

## OGŁOSZENIE KONKURSOWE – DOKTORANT W SZKOLE DOKTORSKIEJ

**Stanowisko:** doktorant – stypendysta w dyscyplinie nauki fizyczne

**Jednostka realizującej projekt:** Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych – Uniwersytet Śląski w Katowicach

**Jednostka kształcenia doktoranta:** Szkoła Doktorska w Uniwersytecie Śląskim w Katowicach

Zakres prac w projekcie:

- Nisko- i wysokociśnieniowe badania metodą spektroskopii dielektrycznej i podczerwieni cieczy tworzących wiązania wodorowe oraz van der Waals'owskich
- Badanie procesów relaksacyjnych oraz innych własności w tych materiałach, które wykazują zdolność do przechadzania do fazy szklistej.

Badania będą prowadzone w ramach projektu NCN: „Wysokociśnieniowe badania spektroskopowe i dyfrakcyjne jako klucz do zrozumienia osobliwego zachowania asocjujących cieczy z wiązaniami wodorowymi i oddziaływaniami van der Waalsa” (UMO-2019/35/B/ST3/02670) pod kierownictwem dr hab. Sebastiana Pawlusa, prof. UŚ

W konkursie mogą wziąć udział osoby posiadające co najmniej stopień magistra w dyscyplinie fizyka, fizyka medyczne, fizyka techniczna, chemia, inżynieria materiałowa lub pokrewne. O stypendium mogą ubiegać się:

- osoby, które nie kształcą się w żadnej szkole doktorskiej - w wyniku konkursu mogą otrzymać stypendium doktorskie w Szkole Doktorskiej,
- doktoranci Szkoły Doktorskiej w Uniwersytecie Śląskim w Katowicach – w wyniku konkursu mogą otrzymać stypendium naukowe.

**Czas trwania stypendium: 45 miesięcy**

**Wysokość stypendium (miesięcznie): 4266,58 zł brutto** (w przypadku stypendium doktoranckiego dla nowego doktoranta) lub **5000,00 zł netto** (w przypadku stypendium naukowego przyznanego doktorantowi w Szkole Doktorskiej)

**Opis projektu:**

Nanostruktury supramolekularne, istniejące w większości cieczy tworzących wiązania wodorowe oraz w pewnej grupie materiałów zdominowanych przez oddziaływanie van der Waalsa, od wielu lat są przedmiotem zainteresowania wielu najlepszych światowych laboratoriów. Zainteresowanie fenomenem oddziaływań międzymolekularnych wynika z faktu, że proces tworzenia się supramolekularnych struktur, o różnej wielkości i architekturze, ma decydujące znaczenie dla



fizycznych i chemicznych własności materiałów asocjacyjnych, ważnych m.in. dla procesów biologicznych. Doskonałymi przykładami takich materiałów, w których tworzenie się mniej lub bardziej uporządkowanych, wodorowo powiązanych struktur odgrywa kluczową rolę, są np. woda, cukry, czy DNA. Zdolność do tworzenia się struktur supramolekularnych znajduje się również w centrum uwagi naukowców zajmujących się projektowaniem i tworzeniem nowych polielektrolitów, w których proces transportu protonów wzdłuż wiązań wodorowych daje duży wkład do przewodnictwa materiału, co ma zastosowanie m.in. w bateriach i ogniwach paliwowych.

Tak duże znaczenie samorganizujących się nanostruktur zaowocowało licznymi badaniami różnych materiałów asocjacyjnych z wykorzystaniem różnych metod eksperymentalnych. W tym kontekście może się wydawać zaskakujące, że pomimo rosnącej liczby danych i systematycznie wzrastającej wiedzy na temat przyczyn i mechanizmów rządzących tworzeniem asocjacji, wiele fundamentalnych problemów pozostaje nierozwiązanych. Być może najistotniejszą z przyczyn tej sytuacji jest fakt, że wiele metod eksperymentalnych nie jest wystarczająco wrażliwych na zjawiska i obiekty o skali rzędu 5-30 Å, a to właśnie z tej wielkości średniozasięgowym uporządkowaniem międzymolekularnym mamy do czynienia w materiałach asocjacyjnych. Co więcej, większość badań prowadzona jest jedynie w funkcji temperatury pod ciśnieniem atmosferycznym, kiedy zmianie ulega zarówno energia kinetyczna molekuł, odległość między nimi, jak i dystrybucja konformerów zależna od wielkości barier energetycznych. Tymczasem, aby poznać własności struktur asocjacyjnych konieczne są badania pod wysokim ciśnieniem, zwłaszcza izotermiczne, w trakcie których zmianie ulega jedynie gęstość cieczy, a co za tym idzie oddziaływania międzymolekularne, natomiast energia termiczna molekuł pozostaje niezmienną.

Aby wypełnić luki w wiedzy o własnościach materiałów asocjacyjnych, zarówno tworzących wiązania wodorowe, jak i typu van der Waalsa, realizując projekt przeprowadzimy systematyczne, pionierskie badania wysokociśnieniowe z wykorzystaniem komplementarnych metod pomiarowych: szerokopasmowej spektroskopii dielektrycznej, dyfrakcji rentgenowskiej, spektroskopii oscylacyjnej (FTIR i Ramana), połączonych z obliczeniami metodą teorii funkcjonału gęstości elektronowej (DFT) i komputerowym modelowaniem struktury. Zbadane zostaną materiały różniące się m.in. szkieletem molekularnym, grupami funkcyjnymi (OH, SH, NH<sub>2</sub>, OD), konformacjami (cis-trans, R-S), stopniem ograniczenia przestrzennego ruchów molekularnych (pierścień fenylowy), itp. Porównawcza analiza wyników z tak wielu metod i dla tak szerokiej gamy materiałów umożliwi stworzenie bardziej kompletnego i fundamentalnego obrazu procesów asocjacji struktur supramolekularnych zachodzących zarówno

w układach z wiązaniami wodorowymi, jak i oddziałujących poprzez siły dyspersyjne. Ponadto uzyskamy możliwość pełnego opisu stopnia i zasięgu asocjacji, wewnętrznego uporządkowania oraz stabilności nanoukładów w różnych warunkach termodynamicznych. A dzięki rozdzieleniu wpływu energii kinetycznej od wpływu zmian upakowania na własności cieczy tworzących wiązania wodorowe, stanie się możliwe dokładniejsze opisanie tych specyficznych kierunkowych oddziaływań.



Podsumowując, rezultaty projektu powinny pobudzić konstruktywną dyskusję wychodzącą poza dotychczasowy stan wiedzy na temat zachowania różnych grup materiałów asocjacyjnych w zmieniających się warunkach termodynamicznych. Umożliwią one rozwój obecnie istniejących modeli opisujących wiązania wodorowe oraz przewidywanie własności fizycznych i chemicznych procesów zachodzących

w materiałach asocjacyjnych, istotnych dla układów biologicznych (np. białek), zarówno w normalnych jak i ekstremalnych warunkach ciśnieniowych i temperaturowych.

#### **Wymagania:**

1. Posiadanie stopnia naukowego magistra w dyscyplinie fizyka, fizyka medyczne, fizyka techniczna, chemia, inżynieria materiałowa lub pokrewne.
2. Doświadczenie w wykorzystaniu metod spektroskopowych, przede wszystkim spektroskopii dielektrycznej i/lub podczerwieni, do monitorowania własności w cieczy i/lub materiałach stałych.
3. Mile widziane doświadczenie w wykonywaniu badań w warunkach wysokiego ciśnienia.
4. Mile widziane posiadanie dorobku naukowego z zakresu wyżej podanych dyscyplin naukowych.
5. Bardzo dobra znajomość języka angielskiego.

#### **Wymagane dokumenty:**

1. CV.
2. List motywacyjny.
3. Udokumentowanie osiągnięć naukowych (publikacje, wystąpienia konferencyjne), wyróżnień wynikających z prowadzenia badań naukowych, stypendiów, nagród, warsztatów, szkoleń.
4. Opinia opiekuna naukowego lub promotora pracy magisterskiej.

Kandydaci powinni ponadto zarejestrować się w systemie IRK i wybrać kierunek „Szkoła Doktorska – rekrutacja na miejsce stypendialne finansowane z grantu” (<https://irk.us.edu.pl/>).

Dokumenty należy złożyć do **31 grudnia 2020** na adres e-mail: [sebastian.pawlus@us.edu.pl](mailto:sebastian.pawlus@us.edu.pl). W razie pytań, przed formalnym złożeniem wniosku, proszę się kontaktować z kierownikiem projektu na powyższy adres e-mail.

Dokumentacja złożona przez kandydatów zostanie oceniona przez komisję, której przewodniczył będzie kierownik projektu. Rekrutacja zostanie przeprowadzone zgodnie z odpowiednim regulaminem NCN. Rekrutacja może odbyć się w języku polskim lub języku angielskim. Rozmowa kwalifikacyjna odbędzie się on-line. Decyzja komisji będzie przedstawiona kandydatom za pomocą poczty elektronicznej. Ogłoszenie wyników rekrutacji zostanie przesłane do 8 stycznia 2021 roku na adres e-mail podany w rekrutacji.

