



UNIwersytet
Warszawski



Szkoła Doktorska
Nauk Ścisłych
i Przyrodniczych

Ogłoszenie

PRELUDIUM BIS

Tytuł projektu: **Projektowanie obliczeniowe materiałów magnetycznych na podstawie sieci metaloorganicznych**

Kierownik projektu: dr hab. Mihails Arhangelskis

E-mail: m.arhangelskis@uw.edu.pl

Opis projektu:

W grupie Arhangelskisa opracowujemy metody obliczeniowego projektowania materiałów krystalicznych w celu poprawy szybkości i obniżenia kosztów opracowywania materiałów.

Naszym głównym zainteresowaniem badawczym jest rozwój metody przewidywania struktur krystalicznych (angl. crystal structure prediction, CSP) sieci metaloorganicznych (angl. Metal-organic frameworks, MOF), które są materiałami funkcjonalnymi zbudowanymi z węzłów metali przejściowych połączonych łącznikami organicznymi. MOFy są znane z różnorodności zastosowań funkcjonalnych, w tym magazynowania gazów, katalizy, materiałów do magazynowania energii, materiałów magnetycznych i wielu innych. Różnorodność właściwości funkcjonalnych wynika z ogromnej liczby możliwych kombinacji węzłów i łączników, z których każda prowadzi do materiałów o różnych strukturach krystalicznych, a po tym i właściwościach funkcjonalnych. Dlatego projektowanie nowych MOFów wymaga szeroko zakrojonych eksperymentalnych badań przesiewowych, 2 celu znalezienia kombinacji węzłów i łączników, które dają materiały o pożądanym właściwościach.

Metoda CSP, opracowana w naszym zespole,¹ zapewnia alternatywne podejście do projektowania MOFów z perspektywy obliczeniowej: zaczynając od dwuwymiarowego diagramu węzłów i łączników. Jesteśmy w stanie przewidzieć, które struktury krystaliczne najprawdopodobniej utworzą się eksperymentalnie, a następnie symulować właściwości funkcjonalne przewidywanych struktur. W szczególności ostatnio zastosowaliśmy tę metodę do projektowania MOFów o potencjalnym zastosowaniu jako paliwa raketowe.²

Obecny projekt doktorancki poświęcony jest zastosowaniu CSP do projektowania magnetycznych materiałów MOF. W tych materiałach atomy metali przejściowych z niesparowanymi elektronami przenoszą moment magnetyczny, jednak łączniki organiczne pozwalają kontrolować odległość między centrami magnetycznymi i ich orientację, wpływając w ten sposób na ogólną wydajność magnetyczną.³ Naszym celem jest wiarygodne przewidywanie struktur MOFów, które mają silne właściwości magnetyczne w możliwysokich temperaturach.

Wybrany kandydat będzie stosował najnowocześniejsze metody obliczeniowe, przede wszystkim obliczenia metodą teorii funkcjonału gęstości (ang. *density functional theory*, DFT), oraz uczenie maszynowe do przewidywania struktur krystalicznych i właściwości magnetycznych (uporządkowanie magnetyczne, temperatura Curie) struktur MOFów.

Stypendium obejmuje również 6-miesięczny staż (wspierany przez NAWA) u dr. Krunoslava Užarevicia (Instytut Ruđer Bošković, Zagrzeb, Chorwacja), gdzie kandydat przejdzie szkolenie w zakresie eksperymentalnej syntezy i charakteryzacji MOFów, w tym pomiarach magnetycznych.

W przypadku pytań proszę pisać na adres m.arhangelskis@uw.edu.pl. Więcej informacji można znaleźć stronie internetowej www.arhangelskis.org.

Bibliografia

- (1) Darby, J. P.; Arhangelskis, M.; Katsenis, A. D.; Marrett, J. M.; Frišćić, T.; Morris, A. J. *Chem. Mater.* **2020**, *32*, 5835–5844.
- (2) Xu, Y.; Marrett, J. M.; Titi, H. M.; Darby, J. P.; Morris, A. J.; Frišćić, T.; Arhangelskis, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 3515–3525..
- (3) Muratović, S.; Martinez, V.; Karadeniz, B.; Pajić, D.; Brekalo, I.; Arhangelskis, M.; Mazaj, M.; Mali, G.; Etter, M.; Frišćić, T.; Krupskaya, Y.; Kataev, V.; Žilić, D.; Užarević, K. *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 18181–18192.

Warunki względem kandydata

Do konkursu może przystąpić osoba, która nie posiada stopnia naukowego doktora i nie jest uczestnikiem szkoły doktorskiej.

- Stopień magistra chemii oraz dziedzin pokrewnych.
- Doświadczenie w obliczeniach chemii kwantowej (periodyczne obliczenia DFT są pożądane).
- Dobra znajomość języka angielskiego.

Dodatkowe kwalifikacje:

- Doświadczenie w pomiarach dyfrakcji rentgenowskiej.
- Doświadczenie z różnymi metodami charakteryzacji ciała stałego, np. *NMR w ciele stałym*, pomiary magnetyczne, analiza termiczna.

Dyscyplina: nauki chemiczne

Limit miejsc: 1

Harmonogram rekrutacji

Harmonogram rekrutacji:

- rejestracja kandydatów w IRK: od 10 maja do 09 czerwca 2023 r.
 - postępowanie rekrutacyjne: od 14 czerwca do 23 czerwca 2023 r.
 - ogłoszenie listy rankingowej: do 30 czerwca 2023 r.
 - przyjmowanie dokumentów od zakwalifikowanych kandydatów: od 3 lipca do 21 września 2023 r.
 - ogłoszenie listy przyjętych do Szkoły Doktorskiej: do 30 września 2023 r.
- Rozpoczęcie kształcenia – październik 2023

Opłata rekrutacyjna

200 zł

Forma postępowania kwalifikacyjnego

W postępowaniu kwalifikacyjnym uwzględnia się ocenę:

- 1) aktywności naukowej kandydata na podstawie CV lub życiorysu udokumentowanej skanami materiałów załączonymi do wniosku o przyjęcie do Szkoły;
- 2) rozmowy kwalifikacyjnej z kandydatem / egzaminu kwalifikacyjnego;
- 3) innych osiągnięć.

Język postępowania kwalifikacyjnego, w tym rozmowy kwalifikacyjnej

Rozmowa kwalifikacyjna odbywa się w języku polskim lub angielskim zgodnie z preferencjami kandydata zgłoszonymi w IRK. W przypadku wyboru języka polskiego, rozmowa kwalifikacyjna może zawierać część prowadzoną w języku angielskim.

Wymagane dokumenty

Kandydat składa wyłącznie w IRK wniosek o przyjęcie do Szkoły. Wniosek zawiera:

- 1) wskazanie wybranej dyscypliny, w której kandydat planuje podjąć kształcenie, numer PESEL lub numer paszportu, obywatelstwo, dane kontaktowe (adres zamieszkania, adres poczty elektronicznej, numer telefonu), informację, czy kandydat wyraża zgodę na doręczenie decyzji administracyjnych za pomocą środków komunikacji elektronicznej, zgodę na przetwarzanie danych osobowych na potrzeby postępowania rekrutacyjnego;
- 2) skan dyplomu ukończenia jednolitych studiów magisterskich bądź studiów drugiego stopnia lub równorzędny uzyskany na podstawie odrębnych przepisów lub w przypadku kandydatów realizujących kształcenie w ramach Europejskiego Obszaru Szkolnictwa Wyższego - zaświadczenie o uzyskaniu tytułu zawodowego magistra albo oświadczenie, że dyplom lub świadectwo uzyskania tytułu zawodowego magistra zostanie dostarczone do 21.09.2023 (formularz oświadczenia). W przypadku dyplomu równorzędnego dyplomowi ukończenia jednolitych studiów magisterskich lub studiów drugiego stopnia, kandydat uzasadnia tę równorzędność. W przypadku gdy dyplom został wydany w języku innym niż polski lub angielski, kandydat załącza jego tłumaczenie przysięgłe;
- 3) życiorys lub CV zawierające informacje o aktywności naukowej, w tym zainteresowaniach i osiągnięciach naukowych kandydata w okresie pięciu lat kalendarzowych poprzedzających złożenie wniosku (w przypadku, gdy kandydat w tym okresie został rodzicem, co potwierdzi załączając we wniosku skan aktu urodzenia dziecka, termin ten podlega wydłużeniu o dwa lata na każde dziecko), w szczególności o:
 - publikacjach,
 - pracach badawczych i organizacyjnych w kołach naukowych,
 - udziale w konferencjach naukowych,
 - udziale w projektach badawczych,
 - nagrodach i wyróżnieniach,
 - stażach badawczych,
 - odbytych szkoleniach z zakresu umiejętności badawczych,
 - działalności popularyzującej naukę,
 - działalności w ciałach przedstawicielskich ruchu naukowego,
 - średniej ocen ze studiów,
 - karierze zawodowej,
 - znajomości języków obcych;
- 4) skany materiałów potwierdzających wskazaną w życiorysie lub CV aktywność naukową;
- 5) dokument potwierdzający znajomość języka angielskiego na poziomie co najmniej B2 lub oświadczenie o znajomości języka angielskiego w stopniu umożliwiającym kształcenie w szkole;

- 6) skan oświadczenia planowanego promotora o podjęciu się opieki promotorskiej oraz o liczbie doktorantów, dla których pozostaje wyznaczonym promotorem według wzoru, stanowiącego załącznik nr 4 do Uchwały nr 17 Senatu Uniwersytetu Warszawskiego z dnia 20 stycznia 2021 r. w sprawie zasad rekrutacji do szkół doktorskich Uniwersytetu Warszawskiego (Monitor UW z 2023, poz. 43), ponadto kandydat może dołączyć skan opinii planowanego promotora oraz opinie innych pracowników naukowych na temat kandydata oraz jego aktywności naukowej lub propozycji projektu badawczego;
- 7) fotografię przedstawiającą twarz kandydata, umożliwiającą jego identyfikację;
- 8) oświadczenie, czy jest lub był doktorantem albo uczestnikiem studiów doktoranckich lub posiada bądź posiadał wszczęty przewód doktorski albo postępowanie w sprawie nadania stopnia doktora, a jeżeli tak – tytuł rozprawy doktorskiej albo projektu badawczego przygotowywanego przez kandydata, z podaniem imienia i nazwiska jego opiekuna naukowego lub promotora;
- 9) oświadczenie o zapoznaniu się z treścią uchwały nr 17 Senatu Uniwersytetu Warszawskiego z dnia 20 stycznia 2021 r. w sprawie zasad rekrutacji do szkół doktorskich Uniwersytetu Warszawskiego (Monitor UW z 2023, poz. 43) oraz treścią art. 40 i art. 41 Kodeksu postępowania administracyjnego;
- 10) skany kart przebiegu studiów I i II stopnia lub jednolitych studiów magisterskich, lub dokumentów równoważnych (np. suplement do dyplomu);
- 11) streszczenie pracy lub projektu magisterskiego w języku angielskim (do 3000 znaków ze spacjami).

Kryteria oceny

- a) kompetencje do realizacji określonych zadań w projekcie badawczym (70% oceny końcowej)
 - 3 pkt - bardzo dobre
 - 2 pkt – dobre
 - 1 pkt - słabe
 - 0 pkt - brak kompetencji
- b) dorobek naukowy kandydata, w tym publikacje w renomowanych wydawnictwach / czasopismach naukowych (30% oceny końcowej)
 - 4 pkt – wyróżniający
 - 3 pkt - bardzo dobry
 - 2 pkt – dobry
 - 1 pkt – słaby
 - 0 pkt - brak dorobku naukowego

Program kształcenia

Kształcenie trwa 4 lata. Obejmuje zajęcia obowiązkowe (nie więcej niż 300 godz. łącznie przez cały okres kształcenia) oraz realizację indywidualnego programu badawczego, realizowanego pod kierunkiem promotora. Rozpoczęcie kształcenia – 1 października 2023.

Przygotowanie rozprawy doktorskiej w ramach programu nie może trwać dłużej niż 4 lata.

Stypendium

Stypendium doktoranckie PRELUDIUM BIS w miesięcznej wysokości:

- 4 266,00 zł brutto/mies. do miesiąca, w którym została przeprowadzona ocena śródkresowa doktoranta w szkole doktorskiej,
- 5199,00 zł brutto/mies. po miesiącu, w którym została przeprowadzona ocena śródkresowa doktoranta w szkole doktorskiej

otrzymywane jest na zasadach określonych przepisami ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce.