

**Zgłoszenie zagadnienia badawczego realizowanego
w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej
w dyscyplinie: physical sciences**

w Jednostce: NZ34

1	Nazwisko i imię promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	Żaneta/Świątkowska-Warkocka, dr hab., IFJ PAN, NZ34, zaneta.swiatkowska@ifj.edu.pl
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	Mohammad Sadegh/Shakeri, dr, IFJ PAN, NZ34, ms.shakeri@ifj.edu.pl
3	Temat zagadnienia badawczego+ krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	Badanie złożonych mechanizmów na granicy faz rozpuszczalnik/nanocząstki wywołanych pulsacyjnym naświetlaniem laserowym Tworzenie heterostruktur okazało się doskonałym rozwiązaniem pozwalającym sprostać rosnącemu zapotrzebowaniu na innowacyjne materiały w zastosowaniach zaawansowanych technologii. Celem tego projektu jest zbadanie obiecującego i innowacyjnego podejścia do wytwarzania nietlenkowych heterostruktur typu rdzeń-powłoka za pomocą pulsacyjnego napromieniowania laserowego (PLIL). Metoda ta polega na wykorzystaniu pulsacyjnego naświetlania laserowego zawieszonych nanocząstek. Głównym celem jest zrozumienie mechanizmu na granicy faz rozpuszczalnik/cząstka podczas naświetlania laserem poprzez prace eksperymentalne i teoretyczne. Kiedy nanocząstki są wystawione na działanie impulsów laserowych, pochłaniają energię z impulsów, powodując, że stykające się z nimi cząsteczki rozpuszczalnika zyskują energię kinetyczną. Ten wzrost energii jest wystarczający, aby cząsteczki rozpuszczalnika uległy dysocjacji i dyfuzji do stopionej nanocząstki, prowadząc do powstania różnych faz. W projekcie tym zostaną wykorzystane obliczenia

		teorii funkcjonału gęstości (DFT) do określenia pól sił wiązań reaktywnych. Te pola siłowe zostaną następnie wykorzystane do badania zrywania i tworzenia wiązań w odpowiednich układach przy użyciu symulacji dynamiki molekularnej (MD).
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	<ul style="list-style-type: none"> - mgr fizyki, chemii lub materiałoznawstwa - doświadczenie związane z nauką o materiałach - znajomość metod obliczeniowych m.in. Dynamiki Molekularnej (MD), Teorii Funkcjonału Gęstości (DFT). Umiejętność kodowania przy użyciu Python/Matlab będzie dodatkowym atutem. - umiejętność pracy w grupie - dorobek publikacyjny - biegłość w posługiwaniu się językiem angielskim jest koniecznością
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	NCN-SONATA

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	Żaneta/Świątkowska-Warkocka, dr hab., IFJ PAN, NZ34, zaneta.swiatkowska@ifj.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation,e-mail address	Mohammad Sadegh/Shakeri, dr, IFJ PAN, NZ34, ms.shakeri@ifj.edu.pl
3	Research subject title Short description, up to 250 words	<p>Study the complicated mechanism phenomena at the solvents/nanoparticles interface induced by pulsed laser irradiation</p> <p>Creating heterostructures has proven to be an excellent solution to meet the growing demand for innovative materials in advanced technology applications. The aim of this project is to investigate a promising and innovative approach to fabricating non-oxide</p>

		<p>core-shell heterostructures by pulsed laser irradiation (PLIL). This method involves the use of pulsed laser irradiation of suspended nanoparticles. The main goal is to understand the mechanism at the solvent/particle interface during laser irradiation through experimental and theoretical tasks. When nanoparticles are exposed to laser pulses, they absorb energy from the pulses, causing the solvent molecules in contact with them to gain kinetic energy. This increase in energy is sufficient for the solvent molecules to dissociate and diffuse into the molten nanoparticle, leading to the formation of different phases. This project will use density functional theory (DFT) calculations to determine the reactive bond force fields. These force fields will then be used to study the breaking and formation of bonds in appropriate systems using molecular dynamics (MD) simulations.</p>
4	<p>Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)</p>	<ul style="list-style-type: none"> - M.Sc. of Physical/Chemical Science or Materials Science - Previous experience related to material science - Familiar with computational materials science methods e.g. Molecular Dynamics (MD), Density Functional Theory (DFT). Coding ability using Python/Matlab is a plus. - Ability to work in group - Suitable publication record - Enough proficiency in English is a must
5	<p>Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.</p>	<p>NCN- SONATA</p>