

**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	Imię i nazwisko promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	Jan Łażewski , dr hab., prof. IFJ PAN Zakład Komputerowych Badań Materiałów, Instytut Fizyki Jądrowej PAN jan.lazewski@ifj.edu.pl
2	Imię i nazwisko promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	Svitlana Pastukh, dr Zakład Komputerowych Badań Materiałów, Instytut Fizyki Jądrowej PAN svitlana.pastukh@ifj.edu.pl
3	Temat zagadnienia badawczego + krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	Dynamika sieci oraz własności termodynamiczne materiałów badane metodami z pierwszych zasad Poprzez studiowanie dynamiki sieci wybranych materiałów sprawdzana będzie stabilność / granice stabilności struktury krystalicznej, badane będą ewentualne przejścia fazowe / diagramy fazowe. Znajomość widma fononowego umożliwi wyliczenie różnych własności termodynamicznych. Uwzględ- nienie wyższych rzędów oddziaływania (anharmoniczności potencjału) pozwoli na wyznaczenie czasów życia fononów, średniej drogi swobodnej i w konsekwencji również przewod- nictwa cieplnego badanych materiałów. Wykorzystanie idei TDEP (temperaturowej zależności efektywnego potencjału) [1] i zastosowanie pakietu HECSS [2] ułatwi badanie zależ- ności temperaturowych wyliczonych wcześniej własności w T=0 K. Wszystkie obliczenia będą prowadzone w ramach teorii DFT bez wykorzystania jakichkolwiek wyników doświadczalnych, co umożliwi symulowanie własności również nieznanych lub niebadanych dotąd materiałów. Jednocześnie na każdym etapie rachunków, do weryfikacji obliczeń zostaną wykorzystane dostępne wyniki ekspery-

		<p>mentalne. Przykłady prezentujące możliwości posiadanego warsztatu, który w ramach zadania będzie dalej rozwijany, można znaleźć w pracach [3-5].</p> <p>[1] O. Hellmann <i>et al.</i>, Phys. Rev. B 87, 104111 (2013) [2] P.T. Jochym, J. Łażewski, SciPost Phys. 10, 129 (2021) [3] J. Łażewski <i>et al.</i>, Inorg. Chem. 60, 9571 (2021) [4] P.T. Jochym <i>et al.</i>, Phys. Rev. Materials 6, 113601 (2022) [5] S. Pastukh <i>et al.</i>, Comput. Condens. Matter 47 (2026) e01322</p>
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	<p>Ukończone studia magisterskie na kierunku: fizyka, chemia, inżynieria materiałowa lub pokrewnym. Podstawowa wiedza z zakresu fizyki fazy skondensowanej. Podstawowe umiejętności w zakresie Linuxa, LaTeX-a i Pythona. Znajomość języka angielskiego na poziomie B2.</p>
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	<p>Jan Łażewski, Dr. hab., Prof. IFJ PAN Department of Computational Materials Research, Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences jan.lazewski@ifj.edu.pl</p>
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	<p>Svitlana Pastukh, dr Department of Computational Materials Research, Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences svitlana.pastukh@ifj.edu.pl</p>
3	Research subject title Short description, up to 250 words	<p>Lattice dynamics and thermodynamic properties of materials studied by first-principles methods</p> <p>By studying the lattice dynamics of selected materials, the stability / stability limits of the crystal structure will be verified, and potential phase transitions / phase diagrams will be investigated. Knowledge of the phonon spectrum will enable the calculation of various thermodynamic properties. Taking into account higher-order interactions (potential anharmonicity) will allow for the determination of phonon</p>

		<p>lifetimes, the mean free path, and consequently, the thermal conductivity of the studied materials. Utilizing the TDEP (temperature-dependent effective potential) concept [1] and applying the HECSS package [2] will facilitate the investigation of the temperature dependence of properties previously calculated at T=0 K. All calculations will be carried out within the DFT framework without using any experimental data, which enables the simulation of the properties of materials that are currently unknown or have not yet been investigated. Concurrently, at each stage of the computations, available experimental results will be used to verify the calculations. Examples demonstrating the capabilities of the current methodological framework, which will be further developed as part of this task, can be found in papers [3-5].</p> <p>[1] O. Hellmann <i>et al.</i>, Phys. Rev. B 87, 104111 (2013) [2] P.T. Jochym, J. Łażewski, SciPost Phys. 10, 129 (2021) [3] J. Łażewski <i>et al.</i>, Inorg. Chem. 60, 9571 (2021) [4] P.T. Jochym <i>et al.</i>, Phys. Rev. Materials 6, 113601 (2022) [5] S. Pastukh <i>et al.</i>, Comput. Condens. Matter 47 (2026) e01322</p>
4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	Master's degree in physics, chemistry, materials science, or a related field. Basic knowledge of condensed matter physics. Basic Linux, LaTeX, and Python skills. English language proficiency at B2 level.
5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	