

***„Implantacja jonów azotu, a następnie szybka obróbka termiczna jako metoda wytwarzania warstwy azotków o wysokiej entropii na powierzchni stopów o wysokiej entropii.”***

**BSP/DSP/110-8/2023**

|                                |                                                                        |
|--------------------------------|------------------------------------------------------------------------|
| <b>INSTYTUCJA:</b>             | <b>Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN</b>                    |
| <b>MIASTO:</b>                 | <b>Warszawa</b>                                                        |
| <b>STANOWISKO:</b>             | <b>adiunkt/postdoc</b>                                                 |
| <b>DYSCYPLINA NAUKOWA:</b>     | <b>Inżynieria Materiałowa</b>                                          |
| <b>DATA OGŁOSZENIA:</b>        | <b>24.03.2023</b>                                                      |
| <b>TERMIN SKŁADANIA OFERT:</b> | <b>21.04.2023</b>                                                      |
| <b>SŁOWA KLUCZOWE:</b>         | <b>density functional theory, ion implantation, high entropy alloy</b> |

**Opis projektu**

Głównym celem projektu jest wytworzenie ceramiki o wysokiej entropii (HEC) na wierzchniej warstwie stopu o wysokiej entropii. HEC reprezentują całkowicie nowy typ materiałów o wysokiej entropii, które mogą mieć unikalne składy i struktury wyraźnie różniące się od innych istniejących materiałów, a także ogromne możliwości dostosowania ich właściwości za pomocą niezwykle dużej przestrzeni modyfikacji ich składu. Materiały te zwykle charakteryzują się dużą wytrzymałością mechaniczną i odpornością na zużycie. Aby osiągnąć główny cel projektu zbadamy możliwość zastosowania wieloenergetycznej implantacji jonów o dużej fluencji, a następnie szybkiej obróbki termicznej. Założenie, że uda nam się wytworzyć azotki o wysokiej entropii tą metodą jest najbardziej ryzykowną częścią projektu, jednak może też przynieść niezwykle ciekawe rezultaty.

Aby osiągnąć główny cel projektu, zastosowane zostaną dwa podejścia. Na początkowym etapie użyjemy metody „prób i błędów”. Przeprowadzimy implantację niedawno zsyntetyzowanego stopu FeCrAlW0.7Ta0.7. Zmieniać będziemy zarówno właściwości wiązki jonowej, parametry obróbki termicznej, jak i skład i mikrostrukturę podłoża. Ponadto w projekcie połączymy metodę prób i błędów z wysoce zaawansowanymi symulacjami komputerowymi opartymi na Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (CALPHAD) oraz Density Functional Theory (DFT) w celu stworzenia narzędzia do przewidywania teoretycznych kompozycji ceramiki HEC. Wreszcie, z uwagi na fakt, że liczba lub możliwe składy HEC przekraczają nasze możliwości zrozumienia i zbadania przy użyciu obecnych metod, proponujemy metody eksperymentalne oparte na pomiarach w nanoskali, co może znacznie przyspieszyć charakterystykę porównawczą pojedynczego HEC. Zastosujemy testy nanoindentacji, kompresji mikrokolumn i test zarysowania.

**Do obowiązków pracownika będzie należało:**

- opracowanie numerycznych modeli struktury krystalograficznej stopów o wysokiej entropii i ceramiki za pomocą obliczeń teorii funkcjonału gęstości
- modelowanie numeryczne implantacji jonów z wykorzystaniem dynamiki molekularnej
- pisanie artykułów naukowych, streszczeń konferencyjnych i propozycji badawczych
- udział w pracach eksperymentalnych związanych z projektem (implantacja jonów, SEM-FIB, AFM itp.)

**WYMAGANIA:**

- wysoka motywacja do pracy naukowej na pograniczu mechaniki i materiałoznawstwa
- Stopień doktora inżynierii mechanicznej, materiałoznawstwa, fizyki, chemii lub dziedzin pokrewnych
- Umiejętność przeprowadzania obliczeń numerycznych bazujących na teorii funkcjonału gęstości (DFT) i krystalografii

- Mile widziana znajomość CALPHAD i/lub dynamiki molekularnej
- umiejętności programowania (Matlab, Python i/lub C++)
- Płynny angielski
- umiejętność pracy w zespole

#### **PRZYSTĘPUJĄC DO KONKURSU NALEŻY DOSTARCZYĆ:**

- 1) podanie skierowane do Dyrektora,
- 2) życiorys naukowy i zawodowy z wykazem publikacji, liczbą cytowań i indeksem H,
- 3) kwestionariusz osobowy,
- 4) odpis dyplomu ukończenia studiów wyższych i dyplomu doktorskiego
- 5) potwierdzenie umiejętności przeprowadzania obliczeń numerycznych bazujących na teorii funkcjonału gęstości (DFT) np. przykładowe obliczenia przeprowadzone przez kandydata
- 6) Do dokumentów należy dołączyć oświadczenie:

“Wyrażam zgodę na przetwarzanie danych osobowych zawartych w mojej ofercie pracy na potrzeby niezbędne do przeprowadzenia procesu rekrutacji prowadzonego przez IPPT PAN z siedzibą w Warszawie, ul. A. Pawińskiego 5B, zgodnie z art. 13 ust. 1 i 2 rozporządzenia (UE) 2016/679 Parlamentu i Rady z dnia 27 kwietnia 2016 r. w sprawie ochrony osób fizycznych w zakresie przetwarzania danych osobowych i swobodnego przepływu tych danych oraz uchylenia dyrektywy 95/46 / WE (RODO)”

#### **OKRES ZATRUDNIENIA:**

Umowa o pracę na 2 lata w wymiarze pełnego etatu.

#### **ZGŁOSZENIA PROSIMY KIEROWAĆ:**

Biuro Spraw Pracowniczych IPPT PAN: konkursy@ippt.pan.pl

Dodatkowych informacji udzielają:

dr hab. inż. Dariusz Jarząbek (djarz@ippt.pan.pl)

#### **Post-doc/assistant professor offer within the NCN OPUS-23 scientific project**

**“Nitrogen ion implantation followed by rapid thermal treatment as a method for production of a layer of high-entropy nitrides on the surface of high-entropy alloys”**

**INSTITUTION:** Institute of Fundamental Technological Research, Polish Academy of Sciences

**Position in the project:** postdoc/assistant professor

**Scientific discipline:** Materials Science

**Announcement date:** 23.03.2023

**Deadline:** 21.04.2023

**Keywords:** density functional theory, ion implantation, high entropy alloy

#### **Project Description**

The main objective of this project is to produce high entropy ceramics (HECs) on the top layer of a high entropy alloy. HECs represent a totally new type of high-entropy materials that can have unique compositions and structures that differ distinctly from any other existing materials, as well as great possibilities of tailoring their properties via an extremely-large compositional engineering space. These materials are usually characterized by high mechanical strength and wear resistance. In order to achieve the main objective of the project we are going to examine the possibility of the application

of the multi-energy, high fluence ion implantation followed by rapid thermal processing. The assumption that we will succeed in the creation of nitride ceramics with this method is the most risky part of the project, however, it may also provide an extremely high gain.

Two approaches are going to be used in order to achieve the main project's objective. At the initial stage we are going to use 'trial and error' method. We will perform implantation into recently synthesized FeCrAlW<sub>0.7</sub>Ta<sub>0.7</sub>. We will vary both ion beam properties, thermal processing parameters as well as the composition and microstructure of the substrate. Furthermore, in the project we will combine the trial-and-error method with highly advanced computer simulations based on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (CALPHAD) and Density Functional Theory (DFT) in order to create a tool for prediction of theoretical HECs composition. Finally, due to the fact that the number of possible HECs compositions is beyond our ability to comprehend and investigate using current methods, we propose experimental methods based on the high throughput processing with the evaluation of the composition and properties at the nanoscale, which can significantly accelerate the comparative characteristic of a single HEC. We are going to apply nanoindentation, micropillars compression and nanoscratch tests.

#### **Responsibilities:**

- development of the numerical models of the crystallographic structure of high entropy alloys and ceramics by density functional theory calculations
- numerical modelling of ion implantation with the use of molecular dynamics
- writing scientific papers, conference abstracts and research proposals
- participation in experimental work related to the project (ion implantation, SEM-FIB, AFM etc.)

#### **QUALIFICATIONS:**

- high motivation for scientific work at the boundary between mechanics and materials science
- MSc in mechanics, materials science, physics, chemistry or related fields
- Expertise in density functional theory calculations and crystallography
- Knowledge of CALPHAD and/or molecular dynamics is welcome
- programming skills (Matlab, Python and/or C++)
- fluent English
- ability to work in a team

#### **Requirement documents:**

- 1) Cover letter
- 2) CV including list of publication and conferences
- 3) PhD diploma in physics/biophysics or a related branch of science
- 4) confirmation of the ability to perform numerical calculations based on the density functional theory (DFT), e.g. example calculations carried out by the candidate
- 5) Signed statement: "I agree to the processing of personal data contained in my job offer for the needs necessary to carry out the recruitment process conducted by IPPT PAN with headquarters in Warsaw, ul. A. Pawińskiego 5B, according to art. 13 para. 1 and 2 of Regulation (EU) 2016/679 of the Parliament and of the Council of 27 April 2016 on the protection of individuals with regard to the processing of personal data and the free movement of such data and the repeal of Directive 95/46 / EC (RODO)."

**Type of Contract:** Temporary – max 2 years

**Job Status:** Full-time

**Please submit the documents to:** [konkursy@ippt.pan.pl](mailto:konkursy@ippt.pan.pl)

**For more details about the position please write to dr hab. inż. Dariusz Jarząbek, [djarz@ippt.pan.pl](mailto:djarz@ippt.pan.pl)**