

**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	Dr hab. inż. Piotr Batys Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk piotr.batys@ikifp.edu.pl
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	Dr inż. Maria Morga Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk maria.morga@ikifp.edu.pl
3	Temat zagadnienia badawczego+ krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	<p style="text-align: center;">Określenie wpływu rozpuszczalnika na właściwości fizykochemiczne polielektrolitów oraz ich kompleksów</p> <p>Polielektrolity to polimery zawierające grupy funkcyjne ulegające jonizacji. W roztworze wodnym dysocjują na przeciwjon oraz rdzeń posiadający ładunek. Samoorganizacja cząsteczek polielektrolitów mających przeciwne ładunki prowadzi do powstania kompleksów polielektrolitów, których właściwości można kontrolować m.in. za pomocą pH czy siły jonowej roztworu. [1,2] Ostatnie badania pokazały, że dodatek drugiego rozpuszczalnika może mieć znaczący wpływ na właściwości polielektrolitów, takie jak konformacja czy efektywny ładunek cząsteczki. [3] Modyfikuje to oddziaływania pomiędzy nimi, co z kolei determinuje właściwości powstałych kompleksów. To sugeruje, że rodzaj rozpuszczalnika może być interesującym parametrem pozwalającym na kontrolę właściwości otrzymywanych materiałów.</p> <p>Głównym celem naukowym niniejszego projektu będą systematyczne badania nad wpływem rozpuszczalnika na właściwości wybranych polielektrolitów oraz mechanizm tworzenia ich kompleksów z zastosowaniem metod eksperymentalnych oraz teoretycznych. Przeprowadzona obszerna charakterystyka fizykochemiczna zostanie zinterpretowana w oparciu o wyniki symulacji dynamiki molekularnej.</p>

		<p>Zrealizowanie powyższych badań pozwoli na usystematyzowanie wiedzy w tym obszarze, a także potencjalnie na uogólnienie zaobserwowanych prawidłowości. Poza dużym znaczeniem poznawczym, niniejsza praca umożliwi dodatkową kontrolę nad właściwościami otrzymywanych materiałów. Tematyka będzie realizowana we współpracy grupami badawczymi z USA i Finlandii.</p> <p>[1] Y. Zhang, P. Batys, et al., Molecular Origin of the Glass Transition in Polyelectrolyte Assemblies, <i>ACS Cent. Sci.</i> 4, 638 (2018) [2] S.M. Lalwani, P. Batys, et al., Relaxation Times of Solid-like Polyelectrolyte Complexes of Varying pH and Water Content, <i>Macromolecules</i> 54, 7765 (2021) [3] M. Khavani, P. Batys, et al., Effect of ethanol and urea as solvent additives on PSS-PDADMA polyelectrolyte complexation, <i>Macromolecules</i> 55, 3140 (2022)</p>
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	<ul style="list-style-type: none"> - Dyplom ukończenia studiów magisterskich w dziedzinie chemii, fizyki, inżynierii materiałowej lub dziedzin pokrewnych. - Dobra znajomość języka angielskiego w mowie i piśmie. - Dodatkowymi atutami będzie doświadczenie w zastosowaniu metod modelowania molekularnego oraz mobilność międzynarodowa.
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	Środki statutowe IKiFP PAN

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	Dr hab. inż. Piotr Batys Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences piotr.batys@ikifp.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	Dr inż. Maria Morga Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences maria.morga@ikifp.edu.pl
3	Research subject Title Short description, up to 250 words	<p style="text-align: center;">Effect of the solvent on the formation mechanism and physicochemical properties of polyelectrolyte complexes</p> <p>Polyelectrolytes are polymers containing ionizable functional groups. In an aqueous solution, they dissociate into a counterion and a core with an electrostatic charge. Self-organization of polyelectrolytes having opposite charges leads to the formation of polyelectrolyte complexes, the properties of which can be controlled, for example, by regulating the pH or ionic strength of the solution. [1,2] Recent studies have shown</p>

		<p>that the addition of a co-solvent can have a significant impact on the properties of the polyelectrolyte, such as its conformation and effective charge. [3] These modify the interactions between the polyelectrolyte molecules, which in turn determine the properties of the resulting complexes. This suggests that the co-solvent type might be another interesting parameter to control the properties of the obtained materials. The main scientific goal of this project will be the systematic research regarding the solvent type influence on the properties of selected polyelectrolytes and the mechanism of their complex formation, via experimental and theoretical methods. The extensive physicochemical characterization will be interpreted based on the molecular dynamics simulation results.</p> <p>The proposed research will allow for the systematization of our knowledge in this area, 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 obtained materials. The research will be carried out in cooperation with research groups from the USA and Finland.</p> <p>[1] Y. Zhang, P. Batys, et al., Molecular Origin of the Glass Transition in Polyelectrolyte Assemblies, <i>ACS Cent. Sci.</i> 4, 638 (2018) [2] S.M. Lalwani, P. Batys, et al., Relaxation Times of Solid-like Polyelectrolyte Complexes of Varying pH and Water Content, <i>Macromolecules</i> 54, 7765 (2021) [3] M. Khavani, P. Batys, et al., Effect of ethanol and urea as solvent additives on PSS-PDADMA polyelectrolyte complexation, <i>Macromolecules</i> 55, 3140 (2022)</p>
4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	<ul style="list-style-type: none"> - MSc in chemistry, physics, materials science or related fields - Good knowledge of English – spoken and written - Experience in molecular modeling methods and international mobility will be a plus.
5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	Statutory funds of ICSC PAS