

Tytuł: Wzrost kryształów hBN z roztworów metali w wysokim ciśnieniu N_2 – modelowanie własności termodynamicznych układów Me-B-N i weryfikacja eksperymentalna

Promotor: dr hab. Paweł Strąk, prof. IWC PAN

Instytut: Instytut Wysokich Ciśnień Polskiej Akademii Nauk

Jednostka organizacyjna: Laboratorium Fizyki Półprzewodników Azotkowych (NL-2)

WWW: <https://www.unipress.waw.pl/laboratoria/laboratorium-fizyki-polprzewodnikow-azotkowych>

Opis projektu [background; max 1500 znaków ze spacjami]:

Naukowa koncepcja projektu opiera się na kontrolowanej krystalizacji hBN z roztworów metalicznych prowadzonych pod wysokim ciśnieniem azotu, w warunkach zbliżonych do równowagi termodynamicznej. Kluczowym zagadnieniem jest określenie, w jaki sposób skład rozpuszczalnika metalicznego (na przykład Fe, Ga, Mg etc.), aktywność boru oraz potencjał chemiczny azotu wpływają na stabilność hBN i przebieg procesu krystalizacji.

Praca doktorska będzie łączyć modelowanie termodynamiczne z eksperymentalną weryfikacją wybranych granic stabilności hBN w układach Me–B–N. Część teoretyczna obejmie wyznaczanie aktywności boru w roztworach metalicznych na podstawie danych literaturowych, uproszczonych modeli termodynamicznych oraz — tam, gdzie będzie to uzasadnione — obliczeń *ab initio* energii oddziaływania boru z metalem rozpuszczalnika.

Część eksperymentalna będzie polegać na udziale w przygotowaniu i analizie wybranych eksperymentów wysokociśnieniowych, których celem będzie sprawdzenie przewidywań modelu oraz powiązanie warunków równowagi z obserwowanym wzrostem lub brakiem wzrostu hBN. Uzyskane wyniki posłużą do opracowania ilościowych map stabilności hBN oraz do wskazania korzystnych warunków krystalizacji z roztworów metalicznych.

Cel projektu [max 500 znaków ze spacjami]:

Celem projektu jest opracowanie i eksperymentalna weryfikacja opisu termodynamicznego stabilności hBN w wybranych układach Me–B–N pod wysokim ciśnieniem azotu. Wynikiem będą mapy stabilności hBN, ocena wpływu składu rozpuszczalnika na aktywność boru i równowagę tworzenia hBN oraz wskazanie warunków korzystnych dla kontrolowanej krystalizacji, na podstawie połączenia modelowania z eksperymentem.

Wymagania:

Kandydat powinien posiadać tytuł magistra fizyki, nauki o materiałach, chemii lub pokrewnej dziedziny. Wymagane kwalifikacje obejmują solidne podstawy w zakresie fizyki ciała stałego, termodynamiki lub komputerowego badania materiałów. Kandydat powinien być zaznajomiony z podstawowymi koncepcjami modelowania *ab initio* i/lub symulacji numerycznych oraz wykazać umiejętność opracowywania i stosowania modeli teoretycznych do interpretacji danych eksperymentalnych. Doświadczenie w teorii funkcjonału gęstości (DFT), obliczeniach termodynamicznych lub programowaniu naukowym będzie uznane za atut. Od kandydata oczekuje się samodzielnej pracy nad zadaniami teoretycznymi, aktywnej współpracy z badaczami eksperymentalnymi oraz skutecznego komunikowania wyników w ramach multidyscyplinarnego zespołu badawczego. Wymagana jest dobra znajomość języka angielskiego (min. B2).