



UNIwersytet
Warszawski

Wydział Chemii



Warszawa, dnia 9.10.2019 r.

WCH.1210-19/2019

Ogłoszenie o konkursie

na stanowisko **adiunkta (grupa pracowników badawczych)** w ramach projektu OPUS z NCN pod tytułem „**Modelowanie lokalnej struktury krystalicznej i magnetycznej w potencjalnym QSL (quantum spin liquid) α -RuCl₃**”

Kierownik projektu: **dr Wojciech Sławiński**

Osoby zatrudniona w ramach niniejszego konkursu będzie odpowiedzialna za realizację zadań w ramach w/w grantu naukowego przyznanego przez NCN decyzją: **NR DEC-2018/31/B/ST4/00943.**

Liczba dostępnych etatów: **1.**

Kwalifikacje kandydata/teki:

- stopień doktora nauk w zakresie chemii, fizyki lub dziedzin pokrewnych (uzyskany nie wcześniej niż 1/10/2012 zgodnie z wymaganiami NCN (www.ncn.gov.pl))
- praktyczna umiejętność programowania (preferowane języki: Fortran, C++ i/lub Python)
- gotowości do analizowania/stosowania kodu tworzonych przez innych
- znajomość krystalografii, fizyki ciała stałego
- doświadczenie w analizie eksperymentalnych danych dyfrakcyjnych (mono oraz polikrystalicznych) przy użyciu standardowych metod
- doświadczenie w analizie eksperymentalnych danych dyfrakcyjnych przy użyciu metody Pair Distribution Function
- bardzo dobra znajomość języka angielskiego w mowie i piśmie, potwierdzone umiejętności pisania tekstów naukowych
- doświadczenie w prowadzeniu pomiarów dyfrakcyjnych
- zdolność do pracy zarówno zespołowej jak i samodzielnej
- doskonale zdolności analityczne oraz umiejętność rozwiązywania problemów
- umiejętność debugowania i krytycznego myślenia

Mile widziane:

- znajomość systemu operacyjnego Linux/Unix
- doświadczenie w optymalizacji kodu programów
- doświadczenie w krystalizacji

Kandydat/ka musi spełniać wymagania zawarte w art. 113 ustawy - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dn. 20.07.2018 (Dz. U. z 2018 r., poz. 1668 z późn. zm.).

Zgłoszenie powinno zawierać:

- list motywacyjny
- życiorys (CV),
- informacja o przetwarzaniu danych osobowych (do pobrania na stronie: <http://www.chem.uw.edu.pl/oferty-pracy/>),

- spis publikacji (i/lub wykonanych programów) z podkreśleniem 3 najważniejszych prac
- krótki opis 3 najważniejszych osiągnięć
- 1 opinia konfidencyjna opinia promotora (lub szefa), pod którego kierunkiem wykonywało się pracę naukową wysłana, wysłana bezpośrednio na adres e-mailowy: wslawinski@chem.uw.edu.pl

Warunki zatrudnienia:

Zatrudnienie na pełnym etacie. Praca od 1/01/2020 do 31/12/2021 z możliwością przedłużenia, na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego.

Termin składania dokumentów upływa z dniem: 10.11.2019.

Zgłoszenia należy przysyłać na adres: wslawinski@chem.uw.edu.pl, z dopiskiem: „RuCl3 PostDoc”

Całkowite wynagrodzenie przed opodatkowaniem (brutto/brutto) 10 000 PLN / miesiąc.

Dokumentacja złożona przez kandydatów zostanie oceniona przez komisję, której przewodniczy kierownik projektu dr Wojciech Sławiński. Wybrani kandydaci zostaną zaproszeni na rozmowę kwalifikacyjną do 20/11/2019. Decyzja końcowa komisji będzie przedstawiona kandydatom za pomocą poczty elektronicznej/telefonicznie do 12/12/2019.

Procedura rekrutacji jest 2-stopniowa. W pierwszym etapie oceniane są przez Komisję Rekrutacyjną dokumenty złożone przez aplikantów i na ich podstawie wybranych będzie do 6 osób, które zaproszone będą na rozmowę kwalifikacyjną. W uzasadnionych przypadkach rozmowa ta może także odbyć się drogą internetową. Tylko osoby, które złożą kompletną dokumentację będą rozważane w procedurze rekrutacyjnej.

Konkurs jest pierwszym etapem procedury zatrudnienia na stanowisku nauczyciela akademickiego, a jego pozytywne rozstrzygnięcie stanowi podstawę do dalszego postępowania.

Abstrakt projektu: „Modelowanie lokalnej struktury krystalicznej i magnetycznej w potencjalnym QSL (quantum spin liquid) α - RuCl_3 ”.

Sprzężenie właściwości materiałów z ich strukturą krystaliczną, jest głównym zagadnieniem współczesnej krystalografii fizycznej. Powiązanie średniej struktury materiału, a także lokalnego uporządkowania oraz lokalnego odkształcenia od średniej struktury z chemicznymi i fizycznymi właściwościami materiałów stanowi tematykę badawczą wielu grup naukowych na całym świecie. Jednym ze szczególnie intensywnie badanych obszarów z zakresu badań własności magnetycznych materiałów, jest poszukiwanie kandydatów na kwantowe cieczy spinowe (ang. : Quantum Spin Liquid - QSL).

QSL jest to egzotyczny stan materii, w którym w stanie podstawowym silnie oddziałujące momenty magnetyczne nie podlegają daleko-zasięgowemu uporządkowaniu nawet w temperaturze 0 K. Stan podstawowy jest natomiast superpozycją wielu, fluktuujących stanów, różnych wzajemnych orientacji momentów magnetycznych [1]. Konsekwencją istnienia SQL jest możliwość występowania kwazicząstek - fermionów Majorany, jako stanów wzbudzonych [2]. Jedną z grup związków, potencjalnych kandydatów na SQL są materiały, których struktura krystaliczna określana jest jako płaska struktura heksagonalna (ang.: honeycomb like lattice). W związkach o takiej strukturze możliwe jest zrealizowanie stanu SQL przez atomy o spinie $\frac{1}{2}$. Sytuacja taka opisywana jest za pomocą teoretycznego modelu Kitaev' a [3]. Rzeczywista realizacja powyższego modelu nie została jeszcze jednoznacznie eksperymentalnie potwierdzona. Obecnie trwają intensywne poszukiwania takich materiałów. Jednym z niewielu przykładów SQL jest kryształ molekularny κ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu $_2$ (CN) $_3$, w przypadku, którego nie zaobserwowano dalekozasięgowego uporządkowania momentów magnetycznych aż do 20 mK [4].

Jedną z grup materiałów, które są potencjalnymi kandydatami na materiały SQL, są warstwowe struktury, w których atomy posiadające moment magnetyczny (spin = $\frac{1}{2}$.) znajdują się w dwuwymiarowych warstwach. Warstwy te są następnie ułożone jedne na drugich, tworząc trójwymiarową strukturę krystaliczną. Przykładem takiego związku jest α - RuCl_3 , gdzie 2D warstwy tworzą 3D strukturę oddziałując między sobą poprzez słabe wiązania Van der Waalsa. Z tego powodu wysoce prawdopodobne jest występowaniu błędów w ułożeniu dwuwymiarowych warstw w trójwymiarowych kryształach, czyli występowanie odstępstw od periodycznych struktur typu najgęstszego upakowania. Odstępstwa te nazywane są defektami w ułożeniu dwuwymiarowych warstw w tym materiale (ang. stacking faults). W przypadku struktury typu „stacking faults” nie jest zachowana symetria translacyjna w kierunku osi prostopadłej do płaszczyzny dwuwymiarowych warstw.

Proponowanych jest wiele modeli struktury typu QSL, a głównym powodem tych rozbieżności jest fakt, iż struktura tego związku jest typu ” stacking faults” . W pierwszej fazie projektu planuję zbadanie zmian modelowej struktury krystalicznej α - RuCl_3 , w funkcji temperatury, tak aby opracowany model mógł być wykorzystywany do późniejszych badań oraz obliczeń magnetycznych. Z racji na warstwowy charakter powyższej grupy związków, niezbędne będzie szczegółowe zbadanie ich struktury z uwzględnieniem możliwych „stacking faults” .

Drugim kierunkiem badań będzie analiza lokalnego nieuporządkowania w badanych związkach. Dyfrakcja Bragga dostarcza, bowiem informacji o średniej strukturze materiału. W przypadku materiałów częściowo nieuporządkowanych możliwe są lokalne odkształcenia otoczenia poszczególnych atomów, co może wpływać szczególnie na własności magnetyczne materiałów. Lokalny nieporządek lub lokalne uporządkowanie krótkozasięgowe można badać przy pomocy jednej z metod dyfrakcyjnych zwanej Pair Distribution Function (PDF). Również krótkozasięgowe uporządkowanie momentów magnetycznych może być badane przy użyciu dyfrakcji neutronów. Aby było to możliwe konieczne będzie dalsze rozwinięcie programu RMCPProfile [5]. Pomiary oraz analiza danych typu PDF pozwoli na dokładne określenie lokalnej struktury krystalicznej materiałów, która bezpośrednio wpływa na oddziaływania magnetyczne spinowe.

[1] L. Balents, Nature 464, 2010, 199

[2] Kitaev, A. Ann. Phys. 321, 2016, 2

[3] R. D. Johnson, S. C. Williams, A.A. Haghighirad, J. Singleton, V. Zapf, P. Manuel, I. I. Mazin, Y. Li, H. O. Jeschke,

R. Valenti, and R. Coldea, Phys Rev. B 92, 235119 (2015)

[4] P. Lampen-Kelley, A. Banerjee, A.A. Aczel, H.B. Cao, M.B. Stone, C.A. Bridges, J.-Q. Yan, S.E. Nagler, and D.

Mandrus, Phys. Rev. Lett. 119, 2017, 237203

[5] M. G. Tucker, D. A. Keen, M. T. Dove, A. L. Goodwin and Q. Hui, J. of Phys. Cond. Mat. 19, 2007, 335218