



dr inż. Wojciech Szczypka

Rozmowa z autorem pracy:

„Studia *in silico* struktury elektronowej oraz właściwości wiązań dla wybranych materiałów termoelektrycznych z grup chalcogenków oraz klatratów krzemowych”

W jaki sposób zainteresował się Pan chemią obliczeniową?

Podczas ćwiczeń z chemii ogólnej na pierwszym roku studiów często rozwiązywałem zadania na tablicy, korzystając z umiejętności nabytych w trakcie wielu konkursów z czasów liceum, w tym Olimpiady Chemicznej. Moje metody rozwiązywania, z uwagi na rozbudowany aparat matematyczny, przykuły uwagę prowadzącej zajęcia, która w niedługim czasie poleciła mi skontaktować się z innym pracownikiem Wydziału, specjalizującym się właśnie w chemii obliczeniowej. W ten sposób trafiłem pod opiekę mojego wieloletniego opiekuna naukowego i promotora, z którym współpracowałem niemal osiem lat. Jednoczesne zamiłowanie do matematyki, chemii i fizyki oraz fascynacja technologiami komputerowymi – te cechy sprawiły, że błyskawicznie pokochałem chemię obliczeniową, która stawia wyzwania w obrębie każdej z wymienionych dziedzin.

Co skłoniło Pana do poświęcenia rozprawy doktorskiej konkretnym związkom z grup chalcogenków oraz klatratów krzemowych?

Zanim jeszcze zacząłem myśleć o studiach doktoranckich, byłem już mocno zaangażowany w obliczenia teoretyczne dla materiałów termoelektrycznych. Jeszcze przed planowaniem wniosku o Diamentowy Grant, który później otrzymałem, często rozmawiałem z doświadczonymi naukowcami z tej dziedziny, zarówno na Wydziale, jak i w trakcie konferencji naukowych. W ten sposób wyłoniłem szczególnie interesujące układy, które warto było zbadać metodami popularnymi w chemii obliczeniowej (analiza topologii gęstości elektronowej, metody walencyjności wiązań), a rzadko spotykanymi w pracach dotyczących materiałów termoelektrycznych, w których zdecydowanie dominowała analiza typowa dla fizyki ciała stałego. W przypadku chalcogenków, materiałów w większości bardzo dobrze już poznanych zarówno od strony eksperymentalnej, jak i teoretycznej, wybór padł na AgSbTe_2 i uporządkowanie w podsieci kationowej oraz wpływ obecności defektów samoistnych. Choć oba te czynniki znacząco wpływają na właściwości materiału, to dotychczas powstało niewiele prac w tym zakresie. Klatraty krzemowe są materiałami znacząco różniącymi się od chalcogenków pod względem chemicznym. Ich wybór związany był z chęcią wykazania w mojej pracy uniwersalności stosowanych metod, pozwalających zrozumieć wiele istotnych cech obu grup materiałów. W przypadku klatratów krzemowych przyjąłem jeden typ struktury z wielu możliwych dla tych materiałów do dalszej analizy przekrojowej, aby ograniczyć złożoność badanych układów.

Jakie największe problemy pojawiły się w czasie badań i w jaki sposób Pan je przezwyciężył?

Planując badania do pracy doktorskiej początkowo prowadziłem rozmowy z grupą eksperymentatorów, mając nadzieję na wspólne publikowanie prac naukowych. Niestety, w międzyczasie plany drugiej strony musiały zostać zmienione i ostatecznie trzeba było poradzić sobie samemu. Z tego powodu potrzebowałem zagłębić się jeszcze bardziej w opublikowanej już literaturze, w celu dostosowania planu badawczego do pracy czysto obliczeniowej, jednocześnie skupionej wokół konkretnych i aktualnych problemów dotyczących badanych grup materiałów. Ostatecznie problem ten był dla mnie motorem napędowym, by prowadzone przeze mnie badania były na światowym poziomie z innymi pracami teoretycznymi. Razem z promotorem udało mi się opublikować moje wyniki w bardzo dobrych czasopiśmie z listy filadelfijskiej.

W jaki sposób zasoby udostępniane przez Cyfronet wspomogły Pańską pracę?

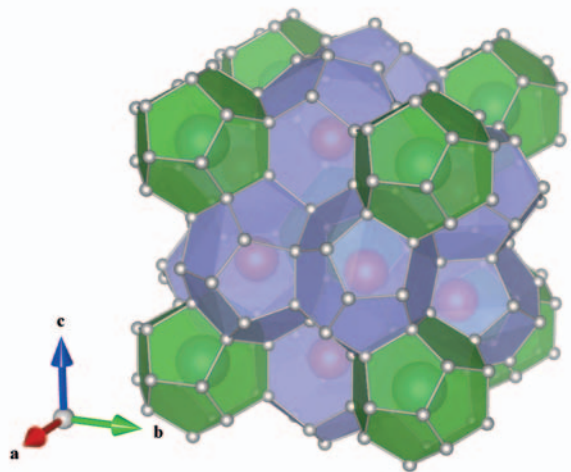
Właściwie, poza drobnymi rachunkami w arkuszach kalkulacyjnych, prawie wszystkie badania, zarówno z czasu pracy w studenckim kole naukowym, jak i potem na studiach doktoranckich, były obliczeniami wykonywanymi na zasobach Cyfronetu. Na początku był to superkomputer Zeus, następnie, w niedługim czasie po udostępnieniu, przenieśliśmy się na Prometheusa. Wykorzystywałem zarówno oprogramowanie, na które licencję posiadał Cyfronet, kompilowałem programy otwarcie źródłowe korzystając z przygotowanego środowiska, czasami w okresach niskiego ruchu mogłem uruchomić wiele trudnych zadań obliczeniowych, wykorzystując niejednokrotnie kilkaset rdzeni jednocześnie. Łącznie wykorzystałem ponad 750 000 godzin obliczeniowych!

Jak ocenia Pan kierunki rozwoju badań nad układami termoelektrycznymi i co Pana zdaniem jest potrzebne do stworzenia instalacji dużej skali?

Badania nad możliwościami wykorzystania materiałów termoelektrycznych w modułach do produkcji energii elektrycznej trwają już od dziesięcioleci. Generatory termoelektryczne z powodzeniem zostały użyte w sondach kosmicznych, między innymi z uwagi na brak elementów ruchomych, oraz w wielu innych specjalistycznych zastosowaniach, w których często bywają jak na razie niezastąpione. Jednak podstawowym czynnikiem limitującym wykorzystanie popularnych modułów termoelektrycznych na szeroką skalę jest ich duży koszt, wynikający z używanych do ich produkcji rzadkich pierwiastków, które niejednokrotnie są również silnie toksyczne. Stąd też bardzo prężnie rozwijają się te kierunki badań, w których poszukuje się materiałów pozbawionych tych negatywnych cech. Chociaż uzyskiwana dotychczas wydajność modułów termoelektrycznych jest wciąż niewystarczająca do tego, by stały się opłacalne na szeroką skalę w takich dziedzinach jak motoryzacja czy energetyka, to jednak szybki rozwój badań obserwowany w ostatnim dziesięcioleciu daje dużą nadzieję na to, że już niedługo będzie możliwe rozpowszechnienie urządzeń uzasadnionych zarówno ekonomicznie, jak i ekologicznie.

Co mógłby Pan poradzić osobom dopiero zaczynającym studia doktoranckie?

Moim zdaniem najważniejsze jest dobre przygotowanie – nieustanne poszerzanie wiedzy i swojego warsztatu, niezależnie od tego, czy nasze badania prowadzimy w laboratoryjnej probówce, czy na krzemowym plastrze. Trzeba również zdawać sobie sprawę, że obie metody są absolutnie niezastąpione w dzisiejszych czasach i gdy wzajemnie się przenikają i uzupełniają, realnie umożliwiają przekraczanie kolejnych granic w badaniu rzeczywistości. Dlatego bardzo ważny jest fundamentalny przegląd literaturowy, zarówno przekrojowy, jak i szczegółowy, a także przegląd dostępnych metod i narzędzi – wszystko to pozwoli stworzyć dobry plan badawczy. Jestem wyznawcą zasady: „jeśli musisz ściąć drzewo w 5 minut, poświęć pierwsze 3 minuty na ostrzenie topora”.



Struktura klatratu krzemowego typu I z zaznaczonymi klatkami

T_{20} i T_{24}