

# Propozycje tematów badawczych/ **Proposals of research topics**

## Dyscyplina: Nauki fizyczne/ **Discipline: Physical sciences**

prof. dr hab. Mikhail Brik

Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych,

Instytut Fizyki

[m.brik@ujd.edu.pl](mailto:m.brik@ujd.edu.pl)

### 1. **Poszukiwanie nowych manometrów luminescencyjnych na bazie luminoforów nieorganicznych domieszkowanych jonami Mn<sup>2+</sup> i Mn<sup>4+</sup>.**

Ciśnienie to obok temperatury najważniejszy parametr termodynamiczny. Jego wartość wpływa nie tylko na charakter i tempo zachodzących procesów i reakcji, ale również może być niezwykle wartościowym sygnałem diagnostycznym w medycynie, mechanice i układach bezpieczeństwa. Dlatego dokładna kontrola ciśnienia jest niezwykle istotna. Optyczne sensory ciśnienia ze szczególnym uwzględnieniem manometrów luminescencyjnych dzięki swoim unikalnym właściwościom w niezwykle szeroki sposób rozszerzają zakres potencjalnych zastosowań takich mierników. Poprzez zdalny odczyt w sposób elektrycznie pasywny i umożliwiający przestrzenne obrazowanie technika ta dostarcza szerokiego spektrum dodatkowych informacji niezwykle istotnych z aplikacyjnego punktu widzenia. W ramach pracy doktorskiej planuje się przeprowadzić badania teoretyczne pozwalające w przyszłości na opracowywanie niezwykle czułych i precyzyjnych manometrów luminescencyjnych. Wykorzystanie luminescencji do odczytu ciśnienia pozwala nie tylko na jego lokalny pomiar, ale również na dwuwymiarowe obrazowanie zmian ciśnienia. W zamierzony sposób dobrana, innowacyjna kombinacja jonów domieszek oraz precyzyjnie zaprojektowany skład chemiczny luminoforu umożliwi na odczyt ciśnienia poprzez analizę koloru emitowanego światła. Celem pracy doktorskiej jest określenie korelacji pomiędzy składem chemicznym luminoforu oraz jego wpływem na właściwości luminescencyjne analizowanych materiałów pod wpływem kompresji.

Wykorzystanie dostępnych (literaturowe) pomiarów właściwości spektroskopowych analizowanych materiałów w funkcji ciśnienia, wraz z ich danymi strukturalnymi z wynikami obliczeń DFT, pozwolą na stworzenie pakietów danych, które zostaną wykorzystane do trenowania algorytmu uczenia maszynowego. Na podstawie wyników wykonanych obliczeń zostanie stworzony model do przewidywania właściwości manometrycznych fosforów współdomieszkowanych jonami Mn<sup>2+</sup>, Mn<sup>4+</sup> na podstawie danych strukturalnych.

### 1. **Development of novel luminescent manometers based on inorganic phosphors doped with Mn<sup>2+</sup> and Mn<sup>4+</sup> ions.**

Pressure, alongside with temperature, is one of the most crucial thermodynamic parameters. Its value not only influences the nature and rate of processes and reactions but also serves as an extremely valuable diagnostic signal in medicine, mechanics, and safety systems. Therefore, accurate pressure control is of paramount importance. Durable and non-toxic optical pressure sensors, particularly luminescent pressure gauges, significantly expand the range of potential applications due to their unique properties. By enabling remote, electrically passive readings and

spatial imaging, this technique offers a wealth of additional information that is highly valuable from an application standpoint.

As part of this PhD work, we aim to conduct research that will enable the future development of highly sensitive and precise luminescent manometers based on pressure induced changes of the luminescence kinetics. Utilizing luminescence for pressure measurement allows for both local measurement and two-dimensional imaging of pressure changes. The unique and innovative technique, which will be a developing of the supervisor's previous research (fundamental for the field) proposed in this PhD project selection of luminescent ions with complementary properties and a novel readout approach will dramatically increase the sensitivity and scope of applications of luminescent manometers. This thesis will establish correlations between the chemical composition of the phosphor and its effect on the luminescence properties of the materials under compression.

The utilized results of measurements (literature data) of the spectroscopic properties of the analyzed materials as a function of pressure, together with their structural data and performed in the frame of titled thesis information from DFT calculations will allow for creation of data packages that will be used to train the machine-learning algorithm. Based on the results of the performed calculations, a model will be created to predict the manometric properties of phosphors co-doped with Mn<sup>2+</sup> and Mn<sup>4+</sup> ions based on structural data.

**prof. dr hab. Jacek Filipecki**  
**Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych,**  
**Instytut Fizyki**  
[j.filipecki@ujd.edu.pl](mailto:j.filipecki@ujd.edu.pl)

#### **1. Badania strukturalne biomateriałów polimerowych.**

Zakresem tematycznym będą badania wpływu modyfikacji składu i czynników fizyko-chemicznych na zdefektowania struktur w biomateriałach polimerowych. Materiały te są szeroko stosowane w medycynie. Biomateriały polimerowe stanowią specyficzną grupę materiałów o różnym składzie, budowie i własnościach, wyróżniających się tym, że są akceptowane przez organizm ludzki, a niektóre z nich łączą się na trwałe z żywą tkanką lub biorą udział w jej regeneracji. Stosowane są między innymi do produkcji polimerowych soczewek kontaktowych, soczewek wewnątrz gałkowych, polimerowych wypełniaczach dentystycznych oraz szerokiej gamy leków. Zbudowane zostaną modele podstawowych jednostek molekularnych tworzących strukturę nieuporządkowaną tych materiałów. Jako główne eksperymentalne narzędzie badawcze będzie wykorzystana spektroskopia czasów życia anihilujących pozytonów PALS.

#### **1. Structural studies of polymeric biomaterials.**

The thematic scope will be research on the influence of modification of the composition and physico-chemical factors on structure defects in polymer biomaterials. These materials are widely used in medicine. Polymer biomaterials are a specific group of materials with different composition, structure and properties, distinguished by the fact that they are accepted by the human body, and some of them are permanently attached to living tissue or participate in its regeneration. They are used inter alia to the manufacture of polymer contact lenses, intraocular lenses, dental polymer

fillers and a wide range of drug ingredients. Models of the basic molecular units that compose the disordered structure of these materials will be built. As the main experimental research tool will be used the positron annihilation lifetimes spectroscopy PALS.

**prof. dr hab. Małgorzata Makowska-Janusik**  
**Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych,**  
**Instytut Fizyki**  
[j.filipecki@ujd.edu.pl](mailto:j.filipecki@ujd.edu.pl)

**dr Anna Jezuita**  
**Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych,**  
**Instytut Fizyki**  
[a.jezuita@ujd.edu.pl](mailto:a.jezuita@ujd.edu.pl)

**1. Właściwości elektronowe struktur opartych na grafenie: badanie teoretyczne z wykorzystaniem metody DFT.**

Materiały 2D charakteryzują się cechami i zjawiskami nieobserwowanymi w materiałach objętościowych. Przedstawicielem takich struktur jest grafen - dwuwymiarowa monowarstwa węgla z hybrydyzacją  $sp^2$ . W ostatnich latach badania nad grafenem rozwijają się w niezwykle tempie ze względu na dużą różnorodność właściwości tego materiału sprawiając, że jest on niezwykle ekscytujący zarówno z punktu widzenia nauk podstawowych, jak i zastosowań technologicznych. Wiadomo, że grafen ma wyjątkowe właściwości elektronowe i mechaniczne, co czyni go przełomowym w projektowaniu elementów elektronicznych w tak zwanym przemyśle „post-krzemowym”.

Tlenek grafenu (GO) lub zredukowany tlenek grafenu (RGO) tworzą unikalne kompozyty z polimerami i półprzewodnikami, które mogą być wykorzystywane w celu uzdatniania wody, magazynowania energii oraz fotokatalizy. Posiadają różnorodne tlenowe grupy funkcyjne (karboksylowe, hydroksylowe, karbonylowe i epoksydowe), które mogą tworzyć wiązania chemiczne z półprzewodnikami, co skutkuje kompozytami o kompatybilnych interfejsach i właściwościach synergistycznych. Niemniej w celu rozszerzenia możliwości aplikacyjnych grafenu trzeba poszerzyć jego przerwę wzbronioną. Jest to możliwe dzięki zastosowaniu silnych pól elektrycznych, syntezy wielowarstw grafenowych oraz domieszkowaniu.

W związku z powyższym niniejszy projekt ma na celu zbadanie właściwości elektronowych materiałów na bazie grafenu zdefektowanych oraz domieszkowanych jonami metali przejściowych, umieszczonych na powierzchni wybranych półprzewodników do zastosowań katalitycznych. W celu wyjaśniania wpływu poszczególnych komponentów na właściwości elektronowe powstałych materiałów hybrydowych planowane jest wykonanie symulacji komputerowych. Dadzą one możliwość opisu mechanizmu zjawisk elektronowych odpowiedzialnych za powstawanie efektu fotokatalitycznego w badanych materiałach. Pozwolą zaprojektować nowe materiały funkcjonalne na bazie grafenu do zastosowań fotokatalitycznych. Obliczenia zostaną wykonane metodami

kwantowo-chemicznymi. Istnieje również możliwość odbycia stażu naukowego w celu wykonania badań eksperymentalnych dotyczących właściwości katalitycznych symulowanych materiałów.

## 1. **Electronic properties of graphene-based structures: A density functional theory study**

2D materials are characterized by features and phenomena not observed in bulk materials. A representative of such structures is graphene - a two-dimensional carbon monolayer with  $sp^2$  hybridization. In recent years, graphene research has been developing at an extraordinary pace due to the wide variety of properties of this material, making it extremely exciting from the point of view of both basic science and technological applications. Graphene is known to have unique electronic and mechanical properties, making it groundbreaking in the design of electronic components in the so-called "post-silicon" industry.

Graphene oxide (GO) or reduced graphene oxide (RGO) forms unique mixed composites with semiconductors that can be used for water treatment, energy storage, and photocatalysis. They have a variety of oxygen functional groups (carboxylic, hydroxyl, carbonyl, and epoxy) that can form chemical bonds with semiconductors, resulting in composites with compatible interfaces and synergistic properties. Nevertheless, to expand the application possibilities of graphene, it is necessary to extend its band gap. This is possible thanks to the use of strong electric fields, the synthesis of graphene multilayers, and doping.

Therefore, this project aims to study the electronic properties of materials based on defective graphene and doped with transition metal ions, placed on the surface of selected semiconductors for catalytic applications. To explain the influence of individual components on the electronic properties of the resulting hybrid materials, computer simulations are planned. They will make it possible to describe the mechanism of electronic phenomena responsible for the formation of the photocatalytic effect in the tested materials. They will allow the designing of new graphene-based functional materials for photocatalytic applications. The calculations will be made using quantum-chemical methods. There is also the possibility of a scientific internship to perform experimental research on the catalytic properties of simulated materials.

## 2. **Właściwości termoelektryczne wybranych materiałów półprzewodnikowych.**

Proponowana tematyka dotyczy aktualnego obszaru badań naukowych nad materiałami termoelektrycznymi, zdolnymi do wytwarzania „zielonej” energii elektrycznej z niskotemperaturowego ciepła odpadowego, co w przyszłości może znacznie zmniejszyć wykorzystanie paliw kopalnych. Bazuje na badaniu właściwości fizycznych nowych materiałów półprzewodnikowych do zastosowań termoelektrycznych metodami symulacji komputerowych.

Celem badań jest opracowanie teoretycznego modelu służącego przewidywaniu i wyjaśnieniu zmian właściwości termoelektrycznych wybranych kryształów półprzewodnikowych, zmieniając ich stechiometrię oraz grubość warstw przechodząc od struktur objętościowych do nanowarstw. W celu wyjaśnienia zjawisk fizycznych odpowiedzialnych za transfer ładunków oraz przewodność cieplną badanych materiałów będą wykonane symulacje komputerowe ich właściwości elektronowych i fononowych. Znajomość struktury pasmowej badanych materiałów pozwoli określić mechanizm transferu ładunków elektrycznych, charakter wakansów i domieszek oraz ich wpływ na przewodnictwo elektryczne, co da możliwość wytłumaczenia mechanizmu powstawania zjawiska

termoelektrycznego w badanych materiałach. Symulacje komputerowe będą dotyczyły również badań właściwości termodynamicznych drgań sieci krystalicznej z uwzględnieniem jej ograniczenia rozmiarowego. Uzyskane wyniki dadzą możliwość optymalizacji technologii wzrostu i domieszkowania krystalicznych struktur półprzewodnikowych odpowiednich do tworzenia termoelektrycznych przetworników energii.

Wyniki symulacji komputerowych będą testowane eksperymentalnie. Praca będzie wykonywana we współpracy międzynarodowej z możliwością wyjazdów stażowych.

## 2. **Thermoelectric properties of selected semiconductor materials.**

The proposed topic concerns the current area of research on thermoelectric materials capable of producing „green” energy from low-temperature waste heat, which in the future may significantly reduce the use of fossil fuels. It is based on the study of the physical properties of new semiconductor materials for thermoelectric applications using computer simulation methods.

The research aims to develop a theoretical model for predicting and explaining changes in the thermoelectric properties of selected semiconductor crystals, changing their stoichiometry and layer thickness, moving from bulk structures to nanolayers. To explain the physical phenomena responsible for charge transfer and thermal conductivity of the tested materials, computer simulations of their electronic and phonon properties will be performed. Knowledge of the band structure of the tested materials will allow us to determine the mechanism of electric charge transfer, the nature of vacancies and admixtures, and their impact on electrical conductivity, which will make it possible to explain the mechanism of the formation of the thermoelectric effect in the tested materials. Computer simulations will also concern the study of the thermodynamic properties of crystal lattice vibrations, taking into account its size limitation.

The obtained results will serve as the basis for optimizing the technology of growth and doping of crystalline semiconductor structures suitable for the creation of thermoelectric energy converters. The results of the computer simulations will be tested experimentally. The work will be carried out in international cooperation with the possibility of internship trips.

**prof. dr hab. Arkadiusz Mandowski**  
**Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych,**  
**Instytut Fizyki**  
[a.mandowski@ujd.edu.pl](mailto:a.mandowski@ujd.edu.pl)

## 1. **Kinetyka przejść częściowo-zlokalizowanych (SLT) w wybranych detektorach luminescencyjnych promieniowania jonizującego.**

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 TL i OSL. Bezpośrednie porównanie przewidywań modelu SLT z danymi eksperymentalnymi jest jednak niełatwym zadaniem. Do najważniejszych luminoforów 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.

#### 1. **Kinetics of semi-localized transitions (SLT) in selected luminescent detectors of ionizing radiation.**

Thermoluminescence (TL) and optically stimulated luminescence (OSL) are interesting optical phenomena that occur in various materials. By subjecting the material to thermal (TL) or optical (OSL) stimulation, we can observe the emission of light, i.e. luminescence. Interestingly, this emission only occurs when the material has previously been excited by ionizing radiation. As a result, TL and OSL phenomena are widely used in ionizing radiation dosimetry (dose determination) and in the dating of geological and archaeological materials.

TL and OSL phenomena are found only in solid state dielectric materials – in crystals or glasses. The mechanism of energy deposition and its subsequent release in the form of luminescence is quite complex. The explanation is based on the so-called charge carrier traps and recombination centers. One of the most general models describing TL and OSL phenomena is the semi-localized transitions model (SLT), formulated in 2005, in which the recombination processes responsible for luminescence can be both local (i.e. taking place in the vicinity of the trap) as well as delocalized, i.e. taking place through transport bands.

There are many indications that the SLT model correctly describes the kinetics of luminescence in many TL and OSL materials. However, direct comparison of the predictions of the SLT model with the experimental data is not an easy task. The most important phosphors include doped lithium fluoride crystals, which are commonly used in ionizing radiation dosimetry. The aim of the work is to build an SLT model for these materials. The work is theoretical and experimental.

#### 2. **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 zjawisk TL i OSL. Praca ma charakter teoretyczny. Obejmuje również symulacje numeryczne.

## 2. **Quasi-equilibrium approximations for the semi-localized transition model (SLT).**

Thermoluminescence (TL) and optically stimulated luminescence (OSL) are interesting optical phenomena that occur in various materials. By subjecting the material to thermal (TL) or optical (OSL) stimulation, we can observe the emission of light, i.e. luminescence. Interestingly, this emission only occurs when the material has previously been excited by ionizing radiation. As a result, TL and OSL phenomena are widely used in ionizing radiation dosimetry (dose determination) and in the dating of geological and archaeological materials.

TL and OSL phenomena are found only in solid state dielectric materials – in crystals or glasses. The mechanism of energy deposition and its subsequent release in the form of luminescence is quite complex. The explanation is based on the so-called charge carrier traps and recombination centers. One of the most general models describing TL and OSL phenomena is the semi-localized transitions model (SLT), formulated in 2005, in which the recombination processes responsible for luminescence can be both local (i.e. taking place in the vicinity of the trap) as well as delocalized, i.e. taking place through transport bands.

The SLT model is quite complex mathematically which makes it difficult to directly apply the model to the analysis of TL and OSL processes - in particular to the estimation of trap parameters. For this reason, it is reasonable to search for analytical approximations that will allow simplifying the mathematical form of this model. The aim of the study is to investigate the quasi-equilibrium approximations of the SLT model as applied to the TL and OSL phenomenon. The work is theoretical. It also includes numerical simulations.

**prof. dr hab. Oleh Shpotyuk**

**Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych,  
Instytut Fizyki**

[o.shpotyuk@ujd.edu.pl](mailto:o.shpotyuk@ujd.edu.pl)

1. **Nanostrukturyzacja wolnych objętości jako podstawa współczesnej inżynierii biomateriałowej: badania doświadczalne z wykorzystaniem spektroskopii anihilujących pozytonów.**

Na początku trzeciego tysiąclecia nowoczesna inżynieria materiałowa stanęła w obliczu nowych wyzwań wyznaczających stabilność ekonomiczną i jakość życia społeczeństwa w których kluczową rolę odgrywają sukcesy w wytwarzaniu nowych materiałów. Dlatego też materiały dla zastosowań medycznych (biomateriały) leżą obecnie w sferze zainteresowań olbrzymiej liczby naukowców od teoretyków aż do inżynierów, technologów i użytkowników. Biomateriały współczesne (biopolimery) to zwykle polimery ze względu na ich pochodzenie oraz implanty biologiczne jako substancje warunkujące prawidłowe działanie w organizmie żywym.

Przełomem w rozwiązaniu tego problemu wydaje się być całkowicie nowa metodologia oparta na możliwości diagnostyczno-pomiarowe Spektroskopii Czasów Życia Anihilujących Pozytonów (PALS). Jednakże w ostatnich latach ta metoda stosowana była głównie w półprzewodnikach krystalicznych takich jak Si, Ge, ich stałe roztwory. Liczne próby zastosowania tej metody do materiałów o strukturze nieuporządkowanej były niesystematyczne i niepełne z powodu istotnych trudności we właściwej interpretacji danych pomiarowych.

Ten temat ma na celu uzasadnienie podstaw PALS jako skutecznego narzędzia w modyfikacji struktury nanopustek materiałów polimerowych charakteryzujących się dużą niezawodnością i znajdujących zastosowanie w medycynie. Dla osiągnięcia powodzenia planowane systematyczne i kompleksowe badania z wykorzystaniem techniki PALS procesów modyfikacji w nowoczesnych biomateriałach których przykładem są polimery akrylowe. Te biopolimery są stosowane jako materiały dentystyczne i ortopedyczne, struktura sieci których powstaje w wyniku kontrolowanej polimeryzacji. W stanie polimeryzowanym taki materiał musi być biokompatybilny, nietoksyczny, oraz nierozpuszczalny. Właściwości te niekiedy są nie do pogodzenia ze względu na efekty poboczne fotopolimeryzacji. Ze względu na różne modyfikatory akrylany wykazują typowe nanoniejednorodności w postaci objętości swobodnej pomiędzy cząsteczkami polimeru.

Temat pracy przewiduje pięć pakiet zadaniowych:

- czynności techniczno-metodologiczne,
- propozycje chemiczno-technologiczne dla inżynierii biopolimerów,
- biopolimery opracowane pod względem starzenia fizycznego wywołanego ciepłem i wilgotnością,
- zewnątrznie inicjowana polimeryzacja jako sposób na otrzymanie funkcjonalnych biopolimerów,
- dobór zaleceń technicznych pod kątem otrzymania nanostrukturyzowanych biopolimerów.

Głównym efektem wykonania tych zadań będzie metodologia PALS rozwinięta dla biopolimerów o dużej niezawodności stosowanych we współczesnej medycynie. Pomyślnie przeprowadzone badania wpłyną na fizykę biomedyczną stosowaną. Poza tym spodziewany jest istotny wkład w nauki podstawowe dzięki nowemu zjawisku oddziaływania pozyton-elektron badanemu w biośrodku będącym w ścisłym kontakcie z żywą tkanką. Badania otworzą drzwi do nieznanego świata tajemnic odstawiających się na poziomie niezmiernie małych odległości – strukturze materii o rozmiarach nanometrycznych.

1. **Free-volume nanostructurization as principal motif in contemporary biomaterials engineering: experimental studies with PALS (Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy).**

This work concerns actual problems in contemporary biomaterials science and engineering.



In general, this work is to study peculiarities of atomic-deficient changes under light-curing polymerization in polymer-filler nanocomposites exemplified by commercially available dimethacrylate-based dental restoratives (the acrylates group) employing the method of positron annihilation lifetime (PAL) spectroscopy. The main process governing volumetric nano-structurization in these materials is known to be positron-to-Ps trapping conversion, initiated by fragmentation of Ps-decaying holes due to crosslinking of monomer chains. Meaningful description of these changes will be developed using the PALS method applied within a novel approach nominated as the x3-x2-CDA (coupling decomposition algorithm).

With this in mind, the following work-packages are planned to be performed within this work: (1) technical-methodological tasks in PALS methodology; (2) chemical-technological tasks in biopolymers synthesis; (3) effects of long-termed physical and chemical ageing; (4) externally-induced polymerization; (5) guided volumetric nanostructurization in nanocomposites and acrylic polymers engineering.

## 2. **Ewolucja wolnych objętości w mechanochemicznie-aktywowanych nanokompozytach na podstawie związków As-S/Se (arsenikałów) z kierowaną funkcjonalnością”.**

Od wielu lat dwuskładnikowe szkła typu As-S/Se, jedno z najpopularniejszych szkieł chalcogenidkowych odkrytych w połowie lat pięćdziesiątych zeszłego wieku, znane jako unikatowe materiały amorficzne dla zastosowań opto- telekomunikacyjnych z zakresu podczerwieni w dwu komercyjnych oknach atmosferycznych (3-5 m oraz 8-12 m). Są to także materiały dla nowoczesnych zastosowań w optoelektronice, fotonice, akustooptyce, kserografii, litografii. Wobec tego że włókna As-S/Se przepuszczają podczerwień, istnieją liczne potencjalne zastosowania tych materiałów, w tym i medyczne. Jednakże szkła As-S/Se będąc technologicznie w stanie niestabilnym wykazują niekontrolowane dążenie do stanu równowagi termodynamicznej. Ten efekt niestabilności obserwowany w dopiero co wytopionych szklach przez dość długi okres czasu (kilkadziesiąt lat) stanowi istotną przeszkodę w praktycznym zastosowaniu tych materiałów dla telekomunikacji opartej na wysoce niezawodnych i przewidywalnych materiałach funkcjonalnych.

Od strony teoretycznej praca dotyczy modelowania klastrów tworzących sieć szkieł As-S/Se, zgodnie z opracowanymi założeniami modelowymi CINCA (cation-interlinking network cluster approach) aby wyjaśnić topologiczne osobliwości w skłonności do tworzenia sieci szkła kowalencyjnego [Shpotyuk O., Boyko V. and Hyla M. Phys. Stat. Sol. 8 (2009) 1882]. Modelowanie klastrów wspomagane jest obliczeniami ab-initio przeprowadzonymi z wykorzystaniem programu HyperChem (metoda Hartree–Focka z bazą funkcyjną 6-311G\*, optymalizacja geometryczna metodą Fletcher-Reevesa).

Doświadczalna realizacja pracy – wykorzystanie spektroskopii czasów życia anihilujących pozytonów (PALS) w celu identyfikacji rzeczywistej struktury szkieł As-S/Se (w tym i aktywowanych mechanochemicznie) i wyboru tej najlepszej pod kątem zastosowań praktycznych. Oprócz tego, celem pracy jest:

- opracowanie teoretycznych podstaw metodologii celowego wyboru dwuskładnikowych szkieł As-S/Se które wykazują samoorganizację zoptymalizowanej struktury nie ulegającej starzeniu i najlepiej nadające się do praktycznych zastosowań;
- opracowanie teoretycznych metodologii systematycznej i kompleksowej charakteryzacji kompozycyjnych tendencji do lokalnego uporządkowania w nanostrukturze szkieł As-S/Se w oparciu o dane PALS,

- wykorzystanie powyższych opracowań dla szkielec As-S/Se w szerokim zakresie składów szkielec chalcogenidkowych celem wyselekcjonowania kompozycji najlepszych do stosowania w optotelekomunikacji.

2. **Free-volume evolution in mechanochemically activated nanocomposites based on As-S/Se compounds (arsenicals) with guided functionality.**

This work is devoted to materials engineering in the field of special glasses, concerning binary As-S/Se chalcogenide glasses for advanced opto-telecom applications in IR optics, optoelectronics, photonics and functional electronics.

Theoretical part of the work is

ab-initio quantum-chemical modeling of chalcogenide network-forming compounds with cation-interlinking network cluster approach, CINCA [Shpotyuk O., Boyko V., Hyla M. Phys. Stat. Sol. 8 (2009) 1882], using HyperChem package (the Hartree–Fock method, basis set 6-311G\*, the Fletcher-Reeves geometrical optimization).

Theoretical part of the work is

development of the PALS (Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy) method to identify free-volume void structure of chalcogenide glasses of As-S/Se cut-section (incl. mechanochemically-activated nanostructured substances).

Other work-packages include:

- theoretical background to select the best glass compositions for advanced applications;
- analysis of compositional trends in chalcogenide glass engineering based on the PALS results;
- proposition of the best nanostructured glasses from As-S/Se section for contemporary optoelectronics.

**dr hab. Oleg Khyzhun, prof. UJD**

**Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych,**

**Instytut Fizyki**

[o.khyzhun@ujd.edu.pl](mailto:o.khyzhun@ujd.edu.pl)

1. **Badania właściwości elektronowych domieszkowanych RE kryształów perowskitów Cs(Pb, Sn)(Cl,Br,I)3.**

Materiały perowskitowe na bazie Cs(Pb, Sn)(Cl,Br,I)3 mają obiecujące zastosowania w różnych urządzeniach optoelektronicznych ze względu na ich zalety jak możliwość tuningowania właściwości luminescencyjnych, regulowania przerwy energetycznej i wysokiej wydajności kwantowej fotoluminescencji. W szczególności stabilność fazowa, struktura elektronowa i właściwości optyczne CsPbBr3 domieszkowane pierwiastkami ziem rzadkich (RE) i ciśnieniem hydrostatycznym zostaną zbadane przy użyciu obliczeń w ramach teorii funkcjonału gęstości, pomiarów XPS, NEXAFS, XES oraz spektroskopii optycznej. Celem pracy będzie skupienie się na ustaleniu związku między składem chemicznym, temperaturą, ciśnieniem wyżej wymienionych perowskitów z różnym domieszkowaniem RE. Badana struktura elektronowa, przerwa energetyczna, właściwości luminescencyjne Cs(Pb, Sn)(Cl,Br,I)3:RE mogą pomóc w dostosowaniu pożądanych właściwości do różnych zastosowań.

1. **Studies on electronic properties of RE-doped Cs(Pb,Sn)(Cl,Br,I)3 perovskite crystals.**

The Cs(Pb,Sn)(Cl,Br,I)<sub>3</sub>-based perovskite materials have promising applications in various optoelectronic devices due to their advantages of high luminescence color purity, tunable band gap, and high photoluminescence quantum yields. Especially, the phase stability, electronic structure, and optical properties of CsPbBr<sub>3</sub> under rare-earth (RE) doping and hydrostatic pressure will be studied using density functional theory calculations, XPS, NEXAFS, X-ray emission spectroscopy and optical spectroscopy. The goal of thesis will be focused on finding relationships between chemical composition, temperature, and pressure of above mentioned perovskites with different RE doping. The knowledge on the studying electronic structure, band gap values, luminescence properties of Cs(Pb,Sn)(Cl,Br,I)<sub>3</sub>:RE will allow exploring how desired properties could be adjusted for various applications.

**dr hab. Ewa Mandowska, prof. UJD**  
**Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych,**  
**Instytut Fizyki**  
[e.mandowska@ujd.edu.pl](mailto:e.mandowska@ujd.edu.pl)

**1. Badania spektralnie rozdzielczej radioluminescencji wybranych luminoforów.**

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. Emisja ta zachodzi tylko wtedy, gdy materiał był uprzednio poddany ekscytacji 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 i TL wybranych luminoforów nieorganicznych stosowanych w dozymetrii promieniowania jonizującego. Pomiary będą dokonane przy użyciu unikalnej aparatury i nowych metod pomiarowych. Budowa nowego stanowiska pomiarowego będzie istotną częścią pracy. Zebrane dane doświadczalne posłużą do budowy modelu teoretycznego, który będzie opisywał kinetykę rekombinacji promienistej w badanych materiałach.

**1. Investigation of spectrally resolving radioluminescence of selected phosphors.**

Thermoluminescence (TL) and optically stimulated luminescence (OSL) are interesting optical phenomena that occur in various materials. By subjecting the material to thermal (TL) or optical (OSL) stimulation, we can observe the emission of light, i.e. luminescence. This emission occurs when the material has previously been excited by ionizing radiation. As a result, TL and OSL phenomena are widely used in ionizing radiation dosimetry (dose determination) and in the dating of geological and archaeological materials.

The aim of this work is to study the spectral characteristics of the long-lived OSL and TL radiation-induced luminescence of selected inorganic phosphors used in the dosimetry of ionizing radiation. The measurements will be made using unique apparatus and new

measurement methods. The construction of the new measurement setup will be an important part of the work. The collected experimental data will be used to build a theoretical model that will describe the kinetics of radiative recombination in the studied materials.

**dr hab. Zygmunt Bąk, prof. UJD**  
**Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych,**  
**Instytut Fizyki**  
[z.bak@ujd.edu.pl](mailto:z.bak@ujd.edu.pl)

**dr Dominik Szczęśniak, prof. UJD**  
**Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych,**  
**Instytut Fizyki**  
[d.szczesniak@ujd.edu.pl](mailto:d.szczesniak@ujd.edu.pl)

**1. Miary entropii i ich rola w procesach stochastycznych.**

Procesy stochastyczne są z natury procesami losowymi, których wynik jest trudny do przewidzenia. Jednakże ich szerokie spektrum zastosowań, od dyfuzji i transportu cząstek po analizę sygnałów, motywuje do podejmowania działań mających na celu lepsze zrozumienie i kontrolę tych procesów, zwłaszcza w kontekście modelowania powiązanych zjawisk. Niedawne badania wskazują na możliwość wykorzystania koncepcji entropii w szeroko pojętej optymalizacji procesów stochastycznych. Podejście to opiera się na obserwacji, że minimalizacja entropii rozwiązań w procesach stochastycznych może prowadzić do zwiększenia jakości ich przewidywań. Niemniej jednak jest to nowy kierunek badań, który wymaga dalszej analizy. W kontekście powyższego, celem pracy doktorskiej będzie szczegółowe omówienie znaczenia entropii w procesach stochastycznych, w tym analiza jej roli jako miary niepewności i złożoności systemów losowych. Rozpatrzone zostaną różne miary entropii, w tym entropia Shannona, Rényiego i Tsallisa oraz ich zastosowania w modelowaniu i analizie procesów stochastycznych. Działania te będą miały również na celu lepsze sformalizowanie dotychczasowych obserwacji. Przedstawione będą również praktyczne implikacje wykorzystania entropii w modelowaniu stochastycznym w ramach dziedzin, takich jak teoria informacji, fizyka statystyczna czy analiza sygnałów.

**1. Entropy Measures and their role in stochastic processes.**

Stochastic processes are inherently random and their outcomes are difficult to predict. However, their wide range of applications, from diffusion and particle transport to signal analysis, motivates efforts to better understand and control these processes, particularly in the context of modeling related phenomena.

Recent studies indicate the potential use of entropy concepts in the optimization of stochastic processes. This approach is based on the observation that minimizing the entropy of solutions in stochastic processes may lead to improved predictive accuracy. Nevertheless, this is a novel research direction that requires further analysis.

In light of the above, the aim of this doctoral dissertation is to provide a detailed discussion of the significance of entropy in stochastic processes, including an analysis of its role as a measure of uncertainty and complexity in random systems. Various entropy measures, such as Shannon entropy, Rényi entropy, and Tsallis entropy, will be examined, along with their applications in the

modeling and analysis of stochastic processes. These efforts will also seek to formalize previous observations more rigorously. Additionally, the dissertation will present practical implications of entropy utilization in stochastic modeling across various fields, including information theory, statistical physics, and signal analysis.