

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

Nauki fizyczne temat nr 5	Physical sciences topic No. 5
Drogi formowania szkła: symulacyjne badania mikroskopowych mechanizmów podczas chłodzenia i kompresji	Glass Formation Pathways: Simulation Studies of Microscopic Molecular Mechanisms under Cooling and Compression
PhD supervisor: dr hab. Kajetan Koperwas, prof. UŚ	
<p>Krótką charakterystyka założeń i celów badawczych</p> <p>Ciecze szklotwórcze wykazują silne spowolnienie dynamiki molekularnej w pobliżu przejścia szklistego, które wiąże się z pojawieniem się kooperatywnych, przestrzennie heterogenicznych ruchów cząsteczek. Tradycyjnie zjawisko to badane jest wzdłuż ścieżki izobarycznego chłodzenia, gdzie obserwuje się przejście od relaksacji typu Arrheniusa do zachowania niearrheniusowskiego, identyfikowane z temperaturą Arrheniusa. Jednak chłodzenie jednocześnie zmniejsza energię termiczną i zwiększa upakowanie cząsteczek, co utrudnia jednoznaczne wskazanie mikroskopowego mechanizmu odpowiedzialnego za narastanie kooperatywności. Podstawowym założeniem niniejszych badań jest wykorzystanie izotermicznej kompresji jako alternatywnej drogi do spowolnienia dynamiki, pozwalającej rozdzielić wpływ temperatury i gęstości. W tym przypadku kluczowym parametrem staje się objętość aktywacji, której charakterystyczne minimum wyznacza punkt przegięcia (IP) w dynamice relaksacyjnej. Wstępne wyniki wskazują, że punkty charakterystyczne uzyskane wzdłuż ścieżek chłodzenia i kompresji nie są równoważne, co sugeruje istnienie odmiennych mikroskopowych mechanizmów spowolnienia dynamiki. Głównym celem pracy jest wyjaśnienie mikroskopowego pochodzenia tej rozbieżności oraz ustalenie, czy ma ona charakter uniwersalny,</p>	<p>Brief description of research assumptions and goals</p> <p>Glass-forming liquids exhibit a pronounced slowdown of molecular dynamics upon approaching the glass transition, which is associated with the emergence of cooperative and spatially heterogeneous molecular motions. Traditionally, this phenomenon has been investigated along the isobaric cooling path, where a crossover from Arrhenius-type relaxation to non-Arrhenius behavior is observed and identified with the Arrhenius temperature. However, cooling simultaneously reduces thermal energy and increases molecular packing, making it difficult to unambiguously identify the microscopic mechanism responsible for the growth of cooperativity. The central assumption of the present study is to employ isothermal compression as an alternative route to dynamical slowdown, enabling the separation of temperature and density effects. In this case, the key parameter is the activation volume, whose characteristic minimum defines an inflection point (IP) in the relaxation dynamics. Preliminary results indicate that the characteristic points obtained along cooling and compression paths are not equivalent, suggesting the presence of distinct microscopic mechanisms underlying the dynamical slowdown. The main objective of this work is to elucidate the microscopic origin of this discrepancy and to determine whether it is universal or depends on</p>





<p>czy też zależy od rodzaju oddziaływań międzycząsteczkowych. W tym celu planowane jest połączenie badań symulacyjnych dynamiki molekularnej z analizą mikroskopowych własności cząsteczek, takich jak translacyjne i rotacyjne mechanizmy relaksacji, dynamiczna heterogeniczność oraz procesy dynamic facilitation. Uzyskane wyniki pozwolą odpowiedzieć na fundamentalne pytanie, czy chłodzenie i kompresja prowadzą do zeszklenia poprzez ten sam, czy zasadniczo różny mechanizm mikroskopowy.</p>	<p>the nature of intermolecular interactions. To this end, we plan to combine molecular dynamics simulations with an analysis of microscopic molecular properties, such as translational and rotational relaxation mechanisms, dynamic heterogeneity, and dynamic facilitation processes. The results will address the fundamental question of whether cooling and compression lead to vitrification through the same or fundamentally different microscopic mechanisms.</p>
<p>Planowany wkład w rozwój dyscypliny Projekt wniesie istotny wkład w rozwój fizyki materii skondensowanej poprzez rozdzielenie wpływu temperatury i gęstości na spowolnienie dynamiki w cieczach szkłotwórczych. Zastosowanie izotermicznej kompresji, badań pod wysokim ciśnieniem oraz symulacji molekularnych umożliwi identyfikację mikroskopowych mechanizmów odpowiedzialnych za przejście Arrheniusa–niearrheniusowskie oraz ocenę ich uniwersalności. Uzyskane wyniki pozwolą na weryfikację i doprecyzowanie współczesnych modeli zeszklenia.</p>	<p>Planned contribution to the development of the discipline The project will advance condensed matter physics by disentangling the roles of temperature and density in the dynamical slowdown of glass-forming liquids. By employing isothermal compression, high-pressure studies, and molecular dynamics simulations, it will identify the microscopic mechanisms underlying the Arrhenius–to–non-Arrhenius transition and assess their universality, thereby refining current models of vitrification.</p>
<p>Opis wymagań – wiedza, umiejętności i kompetencje społeczne kandydata</p>	<p>Description of requirements – knowledge, skills and social competences of the candidate</p>

