

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

**w Jednostce: Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni**

**im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk**

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	<p><b>Dr Agata Pomorska</b> Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk  agata.pomorska@ikifp.edu.pl</p>
3	<p><b>Temat zagadnienia badawczego</b>+ krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej</p>	<p style="text-align: center;"><b>Precyzyjne dostrajanie właściwości kompleksów polielektrolitów poprzez trójskładnikową kompozycję</b></p> <p>Kompleksy polielektrolitów powstają w wyniku rozdzielania faz, gdy mieszane zostają ze sobą dwa roztwory przeciwnie naładowanych polielektrolitów. Z kompleksów stałych można formować materiały polimerowe, których właściwości silnie zależą od warunków syntezy, takich jak pH, rodzaj i stężenie elektrolitu, rodzaj rozpuszczalnika, a także skład chemiczny. Ze względu na możliwość dostrajania ich właściwości oraz wszechstronność, materiały na bazie kompleksów polielektrolitów znajdują szerokie zastosowanie w praktyce.</p> <p>Dotychczas w literaturze, badane były głównie dwuskładnikowe kompleksy polielektrolitów, tj. złożone z jednego dodatnio naładowanego i jednego ujemnie naładowanego polielektrolitu. Zmiana jednego z polielektrolitów skutkuje jednak znaczną, skokową zmianą właściwości wytworzonego materiału, co ogranicza możliwości jego kontroli. Aby umożliwić lepsze dostrajanie właściwości tych materiałów, niniejszy projekt ma na celu obszerne badania teoretyczne i eksperymentalne nad otrzymywaniem trójskładnikowych kompleksów polielektrolitów, które określą związek pomiędzy stechiometrią a właściwościami wytworzonych materiałów.</p>

		<p>W pierwszym etapie projektu, wykorzystane zostanie modelowanie metodą dynamiki molekularnej z rozdzielczością atomową oraz techniki eksperymentalne oparte na rozpraszaniu światła. Badania dostarczą informacji o postaci kompleksów polielektrolitów w zależności od dobranego składu oraz o ich właściwościach. Drugim etapem będzie wytworzenie i charakterystyka materiałów polimerowych na bazie trójskładnikowych kompleksów polielektrolitów. Dodatkowo, modelowanie teoretyczne pozwoli zrozumieć mechanizm zmian we właściwościach mechanicznych i termicznych na poziomie molekularnym.</p> <p>Powyższe badania, łączące w sobie modelowanie teoretyczne oraz badania eksperymentalne, pozwolą przewidywać właściwości materiałów na bazie trójskładnikowych kompleksów polielektrolitów oraz kontrolować je w sposób ciągły. Projekt zostanie zrealizowany we współpracy międzynarodowej (Texas A&amp;M University, USA) z wiodącą grupą w tej dziedzinie. Otrzymane wyniki pozwolą również na lepsze zrozumienie tych niezwykle interesujących i obiecujących materiałów.</p>
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 PRELUDIUM BIS

1	<b>Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address</b>	<p><b>DSc Eng. Piotr Batys</b></p> <p>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	<p><b>PhD Agata Pomorska</b></p> <p>Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences,</p> <p>agata.pomorska@ikifp.edu.pl</p>

3	<p><b>Research subject title</b> Short description, up to 250 words</p>	<p style="text-align: center;"><b>Fine-tuning of polyelectrolyte complexes properties via ternary composition</b></p> <p>Polyelectrolyte complexes are formed as a result of phase separation when two solutions of oppositely charged polyelectrolytes are mixed. Solid complexes can be used to form polymeric materials whose properties strongly depend on the synthesis conditions, such as pH, electrolyte type and concentration, solvent type, and chemical composition. Due to their tunability and versatility materials based on polyelectrolyte complexes are widely in practical applications.</p> <p>So far, in the literature, mainly binary polyelectrolyte complexes have been studied, i.e. composed of one positively charged and one negatively charged polyelectrolyte. However, changing one of the polyelectrolytes results in a significant, abrupt change in the properties of the produced material, which limits the possibilities of its control. To enable better tuning of the properties of these materials, this project aims at conducting extensive theoretical and experimental research on the preparation of ternary polyelectrolyte complexes, which will determine the relationship between the stoichiometry and properties of the produced materials.</p> <p>In the first stage of the project, all-atom molecular dynamics modeling and experimental techniques, based on light scattering, will be utilized. The research will provide information about the form and the properties of polyelectrolyte complexes depending on their composition. The second stage will focus on the production and characterization of polymer materials based on ternary polyelectrolyte complexes. Additionally, theoretical modeling will allow us to understand the mechanism of these changes at molecular level.</p> <p>The above research, combining theoretical modeling and experimental research, will allow predicting the properties of materials based on ternary polyelectrolyte complexes and controlling them in a continuous manner. The project will be conducted in international collaboration (Texas A&amp;M, University, USA) with a leading group in the field of synthesis of polymer materials. The obtained results will also allow for a better understanding of these extremely interesting and promising materials.</p>
4	<p>Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)</p>	<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 PRELUDIUM BIS
---	--	---------------------------