

Warszawa, dnia 12/10/ 2022 r.

Ogłoszenie o konkursie

na stanowisko **doktoranta** w ramach projektu OPUS z NCN pod tytułem: „**Kwantowo-krytalograficzne poszukiwania nowych odmian polimorficznych lodu i hydratów**”.

Kierownik projektu: **Prof. dr hab. Krzysztof Woźniak**

Osoba zatrudniona w ramach niniejszego konkursu będzie odpowiedzialna za realizację zadań w ramach w/w grantu naukowego przyznanego przez NCN decyzją: **NR DEC-2021/41/B/ST4/03010**. Będzie prowadził działalność w obszarze nauk ścisłych i przyrodniczych.

Liczba dostępnych stypendiów: **2**

Zakres obowiązków:

doktorant 1 - osoba ta będzie odpowiedzialna za zbieranie wysokorozdzielczych rentgenowskich danych dyfrakcyjnych dla polimorfów lodu i hydratów minerałów w warunkach atmosferycznych oraz pod ciśnieniem, procesowanie danych, udokładnienie struktur, udokładnienie eksperymentalnych gęstości elektronowych, analizę uzyskiwanych gęstości elektronowych minerałów i lodów.

Doktorant 2 – będzie odpowiedzialny za rejestrację danych dyfrakcyjnych (dyfrakcja promieni rentgenowskich i elektronów), udokładnienie struktur i gęstości elektronowych przy pomocy HARu, obliczenia kwantowe dla układów periodycznych, programowanie drobnych fragmentów programów

Kwalifikacje kandydata/teki:

- tytuł magistra w zakresie krytalografii, mineralogii, geologii, chemii, fizyki, informatyki, matematyki lub dziedzin pokrewnych, uzyskany w ciągu ostatnich 5 lat,
- praktyczna znajomość krytalografii
- doświadczenie w obliczeniach kwantowych
- znajomość mineralogii, fizyki ciała stałego, struktur nieorganicznych, badań ciśnieniowych kryształów,
- umiejętność przeprowadzania i raportowaniu wyników badań interdyscyplinarnych
- bardzo dobra znajomość języka angielskiego w mowie i piśmie
- zdolność do pracy zarówno zespołowej jak i samodzielnej

Mile widziane:

- doświadczenie w krytalografii kwantowej
- umiejętność udokładnienia eksperymentalnych gęstości elektronowych oraz/i w badaniach kryształów pod wysokim ciśnieniem,

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 oraz oświadczenie o zapoznaniu się z procedurą konkursową (wzory do pobrania ze strony: <http://www.chem.uw.edu.pl/oferty-pracy/>),**
- **krótki opis najważniejszego osiągnięcia naukowego uzyskanego w dotychczasowej karierze**

- 1 konfidencaonalna opinia promotora (lub szefa), pod którego kierunkiem wykonywało się pracę naukową wysłana, wysłana bezpośrednio na adres e-mailowy: mincryst@chem.uw.edu.pl

Warunki zatrudnienia:

Stypendium od **15.11.2022r.** do **14.10.2026r.**, na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego.

Termin składania dokumentów upływa z dniem: **31.10.2022r.**

Zgłoszenia należy przesyłać na adres: mincryst@chem.uw.edu.pl z dopiskiem: „Mincryst PhD studenci 1 or 2”

Całkowite stypendium doktoranckie przed opodatkowaniem (brutto/brutto) 5000 PLN/miesiąc

Dokumentacja złożona przez kandydatów zostanie oceniona przez komisję, której przewodniczy kierownik projektu **prof. Krzysztof Woźniak**. **Wybrani kandydaci zostaną zaproszeni na spotkanie do 5/11/2022r.** Końcowa decyzja komisji będzie przedstawiona kandydatom za pomocą poczty elektronicznej/telefonicznie do **10.11.2020r.**

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.

Abstract: " Kwantowo-krytalograficzne poszukiwania nowych odmian polimorficznych lodu i hydratów"

Woda jest głównym składnikiem hydrosfery Ziemi i płynów większości organizmów żywych. Ma kluczowe znaczenie dla wszystkich znanych form życia. Tworzy 18 stałych, krystalicznych form lodu o fantastycznych strukturach i dwie formy bezpostaciowe. Zajmuje większość powierzchni Ziemi. Cząsteczki wody oddziałują z najważniejszymi substancjami biologicznymi: białkami, DNA i polisacharydami wpływającymi na fałdowanie białek, parowanie zasad DNA i inne kluczowe dla życia zjawiska. Cząsteczki wody tworzą wiązania wodorowe - jedno z najważniejszych oddziaływań we współczesnej biologii, medycynie i farmakologii. Woda tworzy różne hydraty i odgrywa kluczową rolę w procesach geologicznych i mineralogicznych zachodzących w płaszczu Ziemi (hydrografia, hydrologia, hydrogeologia, glaciologia, oceanografia itp). Woda/lód są również obecne w przestrzeni kosmicznej. Woda wytwarzana jako produkt uboczny gwiazdnej fuzji jądrowej, został wykryty w obłokach międzygwiazdowych w Drodze Mlecznej i występuje w dużych ilościach w innych galaktykach. Główne cele tego projektu to: (1) poszukiwanie nowych form lodu, lodu deuterowanego i hydratów zawierających małe cząsteczki organiczne, (2) dla znanych form lodu, uzyskanie lepszych (bardziej precyzyjnych i dokładnych) uśrednieniach i lokalnych struktur znanych lodów.

Planujemy osiągnąć cele projektu stosując nowe podejścia krytalografii kwantowej (QC) połączone z monokrytalicznymi badaniami wysokociśnieniowymi przy użyciu gazowych celek diamentowych o szerokim kącie otwarcia (DAC) z kontrolowanym ciśnieniem i temperaturą oraz krótkofalowe promieniowanie synchrotronowe (ca. 0.2-0.4Å). Metody QC są bardziej rygorystyczne niż dotychczas stosowane rutynowe metody krytalografii. Będą one obejmować: eksperymentalne badania gęstości elektronowej, udokładnienia atomów metodą Hirshfelda (HAR), udoskonaloną przez nas nową wersję HARu (z możliwością użycia różnych partycji atomowej gęstości elektronowej) oraz udokładnienie eksperymentalnej funkcji falowej na podstawie eksperymentów rentgenowskich (XWR). Udokładniliśmy już

anizotropowe atomy wodoru w lodzie VI, lodzie D2O VI i mieszanym lodzie H2O /D2O VI, korzystając z danych uzyskanych z naszego laboratoryjnego dyfraktometru rentgenowskiego o anodzie srebrnej. To niebywałe, że można udokładować anizotropowe ruchy termiczne nieuporządkowanych atomów wodoru w lodzie VI nawet na podstawie jedynie danych rentgenowskich z laboratoryjnego dyfraktometru. Promieniowanie synchrotronowe jest ponad 10mln razy silniejsze, dlatego powinniśmy zobaczyć znacznie więcej szczegółów, w tym zobaczyć nowe formy lodu. Będziemy generować różne formy lodu in situ wewnątrz DAC i wytwarzać nowe formy lodu poprzez kontrolowane zmiany temperatury i ciśnienia. Spadek temperatury i wzrost ciśnienia spowodują zmniejszenie ruchu termicznego cząsteczek wody, podczas gdy wzrost temperatury i spadek ciśnienia zwiększy dynamiczny nieporządek cząsteczek wody. Nasze badania pozwolą symulować struktury lodu i hydratów oraz procesy na powierzchni Ziemi, wewnątrz Ziemi i innych planet oraz scharakteryzować i badać je na poziomie ilościowych zmian gęstości elektronów. To otwiera nowe możliwości w mineralogii daleko wykraczającą poza obecny stan wiedzy, powiedziałbym nawet nową mineralogię.

Nasz projekt jest wysoce interdyscyplinarny i łączy w sobie najnowocześniejsze metody krystalografii kwantowej, wykorzystujące ściśle idee chemii kwantowej dla ciała stałego oraz badania mineralogiczne wysokiej rozdzielczości, wysokociśnieniowe i w zmiennej temperaturze. Jesteśmy przekonani, że znajdziemy nowe polimorficzne formy lodów i hydratów, szczególnie te, które w swoich strukturach mają ważne biologiczne cząsteczki, takie jak: NaCl, MgSO₄, Na₂SO₄, MgCl₂, proste gazy: H₂, N₂, O₂, NH₃, CH₄, CO₂, gazy szlachetne, aminokwasy, zasady purynowe i pirymidynowe itp.

Badania wody stały się ostatnio niezwykle gorącym tematem. Są steki tysięcy prac. Doskonałym przykładem wagi tego tematu jest cykl konferencji w DESY (Niemcy) skupionych na utworzeniu Centrum Molekularnej Nauki o Wodach (CMWS) wspólnym wysiłkiem ok. 85 grup badawczych z całego świata. Jestem jednym ze współtwórców drugiego filaru tej aplikacji. Już wkrótce (koniec września) będziemy mieć pierwsze zbiory danych z synchrotronu dla lodu VI w APS w Chicago i DESY w Niemczech. Złożyłem również wniosek o projekt długoterminowy w DESY, który po zaakceptowaniu da nam prawie miesiąc pomiarów na synchrotronie Petra III w DESY w ciągu najbliższych 2 lat. Będziemy również nadal stosować do innych synchrotronów czas wiązki potrzebny do realizacji tego projektu.

Nasze badania pozwolą studiowanie odkształceń plastycznych, również dla ekstremalnie głębokich ciśnień wewnętrznych Ziemi, określenia anizotropii plastycznej, ścieżek transportowych jonów/dziur - ścieżek dyfuzji i dyslokacji, weryfikacji mechanizmu Peierlsa, etc. Zrozumienie właściwości reologicznych całego płaszcza planety jest ważnym krokiem w kierunku lepszego zrozumienia dynamiki i ewolucji Ziemi i innych planet pozaziemskich.



UNIWERSYTET
WARSZAWSKI

Wydział Chemii



...12/10/2022, Warsaw (Poland)

An announcement for PhD student positions

Position of **PhD student** in the project entitled "**Quantum Crystallographic Quest for New Polymorphic Forms of Ice and Hydrates**" financed by **National Science Centre (NCN)** is open for application.

Project leader: **Prof. dr hab. Krzysztof Woźniak**

Grant Decision: **DEC-2021/41/B/ST4/03010**

Available positions: 2 PhD student positions

Duties: We are looking for a highly motivated candidate:

PhD student 1: who will be collecting X-ray diffraction data (also high resolution data), solving and refining crystal structures, refining experimental electron densities, at ambient pressure and room temperature as well as under pressure and analyzing the final results.

PhD student 2: will be responsible for X-ray and electron data collection, refinement of structures and experimental electron densities also by applying HAR and quantum chemistry approaches. We also expect that such a person will be able to write simple pieces of software.

We expect a person:

- with MSc degree (or equivalent degree) in crystallography, mineralogy, geology chemistry or physics, informatics, or related fields obtained within last up to 5 years,
- practical knowledge of crystallography
- certain experience in quantum chemistry calculations,
- with knowledge of: mineralogy, solid state physics, inorganic crystal structures, studies of crystal under high pressure,
- with practical skills of initiating, conducting, evaluating and reporting of research results
- with excellent knowledge of written and spoken English, written and spoken presentation skills
- with ability to work independently and within a team

Additional skills and abilities expected :

- Practical knowledge of Quantum Crystallography
- practical experience in high pressure studies of crystals at synchrotron beam lines,

We offer:

a stipend 5000PLN/month before taxation and contract from **15.11.2022 to 14.11.2026**

Required documents:

- Motivation letter
- Curriculum Vitae (CV),
- Information on the processing of personal data and declaration of the acceptance of the competition rules at the University of Warsaw (the templates available at: <http://www.chem.uw.edu.pl/oferty-pracy/>),
- short description of the most important achievement so far
- 1 confidential opinion of the promoter (or a researcher) who supervised your research work sent directly to the e-mail address: **mincryst@chem.uw.edu.pl**

Please submit the documents **no later than 31/Oct/2022** to: **mincryst@chem.uw.edu.pl** (PDF is the preferred format). E-mail entitled: **“MinCryst PhD students 1 and 2”**

Selected candidates will be informed about the date of the interview by e-mail until the **5th / 11 / 2022**. The results of the competition will be given by e-mail till **10th/ 11 / 2022**.

The interview will take place face to face or *via* internet. Only those who submit complete documentation will be considered in the recruitment procedure. Up to the best 6 candidates will be invited for interviews.

Abstract of the project:

" Quantum Crystallographic Quest for New Polymorphic Forms of Ice and Hydrates ".

Water is the main constituent of Earth's hydrosphere and the fluids of most living organisms. It is crucial for all known forms of life. It forms 18 solid crystalline ices and two amorphous solid forms. It covers the most of the Earth's surface. Water molecules interact with the most important biological substances: proteins, DNA and polysaccharides influencing protein folding, DNA base pairing, and other phenomena crucial to life. Water molecules form hydrogen bonds - one of the most important interactions in modern biology, medicine and pharmacology. Water forms different hydrates and plays a key role in Earth's mantle processes (hydrography, hydrology, hydrogeology, glaciology, oceanography, etc). Water is also present in outer space. It is produced as a by-product of stellar nuclear fusion, was detected in interstellar clouds within the Milky Way, and exists in abundance in other galaxies. The main goals of this project are: (1) to discover new forms of ice, deuterated ice and hydrates hosting small organic molecules, (2) to improve the known forms of ice by establishing better averaged and local structures and to elucidate the hydrogen atom thermal motion.

We will accomplish our aims by combining the new approaches of quantum crystallography (QC) with single crystal high pressure studies using wide opening angle diamond anvil cells (DACs) with controlled pressure and temperature and short wavelength synchrotron radiation. QC approaches will include: experimental charge density studies, Hirshfeld atom (HAR) and proposed by us Hirshfeld atom-like refinements (including its periodic version), and X-ray wavefunction refinement (XWR). QC methods are more rigorous (and also more precise and accurate) than routine methods of crystallography. Using HAR we have already refined anisotropic H-atoms in hydrates of very heavy metal derivatives and relativistic and electron correlation effects in a gold complex. Sometimes, we were observing some new structures of ice but they were of very poor quality and we could not have refined them. However, synchrotron X-ray radiation is ca. 10mln times stronger than laboratory X-ray sources and thus we hope to get reliable new ice structures from synchrotron data collections. This is incredible that using our HAR, we have already managed to refine anisotropic hydrogen atoms in ice VI, D2O ice VI and mixed H2O/D2O ice VI for data obtained on our home

X-ray silver source. We will generate different forms of ice in situ inside the DACs, and produce new forms of ice through changes in temperature and pressure. Decreases in temperature and increases in pressure will reduce the thermal motion of water molecules while increasing temperature and decreasing pressure will increase the dynamic disorder of water molecules. Using wide angle DACs, QC and synchrotron X-rays, we will simulate ice and hydrate structures and processes inside Earth and other planetary bodies, and characterise and study them at the level of quantitative electron density changes. This is opening new mineralogy far beyond the present state of the art.

Our project is highly interdisciplinary and combines state-of-the-art methods of quantum crystallography utilising strict ideas of quantum chemistry for the solid state, and high resolution, high pressure and variable temperature mineralogical studies. Additionally, a significant part of our project is focused on development of new software which would allow us to improve quality of results. This includes correction of high resolution single crystal X-ray data to account for absorption of the diamond anvil cell and for diffuse scattering.

We are convinced that with proper DACs allowing for controlling both temperature and pressure we will find some new polymorphic forms of ices and hydrates particularly those carrying important biological molecules in their structures. Water studies have become a hot topic recently. An excellent example of importance of this topic is a series of conferences at DESY(Germany) focused on forming a Centre for Molecular Water Science (CMWS) a joint effort of ca. 85 research groups from all over the world. I am a contributor to Pillar 2 of that application.

Our research has a fundamental nature and it should allow to get break through in studies of ice (really millions publications in literature) . It will allow for better understanding the role of water/ice in the mantles of planets, the experimental determination of plastic anisotropy and deformation, ion/holes transition pathways and the better understanding of the dynamics and evolution of Earth and other extraterrestrial planets.