

**Zgłoszenie zagadnienia badawczego realizowanego
w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej
w dyscyplinie nauki fizyczne**

w Jednostce: Instytut Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk

1	Nazwisko i imię promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	<p>dr hab. Pelka Robert/Zakład Magnetyzmu Molekularnego/Oddział Fizyki Materii Skondensowanej/Instytut Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk, Radzikowskiego 152, 31-342 Kraków/robert.pelka@ifj.edu.pl</p>
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	
3	<p>Temat zagadnienia badawczego+ krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej</p>	<p>Modelowanie własności fizycznych magnetyków molekularnych</p> <p>Magnetyzm molekularny stanowi interesujący i obiecujący kierunek badań. Nowe magnetyczne układy molekularne mogą znaleźć zastosowanie w technologii przełączania sygnałów, zapisu informacji dużej gęstości jak i w implementacji idei kwantowej informatyki. Głównym celem pracy będzie szeroko rozumiane modelowanie własności fizycznych magnetyków molekularnych. Obliczenia analityczne lub numeryczne takich charakterystyk jak podatność magnetyczna, izotermiczne namagnesowanie i pojemność cieplna będą oparte na ogólnych zasadach fizyki kwantowej i mechaniki statystycznej. Porównanie wyliczeń modelowych z danymi eksperymentalnymi pozwoli na oszacowanie parametrów modelu i wyciągnięcie wniosków dotyczących siły oddziaływania wymiennego, anizotropii magnetycznej oraz korelacji magneto-strukturalnych. Te informacje są cenne dla inżynierii chemicznej zajmującej się</p>

		syntezą tego typu związków.
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Znajomość podstaw mechaniki kwantowej i mechaniki statystycznej. 2. Umiejętność przeprowadzania rachunków analitycznych. 3. Znajomość metod numerycznych w szczególności dotyczących procedur diagonalizacyjnych oraz rachunków Monte Carlo. 4. Umiejętność programowania. 5. Znajomość języka angielskiego przynajmniej w stopniu umożliwiającym komunikację naukową w tym języku oraz lekturę ze zrozumieniem literatury dotyczącej przedmiotu badań. 6. Systematyczność i zaangażowanie w pracę naukową.
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	Brak

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	dr hab. Pelka Robert /Department of Molecular Magnetism/Division of Condensed Matter Physics/Institute of Nuclear Physics Polish Academy of Sciences, Radzikowskiego 152, 31-342 Kraków/robert.pelka@ifj.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation,e-mail address	
3	Research subject title Short description, up to 250 words	<p>Modeling of physical properties of molecular magnets</p> <p>Molecular magnetism represents an exciting and promising research topic. Novel magnetic molecular systems may find applications in the technology of signal switching, high density memory devices and in the implementation of ideas of quantum information technology. The main goal of the research is a comprehensive modeling of physical properties of molecular magnets. The numerical or analytical calculations of such characteristics as magnetic susceptibility, isothermal magnetization or heat capacity will be based on the general principles of quantum physics and statistical mechanics. A comparison of the calculations with experimental results leads to the determination of the model parameters and conclusions</p>

		concerning the strength of exchange interaction, magnetic anisotropy or magnetostructural correlations. Such information is useful for chemical engineers dealing with the synthesis of this type of compounds.
4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	<ol style="list-style-type: none"> 1. The basic knowledge of quantum physics and statistical mechanics. 2. The ability to carry out analytical calculations. 3. The knowledge of numerical analysis, in particular of diagonalizing procedures and Monte Carlo simulations. 4. The programming skills. 5. Knowledge of the English language at least to the extent that enables scientific communication in this language and reading and understanding the literature on the research subject. 6. The good time organization skills and engagement in research.
5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	None