

Adres do korespondencji: Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN, 30-059 Kraków, ul. Reymonta 25

Tel.: (012) 295 28 89, pokój 208B, fax: (012) 295 28 04

e-mail: trybulamarcela@wp.eu; m.trybula@imim.pl

Miejsca zatrudnienia i zajmowane stanowiska

10.2017- Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN, adiunkt

03.2020-01.2022 - Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych Uniwersytetu Warszawskiego, asystent

Przebieg kariery naukowej

Magister: Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, 2010

Doktor: Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN w Krakowie, 2015

Dorobek naukowy

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4802-9200>

Najważniejsze publikacje w okresie ostatnich 5 lat

1.

Marcela E. Trybula, T. Gancarz, W. Gąsior "Density, surface tension and viscosity of liquid binary Al-Zn and ternary Al-Li-Zn alloys", Fluid Phase Equil., 421 (2016) 39-48.

2.

Marcela E. Trybula "Structure and transport properties of the liquid Al₈₀Cu₂₀ alloy - A molecular dynamics study", Comp. Mater. Sci. 122, (2016) 341-352.

3.

Marcela E. Trybula, Przemysław W. Szafrąński and Pavel A. Korzhavyi „Structure and chemistry of liquid Al-Cu alloys: molecular dynamics study versus thermodynamics-based modelling”, J. Mater. Sci., 11 (2018) 8285-8301.

4.

Marcela E. Trybula, Sylwia Terlicka, Przemysław Fima "Thermodynamics of liquid Li-Sb alloys - Experiment vs modeling" J. Chem. Therm., 128 (2019) 134-140.

5.

Patryk Kasza, **Marcela E. Trybula**, Katarzyna Baradziej, Przemysław W. Szafrąński, Marek Cegła. „Fluorescent triazolyl spirooxazolidines: Synthesis and NMR stereochemical studies" J. Mol. Str., 1183 (2019) 157-167.

6.

Marcela E. Trybula and Pavel A. Korzhavyi „ Atomistic Simulations of Al(100) and Al(111) Surface Oxidation: Chemical and Topological Aspects of the Oxide Structure”, J. Phys. Chem. C, 123, 1, (2019) 334-346.

7.

P.W. Szafranski, **M.E. Trybula**, P. Kasza, M.T. Cegła, "Following the oxidation state of organosulfur compounds with NMR: Experimental data versus DFT calculations and database-powered NMR prediction" J. Mol. Str., 1202 (2020) 157-167.

Projekty badawcze

Projekty NCN

-

Termodynamiczne i fizyczne właściwości ciekłych dwuskładnikowych stopów, PRELUDIUM, 2011/03/N/ST8/05308 - kierownik projektu (08.2012-08.2014)

-

Termodynamiczne, strukturalne i fizykochemiczne właściwości ciekłych stopów Al-Li-Zn, ETIUDA, 2014/12/T/ST8/00089 - kierownik projektu (10.2014-06.2015)

-

Mechanizm reakcji nieciągłego wydzielania w ujęciu metod symulacji atomistycznych, SONATA, NCN2016/21/D/ST8/01689 - kierownik projektu (10.2017-10.3019)

-

Właściwości termodynamiczne i strukturalne ciekłych stopów Ag-Li-Sb, OPUS, NCN2015/19/B/ST8/0107 - wykonawca (07.2016 - 09.2017)

-

Transport masy w przemianach fazowych na migrujących granicach wydzieleni nieciągłych-eksperyment vs. modelowanie, OPUS, 2017/25/B/ST8/02198 - wykonawca (03.2020-12.2020)

Projekty Unii Europejskiej i inne

-

Innovative and affordable service for the Preventive Conservation monitoring of individual Cultural Artefacts during display, storage, handling and transport, CollectionCare project, Horizon2020, 501-D31260-0534653 - wykonawca (03.2020-01.2022)

-

ALUminium oXides for processing and products, ALUX, Swedish Foundation for Strategic Research (SSF), RMA11-0090 - wykonawca (01.2017-12.2018)

Doświadczenia naukowe zdobyte w kraju i za granicą

Stáže naukowe

-

Politechnika w Grenoble, Grenoble, Francja, temat: Symulacje atomistyczne dla ciekłych

stopów z układu Al-Li-Zn, 2014-2015 (4 miesiące)

-

Physical Properties of Materials, Research with Neutrons and Muons Division, Paul Scherrer Institute, Villigen, Szwajcaria, temat: zapoznanie się z infrastrukturą badawczą w Instytucie Paul Scherrer wykorzystującą promieniowanie neutronów i muonów, 2015 (1 tydzień)

-

School of Chemical Technology, Aalto University, Aalto, Finlandia, temat: dyskusja badań z wykorzystaniem metod dynamiki molekularnej, obliczeń ab initio oraz symulacji modelami termodynamicznymi, 2015 (1 tydzień)

-

KTH Royal Institute of Technology, Sztokholm, Szwecja, - post-doc, temat: "Atomistic simulations of thermal and chemical oxidation of Al metal and Al-based alloys" 2017-2018 (24 miesiące)

Najważniejsze międzynarodowe i krajowe wyróżnienia wynikające z prowadzenia badań naukowych lub prac rozwojowych

2014 Stypendium doktorskie ETIUDA, NCN

2015 Stypendium konferencyjne Larry Kauffman, CALPHAD INC.

2015 Seminarium zaproszone, Condensed Matter Theory Group, Paul Scherrer Institute, Villigen, Szwajcaria, pt: "Multiscale Description of structural and thermophysical properties of liquid alloys"

2017 Stypendium na badania w ramach stażu podoktorskiego Carl Tryggers Stiftelse for Vetenskapling

2018 Stypendium na badania w ramach stażu podoktorskiego Carl Tryggers Stiftelse for Vetenskapling

2020 trzyletnie stypendium naukowe Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla wybitnych młodych naukowców

Osiągnięcia w zakresie kształcenia kadr

Promotor pracy magisterskiej - inż. Arkadiusz Żydek pt: „Impact of Grain Boundary Complexion on structural properties in aluminum alloy”, Wydział Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej, AGH, 2020

Promotor pomocniczy - praca doktorska mgr Moniki Bugajskiej pt: „Właściwości termodynamiczne stopów Ag-Li-Sb”, IMIM PAN, 2020

Opiekun praktyk i staży naukowych:

2019 -Aleksandra Plucińska (Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki, AGH) i Mariusz Wermiński (Wydział Inżynierii Materiałowej i Informatyki Przemysłowej, AGH)

2017 - kierownictwo badaniami stypendysty ERASMUS+, KTH, Sztokholm, Szwecja

2017 - Dominika Wieczorek, Marta Pietrzak i Maciej Skolarczyk, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, Uniwersytet Jagielloński

2017 - Anna Ferenc, Iga Głowczyk i Patryk Burejza, (Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki, AGH)

Współpraca międzynarodowa

Department of Materials Science and Engineering, KTH Royal Institute of Technology, Sztokholm, Szwecja - Prof. Pavel A. Korzhavyi

Organizacja konferencji i sympozjów naukowych

Współorganizator panelu dyskusyjnego M8: Predicting Interface Structure and Dynamics - From Atomic- to Meso-Scale na międzynarodowym Kongresie Materials Science and Engineering (MSE) w Darmstadt, Niemcy, 25.09.-27.09.2018

Współorganizator panelu dyskusyjnego: M16: Predicting Interface Structure and Dynamics - From Atomic- to Meso-Scale na międzynarodowym Kongresie Materials Science and Engineering (MSE) w Darmstadt, Niemcy, 22.09.- 25.09.2020

Członkostwo w organizacjach naukowych

członkostwo TMS od 2014

Główne zainteresowania naukowe

Struktura i właściwości ciekłych stopów aluminium, cienkich filmów oraz granic ziaren w monokrystalicznym i polikrystalicznym Al. i jego stopach w skali nano, nowoczesne techniki komputerowej inżynierii materiałowej (symulacje metodami dynamiki molekularnej, obliczenia ab initio, metoda tesselacji Voronoi'a), modele półempiryczne.