

**Zgłoszenie zagadnienia badawczego realizowanego  
w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej  
w dyscyplinie nauki chemiczne  
w Jednostce: Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN**

1	Nazwisko i imię promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	<p><b>Dr hab. inż. Piotr Batys</b> Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk  piotr.batys@ikifp.edu.pl</p>
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	
3	Temat zagadnienia badawczego+ krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	<p style="text-align: center;"><b>Właściwości fizykochemiczne nowych surfaktantów wieloładunkowych oraz ich kompleksów z polielektrolitami</b></p> <p>Projektowanie molekularnych surfaktantów o bardzo zróżnicowanej architekturze oferuje doskonałą możliwość kontrolowania procesu agregacji i innych właściwości fizykochemicznych ich roztworów, co jest niezwykle istotne zarówno w badaniach naukowych jak i w przemyśle. Różnorodne wielofunkcyjne pochodne wykazują silną tendencję do samoorganizację, tworząc różne struktury agregatów od nano- do mikroskali oraz wykazują pożądaną aktywność międzyfazową. W zależności od architektury surfaktantu, kształt i rozmiar agregatów mogą się znacznie zmieniać, od kulistych lub sferoidalnych miceli do pęcherzyków lub agregatów heksagonalnych.</p> <p>Głównym celem naukowym niniejszego projektu będzie teoretyczny opis procesów adsorpcji, samoorganizacji oraz aktywności powierzchniowej wybranych wieloładunkowych surfaktantów zawierających nowo zaprojektowane grupy hydrofilowe a także ich oddziaływań z polielektrolitami z wykorzystaniem modelowania dynamiki molekularnej.</p> <p>Proponowane badania poszerzą naszą wiedzę i zwiększą umiejętności projektowania materiałów funkcjonalnych do różnych zastosowań, a także pozwolą na uogólnienie zaobserwowanych prawidłowości. Poza dużym znaczeniem</p>

		poznawczym, niniejsza praca umożliwi dodatkową kontrolę nad właściwościami otrzymywanych surfaktantów oraz ich kompleksów z polielektrolitami. Badania będą prowadzone we współpracy z grupą badawczą z Politechniki Wrocławskiej.
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Dyplom ukończenia studiów magisterskich w dziedzinie chemii, fizyki, inżynierii materiałowej lub dziedzin pokrewnych.</li> <li>- Dobra znajomość języka angielskiego w mowie i piśmie.</li> <li>- Dodatkowymi atutami będzie doświadczenie w zastosowaniu metod modelowania molekularnego oraz mobilność międzynarodowa.</li> </ul>
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	Projekt NCN OPUS

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	<p><b>Dr hab. inż. Piotr Batys</b>  Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry,  Polish Academy of Sciences</p> <p>piotr.batys@ikifp.edu.pl</p>
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	
3	Research subject  Title  Short description, up to 250 words	<p style="text-align: center;"><b>Physicochemical properties of novel multicharged surfactants and their complexes with polyelectrolytes</b></p> <p>The molecular design of surfactants with widely varying architectures offers an excellent opportunity for tailoring the surfactant aggregation behavior and other physicochemical properties of their solutions with further unique performances in industrial and academic fields. A variety of multifunctional derivatives show strong self-assembly, forming different aggregate structures from the nano- to the microscale, and reveal desirable interfacial activity and rich phase behavior. Depending on the surfactant architecture, the shape and size of the aggregates can change significantly from spherical or spheroidal micelles to vesicles or hexagonal aggregates. The main scientific goal of this project will be theoretical description of adsorption, self-assembly, and surface activity of selected multicharged novel surfactants containing the designed hydrophilic group, as well as their interactions with</p>

		<p>polyelectrolytes using molecular dynamics modelling.</p> <p>The proposed research will allow to broaden our knowledge and enhance the ability to design functional materials for various applications, as well as for potential generalization of the observed regularities. In addition to the high cognitive importance, this work will allow for additional control over the properties of the designed surfactants as well as their complexes with polyelectrolytes. The research will be carried out in cooperation with research group from Wrocław University of Science and Technology.</p>
4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- MSc in chemistry, physics, materials science or related fields</li> <li>- Good knowledge of English – spoken and written</li> <li>- Experience in molecular modeling methods and international mobility will be a plus.</li> </ul>
5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	NCN project OPUS