

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

**w Jednostce: Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego
Polskiej Akademii Nauk**

1	Nazwisko i imię promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	Juszyńska-Gałazka Ewa, Dr hab., Prof. IFJ PAN, IFJ PAN, ewa.juszynska-galazka@ifj.edu.pl
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	Osiecka-Drewniak Natalia, Dr, IFJ PAN, natalia.osiecka-drewniak@ifj.edu.pl
3	Temat zagadnienia badawczego + krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	Analiza wpływu budowy molekularnej i przestrzennej na mikroskopowe i makroskopowe własności farmaceutyków z wykorzystaniem algorytmów machine learning Farmaceutyki wykazują tendencję do tworzenia, m.in. stanów szklistych. W szklach zamrożeniu uległa kinetyka, czyli nieporządek orientacyjny (rotacyjny) bądź konformacyjny, jak w fazach plastyczno-krystalicznych, albo zarówno nieporządek rotacyjny i translacyjny, jak w cieczach izotropowych. Uzyskiwane fazy termodynamiczne zależą bezpośrednio od tempa ochładzania substancji czy zmiany ciśnienia, co wpływa również na wewnętrzne oddziaływania międzymolekularne, na przykład na wiązanie wodorowe. Badanie stanu szklistego jest istotne, np. z aplikacyjnego punktu widzenia – forma amorficzna farmaceutyków jest lepiej przyswajalna przez organizm niż forma krystaliczna. Stan szklisty jest pod względem termodynamicznym niestabilny i dąży do powrotu do fazy krystalicznej, zwłaszcza w czasie jego przechowywania. Dlatego aplikacyjne wykorzystanie stanu szklistego niesie ze sobą liczne wyzwania. Celem proponowanej pracy jest określenie właściwości fizykochemicznych wybranych farmaceutyków przy użyciu wzajemnie się uzupełniających metod, zarówno eksperymentalnych jak i teoretycznych. Charakterystyka stanów termodynamicznych zostanie przeprowadzona przy użyciu metod kalorymetrycznych i mikroskopowych. Natomiast metoda dyfrakcji promieni rentgenowskich pozwoli na wyznaczenie parametrów komórki elementarnej oraz struktur molekuł w danych fazach stałych. Dynamika molekuł określona zostanie z

		<p>wykorzystaniem metod spektroskopowych, między innymi, FTIR, BDS jak również z wykorzystaniem metod neutronowych: nieelastycznego i kwazielastycznego rozpraszania neutronów INS i QENS.</p> <p>Wraz z rosnącą ilością danych generowanych przez zaawansowane techniki badawcze, rozwój technologii z zakresu „machine learning” (algorytm uczenia maszynowego) staje się niezwykle pomocny. Algorytmy „machine learning” mogą być wykorzystane do identyfikacji specyficznych cech mikroskopowych charakteryzujących stan szklisty oraz przemian polimorficznych. Użycie technik „machine learning” ułatwia wykrycie subtelnych zmian w dużym zbiorze danych eksperymentalnych uzyskanych wyżej wymienionymi technikami.</p>
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	<ul style="list-style-type: none"> - podstawowa wiedza z zakresu fizyki fazy skondensowanej; - znajomość języka angielskiego; - ukończone studia magisterskie na kierunku: fizyka, chemia, inżynieria materiałowa lub pokrewnym.
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	Juszyńska-Gałazka Ewa, Assoc. Prof., IFJ PAN, ewa.juszynska-galazka@ifj.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	Osiecka-Drewniak Natalia, Ph. D., IFJ PAN, natalia.osiecka-drewniak@ifj.edu.pl
3	Research subject title Short description, up to 250 words	<p>Analysis of the impact of molecular and spatial structure on microscopic and macroscopic properties of pharmaceuticals using machine learning algorithms</p> <p>Pharmaceuticals tend to form, inter alia, glassy states. In the glasses, the kinetics is frozen-in, i.e. orientation (rotational) or conformational disorder, as in plastic-crystalline phases, or both rotational and translational disorder, as in isotropic liquids. The obtained thermodynamic phases directly depend on the cooling rate of the substance or the pressure change, which also affects internal intermolecular interactions, for example hydrogen bonding. The study of the glassy state is important, e.g. from the</p>

		<p>application point of view – the amorphous form of drugs is better absorbed by the body than the crystalline one. Although, amorphous materials are thermodynamically unstable and will tend to revert to crystalline form on storage. For that reason, there are several difficulties associated with their use.</p> <p>The proposed research aims to determine the physicochemical properties of selected drugs using complementary methods, both experimental and theoretical. Initial characterization of thermodynamic phases will be carried out using: POM, DSC, and MT-DSC. X-ray diffraction methods will be used to determine the parameters of the elementary cell and the structures. The dynamics of molecules will be determined using the spectroscopy methods, i.e., FTIR and BDS, as well as neutron methods: inelastic and quasi-elastic neutron scattering (INS and QENS).</p> <p>With the increasing amount of data generated by advanced research techniques, the development of machine learning technology has become extremely helpful. Machine learning algorithms can be employed to identify specific microscopic features characterizing the glassy state and polymorphic transformations. The use of machine learning techniques facilitates the detection of subtle changes in a large dataset obtained through the aforementioned techniques.</p>
4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	<ul style="list-style-type: none"> - basic knowledge of condensed phase physics; - knowledge of English language; - master degree in physics, chemistry, material sciences or a related field.
5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	