

**Proponowana tematyka prac doktorskich w związku z rekrutacją na studia
doktoranckie na rok akademicki 2018/2019**

Opiekun naukowy: dr hab. Zygmunt Bąk, prof. AJD

Instytut Fizyki, Zakład Fizyki Teoretycznej

Armii Krajowej 13/15, Częstochowa

Pokój 1008

z.bak@ajd.czyst.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki fizyczne, fizyka lub nauki chemiczne, chemia.

**Wpływ domieszek na zmiany struktury elektronowej nano-ziaren tlenków tytanu
domieszkowanych glinem, borem, fosforem, krzemem lub węglem i ich związek z
własnościami fotokatalicznymi materiału.**

Domieszkowanie nano-ziaren TiO_2 atomami metali i/lub niemetalu zmienia szerokość przerwy energetycznej poprawiając fotokatalityczne właściwości materiału, w szczególności zwiększając ich efektywność w procesach degradacji barwników (Krishnakumar, Boobas 2016, 2017). Właściwość ta nie została jak dotąd wyjaśniona na poziomie zmian w strukturze elektronowej materiału. Nie jest też wyjaśniony mechanizm oddziaływania domieszek w przypadku współdopowania oraz mechanizm wpływu koncentracji na poprawę właściwości. Zbadanie tego zagadnienia byłoby zadaniem doktorantki/doktoranta. Podstawowymi narzędziami byłyby tu pakiety obliczeniowe Gaussian16, Calypso oraz ATK Quantum Wise.

Opisywane w literaturze materiały na bazie domieszkowanych nano-ziaren tlenku tytanu otrzymywane były metodą sol-gel lub hydrotermalną (Boobas 2017). Do zadań realizującego prace będzie też należało zbadanie możliwości syntezy takich ziaren „zieloną techniką”, to jest z wykorzystaniem ekstraktów roślinnych. Ta, tak zwana „green way” została sprawdzona w przypadku nano – ziaren tlenku tytanu czy tlenku cynku (Rajakumar i inn., 2012, Santhoskumar i inn., 2014, Karnan i inn., 2016, Agarwal i inn., 2017, Nava i inn. 2017). W literaturze dostępne są raporty przedstawiające wykorzystanie wielu różnych roślin – niestety przeważnie tropikalnych, grzybów i bakterii. W proponowanych badaniach proponuję wykorzystać ekstrakty z koniczyny, dzikiej róży i z aloesu – roślin powszechnie dostępnych w naszym kraju.

Otrzymany materiał należałoby przebadać: XRD, SEM, IR, UV-VIS oraz przeprowadzić testy jego właściwości fotokatalicznych dla reakcji rozkładu kilku popularnych barwników.

Ostateczna decyzja co do wyboru dziedziny, w której byłby realizowany przewód, zostanie podjęta na podstawie pierwszej części otrzymanych wyników, a także predyspozycji osoby realizującej temat.

Opiekun naukowy: dr hab. Zygmunt Bąk, prof. AJD

Instytut Fizyki, Zakład Fizyki Teoretycznej

Armii Krajowej 13/15, Częstochowa

Pokój 1008

z.bak@ajd.czyst.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki fizyczne, fizyka lub nauki chemiczne, chemia.

**Wpływ domieszek na zmiany struktury elektronowej nano-ziaren tlenków cynku
domieszkowanych glinem, borem, fosforem, krzemem lub węglem i ich związek z
własnościami fotokatalicznymi materiału.**

Zakres planowanych prac jak w przypadku badań zaproponowanych dla tlenku tytanu.

Opiekun naukowy: Prof. dr hab. Józef Drabowicz

Katedra Chemii Organicznej
Budynek: Aleja Armii Krajowej 13/15
Pokój: 45, tel. 665011171; e-mail: draj@cbmm.lodz.pl;
WWW: <http://ajd.czest.pl/p183,Drabowicz>

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Wybrane związki ze stereogenicznym heteroatomem jak chiralne zasady lub kwasy

Celem projektu jest przeprowadzenie badań nad wykorzystaniem jako chiralnych substancji pomocniczych w syntezie związków optycznie czynnych i niektórych pomiarach spektroskopowych wybranych optycznie czynnych zasad i kwasów których chiralność wynika z obecności stereogenicznego atomu fosforu lub siarki. Program zawiera dwa nurty badawcze. Pierwszy z nich wiąże się z badaniami z zakresu metodologii syntezy organicznej. Otwierającym fragmentem tego nurtu będą syntezy modelowych optycznie czynnych zasad i kwasów oparte głównie na oryginalnych procedurach opracowanych wcześniej w grupie Kierownika grantu. Natomiast podstawowy element stanowić będą badania nad wykorzystaniem modelowych połączeń jako:

- a) induktorów chiralności w wybranych reakcjach syntezy asymetrycznej.
- b) prekursorów nowych chiralnych cieczy jonowych
- c) enancjomerycznie czystych składników układów diastereoizomerycznych wykorzystywanych w klasycznych procedurach rozdziału na enancjomery racemicznych kwasów lub zasad.

Drugi, uzupełniający nurt stanowić będą badania nad wykorzystaniem zsyntetyzowanych optycznie czynnych zasad i kwasów, w tym funkcjonalizowanych chiralnym podstawnikiem w pozycji 5 1-*H*-1,2,3-tetrazoli, jako chiralnych odczynników solwatujących w spektroskopii NMR. Realizacja programu badawczego powinna doprowadzić do powiększenia biblioteki optycznie czynnych zasad i kwasów. Powinna również pozwolić na weryfikację hipotezy badawczej zakładającej, że właściwości kwasowe (wynikające z obecności ugrupowania hydroksylowego) lub zasadowe (wynikające z obecności atomu azotu) będą w istotny sposób modyfikowane przez obecne w strukturze heteroatomy lub ugrupowania zawierające ten heteroatom (np. ugrupowanie fosforylowe). Powinna również zweryfikować hipotezę, że połączenia te mogą stanowić nową grupę optycznie czynnych katalizatorów organicznych lub prekursorów optycznie czynnych cieczy jonowych o charakterze soli amoniowych. Realizacja pomiarów spektroskopowych powinna wykazać między innymi czy: a) dynamiczne układy diastereomeryczne można obserwować za pomocą spektrofluymetrii i czy technika ta może być wykorzystana do oznaczania nadmiarów enancjomerycznych techniką NMR b) takie układy tworzone przez optycznie czynne zasady ze stereogenicznym heteroatomem charakteryzują się zwiększonymi wartościami magnetycznej nierównocenności w porównaniu z układami tworzonymi z udziałem zasad których czynność optyczna wynika z obecności stereogenicznego atomu węgla lub chiralności osiowej,

Koncepcja i plan badań: W ramach projektu otrzymane zostaną: izomeryczne anilinofosfinitlenki, α -pirydynofosfinitlenki, *S*- aniliniotiofosfiniany, modelowe tlenki fosfin: *t*-butylofenylo- α -aminometylowej i β -aminoetylowej, izomeryczne anilinosulfotlenki, sulfotlenki *p*-tolilowo- (Ω -N,N-dialkilo)alkilowe, sulfotlenki arylo(alkilowo) pirydylowe, kwasy tiofosfinowe: *t*-butylo-1-pyrenylowej, *t*-butylo-3-tienylowej, kwas tiofosfinowy oparty na szkielecie kwasu salicylowego, 1-*H*-1,2,3,4-tetrazole funkcjonalizowane w pozycji 5 podstawnikiem ze stereogenicznym fosforylowym atomem fosforu lub sulfurylowym atomem siarki, oligomeryczny kwas *t*-butylo-3-tienylo-*tiofosfinowy*. Przeprowadzone zostaną badania nad syntezą nowych chiralnych cieczy jonowych oraz nad wykorzystaniem zsyntetyzowanych chiralnych kwasów i zasad jako

chiralnych substancji pomocniczych w syntezie asymetrycznej i pomiarach spektroskopowych.

Scientific Advisor: Prof. dr hab. Józef Drabowicz

Chair of Organic Chemistry

Location: Aleja Armii Krajowej 13/15

Room: 45, tel. 665011171; E-mail: draj@cbmm.lodz.pl

WWW: <http://ajd.czest.pl/p183,Drabowicz>

Field and discipline: chemical sciences, chemistry

Selected compounds with a stereogenic heteroatom as chiral bases or acids

The aim of the project is to carry out research on the use as chiral auxiliaries in the synthesis of optically active compounds and some spectroscopic measurements of selected, optically active, bases and acids whose chirality results from the presence of a stereogenic phosphorus or sulfur atom. The program includes two research lines. The first of these involves research in the field of organic synthesis methodology. Preliminary fragments of this research line will be the synthesis of model optically active bases and acids based mainly on the original procedures developed earlier in the Principale Investigator (PI) group. While the basic element will be research devoted to the use of model connections as:

- a) chiral inductors in selected asymmetric synthesis reactions.
- b) precursors of new chiral ionic liquids
- c) enantiomerically pure components of diastereoisomeric systems used in classical procedures for the separation of racemic acids or bases into enantiomers

The second, complementary line will be research on the use of synthesized optically active bases and acids, including the 5-H-1,2,3-tetraazole functionalised with a chiral substituent at the 5 position, as chiral solvating reagents in NMR spectroscopy. The implementation of the research program should lead to the enlargement of the library of optically active bases and acids. It should also allow the verification of a research hypothesis assuming that the acidic properties (resulting from the presence of a hydroxyl group) or basic (due to the presence of a nitrogen atom) will be significantly modified by the heteroatoms present in the structure or groups containing this heteroatom (e.g., phosphoryl moiety). It should also verify the hypothesis that these compounds may constitute a new group of optically active organocatalysts or precursors of optically active ionic liquids having an ammonium salt nature. The spectroscopic measurements should demonstrate, among other things, whether: a) dynamic diastereomeric systems can be observed by spectrofluorimetry and whether this technique can be used to determine enantiomeric excess by NMR technique. b) such systems, created by optically active base with a stereogenic heteroatom, are characterized by increased values of magnetic nonequivalence in comparison with systems formed with the participation of bases whose optical activity results from the presence of a stereogenic carbon or axial chirality.

Research plan: The research plan assumes obtaining, inter alia:

- a) optically active, isomeric anilylphosphinoxides of α -pyridylphosphinoxides and S-anilylthiolphosphinates
- b) model phosphineoxides: t-butylphenyl- α -aminomethyl and β -aminoethyl
- c) thiophosphinic acids: t-butyl-1-pyrenyl, t-butyl-3-thienyl and thiophosphoric acid based on a salicylic acid skeleton
- d) 1-H-1,2,3,4-tetraazoles functionalized at the 5-position with a stereogenic phosphinyl phosphorus atom or a sulphinyl sulfur atom

- e) oligomeric t-butyl-3-thienylphosphonic acid
- f) chiral ionic liquids based on optically active bases and acids obtained as part of the project

In addition, the NMR spectroscopy measurements will be carried out using prepared bases and acids as chiral solvating agents.

Opiekun naukowy: dr hab. Alina Gil, prof. AJD

Zakład Techniki Informatycznych i Podstaw Zarządzania, Instytut Edukacji Technicznej i Bezpieczeństwa

Budynek: Aleja Armii Krajowej 13/15

Pokój: 300 lub 11, tel. 34 361 49 18 wew. 120 lub 301; e-mail: a.gil@ajd.czyst.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki fizyczne, fizyka

Badania własności magnetycznych wybranych związków międzymetalicznych typu RT_xX_2 (R-ziemia rzadka, T-metal przejściowy, X-metaloid)

Własności magnetyczne trójskładnikowych związków międzymetalicznych RT_xX_2 badane są od szeregu lat w celu poszukiwania nowych materiałów magnetycznych. Poszukiwania te są utrudnione ze względu na brak pełnego opisu teoretycznego tych związków. Systematyczne badania własności magnetycznych związków ziem rzadkich dają nadzieję na pełne zrozumienie magnetyzmu w tych rodzinach związków i na znalezienie odpowiedzi na pytania dotyczące mechanizmów oddziaływania między momentami magnetycznymi. Podstawowym celem badań jest określenie struktury magnetycznej, poznanie własności magnetycznych tych związków, które wskażą na ewentualne dalsze ich wykorzystanie.

Badania mają charakter podstawowy, posłużą poznaniu nie opisanych wcześniej własności magnetycznych jak również określeniu wpływu pierwiastków T i X na uporządkowanie magnetyczne. Przeprowadzone zostaną badania przy użyciu metod rentgenowskich, magnetometrycznych, neutronograficznych. Numeryczne opracowywanie danych pomiarowych wykonuje się w oparciu o program Fullprof i Origin. Możliwe przeprowadzenie obliczeń teoretycznych w celu porównania z wynikami eksperymentalnymi.

Opiekun naukowy: dr hab. Jacek Filipecki, prof. AJD

we współpracy z dr hab. Edmundem Golisem

Zakład Badań Strukturalnych i Fizyki Medycznej

Instytut Fizyki, Al. Armii Krajowej 13/15

E-mail: j.filipecki@ajd.czyst.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki fizyczne, fizyka

Magnetoptyczne własności szkieł tellurowych domieszkowanych jonami pierwiastków ziem rzadkich

Szklą tellurowe dla zastosowań w optoelektronice, są obiektem dużego zainteresowania badawczego specjalistów z zakresu fizyki, technologii chemicznej i inżynierii materiałowej.

Celem pracy będą badania własności magnetoptycznych oraz struktury szkieł tellurowych pod kątem określenia stopnia zdefektowania i jego wpływu na własności magnetoptyczne. Zmiany własności szkieł będą badane dla materiałów domieszkowanych jonami ziem rzadkich, które w znaczący sposób wpływają na polepszenie własności magnetoptycznych materiałów co potwierdzają dotychczas prowadzone badania. Badania przeprowadzone zostaną z wykorzystaniem następujących metod:

- określenie własności magnetoptycznych w oparciu o pomiary efektu Faradaya i obliczenia stałej Verdet, na podstawie wartości kąta skręcenia płaszczyzny polaryzacji światła, z wykorzystaniem dedykowanego stanowiska pomiarowego.

- pomiary stałopolowej podatności magnetycznej, z wykorzystaniem stanowiska pomiarowego wyposażonego w magnetometr wibracyjny VSM 7301 firmy Lake Shore;
- pomiary czasów życia pozytonów z wykorzystaniem spektrometru czasów życia pozytonów PALS firmy ORTEC oraz spektroskopii Ramana i MIR.

Działanie urządzeń optoelektronicznych wykorzystujących własności magnetoptyczne jest oparte na zjawisku Faraday'a, polegającym na skręceniu płaszczyzny polaryzacji światła spolaryzowanego liniowo, przechodzącego przez izotropowe ciało przezroczyste, pod wpływem pola magnetycznego, którego kierunek linii sił jest równoległy do kierunku wiązki świetlnej. Współczynnik proporcjonalności V nazywany jest stałą Verdet'a, charakteryzującą własności magnetoptyczne materiałów.

Pomiary podatności magnetycznej materiałów pozwalają na ocenę ich własności magnetycznych w oparciu o określenie dominującego rodzaju uporządkowania magnetycznego, która obrazuje związek między namagnesowaniem i natężeniem pola magnetycznego.

Metody spektroskopii PALS, MIR i Ramana są jednymi z najlepszych technik badawczych do określenia zmian strukturalnych.

Opiekun naukowy: dr hab. Jacek Filipecki, prof. AJD

we współpracy z dr hab. Małgorzatą Hylą

Zakład Badań Strukturalnych i Fizyki Medycznej

Instytut Fizyki, Al. Armii Krajowej 13/15

E-mail: j.filipecki@ajd.czest.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki fizyczne, fizyka

Badania własności strukturalnych i akustycznych materiałów dźwiękochłonnych

Badania z wykorzystaniem głównie metod spektroskopii czasów życia pozytonów PALS, oraz mikroskopii skaningowej (SEM) i mikroskopii sił atomowych (AFM).

Praca dotyczy wykorzystania Spektroskopii Czasów Życia Pozytonów (PALS) do badań struktury materiałów dźwiękochłonnych. Tłumienie dźwięku przez materiały i wyroby dźwiękochłonne zachodzi w lukach (wolnych przestrzeniach) występujących w materiale, dlatego też, problem skutecznego wzajemnego powiązania podstawowych właściwości eksploatacyjnych tych materiałów i parametrów ich struktury ma obecnie istotne znaczenie. Metoda Spektroskopii Czasów Życia Pozytonów jest jednym z najpotężniejszych narzędzi do badania wewnętrznych pustek o rozmiarach nanometrowych występujących w materiałach porowatych i polimerowych. Metoda oparta jest o zjawisko anihilacji pozytonów, bazuje na znajomości procesów wzajemnego oddziaływania pozyton-elektron w materii skondensowanej. Procesy anihilacyjne są bardzo czułe na strukturę ośrodka, a średnie czasy życia pozytonów są mierzone z dużą precyzją. Prace uzupełnione zostaną o badania własności akustycznych tych materiałów. Przewidywane są również badania strukturalne innymi metodami tj. mikroskopii skaningowej (SEM) oraz mikroskopii sił atomowych (AFM).

dr hab. Janusz Kapuśniak, prof. UJD

Instytut Chemii, Ochrony Środowiska i Biotechnologii

Al. Armii Krajowej 13/15, 42-200 Częstochowa, pokój 121

e-mail: j.kapusniak@ajd.czest.pl
https://www.researchgate.net/profile/Janusz_Kapusniak

dr hab. inż. Dariusz Wawro, prof. IBWCh
Zespół Włókien z Polimerów Naturalnych
Instytut Biopolimerów i Włókien Chemicznych
e-mail: dariusz.wawro@ibwch.lodz.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Otrzymywanie i badanie właściwości zielonych kompozytów wytworzonych z biopolimerów i cieczy jonowych

Globalna koncepcja ochrony środowiska oraz świadomość wyczerpywania się zasobów paliw kopalnych stosowanych do wytwarzania tworzyw sztucznych doprowadziła do potrzeby powstania trwałych i przyjaznych dla środowiska materiałów takich jak zielone kompozyty.

Bazą do pozyskiwania tych materiałów są łatwe w recyklingu oraz ulegające biodegradacji surowce naturalne. Odpady otrzymywane w procesie przetwórstwa drzewnego mogą posłużyć jako znakomite źródło surowca w postaci polisacharydów, takich jak celuloza i hemicelulozy oraz innych biopolimerów jak lignina.

Szerokie spektrum oddziaływania cieczy jonowych, zwłaszcza z substancjami organicznymi, czyni je znakomitym czynnikiem w zastosowaniu do produkcji zielonych kompozytów. Unikatowe właściwości cieczy jonowych, takie jak niska prężność par nad roztworem, niska temperatura topnienia, niepalność, czy łatwa możliwość regeneracji oraz stabilność przy szerokim zakresie temperaturowym powodują, że są one znakomitymi rozpuszczalnikami substancji organicznych. Co więcej ciecze jonowe są bezpieczne dla środowiska, a wiele z nich ulega biodegradacji.

Celem pracy jest wytworzenie zielonych kompozytów.

Główne zagadnienia badawcze realizowane w ramach tego tematu będą obejmowały:

- wytworzenie zielonych kompozytów z biopolimerów.
- zbadanie właściwości fizyko-chemicznych otrzymanych zielonych kompozytów.

Właściwości mechaniczne i fizyko-chemiczne zielonych kompozytów ulegają znacznym zmianom w zależności od sposobu ich wytworzenia. Analiza pozwoli porównać i dokładnie opisać właściwości wytworzonych kompozytów. Zakłada się przeprowadzone następujących analiz: skaningowa mikroskopia rentgenowska (SEM), spektroskopia w podczerwieni (FTIR) chromatografia żelowa (GPC), rentgenowska analiza dyfrakcyjna (XRD), analiza termogravimetryczna (TGA). Przeprowadzone zostaną także badania biodegradacji oraz fitotoksyczności wytworzonych kompozytów.

Opiekun naukowy: dr hab. Cezary Kozłowski, prof. AJD
Zakład Chemii Nieorganicznej Analitycznej i Środowiska
Budynek: Al. Armii Krajowej 13/15 Pok. 134, tel. 343614918 w.142
e-mail: c.kozlowski@ajd.czest.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Zastosowania przenośnikowego transportu jonów metali do separacji jonów metali Zakres naukowo-badawczy prac doktorskiej obejmuje syntezę oraz określenie właściwości separacyjnych nowych immobilizowane układ w membranowych zawierających makrocycliczne przenośniki przeznaczone do wspomaganie metod analitycznych oraz zastosowań w chemii separacji.

dr hab. Arkadiusz Mandowski, prof. AJD

Zakład Luminescencji i Biofotoniki

Budynek: Aleja Armii Krajowej 13/15; Pokój: 2008, tel. 34 361 49 19 wew. 262

E-mail: a.mandowski@ajd.czyst.pl

WWW: <http://ajd.czyst.pl/~a.mandowski/index.html>

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki fizyczne, fizyka

Kinetyka przejść częściowo-zlokalizowanych (SLT) w detektorach termoluminescencyjnych LiF_Mg,Ti i LiF:Mg,Cu,P

Termoluminescencja (TL) i optycznie stymulowana luminescencja (OSL) to niezwykle interesujące zjawiska optyczne, które występują w różnych materiałach. Poddając materiał stymulacji termicznej (TL) lub optycznej (OSL) możemy obserwować emisję światła, czyli luminescencję. Co ciekawe, emisja ta zachodzi tylko wtedy, gdy materiał był uprzednio poddany ekscytacji – np. promieniowaniem jonizującym. Dzięki temu zjawiska TL i OSL znajdują szerokie zastosowanie w dozymetrii promieniowania jonizującego (wyznaczaniu dawek) oraz datowaniu materiałów geologicznych i archeologicznych.

TL i OSL występują jedynie w materiałach wysokooporowych (dielektrykach) o stałym stanie skupienia, a więc w kryształach lub szklach. Mechanizm depozycji energii i jej późniejszego uwalniania w postaci luminescencji jest dość złożony. Jego istotą jest występowanie tzw. pułapek nośników ładunku (*charge carrier traps*) oraz centrów rekombinacji (*recombination centers*). Jednym z najogólniejszych modeli opisujących zjawiska TL i OSL jest, sformułowany w 2005 roku, model przejść częściowo-zlokalizowanych (*semi-localized transitions model* – SLT), w którym procesy rekombinacyjne, odpowiedzialne za luminescencję, mogą mieć charakter zarówno lokalny (tzn. zachodzący w bliskim otoczeniu pułapki) jak i zdelokalizowany, czyli dokonujący się poprzez pasma transportowe.

Istnieje wiele przesłanek, że model SLT opisuje poprawnie kinetykę luminescencji w wielu materiałach termoluminescencyjnych. Bezpośrednie porównanie przewidywań modelu SLT z danymi eksperymentalnymi jest jednak niełatwym zadaniem. Do najważniejszych termoluminoforów zaliczyć można domieszkowane kryształy fluorku litu, które są powszechnie wykorzystywane w dozymetrii promieniowania jonizującego. Celem pracy jest zbudowanie modelu SLT dla tych materiałów. Praca ma charakter teoretyczno-eksperymentalny.

dr hab. Arkadiusz Mandowski, prof. AJD

Zakład Luminescencji i Biofotoniki

Budynek: Aleja Armii Krajowej 13/15; Pokój: 2008, tel. 34 361 49 19 wew. 262

E-mail: a.mandowski@ajd.czyst.pl

WWW: <http://ajd.czyst.pl/~a.mandowski/index.html>

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki fizyczne, fizyka

Badania spektralnie rozdzielczej radioluminescencji stymulowanej optycznie (OSL) wybranych fosforów nieorganicznych

Termoluminescencja (TL) i optycznie stymulowana luminescencja (OSL) to niezwykle interesujące zjawiska optyczne, które możemy zaobserwować w różnych materiałach dielektrycznych. Poddając materiał stymulacji termicznej (TL) lub optycznej (OSL) obserwuje się emisję światła, czyli luminescencję. Co ciekawe, emisja ta zachodzi tylko wtedy, gdy materiał był uprzednio poddany ekscytacji – np. promieniowaniem jonizującym. Dzięki temu

zjawiska TL i OSL znajdują szerokie zastosowanie w dozymetrii promieniowania jonizującego (wyznaczaniu dawek) oraz datowaniu materiałów geologicznych i archeologicznych.

Celem pracy jest badanie charakterystyk spektralnych radiacyjnie indukowanej luminescencji długożyciowej OSL (optycznie stymulowana luminescencja) wybranych fosforów nieorganicznych. Pomiary będą dokonane przy użyciu nowego zestawu pomiarowego wyposażonego w podwójny lub potrójny monochromator światła stymulacyjnego. Zebrane dane doświadczalne posłużą do budowy modelu teoretycznego, który będzie opisywał kinetykę rekombinacji promienistej w tych materiałach.

dr hab. Arkadiusz Mandowski, prof. AJD

Zakład Luminescencji i Biofotoniki

Budynek: Aleja Armii Krajowej 13/15; Pokój: 2008, tel. 34 361 49 19 wew. 262

E-mail: a.mandowski@ajd.czyst.pl

WWW: <http://ajd.czyst.pl/~a.mandowski/index.html>

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki fizyczne, fizyka

Przybliżenia kwazi-równowagowe dla modelu przejść częściowo-zlokalizowanych (SLT)

Termoluminescencja (TL) i optycznie stymulowana luminescencja (OSL) to niezwykle interesujące zjawiska optyczne, które występują w różnych materiałach. Poddając materiał stymulacji termicznej (TL) lub optycznej (OSL) możemy obserwować emisję światła, czyli luminescencję. Co ciekawe, emisja ta zachodzi tylko wtedy, gdy materiał był uprzednio poddany ekscytacji – np. promieniowaniem jonizującym. Dzięki temu zjawiska TL i OSL znajdują szerokie zastosowanie w dozymetrii promieniowania jonizującego (wyznaczaniu dawek) oraz datowaniu materiałów geologicznych i archeologicznych.

TL i OSL występują jedynie w materiałach wysokooporowych (dielektrykach) o stałym stanie skupienia, a więc w kryształach lub szklach. Mechanizm depozycji energii i jej późniejszego uwalniania w postaci luminescencji jest dość złożony. Jego istotą jest występowanie tzw. pułapek nośników ładunku (*charge carrier traps*) oraz centrów rekombinacji (*recombination centers*). Jednym z najogólniejszych modeli opisujących zjawiska TL i OSL jest, sformułowany w 2005 roku, model przejść częściowo-zlokalizowanych (*semi-localized transitions model* – SLT), w którym procesy rekombinacyjne, odpowiedzialne za luminescencję, mogą mieć charakter zarówno lokalny (tzn. zachodzący w bliskim otoczeniu pułapki) jak i zdelokalizowany, czyli dokonujący się poprzez pasma transportowe.

Model SLT jest dość złożony matematycznie, co zdecydowanie utrudnia jego bezpośrednie stosowanie do analizy procesów TL i OSL – w szczególności estymacji parametrów pułapkowych. Z tego powodu celowe jest poszukiwanie analitycznych przybliżeń, które pozwolą na uproszczenie matematycznej postaci tego modelu. Celem pracy jest zbadanie przybliżeń kwazi-równowagowych modelu SLT w zastosowaniu do zjawiska TL. Praca ma charakter teoretyczny; obejmuje również symulacje numeryczne.

Opiekun naukowy: dr hab. inż. Bernard Marciniak, prof. AJD

Katedra Badań Strukturalnych i Materiałowych

Budynek: Aleja Armii Krajowej 13/15

Pokój: 54, tel. 34 361 49 18 wew. 170

E-mail: b.marciniak@ajd.czyst.pl

Opiekun pomocniczy: dr Ewa Różycka-Sokołowska, e-mail: e.sokolowska@ajd.czyst.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Analiza oddziaływań niekowalencyjnych w kryształach wybranej grupy związków organicznych

Główne zagadnienia badawcze realizowane w ramach tego tematu będą obejmowały:

- wyznaczenie i udokładnienie struktur badanych związków, oraz
- charakteryzację oddziaływań niekowalencyjnych w kryształach tych związków w oparciu o kryteria geometryczne, analizę powierzchni Hirshfelda oraz parametry topologiczne (teoria „Atoms in Molecules”) i indeks NCI (Non-Covalent Interaction).

Badania te będą prowadzone z wykorzystaniem dyfraktometru rentgenowskiego Xcalibur z kamerą CCD i przystawką temperaturową Cryojet HT oraz oprogramowania zgromadzonego w Katedrze Badań Strukturalnych i Materiałowych.

Opiekun naukowy: dr hab. inż. Bernard Marciniak, prof. AJD

Katedra Badań Strukturalnych i Materiałowych

Budynek: Aleja Armii Krajowej 13/15

Pokój: 54, tel. 34 361 49 18 wew. 170

E-mail: b.marciniak@ajd.czyst.pl

Opiekun pomocniczy: dr Ewa Różycka-Sokołowska, e-mail: e.sokolowska@ajd.czyst.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Wzrost, zarodkowanie i charakteryzacja kryształów wybranej grupy związków organicznych

Badania prowadzone w ramach tego tematu będą koncentrowały się głównie na określeniu:

- rozpuszczalności i właściwości termodynamicznych roztworów wzrostowych badanych związków w rozpuszczalnikach organicznych,
- kinetyki zarodkowania kryształów tych związków z roztworów
- wpływu warunków wzrostu i rozpuszczalnika na ich morfologię.

Badania te będą prowadzone z wykorzystaniem zgromadzonej w Katedrze Badań Strukturalnych i Materiałowych bazy aparaturowej obejmującej takie ważniejsze aparaty i urządzenia jak : niskotemperaturowa komora do otrzymywania kryształów organicznych z roztworów, aparat do wzrostu kryształów z fazy par metodą sublimacji płytkowej, wielostrefowe aparaty do oczyszczania strefowego materiałów organicznych w skali mikro i makro, mikroprocesorowe aparaty do badania zarodkowania kryształów organicznych z roztworów metodą pomiaru gęstości, prędkości propagacji fal ultradźwiękowych oraz przezroczystości/zmętnienia tychże roztworów, aparaty do pomiaru rozpuszczalności ciał stałych w cieczach, goniometr refleksyjny ZRG-3 oraz dyfraktometr rentgenowski Xcalibur z kamerą i dyfraktometr proszkowy HZG-4 ze sterowaniem komputerowym. Realizowane w ramach tej tematyki badania będą koncentrowały się również na wykorzystaniu metod obliczeniowych służących modelowaniu morfologii wzrostowej kryształów badanych związków.

Opiekun naukowy: dr hab. Rajmund Michalski, prof. AJD

Katedra Badań Strukturalnych i Materiałowych Al. Armii Krajowej 13/15 p. 45A,

tel. wew. 141; e-mail: r.michalski@ajd.czyst.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Badania zawartości nieorganicznych jonów w lekach i suplementach diety

Chromatografia jonowa poza rutynowymi zastosowaniami w badaniach jakości wód i ścieków, jest wykorzystywana także w badaniach innych bardziej złożonych próbek, takich jak żywność czy próbki farmaceutyczne oraz biomedyczne. Dostępne na rynku produkty lecznicze i suplementy diety muszą charakteryzować się identyczną skutecznością terapeutyczną oraz bezpieczeństwem dla konsumentów, ponieważ niektóre składniki występujące w lekach mogą stanowić poważne zagrożenie dla zdrowia ludzi. Niestety takie wymagania nie dotyczą suplementów diety, których produkcja i spożycie gwałtownie rośnie. W badaniach farmaceutycznych miarodajność uzyskiwanych wyników ma szczególne znaczenie, ponieważ dotyczą one bezpośrednio naszego zdrowia i życia. Chromatografia jonowa spełnia szereg wymagań, takich jak bardzo dobra powtarzalność, precyzja i dokładność oraz możliwość pełnej automatyzacji pomiarów, potrzebnej do badań zawartości jonów w tego rodzaju produktach.

Opiekun naukowy: dr hab. Rajmund Michalski, prof. AJD

Katedra Badań Strukturalnych i Materiałowych Al. Armii Krajowej 13/15 p. 45A,
tel. wew. 141; e-mail: r.michalski@ajd.czyst.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Chromatografia jonowa w badaniach próbek środowiskowych

W wyniku działalności przemysłowej wiele terenów poprzemysłowych w Polsce wciąż pozostaje pod silnym wpływem antropopresji. Pomimo, że od wielu lat nie działają już tam zakłady przemysłowe zanieczyszczone gleby i wody stanowią wciąż duży problem ekologiczny. W celu określenia źródeł rodzaju i zakresu tych zagrożeń konieczne jest stałe monitorowanie szczególnie wód powierzchniowych i podziemnych, których jakość stanowi wskaźnik zagrożeń dla ludzi mieszkających na tych obszarach. Ponadto tereny te są często przeznaczone na działalność rekreacyjną, a ogródki działkowe tam umiejscowione oraz uprawiane w nich warzywa i owoce mogą stanowić istotne źródło ryzyka zdrowotnego dla ludzi.

Celem badań będzie określenie za pomocą metody chromatografii jonowej zawartości wybranych nieorganicznych i organicznych anionów oraz kationów w wodach powierzchniowych i podziemnych na terenach poprzemysłowych. Część badań zostanie przeprowadzona w laboratoriach akredytowanych Instytutu Podstaw Inżynierii Środowiska PAN w Zabrze.

Opiekun naukowy: dr hab. Rajmund Michalski, prof. AJD

Katedra Badań Strukturalnych i Materiałowych Al. Armii Krajowej 13/15 p. 45A,
tel. wew. 141; e-mail: r.michalski@ajd.czyst.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Zastosowania chromatografii jonowej do oznaczania nieorganicznych i organicznych jonów w próbkach żywności

Głównym celem analizy żywności jest kontrola jakości spożywanych przez konsumentów produktów. Szczególne znaczenie ma monitorowanie zawartości potencjalnie toksycznych substancji chemicznych wykrywanych w żywności, ale także kontrola procesów

technologicznych podczas jej wytwarzania. Przykładami substancji, które mogą wywierać niekorzystny wpływ na zdrowie ludzi są nieorganiczne i organiczne jony. Mogą one wpływać na procesy metaboliczne przebiegające w organizmach żywych i wywierać wpływ na prawidłowy rozwój. Zastosowaniom różnych odmian chromatografii jonowej do badań próbek żywności dotyczą m.in. analiz: produktów mlecznych (np. analizy jodków w mleku, chlorków i sodu w maśle, kwasów organicznych w serach); produktów mięsnych (np. analizy azotanów(III), azotanów(V) i anionów fosforu); napojów (np. analizy nieorganicznych anionów i kationów w wodach i dodatkach do przygotowania napojów, oznaczanie kwasów organicznych w piwach, winach i sokach); konserw (np. analizy chlorków, azotanów(III), sodu, kwasów organicznych, metali przejściowych w warzywach, przyprawach, rybach i mięsie); produktów spożywczych dla dzieci (np. analizy jodków, metali przejściowych); płatków śniadaniowych i pieczywa (np. analizy bromianów(V), jonów metali).

Opiekun naukowy: dr hab. Ewa Mielniczek-Brzóska, prof. AJD

Katedra Chemii Fizycznej

42-200 Częstochowa, Al. Armii Krajowej 13/15

Pokój: 117; tel. 34 361 49 18 wew. 132; e-mail: e.mielniczek@ajd.czyst.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Badania procesów zarodkowania kryształów metodą przeciw-rozpuszczalnikową

Problematyka naukowo-badawcza pracy doktorskiej obejmuje krystalizację wybranych związków chemicznych metodą przeciw-rozpuszczalnikową i zasadniczo dotyczy badań szerokości metastabilnego obszaru ich nasyconych w różnych rozpuszczalnikach i danej temperaturze roztworów w których przesylenie wytwarzanie jest wybranym przeciw-rozpuszczalnikiem dozowanym z określoną szybkością oraz teoretyczne wyjaśnienie zależności pomiędzy szerokością metastabilnego obszaru, rodzajem i szybkością podawanego do nasyconego roztworu przeciw-rozpuszczalnika. Tego typu badania znajdują zastosowanie w takich gałęziach przemysłu jak przemysł chemiczny czy farmaceutyczny podczas planowania procesu krystalizacji.

Opiekun naukowy: dr hab. Ewa Mielniczek-Brzóska, prof. AJD

Katedra Chemii Fizycznej

42-200 Częstochowa, Al. Armii Krajowej 13/15

Pokój: 117; tel. 34 361 49 18 wew. 132; e-mail: e.mielniczek@ajd.czyst.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Badania procesów zarodkowania kryształów metodą politermiczną

Problematyka naukowo-badawcza pracy doktorskiej obejmuje krystalizację wybranych związków chemicznych metodą politermiczną i zasadniczo dotyczy badań szerokości metastabilnego obszaru ich nasyconych w danej temperaturze roztworów w których przesylenie wytwarza się poprzez zmianę temperatury oraz analizę eksperymentalnych danych w oparciu o istniejące teoretyczne modele procesów zarodkowania kryształów. Tego typu badania wiążą się z jakością i wydajnością krystalizowanych produktów co jest istotne podczas planowania procesu krystalizacji.

Opiekun naukowy: prof. dr hab. Volodymyr Pavlyuk

Katedra Chemii Fizycznej

42-200 Częstochowa, Al. Armii Krajowej 13/15

e-mail: vpavlyuk2002@yahoo.com; v.pavlyuk@ajd.czest.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Synteza, badania strukturalne oraz elektrochemiczne stopów układów R-Mg-{Al, Sn} (R-metale ziem rzadkich)

Badania diagramów fazowych oraz struktury związków międzymetalicznych są podstawą do poszukiwania nowych materiałów o unikatowych własnościach fizyko-chemicznych. Stopy ziem rzadkich są bardzo perspektywiczne pod kątem wykorzystania ich jako materiałów elektrodowych w ogniwach wodorkowych, a stopy magnezu w ogniwach magnezowo-jonowych.

Celem pracy doktorskiej będzie opracowanie metody syntezy stopów cyrkonu przy wykorzystaniu następujących metod badawczych: rentgenowska analiza fazowa, rentgenowska analiza rentgenostrukturalna (proszkowa i monokrystaliczna), mikroskopia elektronowa, jakościowa oraz ilościowa analiza mikrorentgenospektralna, metody gazowego oraz elektrochemicznego nawodorowania stopów. Oprócz metod doświadczalnych będą wykorzystane metody obliczeniowe, a mianowicie TB-LMTO-ASA (struktura elektronowa), PANDAT (teoretyczne obliczanie diagramów fazowych)

Opiekun naukowy: prof. dr hab. Volodymyr Pavlyuk

Katedra Chemii Fizycznej

42-200 Częstochowa, Al. Armii Krajowej 13/15

e-mail: vpavlyuk2002@yahoo.com; v.pavlyuk@ajd.czest.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki chemiczne, chemia

Synteza, badania strukturalne oraz elektrochemiczne stopów układów R-Li-{Al, Sn} (R-metale ziem rzadkich)

Praca doktorska w tym temacie będzie poświęcona opracowaniu nowych stopów litowych jako materiałów elektrodowych dla nowoczesnych ogniw litowo-jonowych.

Celem pracy będzie opracowana metody syntezy stopów litowych w atmosferze argonu. W badaniach będą wykorzystywane następujące metody badawcze: rentgenowska analiza fazowa, rentgenowska analiza rentgenostrukturalna (proszkowa i monokrystaliczna), mikroskopia elektronowa, analiza termiczna, metody elektrochemicznego litowania stopów. Częściowo badania będą prowadzone we współpracy z Instytutem Technologicznym w Karlsruhe (Niemcy). Oprócz metod doświadczalnych będą wykorzystane metody obliczeniowe, a mianowicie TB-LMTO-ASA (struktura elektronowa).

Opiekun naukowy: dr hab. Radosław Szczęśniak prof. AJD

Zakład Fizyki Teoretycznej

Aleja Armii Krajowej 13/15 e-mail: szczesni@wip.pcz.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki fizyczne, fizyka

Metoda analizy DFT oraz silne korelacje elektronowe: przypadek molekul dwuatomowych

Zasadniczo klasyczna metoda DFT służy do opisu właściwości słabo skorelowanych układów elektronowych. Niekiedy uzupełnia się ją jakościowo oddziaływaniem hubbardowskim. Uzyskane w powyższym podejściu wyniki należy jednak traktować z dużą rezerwą z uwagi na zastosowanie przybliżenia średniego pola do oddziaływania dwuciałowego. Celem pracy doktorskiej jest takie uogólnienie metody DFT by można było analizować układy silnie skorelowanych elektronów. Szczegółowe rachunki zostaną przeprowadzone na przykładzie

molekuł dwuatomowych dla których dysponujemy dokładnymi wynikami uzyskanymi przy pomocy formalizmu drugiego kwantowania uzupełnionego o metodę wariacyjną.

Opiekun naukowy: dr hab. Radosław Szczęśniak prof. AJD

Zakład Fizyki Teoretycznej

Aleja Armii Krajowej 13/15 e-mail: szczesni@wip.pcz.pl

Dziedzina i dyscyplina naukowa: nauki fizyczne, fizyka

Wpływ korekcji ortokeratologicznej na aberracje optyczną rogówki

Ortokorekcja jest metodą protezowania narządu wzroku polegającą na wymuszeniu zmiany geometrii rogówki w wyniku zastosowania twardych soczewek kontaktowych w trybie nocnym. Zastosowanie takiej korekcji prowadzi do dostosowania kształtem przedniej powierzchni rogówki do odwróconej geometrii soczewki. Celem pracy doktorskiej jest zbadanie zmian zachodzących w aberracjach optycznych wyższego rzędu pod wpływem wymuszonej deformacji rogówki. W celu wykonania analizy zagadnienia konieczne będzie przeprowadzenie badań topografii rogówki i skorelowanie uzyskanych wyników z modelem fizycznym aberracji układu optycznego oka.