

**PROPONOWANE TEMATY PRAC LICENCJACKICH  
W ROKU AKADEMICKIM 2016/2017  
DLA STUDENTÓW KIERUNKU  
ENERGETYKA I CHEMIA JĄDROWA  
PRACE WYKONYWANE NA WYDZIALE CHEMII UW**

**ZAKŁAD DYDAKTYCZNY FIZYKI I RADIOCHEMII**

Pracownia Radiochemii

**1. Badanie właściwości fizykochemicznych roztworów soli uranylowej(VI) w wybranej cieczy jonowej**

Kierownik: dr Agnieszka Siporska ([asipor@chem.uw.edu.pl](mailto:asipor@chem.uw.edu.pl))

Zmierzone zostaną gęstości, lepkości, przewodnictwa właściwe, szybkość propagacji fali ultradźwiękowej oraz charakterystyka elektrochemiczna roztworów soli uranylowej(VI) w wybranej cieczy jonowej. Otrzymane wartości pozwolą na obliczenie wielkości pozwalających na analizę oddziaływań w tych roztworach.

**2. Wpływ podstawienia izotopowego H/D na właściwości fizykochemiczne mieszanin zawierających ciecze jonowe**

Kierownik: dr Anna Makowska ([milew@chem.uw.edu.pl](mailto:milew@chem.uw.edu.pl))

Pracownia Fizykochemii Dielektryków i Magnetyków  
InFemto Research Group

**1. Ultraszybka migawka kerrowska: badanie dynamiki orientacyjnej prostych cząsteczek o wysokiej symetrii poprzez symulacje dynamiki molekularnej oraz pomiary elektro-optycznego i femtosekundowego optyczno-optycznego efektu Kerra**

Kierownik: dr Kamil Polok ([polok@chem.uw.edu.pl](mailto:polok@chem.uw.edu.pl))

Poszukujemy ambitnego i samodzielnego studenta do realizacji projektu licencjackiego/magisterskiego, w ramach którego badana będzie dynamika orientacyjna cząsteczek chloroformu, bromoformu i czterochloroetylenu. Zadaniem studenta będzie pomiar efektu orientacyjnego wywołanego przez stacjonarne pole elektryczne (elektro-optyczny efekt Kerra) oraz relaksacji efektu orientacyjnego wywołanego ultrakrótkim impulsem laserowym w różnych temperaturach (optyczno-optyczny efekt Kerra). Następnie zostaną przeprowadzone symulacje dynamiki molekularnej w celu wyznaczenia wielkości odpowiedzi orientacyjnej oraz czasów reorientacji cząsteczek. Wyniki symulacji zostaną skonfrontowane z eksperymentem.

**2. Wpływ femtosekundowego impulsu laserowego na dynamikę molekularną prostych cząsteczek**

Kierownik: dr Kamil Polok ([polok@chem.uw.edu.pl](mailto:polok@chem.uw.edu.pl))

Poszukujemy ambitnego i samodzielnego studenta do realizacji projektu licencjackiego/magisterskiego, w ramach którego badany będzie wpływ impulsu laserowego na dynamikę w prostych układach molekularnych. Zadaniem studenta będzie przeprowadzenie symulacji dynamiki molekularnej dla wybranej cieczy w stanie równowagi, w trakcie oddziaływania z femtosekundowym impulsem laserowym i tuż po nim. Na podstawie symulacji zostaną wyznaczone odpowiedzi kerrowskie i odpowiadające im niskoczęstościowe widma ramanowskie. Następnie trzeba będzie stwierdzić, jaki wpływ na

składowe zarejestrowanego sygnału mają intensywność i czas trwania zastosowanego impulsu.

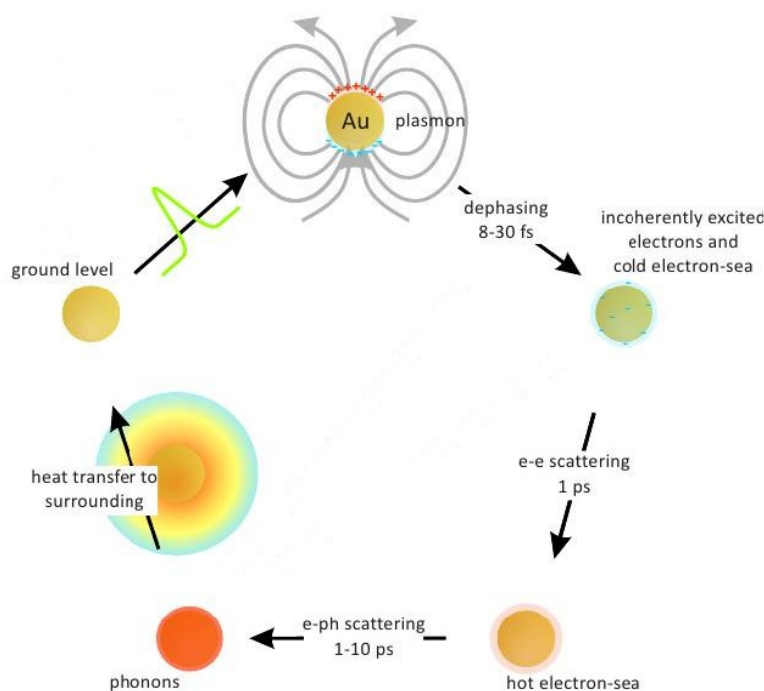
### 3. Ultraszybka dynamika anizotropowych nanocząstek złota wywołana impulsem femtosekundowym

Kierownik: dr Kamil Polok ([polok@chem.uw.edu.pl](mailto:polok@chem.uw.edu.pl))

Poszukujemy ambitnego i samodzielnego studenta (lub pary studentów) do realizacji projektu licencjackiego/magisterskiego dot. femtosekundowej dynamiki w nanocząstkach zbudzonych za pomocą ultrakrótkiego impulsu laserowego. Projekt będzie realizowany we współpracy z drem Wójcikiem i drem Lewandowskim, zajmującymi się syntezą nanocząstek. Zadaniem studenta będzie synteza nanocząstek o określonym kształcie i wymiarach (np. nanopręciki lub nanopryzmaty), w odpowiednim otoczeniu i z jak najmniejszym (lub zadany) rozrzutem rozmiarów oraz ich charakteryzacja (np. poprzez analizę zdjęć z mikroskopu elektronowego i widm UV/VIS). Gdy zostaną już poznane parametry próbki, zostaną przeprowadzone eksperymenty femtosekundowe z wykorzystaniem technik optycznego efektu Kerra i absorpcji przejściowej, dla których następnie trzeba będzie zaproponować i dopasować modele opisujące rejestrowane sygnały. Ostatnim etapem będzie powiązanie wartości parametrów modelu z parametrami próbki, takimi jak otoczenie, wymiary nanocząstek i ich stosunek, a także rozrzut otrzymanych rozmiarów.

W przypadku zgłoszenia się pary studentów jedna osoba skupi się głównie na syntezie, druga zaś na badaniach femtosekundowych.

Poniżej przykładowy schemat relaksacji nanocząstek sferycznych po wzbudzeniu impulsem femtosekundowym.



#### **4. Struktura i dynamika cieczy jonowych i ich mieszanin z rozpuszczalnikami organicznymi**

Kierownik: dr Kamil Polok ([polok@chem.uw.edu.pl](mailto:polok@chem.uw.edu.pl))

Poszukujemy ambitnego i samodzielnego studenta do realizacji projektu licencjackiego/magisterskiego, w ramach którego badana będzie dynamika i struktura cieczy jonowych i ich mieszanin z rozpuszczalnikami organicznymi. Zadaniem studenta będzie wykonywanie symulacji dynamiki molekularnej i rejestracja sygnału optycznego efektu Kerra dla przygotowanych próbek, a następnie obróbka i analiza otrzymanych wyników. Projekt będzie wykonywany we współpracy z prof. Abdenacerem Idrissi z Uniwersytetu w Lille, gdzie będą wykonywane pomiary IR, Ramana oraz NMR.

#### **5. Wiązania wodorowe w prostych układach molekularnych: symulacje dynamiki molekularnej oraz pomiary femtosekundowego optyczno-optycznego efektu Kerra**

Kierownik: dr Kamil Polok ([polok@chem.uw.edu.pl](mailto:polok@chem.uw.edu.pl))

Poszukujemy ambitnego i samodzielnego studenta do realizacji projektu licencjackiego/magisterskiego, w ramach którego badana będzie dynamika i struktura prostych układów molekularnych, w których występują wiązania wodorowe. Zadaniem studenta będzie wykonanie symulacji dynamiki molekularnej dla wybranej mieszaniny (lub kilku mieszanin) cząsteczek dla różnych stężeń (lub też temperatur). Do wyboru studenta będą cząsteczki będące tylko akceptorem wiązania wodorowego (np. aceton), tylko donorem (np. chloroform) bądź zarówno jednym i drugim (np. woda, metanol).

W celu opisanie uzyskanej sieci wiązań wodorowych zostaną wyznaczone liczby i czasy życia tworzonych wiązań wodorowych z rozróżnieniem na rodzaj akceptora i donora, czasy reorientacji cząsteczek oraz rozmiary tworzonych przez cząsteczki klastrów.

Następnie zostaną wyznaczone funkcje korelacji polaryzowalności w celu wyznaczenia odpowiedzi kerrowskiej i widma Ramana. Wyniki te zostaną porównane z eksperymentem. Uzyskane z symulacji funkcje korelacji prędkości i prędkości kątowej zostaną następnie wykorzystane do opisanie ruchów cząsteczek w sieci wiązań wodorowych.

### **ZAKŁAD DYDAKTYCZNY CHEMII ORGANICZNEJ**

#### Pracownia Syntezy Nanomateriałów Organicznych i Biomolekuł grupa badawcza Radiochemia dla medycyny i przemysłu

#### **1. Synteza metylowych pochodnych L-tyrozyny i tyraminy znakowanych izotopami wodoru.**

Kierownik: dr Małgorzata Pająk ([mpajak@chem.uw.edu.pl](mailto:mpajak@chem.uw.edu.pl))

#### **2. Biotransformacje L-fenylalaniny i jej halogenopochodnych oraz keto- i hydroksykwasów znakowanych izotopami wodoru.**

Kierownik: dr Katarzyna Pałka ([kskowera@chem.uw.edu.pl](mailto:kskowera@chem.uw.edu.pl))

#### **3. Biotransformacje halogeno- i metylo pochodnych L-tryptofanu znakowanych izotopami wodoru.**

Kierownik: dr Elżbieta Winnicka ([eboroda@chem.uw.edu.pl](mailto:eboroda@chem.uw.edu.pl))

**1. Nowoczesne materiały w katalizie: synteza i właściwości katalityczne nowych szkieletów metaliczno-organicznych (Metal Organic Frameworks, MOFs)**

Kierownik: dr Michał Chmielewski ([mchmielewski@chem.uw.edu.pl](mailto:mchmielewski@chem.uw.edu.pl))

MOF-y, z ang. Metal-Organic Frameworks, to krystaliczne, porowate i łatwe do modyfikacji materiały, stanowiące unikalne środowisko m.in. dla katalizy. Proponowana praca będzie częścią szeroko zakrojonych badań realizowanych w ramach grantu MNiSW „IDEAS PLUS”, którego głównym celem jest immobilizacja katalizatorów wewnątrz nanoskopowych luk w kryształach MOF-ów i zbadanie, w jaki sposób ograniczona przestrzeń wpływa na chemo-, regio- i stereoselektywność reakcji. W ramach tych badań zostanie zsyntezowany szereg połączeń katalizator – MOF, a następnie badane będą ich właściwości katalityczne. Więcej na <http://www.mchmielewski.pl>.

**2. Chemia supramolekularna anionów: fluorescencyjne sensory i transportery anionów na bazie szkieletu 1,8-diaminokarbazolu - synteza i właściwości kompleksotwórcze**

Kierownik: dr Michał Chmielewski ([mchmielewski@chem.uw.edu.pl](mailto:mchmielewski@chem.uw.edu.pl))

Transport anionów przez błony biologiczne ma duże znaczenie w wielu ważnych dla życia procesach komórkowych, takich jak usuwanie CO<sub>2</sub>, regulacja pH, zapewnienie równowagi osmotycznej i odpowiedniej objętości komórki. Proponowana praca będzie częścią szeroko zakrojonych badań których celem jest znalezienie zależności między strukturą a zdolnością do transportu anionów przez dwuwarstwy lipidowe w pewnej nowej, szczególnie obiecującej klasie receptorów molekularnych. W ramach tych badań zostanie zsyntezowany szereg acyklicznych, makrocyklicznych i makrobicyklicznych receptorów na aniony, a następnie zostaną zbadane ich właściwości kompleksotwórcze i transportowe w stosunku do modelowych anionów. Praca będzie okazją do praktycznego zapoznania się z problematyką i metodami chemii supramolekularnej. Więcej na <http://www.mchmielewski.pl>.

**3. Chemia supramolekularna anionów: synteza i właściwości kompleksotwórcze fluorescencyjnych rotaksanów i katenanów selektywnych na aniony**

Kierownik: dr Michał Chmielewski ([mchmielewski@chem.uw.edu.pl](mailto:mchmielewski@chem.uw.edu.pl))

Praca będzie okazją do praktycznego zapoznania się z problematyką i metodami chemii supramolekularnej, począwszy od opracowania kilkietapowej syntezy modelowych receptorów molekularnych, poprzez ich templatowaną anionami makrocyklizację prowadzącą do cząsteczek powiązanych mechanicznie, aż po wnikliwe badania strukturalne i charakteryzację ich właściwości kompleksotwórczych w stosunku do modelowych anionów nieorganicznych. Więcej na <http://www.mchmielewski.pl>.

**4. Chemia supramolekularna anionów: fotoprzełączalne receptory molekularne na bazie grupy acylohydrazonowej – synteza i badania właściwości kompleksotwórczych**

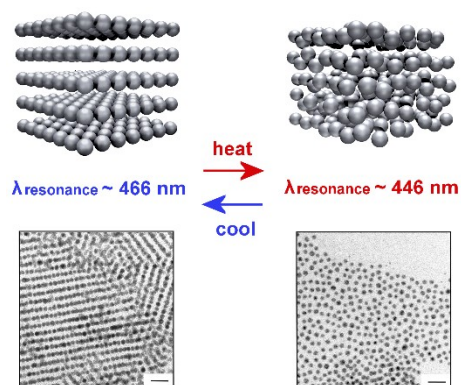
Kierownik: dr Michał Chmielewski ([mchmielewski@chem.uw.edu.pl](mailto:mchmielewski@chem.uw.edu.pl))

Praca będzie okazją do praktycznego zapoznania się z problematyką i metodami chemii supramolekularnej, a w szczególności z modną obecnie tematyką przełączników molekularnych. W ramach projektu zostanie zsyntezowany i zbadany nowy receptor na aniony zdolny do odwracalnej fotoizomeryzacji, jego przekształcanie w formę metastabilną za pomocą naświetlania lampą UV oraz właściwości kompleksotwórcze wszystkich form w stosunku do anionów.

## 1. Synteza nanocząstek metalicznych i półprzewodnikowych w kierunku zastosowań w panelach fotowoltaicznych.

Kierownik: dr Wiktor Lewandowski ([wlewandowski@chem.uw.edu.pl](mailto:wlewandowski@chem.uw.edu.pl))

Praca obejmuje syntezę (nanocząstek) i badania fizykochemiczne (TEM, SAXS, UV-Vis) – nacisk na syntezę. W trakcie pracy student przejdzie szkolenie z wykonywania pomiarów i analizy wyników. Praca zacznie się od przygotowania nanocząstek złota i półprzewodnikowych. Następnie takie nanocząstki, będą na powierzchni pokrywane ligandami ciekłokrystalicznymi (dostarczonymi przez prowadzącego) co spowoduje ich organizację w niezwykle przestrzenne struktury. Ostatnim krokiem będzie wymiana części ligandów na małowcząsteczkowe jony i obserwacja zmian ułożenia nanocząstek.



**Cel:** uzyskanie bardzo bliskiego upakowania nanocząstek (tylko w jednym kierunku) co pozwoli na zastosowanie tych materiałów w panelach fotowoltaicznych.

**Rys. 1.** (góra) Model ułożenia nanocząstek srebra w przestrzeni ukazujący odwracalność zmiany budowy superstruktury pod wpływem temperatury; (dół) zdjęcia TEM potwierdzające prawidłowość modelu.

## 2. Nanotechnologia w dostarczaniu leków: synteza i aplikacje hybryd organiczno-nieorganicznych na przykładzie nanocząstek złota pokrytych glutationem, sprzężonych z kwasem foliowym, docelowo modyfikowanych promieniotwórczymi izotopami (praca teoretyczna lub praktyczna).

Kierownik: dr Michał Wójcik ([mwojcik@chem.uw.edu.pl](mailto:mwojcik@chem.uw.edu.pl))

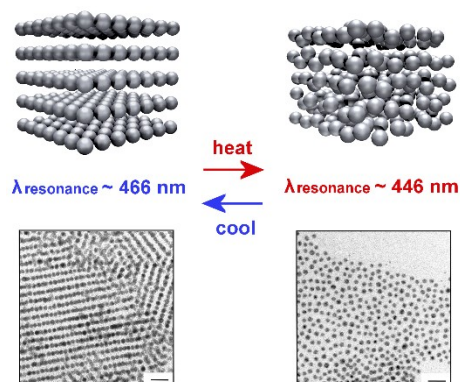
W ostatnich latach obserwuje się wzrastające zainteresowanie nowymi nanomateriałami o potencjalnym zastosowaniu medycznym. Materiały takie mogą być wykorzystywane na dwóch kluczowych drogach: jako terapeutyki, bądź jako układy wspomagające w diagnostyce medycznej. Nieliczne nanoukłady charakteryzują się także właściwościami predysponującymi je do obu zastosowań. Nowe terapeutyki charakteryzują się w szczególności znacznie lepszym powinowactwem ale także mogą być połączeniem wcześniej znanych substancji oraz nanoprzenośników. W proponowanej pracy student przygotowuje materiał teoretyczny skupiający się na wybranej kategorii terapeutyków medycznych, opisze metody syntezy, potencjalne zastosowania oraz przedstawi dalsze perspektywy rozwoju wybranej grupy. Ewentualny wykonywanie pracy praktycznej będzie wiązało się z przeprowadzeniem kilkietapowej syntezy chemicznej łączącej elementy chemii organicznej oraz nieorganicznej (synteza nanocząstek), a także charakteryzacje fizykochemiczną otrzymanych układów. Takie układy docelowo będzie można również znakować promieniotwórczymi izotopami, które pozwolą wykorzystać te materiały również w medycynie do obrazowania guzów.



### 3. Synteza nanocząstek metalicznych i półprzewodnikowych w kierunku zastosowań w diodach elektroluminescencyjnych.

Kierownik: dr Wiktor Lewandowski ([wlewandowski@chem.uw.edu.pl](mailto:wlewandowski@chem.uw.edu.pl))

Praca obejmuje syntezę (nanocząstek) i badania fizykochemiczne (TEM, SAXS, UV-Vis) – nacisk na syntezę. W trakcie pracy student przejdzie szkolenie z wykonywania pomiarów i analizy wyników. Praca zacznie się od przygotowania nanocząstek półprzewodnikowych. Następnie takie nanocząstki, będą na powierzchni pokrywane ligandami ciekłokrystalicznymi (dostarczonymi przez prowadzącego) co spowoduje ich organizację w niezwykle przestrzenne struktury. Odpowiednie ligandy zapewnią przełączalność struktury.



**Cel:** uzyskanie przełączalnego upakowania nanocząstek

PbS co pozwoli na zastosowanie tych materiałów w diodach elektroluminescencyjnych.

**Rys. 1.** (góra) Model ułożenia nanocząstek srebra w przestrzeni ukazujący odwracalność zmiany budowy superstruktury pod wpływem temperatury; (dół) zdjęcia TEM potwierdzające prawidłowość modelu.

### 4. Synteza mezogenicznych i promezogenicznych pochodnych dopaminy do modyfikacji powierzchni nanocząstek magnetycznych

Kierownik: dr Michał Wójcik ([mwojcik@chem.uw.edu.pl](mailto:mwojcik@chem.uw.edu.pl))

### 5. Dynamiczna kontrola ciekłokrystalicznych nanoukładów za pomocą oddziaływań supramolekularnych – na drodze do nowych typów pamięci komputerowej (praca praktyczna)

Kierownik: dr Michał Wójcik ([mwojcik@chem.uw.edu.pl](mailto:mwojcik@chem.uw.edu.pl))

Praca będzie obejmować wieloetapową syntezę pochodnych ligandów ciekłokrystalicznych lub ligandów zdolnych do generowania zachowania ciekłokrystalicznego (promezogenicznych) na drodze syntezy wieloetapowej. W wyniku syntezy otrzymane zostaną pochodne zakończone fragmentem pochodzącym od dopaminy, pozwalającym na modyfikację powierzchni nanocząstek magnetycznych (tlenku żelaza, kobaltu). Student wykona również syntezę odpowiednich nanocząstek. Materiały takie mają potencjalne zastosowania jako pamięć w komputerach.

## ZAKŁAD DYDAKTYCZNY CHEMII FIZYCZNEJ

### Pracownia Elektrochemii

### 1. Modyfikacja inaktywowanych komórek drożdży nanocząstkami z fluorku galu-68 - nowy bioogodny środek kontrastujący w pozytronowej tomografii emisyjnej.

Kierownik: dr hab. Maciej Mazur, prof. UW ([mmazur@chem.uw.edu.pl](mailto:mmazur@chem.uw.edu.pl))

Celem projektu licencjackiego będzie wykorzystanie białkowo-polisacharydowych otoczek komórek drożdży jako szablonów do osadzania nanocząstek z fluorku galu (GaOOH). Jony

$\text{Ga}^{3+}$  będą inkorporowane w strukturze biotemplatu, po czym po oddzieleniu supernatantu dodawany będzie roztwór fluorków, co powinno skutkować wytrąceniem fluorku galu. Oczekuje się, że utworzony  $\text{GaF}_3$  będzie tworzył nanocząstki wbudowane w strukturę bioszablonu.

Po opracowaniu procedur preparatywnych przeprowadzone zostaną próby syntezy z wykorzystaniem radioizotopu  $^{68}\text{Ga}$ . Przeprowadzona zostanie wszechstronna charakterystyka fizykochemiczna otrzymanych struktur, w tym pomiary radiometryczne.

## **2. Inkorporacja jonów nadrenianowych i nadtechnecjanowych w nanosferach hydrożelowych.**

Kierownik: dr hab. Maciej Mazur, prof. UW ([mmazur@chem.uw.edu.pl](mailto:mmazur@chem.uw.edu.pl))

Ren i technet są pierwiastkami o podobnych właściwościach fizykochemicznych, a ich promieniotwórcze izotopy znajdują zastosowanie w terapii i diagnostyce medycznej.

Celem pracy licencjackiej będzie opracowanie metod inkorporacji związków renu i technetu w nanocząstkach z poli(N-izopropylakrylamidu). Struktury takie mają stanowić modelowe układy teranostyczne do zastosowań w medycynie.

Przeprowadzone zostaną wszechstronne badania fizykochemiczne otrzymanych struktur oraz opcjonalnie badania toksyczności w warunkach *in vitro* i *in vivo*.

## **3. Dopowanie superparamagnetycznych nanocząstek "zimnymi" lantanowcami jako nowej platformy w radioterapii.**

Kierownik: prof. dr hab. Paweł Krysiński ([pakrys@chem.uw.edu.pl](mailto:pakrys@chem.uw.edu.pl))

Praca obejmować będzie syntezę nanocząstek z wbudowanymi "zimnymi" lantanowcami, takimi jak Tb, Gd lub Ho oraz zbadanie ich właściwości magnetycznych i luminescencyjnych. Tego typu multimodalne nanocząstki w dalszych etapach mogą zostać przekształcone w zawierające odpowiednie radionuklidy - emitery tzw. miękkiego promieniowania  $\beta^-$ , co pozwoli na bezpośrednie naświetlenie guza nowotworowego. W naszych wstępnych badaniach stwierdziliśmy, że można łatwo wbudować trójładunkowo kationy lantanowców do nanoferrytów, poprzez częściowe zastąpienie kationów  $\text{Fe}^{3+}$ . Jednakże, jak pokazały wstępne wyniki naszych badań, proste dopowanie nanocząstek mikroilościami radionuklidu lantanowca powoduje jedynie jego adsorpcję na powierzchni. Aby związać trwale kation lantanowca z nanocząstką konieczna jest synteza nanocząstek domieszkowanych kationami lantanowca w ilości ok. 10-20%. Treścią pracy będzie optymalizacja składu rdzenia, w którym kation lantanowca (później - radionuklid) będzie równomiernie rozłożony w fazie nanocząstki.

## **4. Nanostruktury magnetyczne jako nośniki radionuklidów**

Kierownik: prof. dr hab. Paweł Krysiński ([pakrys@chem.uw.edu.pl](mailto:pakrys@chem.uw.edu.pl))

## **5. Właściwości elektrokatalityczne kompozytu PEDOT-nanocząstki złota**

Kierownik: dr hab. Barbara Pałys, prof.UW ([bpalys@chem.uw.edu.pl](mailto:bpalys@chem.uw.edu.pl))

## **6. Charakterystyka elektrochemiczna i spektroskopowa kompozytu nanocząstek platyny i tlenku grafenu**

Kierownik: dr hab. Barbara Pałys, prof.UW ([bpalys@chem.uw.edu.pl](mailto:bpalys@chem.uw.edu.pl))

## **7. Charakterystyka elektrochemiczna i spektroskopowa kompozytu nanocząstek złota i tlenku grafenu**

Kierownik: dr hab. Barbara Pałys, prof.UW ([bpalys@chem.uw.edu.pl](mailto:bpalys@chem.uw.edu.pl))

### Pracownia Elektrochemicznych Źródeł Energii

#### **1. Oznaczanie izotopów alf/beta promieniotwórczych w próbkach środowiskowych.**

Kierownik: dr Maciej Chotkowski ([mchotk@chem.uw.edu.pl](mailto:mchotk@chem.uw.edu.pl))

Przedmiotem bada będzie oznaczanie całkowitej aktywności izotopów alfa/beta promieniotwórczych w próbkach środowiskowych z wykorzystaniem detektora ciekłoscyntylacyjnego.

#### **2. Badanie procesu elektrodepozycji uranu z roztworów niewodnych.**

Kierownik: dr Maciej Chotkowski ([mchotk@chem.uw.edu.pl](mailto:mchotk@chem.uw.edu.pl))

Przedmiotem pracy będzie badanie procesu depozycji uranu z roztworów niewodnych. Otrzymane depozyty będą charakteryzowane z wykorzystaniem spektrometrii promieniowania alfa.

### Pracownia Fizykochemii Nanomateriałów

#### **1. Badanie procesu oczyszczania ścieków farbiarskich przy użyciu grafitopodobnego azotku węgla**

Kierownik: dr hab. Michał Bystrzejewski ([mibys@chem.uw.edu.pl](mailto:mibys@chem.uw.edu.pl))

#### **2. Badanie procesów regeneracji grafitopodobnego azotku węgla po procesie adsorpcji błękitu metylowego**

Kierownik: dr hab. Michał Bystrzejewski ([mibys@chem.uw.edu.pl](mailto:mibys@chem.uw.edu.pl))

#### **3. Wpływ metali alkalicznych i metali ziem alkalicznych na właściwości adsorpcyjne grafitopodobnego azotku węgla**

Kierownik: dr hab. Michał Bystrzejewski ([mibys@chem.uw.edu.pl](mailto:mibys@chem.uw.edu.pl))

#### **4. Optymalizacja parametryczna syntezy spalenkowej nanowłókien węgla krzemu**

Kierownik: dr hab. Andrzej Huczko, prof. UW ([ahuczko@chem.uw.edu.pl](mailto:ahuczko@chem.uw.edu.pl))

#### **5. Optymalizacja parametryczna syntezy spalenkowej struktur grafenopodobnych**

Kierownik: dr hab. Andrzej Huczko, prof. UW ([ahuczko@chem.uw.edu.pl](mailto:ahuczko@chem.uw.edu.pl))

### Pracownia Oddziaływań Międzycząsteczkowych

#### Grupa prof. Joanny Sadlej

#### **1. Znieczulanie ksenonem: modelowanie molekularne oddziaływania atomu ksenonu z neurotransmiterami aminokwasowymi.**

Kierownik: dr Janusz Cukras ([januszc@chem.uw.edu.pl](mailto:januszc@chem.uw.edu.pl))

Ksenon jest gazem stosowanym przez anestezjologów do wywołania znieczulenia ogólnego. Mechanizm jego działania jest słabo poznany. Dwa główne hipotetyczne mechanizmy to oddziaływanie z receptorem N-metylo-D-asparaginowym oraz oddziaływanie z neurotransmiterami aminokwasowymi. Rozpracowanie obu mechanizmów wiąże się z dokładnym poznaniem sposobu, w jaki atom ksenonu oddziałuje z aminokwasami.

#### **2. Ku sensorom peptydowym na powierzchni metalu: widma oscylacyjne oligopeptydów.**

Kierownik: dr Janusz Cukras ([januszc@chem.uw.edu.pl](mailto:januszc@chem.uw.edu.pl))



Badania widm oscylacyjnych krótkich oligopeptydów za pomocą modelowania metodami chemii kwantowej na potrzeby interpretacji eksperymentalnych widm i planowania eksperymentu.

### **3. Modelowanie molekularne konformerów małych chiralnych cząsteczek organicznych (np. limonenu, karwonu, metylocyklopropanonu, proliny, fluorocyklopropanonu).**

Kierownik: dr Janusz Cukras ([januszc@chem.uw.edu.pl](mailto:januszc@chem.uw.edu.pl))

Aby móc poprawnie przewidzieć widmo danej substancji trzeba uwzględnić fakt istnienia różnych jej konformerów (izomerów konformacyjnych). Za pomocą analizy konformacyjnej można określić względną ilość danego konformera w próbce oraz wkład jego widma w całkowite widmo substancji. Jest to ważny wstępny etap dobrego modelowania widm.

### **4. Modelowanie widma elektronowego i magnetycznego dichroizmu kołowego (ECD i MCD) małych chiralnych cząsteczek organicznych.**

Kierownik: dr Janusz Cukras ([januszc@chem.uw.edu.pl](mailto:januszc@chem.uw.edu.pl))

Widma ECD i MCD są cennym źródłem informacji o cząsteczkach organicznych i cząsteczek o znaczeniu biologicznym. Modelujemy je w celu ułatwienia interpretacji danych eksperymentalnych ECD i MCD oraz w celu porównania z widmami eksperymentalnymi i teoretycznymi nowo odkrytej spektroskopii dichroizmu magneto-chiralnego (MChD).

### **5. Modelowanie struktur i właściwości kompleksów cząsteczkowych mających znaczenie w chemii atmosfery.**

Kierownik: dr Janusz Cukras ([januszc@chem.uw.edu.pl](mailto:januszc@chem.uw.edu.pl))

Struktury takie jak klastry wody są bardzo ważne z punktu widzenia wielu dziedzin nauki: biologii, chemii atmosfery czy fizyki. Na przykład istnieniu wiązania wodorowego, które jest formą oddziaływania w klastrze międzycząsteczkowym, zawdzięczamy fakt, że woda jest ciekłą w zakresie temperatur 0–100 °C. Jest wiele innych klastrów, których istnienie jest ważne dla dynamiki procesów chemicznych, które zachodzą w przyrodzie. Badamy takie układy ważne z punktu widzenia procesów zachodzących w atmosferze.

### **6. Modelowanie struktury i właściwości kompleksów związków gazów szlachetnych.**

Kierownik: dr Janusz Cukras ([januszc@chem.uw.edu.pl](mailto:januszc@chem.uw.edu.pl))

Chemia związków gazów szlachetnych jest nową dziedziną, rozwiniętą szczególnie przez naukowców w Helsinek na końcu XX i początku XXI wieku. Znamy takie cząsteczki, jak HXeOH, HXeSH, HCCXeH, HKrCl, które w dodatku tworzą kompleksy z innymi cząsteczkami, np. HXeOH...H<sub>2</sub>O. Pomimo tego, że związki te są już scharakteryzowane eksperymentalnie, głównie w matrycach niskotemperaturowych, mamy odnośnie do nich wiele pytań, na które można odpowiedzieć za pomocą metod modelowania chemii kwantowej.

### **7. Modelowanie energii oddziaływania stanów stacjonarnych kompleksów molekularnych z udziałem związków gazów szlachetnych za pomocą rachunku zaburzeń o adaptowanej symetrii.**

Kierownik: dr Janusz Cukras ([januszc@chem.uw.edu.pl](mailto:januszc@chem.uw.edu.pl))

Badanie natury oddziaływania międzymolekularnego dla struktur kompleksów utworzonych przez nowo odkryte związki gazów szlachetnych, np. HKrCl...HCl, HKrF...HF HXeOH...H<sub>2</sub>S, HXeSH...H<sub>2</sub>O itp. Obliczenia te będą prowadzone za pomocą programu SAPT, rozwiniętego między innymi na Wydziale Chemii.

## **8. Rozszerzanie funkcjonalności interfejsu między programem wizualizującym cząsteczki Avogadro, a programem do obliczeń kwantowomechanicznych DALTON.**

Kierownik: dr Janusz Cukras ([januszc@chem.uw.edu.pl](mailto:januszc@chem.uw.edu.pl))

Programy do budowania struktur cząsteczek oraz wizualizacji wyników obliczeń kwantowomechanicznych są podstawowym narzędziem przy pracy w modelowaniu molekularnym. Avogadro jest jednym z prężniej rozwijanych programów tego typu, opartym na standardach Open Source. Jedną z bardzo przydatnych dla chemika obliczeniowego funkcjonalności Avogadro byłaby możliwie pełna obsługa programu DALTON za pomocą odpowiednio zaprogramowanego interfejsu.

[Pracownia Oddziaływań Międzycząsteczkowych](#)  
[Grupa prof. Andrzeja Kudelskiego](#)

### **1. Synteza nowego typu nanorezonatorów do prowadzenia analiz powierzchni przy pomocy spektroskopii Ramana.**

Kierownik: dr hab. Andrzej Kudelski, prof. UW ([akudel@chem.uw.edu.pl](mailto:akudel@chem.uw.edu.pl))

[Pracownia Oddziaływań Międzycząsteczkowych](#)  
[Grupa prof. Wiktora Koźmińskiego](#)

### **1. Przypisanie sygnałów NMR dla białek nieustrukturyzowanych**

Kierownik: prof. dr hab. Wiktor Koźmiński ([kozmin@chem.uw.edu.pl](mailto:kozmin@chem.uw.edu.pl))

### **2. Wyznaczenie struktury białka lub peptydu**

Kierownik: prof. dr hab. Wiktor Koźmiński ([kozmin@chem.uw.edu.pl](mailto:kozmin@chem.uw.edu.pl))

[Pracownia Spektroskopii Jądrowego Rezonansu Magnetycznego](#)

### **1. Zastosowanie spektroskopii MRJ do implementacji algorytmu Deutscha-Jozsy**

Kierownik: dr Piotr Garbacz ([garbacz@chem.uw.edu.pl](mailto:garbacz@chem.uw.edu.pl))

## **ZAKŁAD DYDAKTYCZNY CHEMII TEORETYCZNEJ I KRYSTALOGRAFII**

[Pracownia Teorii Biopolimerów](#)  
[Grupa dra hab. Andrzeja Sikorskiego](#)

### **1. Projektowanie kompozytów polimerowych - zjawisko perkolacji.**

Kierownik: dr hab. Andrzej Sikorski ([sikorski@chem.uw.edu.pl](mailto:sikorski@chem.uw.edu.pl))

### **2. Polimery silnie rozgałęzione jako nośniki leków.**

Kierownik: dr hab. Andrzej Sikorski ([sikorski@chem.uw.edu.pl](mailto:sikorski@chem.uw.edu.pl))

[Pracownia Chemii Kwantowej](#)

### **1. Opracowanie nowego zbioru benchmarkowych kompleksów międzycząsteczkowych do badania metod znajdowania energii oddziaływania**

Kierownik: dr hab. Tatiana Korona ([tania@tiger.chem.uw.edu.pl](mailto:tania@tiger.chem.uw.edu.pl))

### **2. Zbadanie stosowności nowych przybliżeń lokalizacji korelacji elektronowej do obliczeń własności cząsteczkowych pierwszego i drugiego rzędu**

Kierownik: dr hab. Tatiana Korona ([tania@tiger.chem.uw.edu.pl](mailto:tania@tiger.chem.uw.edu.pl))

**3. Obliczenia struktury geometrycznej wybranych polimerów węglowodorów pi-elektronowych**

Kierownik: dr hab. Leszek Stolarczyk ([leszek@tiger.chem.uw.edu.pl](mailto:leszek@tiger.chem.uw.edu.pl))

**ZAKŁAD CHEMII NIEORGANICZNEJ I ANALITYCZNEJ**

Pracownia Teorii i Zastosowań Elektrod

**1. Badania oddziaływań leków przeciwnowotworowych z grupy alkilofosfolipidów na modelowe błony komórek zdrowych i nowotworowych.**

Kierownik: dr Joanna Juhaniewicz ([jjuhaniewicz@chem.uw.edu.pl](mailto:jjuhaniewicz@chem.uw.edu.pl))

**2. Wpływ struktury modelowej błony biologicznej na działanie naturalnych peptydów antybiotykowych.**

Kierownik: dr Joanna Juhaniewicz ([jjuhaniewicz@chem.uw.edu.pl](mailto:jjuhaniewicz@chem.uw.edu.pl))

**3. Rola jonów cynku w agregacji amyliny w przebiegu cukrzycy typu II.**

Kierownik: dr Joanna Juhaniewicz ([jjuhaniewicz@chem.uw.edu.pl](mailto:jjuhaniewicz@chem.uw.edu.pl))