

**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. Paweł Weroński, prof. IKiFP</b></p> <p>Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN</p> <p>e-mail: ncwerons@cyf-kr.edu.pl</p>
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	
3	<p><b>Temat zagadnienia badawczego</b>+ krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej</p>	<p><b>Modelowanie i parametryzacja monowarstw cząsteczek o kontrolowanej polidispersyjności</b></p> <p>Temat badawczy koncentruje się na <b>teoretycznym badaniu polidispersyjnych monowarstw cząstek</b>, mając na celu opracowanie nowej metody parametryzacji ich struktury i właściwości. Jako doktorant zajmujący się badaniami teoretycznymi będziesz odpowiedzialny za przeprowadzanie <b>symulacji numerycznych</b> w celu obliczenia kluczowych wielkości, takich jak <b>cząstkowe funkcje rozkładu radialnego i cząstkowe czynniki struktury</b> dla różnych modeli adsorpcji cząstek. Będziesz także pracować nad udoskonalaniem modeli teoretycznych poprzez dopasowanie złożonych interpolacji wielowymiarowych do wyników symulacji. Twoja rola będzie polegać na analizie wyników teoretycznych i weryfikacji <b>uogólnionego r-nia opisującego widmową gęstość mocy</b> cyfrowych zdjęć mikroskopowych monowarstw cząstek polidispersyjnych przy użyciu metod obliczeniowych i symulacji.</p> <p>Temat ten stanowi doskonałą okazję do zdobycia doświadczenia w zakresie <b>fizyki obliczeniowej, mechaniki statystycznej oraz analizy numerycznej</b>, przy pracy nad nowatorskim problemem w nauce o materiałach. Będziesz ściśle współpracować z badaczami eksperymentalnymi, porównując prognozy</p>

		teoretyczne z danymi eksperymentalnymi i przyczyniając się do optymalizacji technik parametryzacji. Ponadto będziesz mieć możliwość publikowania swoich wyników w czasopiśmie o wysokim wpływie i uczestniczenia w międzynarodowych konferencjach. Badania te są idealne dla studentów, którzy chcą rozwijać swoje umiejętności w zakresie <b>modelowania teoretycznego</b> i <b>technik obliczeniowych</b> stosowanych do skomplikowanych systemów materiałowych.
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	Magisterium z chemii, fizyki lub pokrewnej dziedziny. Dobra znajomość nauki o powierzchni, rozumienie symulacji komputerowych i metod numerycznych. Wymagana biegła znajomość j. angielskiego. Podstawowa znajomość systemu Linux i Bash będzie dodatkowym atutem.
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	Stypendium doktoranckie IKiFP PAN.

1	<b>Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address</b>	<b>DSc. Paweł Weroński, prof. IKiFP PAN</b> Institute of Catalysis and Surface Chemistry PAS e-mail: ncwerons@cyf-kr.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	
3	<b>Research subject title</b> Short description, up to 250 words	<b>Modeling and parameterization of Monolayers of Particles with Controlled Polydispersity</b>  The research subject focuses on the <b>theoretical study of polydisperse particle monolayers</b> , with the goal of developing a novel method for parameterizing their structure and properties. As a theoretical PhD student, you will be responsible for conducting <b>numerical simulations</b> to calculate key quantities such as <b>partial radial distribution functions</b> and <b>partial structure factors</b> for several models of particle adsorption. You will also work on refining the theoretical models by fitting complex multidimensional interpolations to simulation results.

		<p>Your role will focus on analyzing theoretical results and validating the <b>generalized equation for power spectral density</b> of digital micrographs of polydisperse particle monolayers through computational methods and simulations.</p> <p>This project provides an excellent opportunity to gain expertise in <b>computational physics</b>, <b>statistical mechanics</b>, and <b>numerical analysis</b>, while working on a cutting-edge problem in materials science. You will collaborate closely with experimental researchers to compare theoretical predictions with experimental data and contribute to the optimization of parameterization techniques. Additionally, you will have the opportunity to publish your work in high-impact journals and present at international conferences. This research is ideal for students interested in advancing their skills in <b>theoretical modeling</b> and <b>computational techniques</b> applied to complex material systems.</p>
4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	MSc in Chemistry, Physics, or a related field. Strong foundation in surface science, understanding of computer simulations and numerical methods. Fluency in English is required. Basic knowledge of Linux and Bash is a plus.
5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	PhD Scholarship at ICSC PAS.