

**Zgłoszenie zagadnienia badawczego realizowanego  
w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej  
w dyscyplinie inżynieria materiałowa**

**w Jednostce: Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN**

1	<b>Nazwisko i imię promotora,</b> tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	dr hab. Marcela Trybuła, prof. instytutu Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN m.trybula@imim.pl
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	
3	<b>Temat zagadnienia badawczego+</b> krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	<b>Struktura i właściwości powłok z dodatkiem nanomateriałów węglowych na podłożach metali</b>  W ramach proponowanej pracy doktorskiej planowane jest wykorzystanie metod obliczeniowych i eksperymentalnych do opracowania modelu powłoki polimerowej dla metali, bazującej na nanomateriałach węglowych, wliczając jej skład chemiczny i strukturę. Celem będzie uzyskanie powłoki stabilnej, odpornej na korozję czy ścieranie. W ramach badań rozpatrywane będą materiały węglowe o zróżnicowanym składzie chemicznym i strukturze. Pozwolą one na opracowanie modelu powłok adhezyjnych o dobrych właściwościach antykorozyjnych z wykorzystaniem metod uczenia maszynowego. W badaniach będzie uwzględniony polikrystaliczny charakter materiałów metalicznych oraz obecność dodatków stopowych. Dzięki temu możliwe będzie zbliżenie rozpatrywanych układów modelowych do rzeczywistych materiałów, co ułatwi projektowanie materiałów o zadanej strukturze i właściwościach. Oprócz różnorodnych materiałów stosowanych do pokrycia powierzchni metalu, badania obejmowały będą wpływ szeregu czynników zewnętrznych takich jak temperatura, ciśnienie, obecność tlenu i wilgoci, czy kwasowość środowiska.

		<p>Głównym zadaniem Doktoranta będzie prowadzenie badań obliczeniowych oraz wykonywanie wybranych pomiarów eksperymentalnych. Podstawowymi narzędziami badań obliczeniowych będą symulacje metodami dynamiki molekularnej, obliczenia metodą DFT, oraz metody uczenia maszynowego. Badania wykorzystujące obliczenia DFT oraz uczenie maszynowe, będą realizowane we współpracy z Królewskim Instytutem Technologii (KTH) w Sztokholmie oraz Los Alamos National Laboratory, USA. Badania eksperymentalne obejmą otrzymanie wybranych powłok na powierzchni metali oraz poddanie ich analizie strukturalnej uwzględniając metody spektroskopowe oraz mikroskopii sił atomowych, a następnie badaniom korozyjnym. Prace eksperymentalne będą realizowane we współpracy z innymi badaczami Instytutu Metalurgii i Inżynierii Materiałowej (IMIM) PAN, Instytutu Mikroelektroniki i Fotoniki (IMiF) Sieci Łukasiewicza oraz Akademii Górniczo-Hutniczej (AGH).</p>
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	<p>Magister inżynierii materiałowej, chemii, fizyki, znajomość podstaw inżynierii materiałowej ( środowiska Linux, metod obliczeniowych (dynamika molekularna, DFT, uczenia maszynowego), metod statystycznych, języka programowania: bash, Fortran, C++, python.</p>
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	<p>NCN, NCBR</p>

1	<b>Supervisor: name/surname,</b> degree, affiliation, e-mail address	Dr Marcela Trybula, Assoc. Prof.
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation,e-mail address	

3	<p><b>Research subject title</b> Short description, up to 250 words</p>	<p>Structure and properties of coatings containing carbon nanomaterials on metallic substrates</p> <p>Within the proposed doctoral thesis, it is planned to use computational and experimental methods to develop a model of a polymer coating for metals based on carbon nanomaterials, including its chemical composition and structure. The aim will be to obtain adherent coating and resistant to corrosion and friction. A machine learning-assisted (ML) model of carbon-based coatings with good anti-corrosion properties will be developed. The polycrystalline nature of metallic materials and the presence of alloy additives will be considered, making possible to bring the model systems closer to real materials, and allowing to design materials with a given structure and properties. The planned tasks will include the influence of external factors, including temperature, pressure, humidity, or environment composition.</p> <p>The main task of the PhD student will be to perform computational research and perform selected experimental measurements. The basic tools for computational research will be molecular dynamics and DFT methods, and ML methods. DFT calculations and machine learning will be carried out in cooperation with the Royal Institute of Technology (KTH) in Stockholm and Los Alamos National Laboratory, USA. Experimental studies will include analysis of selected coatings on metal surfaces and subjecting them to structural analysis, involving spectroscopic methods, and then corrosion and mechanical tests. Experimental work will be carried out in cooperation with other researchers from the Institute of Metallurgy and Materials Science (IMMS PAS), Sieć Łukasiewicz-Institute of Microelectronics and Photonics (IMiF) and the AGH University of Krakow (AGH UK)</p>
4	<p>Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)</p>	<p>MSc in Materials Science, Chemistry, Applied Physics</p> <p>Knowledge of materials science, Linux environment, computational methods (molecular dynamics, DFT, machine learning), statistics methods, programming languages: bash, Fortran, C++, python.</p>
5	<p>Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.</p>	<p>NCN, NCBR</p>



K R A K O W S K A  
INTERDYSCYPLINARNA  
**SZKOŁA DOKTORSKA**