

Rekrutacja do Szkoły Doktorskiej w Uniwersytecie Śląskim w Katowicach na rok akademicki 2026/2027

Admission to the Doctoral School at the University of Silesia in Katowice for academic year 2026/2027

<p>Nauki chemiczne temat nr 1</p>	<p>Chemical sciences topic No. 1</p>
<p>Badanie procesów asocjacji w układach o różnym stopniu uporządkowania w zmiennych warunkach ciśnienia i temperatury</p>	<p>Investigation of association processes in systems with different degrees of structural order under variable pressure and temperature conditions</p>
<p>PhD supervisor: dr hab. Barbara Hachuła, prof. UŚ</p>	
<p>Krótką charakterystyka założeń i celów badawczych</p> <p>Celem pracy doktorskiej będzie kompleksowe poznanie mechanizmów asocjacji molekularnej w układach charakteryzujących się różnym stopniem uporządkowania strukturalnego, obejmujących fazy ciekłe, krystaliczne fazy plastyczne, fazy krystaliczne. Badania będą prowadzone w zmiennych warunkach termodynamicznych, w szczególności podwyższonego ciśnienia (do 30 GPa) i obniżonej temperatury (do -196 C), które istotnie wpływają na oddziaływania międzycząsteczkowe oraz stabilność fazową materiałów.</p> <p>Praca doktorska zakłada wykorzystanie wysokociśnieniowej komory diamentowej (ang. diamond anvil cell - DAC) oraz zaawansowanych technik spektroskopowych (mikroskopia w podczerwieni, mikroskopia Ramana), wspomaganą analizą termiczną oraz metodami obliczeniowymi, w celu identyfikacji zmian w wiązaniach wodorowych, oddziaływaniach van der Waalsa, oddziaływaniach π-π oraz uporządkowaniu i architekturze sieci molekularnych. Szczególny nacisk zostanie położony na korelację zmian widmowych z przejściami fazowymi oraz stopniem uporządkowania strukturalnego.</p> <p>Badania umożliwią rozróżnienie efektów wywołanych kompresją od tych indukowanych zmianą temperatury, co pozwoli na lepsze zrozumienie mechanizmów dostosowania układów molekularnych do ekstremalnych warunków. Praca doktorska będzie koncentrować się zarówno na</p>	<p>Brief description of research assumptions and goals</p> <p>The aim of the doctoral research is to achieve a comprehensive understanding of molecular association mechanisms in systems exhibiting different degrees of structural order, including liquid phases, plastic crystalline phases, crystalline phases. The studies will be conducted under varying of thermodynamic conditions, in particular elevated pressure (up to 30 GPa) and reduced temperature (down to -196 °C), which significantly affect intermolecular interactions, and phase stability of materials.</p> <p>The doctoral project assumes the use of a high-pressure diamond anvil cell (DAC) as well as advanced spectroscopic techniques, including infrared microspectroscopy and Raman microspectroscopy, supported by thermal analysis and computational methods, in order to identify changes in hydrogen bonding, van der Waals interactions, π-π interactions, the ordering and architecture of molecular networks. Special emphasis will be placed on correlating spectral changes with phase transitions, and the degree of structural ordering.</p> <p>The studies will enable discrimination between effects induced by compression and those caused by temperature variation, thereby allowing a deeper understanding of the mechanisms by which molecular systems adapt to extreme conditions. The doctoral research will focus on both model systems and compounds of applied relevance (e.g., pharmaceutical substances), which will enhance both its scientific significance and practical impact.</p>

<p>układach modelowych, jak i związkach o znaczeniu aplikacyjnym (np. substancje farmaceutyczne), co zwiększy jej wartość poznawczą i praktyczną.</p>	
<p>Planowany wkład w rozwój dyscypliny Pogłębienie wiedzy na temat zależności struktura–oddziaływania–właściwości w układach molekularnych. Rozwój metodologii badań spektroskopowych w warunkach wysokiego ciśnienia i niskiej temperatury. Dostarczenie danych istotnych dla projektowania materiałów i substancji o kontrolowanych właściwościach fizykochemicznych. Wkład w rozwój chemii fizycznej, spektroskopii molekularnej oraz chemii materiałowej. Możliwość zastosowania wyników w obszarach takich jak farmacja, inżynieria materiałowa i nanotechnologia.</p>	<p>Planned contribution to the development of the discipline Advancement of knowledge on structure–interaction–property relationships in molecular systems. Development of spectroscopic methodologies under high-pressure and low-temperature conditions. Provision of data relevant for the design of materials and compounds with controlled physicochemical properties. Contribution to the advancement of physical chemistry, molecular spectroscopy, and materials chemistry. Potential application of the results in areas such as pharmaceutical sciences, materials engineering, and nanotechnology.</p>
<p>Opis wymagań – wiedza, umiejętności i kompetencje społeczne kandydata Wiedza: Kandydat powinien posiadać wiedzę z zakresu chemii fizycznej, w szczególności oddziaływań międzycząsteczkowych oraz metod spektroskopowych. Wskazana jest znajomość zagadnień związanych ze strukturą faz skondensowanych oraz podstaw analizy danych eksperymentalnych. Umiejętności: Umiejętność przygotowywania próbek do badań wysokociśnieniowych w celi diamentowej (DAC) oraz do pomiarów niskotemperaturowych z wykorzystaniem stolika mikroskopowego Linkam THMS600. Doświadczenie w obsłudze aparatury badawczej (spektrometr podczerwieni, mikroskop podczerwieni, mikroskop Ramana) i analizie danych spektroskopowych. Kompetencje społeczne: Samodzielność, odpowiedzialność, umiejętność pracy w zespole oraz motywacja do prowadzenia badań naukowych.</p>	<p>Description of requirements – knowledge, skills and social competences of the candidate Knowledge: The candidate should have a background in physical chemistry, particularly in intermolecular interactions and spectroscopic methods. Knowledge of the structure of condensed phases and fundamentals of experimental data analysis is desirable. Skills: Ability to prepare samples for high-pressure experiments using a diamond anvil cell (DAC) and for low-temperature measurements with a Linkam THMS600 microscope stage. Experience in operating research instrumentation (FTIR spectrometer, infrared microscope, Raman microscope) and in spectroscopic data analysis. Social competencies: Independence, responsibility, ability to work in a team, and strong motivation for conducting scientific research.</p>