

**PROPONOWANE TEMATY PRAC LICENCJACKICH
W ROKU AKADEMICKIM 2017/2018
DLA STUDENTÓW KIERUNKU
ENERGETYKA I CHEMIA JĄDROWA
PRACE WYKONYWANE NA WYDZIALE CHEMII UW**

ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ I RADIOCHEMII

Superparamagnetyczne nanocząstki z wbudowanymi jonami Ho^{+3} badania właściwości magnetycznych i luminescencyjnych

prof. Dr hab. Paweł Krysiński, pracownia Elektrochemii, pakrys@chem.uw.edu.pl

Proponujemy syntezę superparamagnetycznych nanocząstek ferrytu zawierających w rdzeniu paramagnetyczny jon Ho(III) o różnym stopniu domieszkowania. Kationy holmu mogą poprawić właściwości magnetyczne i nadać właściwości luminescencyjne badanym nanocząstkom. Celem pracy jest optymalizacja zawartości Ho(III) w rdzeniu, by uzyskane nanocząstki mogły służyć jako nośniki leku i znaczniki luminescencyjne. Ponadto, właściwości magnetyczne zostaną wykorzystane również do generacji ciepła w zmiennym polu magnetycznym. Obecność holmu pozwoli w dalszym etapie badań, przekształcić go częściowo w radioizotop ^{166}Ho , emitujący promieniowanie β^- . Nanocząstki magnetyczne zawierające ^{166}Ho stanowią tym samym źródło promieniowania β^- , umożliwiając radioterapię niejako „od wewnątrz” nowotworu z pominięciem tkanek zdrowych, w przeciwieństwie do działania klasycznej radioterapii. Uzyskamy w ten sposób wielofunkcyjne działanie nanocząstek wynikające zarówno z działania emitowanego przez radionuklid promieniowania jonizującego, jak też z możliwości terapeutycznego wykorzystania właściwości magnetycznych, wywołując lokalną hipertermię.

[Chemia, Ch i E J]

Ekstrakcja jonów $^{99}\text{TcO}_4^-$ z fazy wodnej do wybranej cieczy jonowej.

Maciej Chotkowski, Pracownia Elektrochemicznych Źródeł Energii, grupa badawcza: Radiochemia dla Medycyny i Przemysłu, e-mail: mchotk@chem.uw.edu.pl; tel: (22) 55 26 565

Celem badań jest wyznaczenie optymalnych parametrów procesu ekstrakcji jonów technecjanowych(VII) z roztworów kwasu azotowego(V) do fazy organicznej zawierającej wybraną ciecz jonową. Zagadnienie to wpisuje się we współczesne trendy poszukiwania selektywnych a przy tym bezpiecznych i stabilnych ekstrahentów umożliwiających separację poszczególnych składników wypalonego paliwa jądrowego. Technet jako jeden z głównych produktów rozszczepienia jąder uranu-235 jest swoistym wskaźnikiem wydajności rozdziału aktywności od produktów rozszczepienia w procesie ekstrakcji w układach ciecz-ciecz.

Praca może być realizowana na kierunku Energetyka i Chemia Jądrowa

Elektrochemia oraz spektroelektrochemia ^{99}Tc w roztworach zasadowych.

Maciej Chotkowski, Pracownia Elektrochemicznych Źródeł Energii, e-mail: mchotk@chem.uw.edu.pl, tel: (22)55 26 565

Celem badań jest określenie parametrów elektoredukcji jonów $^{99}\text{TcO}_4^-$ w środowisku silnie zasadowym. Długożyciowy technet-99 jako jeden z głównych produktów rozszczepienia jąder uranu-235 jest szczególnie ważny z punktu widzenia bezpieczeństwa składowania odpadów promieniotwórczych. W środowisku aerobowym silnie mobilne są jony technecjanowe(VII), w przeciwieństwie do jego zredukowanych form, np. TcO_2 . Część odpadów promieniotwórczych przechowywana jest w stanie ciekłym, w silnie zasadowych roztworach. Poznanie produktów reakcji redukcji jonów $^{99}\text{TcO}_4^-$ oraz ich trwałości związane jest z poszerzeniem wiedzy na temat chemii podstawowej tego pierwiastka.

Praca może być realizowana na kierunku Energetyka i Chemia Jądrowa oraz Chemia

Badania elektrochemii żelaza z wykorzystaniem ex-situ spektroskopii Mössbauera

Dr hab. Michał Grdeń, Radiochemia dla medycyny i przemysłu, Pracownia Elektrochemicznych Źródeł Energii, Zakład Chemii Fizycznej, mgrden@chem.uw.edu.pl, tel. 55 26564

Celem pracy jest zbadanie procesów elektrochemicznych przebiegających na powierzchni żelaza w środowisku elektrolitu wodnego o różnym składzie, w tym zawierającego substancje będące potencjalnymi inhibitorami korozji. Spektroskopia Mössbauera (ex-situ) posłuży do określenia składu produktów korozji na powierzchni elektrody, poza technikami elektrochemicznymi wykorzystane zostaną także mikroskop elektronowy (analiza morfologii powierzchni) oraz spektroskopia UV-vis (analiza rozpuszczalnych produktów korozji). Podjęta zostanie próba wykorzystania spektroskopii Mössbauera do oceny kinetyki tworzenia poszczególnych produktów korozji jak również ich stabilności w warunkach pomiaru ex-situ.

Energetyka i chemia jądrowa - wyłącznie, I stopień (praca licencjacka)

Wyznaczanie kinetycznych i rozpuszczalnikowych efektów izotopowych (SIE i KIE) w enzymatycznych reakcjach rozkładu halogenopochodnych L-feniloalaniny

Dr Katarzyna Pałka, Pracownia Elektrochemicznych Źródeł Energii, Grupa badawcza: Radiochemia dla Medycyny i Przemysłu, e-mail: kskowera@chem.uw.edu.pl

Celem projektu licencjackiego jest wyznaczenie liczbowych wartości kinetycznych i rozpuszczalnikowych efektów izotopowych (KIE i SIE) co pozwoli na prześledzenie wpływu podstawnika halogenowego na kinetykę reakcji katalizowanej przez enzym dehydrogenazę L-feniloalaninową (PheDH), w której uczestniczy L-feniloalanina. Parametry kinetyczne ($V_{\max}$ i K_M) zostaną wyznaczone spektrofotometrycznie oraz zoptymalizowane do równania Michaelisa-Menten za pomocą programu Enzfitter 1.05. Wyznaczenie wartości liczbowych KIE i SIE pozwoli na scharakteryzowanie powstających kompleksów aktywnych, określenie etapu decydującego o szybkości badanej reakcji oraz prześledzenie, które z wiązań tworzone bądź rozrywane jest na tym etapie.

Tematy realizowane na kierunkach: Chemia oraz Energetyka i Chemia Jądrowa

Zastosowanie mioblastów oraz mezenchymalnych komórek macierzystych w regeneracji mięśnia sercowego – badania izotopowe

Dr hab. Zbigniew Rogulski, Radiochemia dla medycyny i przemysłu, Pracownia Elektrochemicznych Źródeł Energii, Zakład Chemii Fizycznej, rogul@chem.uw.edu.pl, tel. 55 26517

Energetyka i chemia jądrowa, I stopień (praca licencjacka)

Biotransformacje halogenopochodnych L-feniloalaniny znakowanych izotopami wodoru

Dr Katarzyna Pałka, Pracownia Elektrochemicznych Źródeł Energii, Grupa badawcza: Radiochemia dla Medycyny i Przemysłu, e-mail: kskowera@chem.uw.edu.pl

W ostatnim czasie wzrosło zainteresowanie badaniami nad syntezą oraz wykorzystaniem w medycynie halogenopochodnych aminokwasów aromatycznych. Halogenopochodne L-feniloalaniny znakowane fluorem ^{18}F oraz bromem ^{76}Br wykorzystywane są w medycynie nuklearnej do diagnozowania oraz leczenia chorób nowotworowych. Celem projektu licencjackiego jest synteza F-, Cl-, Br L-feniloalaniny znakowanych w łańcuchu bocznym izotopami wodoru. Związki te zostaną otrzymane w wyniku enzymatycznej syntezy. Substratem wykorzystanym w tej reakcji będzie odpowiednia halogenopochodna kwasu (E)-cynamonowego. Deuter i trytem pochodzi ze środowiska reakcji (D_2O lub HTO).

Tematy realizowane na kierunkach: Chemia oraz Energetyka i Chemia Jądrowa

Biotransformacje halogeno- i metylo pochodnych L-tryptofanu znakowanych izotopami wodoru

Dr Elżbieta Winnicka, Pracownia Elektrochemicznych Źródeł Energii, Grupa badawcza: Radiochemia dla Medycyny i Przemysłu, e-mail: eboroda@chem.uw.edu.pl, tel. (22) 55 26 752

W ostatnim czasie wzrosło zainteresowanie badaniami nad syntezą oraz wykorzystaniem w medycynie halogeno- oraz metylo pochodnych aminokwasów aromatycznych. 1-Metylo-L-tryptofan jest inhibitorem 2,3-dioksygenazy indolaminy - enzymu, którego podwyższona aktywność obserwowana jest w ludzkich nowotworach złośliwych. Natomiast halogenopochodne L-tryptofanu znakowane fluorem ^{18}F oraz jodem ^{131}I wykorzystywane są w medycynie nuklearnej do diagnozowania oraz leczenia chorób nowotworowych. Celem projektu licencjackiego jest synteza F-, Cl-, Br-, I- i metylo pochodnych L-tryptofanu znakowanych w łańcuchu bocznym izotopami wodoru. Związki te zostaną otrzymane w wyniku enzymatycznej syntezy. Substratami wykorzystanymi w tej reakcji będą S-metylo -L-cysteina i odpowiednia halogeno- i metylo pochodna indolu. Deuter i trytem pochodzi ze środowiska reakcji (D_2O lub HTO).

Tematy realizowane na kierunkach: Chemia oraz Energetyka i Chemia Jądrowa

Wyznaczanie kinetycznych i rozpuszczalnikowych efektów izotopowych (SIE i KIE) w enzymatycznej reakcji rozkładu halogeno- i metylopo pochodnych L-tryptofanu

Dr Elżbieta Winnicka, Pracownia Elektrochemicznych Źródeł Energii, Grupa badawcza: Radiochemia dla Medycyny i Przemysłu, e-mail: eboroda@chem.uw.edu.pl, tel. (22) 55 26 752

Celem projektu licencyjnego jest wyznaczenie liczbowych wartości kinetycznych i rozpuszczalnikowych efektów izotopowych (KIE i SIE) co pozwoli na prześledzenie wpływu podstawnika halogenowego bądź metylowego na kinetykę reakcji katalizowanej przez enzym tryptofanazę (EC 4.1.99.1), w której uczestniczy L-tryptofan. Parametry kinetyczne (V_{max} i K_M) zostaną wyznaczone spektrofotometrycznie oraz zoptymalizowane do równania Michaelisa-Menten za pomocą programu Enzifitter 1.05. Wyznaczenie wartości liczbowych KIE i SIE pozwoli na scharakteryzowanie powstających kompleksów aktywnych, określenie etapu decydującego o szybkości badanej reakcji oraz prześledzenie, które z wiązań tworzone bądź rozrywane jest na tym etapie.

Tematy realizowane na kierunkach: Chemia oraz Energetyka i Chemia Jądrowa

Luminescencyjne cząstki polimerowe do zastosowań w fotodynamicznej terapii przeciwnowotworowej

prof. dr hab. Agata Michalska-Maksymiuk, agatam@chem.uw.edu.pl, tel. 26-331;
<http://beta.chem.uw.edu.pl/people/AMichalska/>

dr hab. Maciej Mazur, prof. UW, Pracownia Elektrochemii, mmazur@chem.uw.edu.pl, tel. 26-418; <http://beta.chem.uw.edu.pl/people/MMazur/>

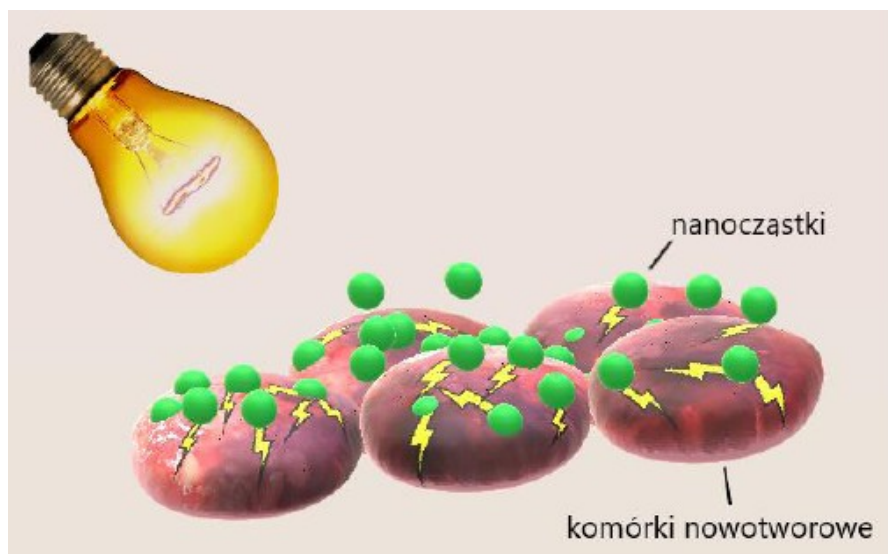
Celem pracy licencjackiej jest otrzymanie nanocząstek z polimeru o właściwościach fotoluminescencyjnych, które mogłyby znaleźć zastosowanie w leczeniu chorób nowotworowych.

W założeniu, nanocząstki takie podane do organizmu, emitując światło (po absorpcji promieniowania elektromagnetycznego) niszczyłyby komórki nowotworowe.

Nanocząstki otrzymywane byłyby metodą polimeryzacji utleniającej z odpowiedniego monomeru organicznego lub przez nanostrącanie gotowego polimeru. Następnie poddane byłyby wszechstronnej charakteryzacji z wykorzystaniem szerokiego spektrum metod doświadczalnych, takich jak metody mikroskopowe (SEM, TEM, AFM), spektroskopowe (FTIR, Raman, XPS, fluorescencja i absorpcja w zakresie UV-VIS), elektrochemiczne (potencjał zeta, woltamperometria cykliczna) i termiczne (termograwimetria).

Właściwości otrzymanych nanocząstek badane byłyby w warunkach *in vitro* na wybranych hodowlach komórek nowotworowych i prawidłowych. Pomiary przeżywalności komórek prowadzone byłyby w warunkach oświetlania promieniowaniem monochromatycznym o odpowiedniej długości fali z zakresu światła widzialnego lub bliskiej podczerwieni.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa



Preparatyka próbek farb do oceny autentyczności dzieł malarskich na płótnie na podstawie pomiarów ramanowskich

dr hab. Maciej Mazur, prof. UW, Pracownia Elektrochemii, mmazur@chem.uw.edu.pl, tel. 26-418; <http://beta.chem.uw.edu.pl/people/MMazur/>

dr hab. Barbara Wagner, Pracownia Teoretycznych Podstaw Chemii Analitycznej, barbog@chem.uw.edu.pl; <http://beta.chem.uw.edu.pl/people/BWagner/>

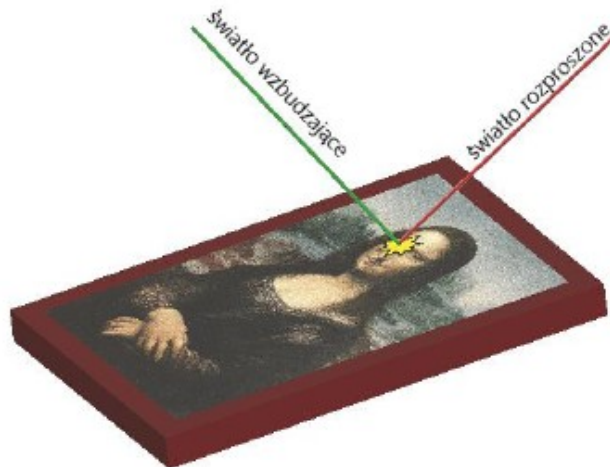
Wykorzystanie metod instrumentalnych w analizie obiektów zabytkowych pozwala szczególnie poznać skład chemiczny i budowę strukturalną badanych obiektów, jednakże często wymaga rozwinięcia odpowiednich procedur przygotowania próbek.

Celem pracy licencjackiej będzie opracowanie preparatyki próbek farb pobranych z wybranych historycznych dzieł malarskich na płótnie, które następnie poddane byłyby pomiarom ramanowskim. Spektroskopia Ramana jest niezwykle wydajną metodą umożliwiającą identyfikację barwników wykorzystywanych w farbách, co ma znaczenie przy ocenie autentyczności dzieł malarskich. Pomiary przysparzają jednak zazwyczaj trudności związane z wysokim tłem fluorescencyjnym, które całkowicie może zdominować pasma oscylacyjne. Tło związane jest z obecnością składników organicznych, dlatego przygotowanie próbek będzie polegało na kontrolowanym usuwaniu związków organicznych poprzez trawienie plazmą tlenową.

Przeprowadzonych zostanie szereg prób trawienia farb współczesnych jak i historycznych tak, aby uzyskiwane widma charakteryzowały się wysokim stosunkiem sygnału do szumu.

Opracowana metodologia zostanie przetestowana na przykładzie mikroprobek pobranych z obrazów z Muzeum Narodowego w Warszawie.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa



Czujnik do wykrywania białka w moczu w warunkach domowych

dr hab. Maciej Mazur, prof. UW, Pracownia Elektrochemii, mmazur@chem.uw.edu.pl, tel. 26-418; <http://beta.chem.uw.edu.pl/people/MMazur/>

Celem pracy licencjackiej będzie skonstruowanie i przetestowanie czułego i precyzyjnego czujnika do wykrywania białka w moczu w warunkach domowych. Urządzenie to przeznaczone jest dla osób monitorujących poziom białkomoczu w przebiegu chorób nerek, np. zespołu nerczycowego.

Oznaczanie białka odbywać się będzie metodą optyczną po dodaniu do próbki odpowiedniego odczynnika chemicznego wywołującego ilościowe wytrącanie białka. Skonstruowane urządzenie będzie współpracowało ze smartfonem: źródłem światła będzie lampa błyskowa (dioda), a detektorem matryca aparatu fotograficznego.

W ramach realizacji pracy licencjackiej skonstruowane zostanie prototypowe urządzenie kompatybilne z wybranym typem telefonu komórkowego oraz przygotowana odpowiednia aplikacja na system Android, iOS lub inny. Elementy konstrukcyjne urządzenia przygotowane zostaną w warsztacie mechanicznym Wydziału Chemii lub wydrukowane na drukarce 3D.

Czujnik testowany będzie na standardach albumin oraz próbkach biologicznych uzyskanych ze Szpitala Pediatrycznego w Warszawie.

Pomocniczo w badaniach wykorzystywane będą techniki optyczne (absorpcja UV-VIS, rozpraszanie światła, pomiar potencjału zeta) oraz mikroskopowe (mikroskopia optyczna, mikroskopia elektronowa).

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa



Oceaniczna równowaga węglanowa: teoria i praktyka

dr hab. Maciej Mazur, prof. UW, Pracownia Elektrochemii, mmazur@chem.uw.edu.pl, tel. 26-418; <http://beta.chem.uw.edu.pl/people/MMazur/>

prof. dr hab. Jarosław Stolarski, Instytut Paleobiologii, stolacy@twarda.pan.pl;
http://biominerals.paleo.pan.pl/pl/pracownicy/stolarski/jaroslaw_stolarski.html

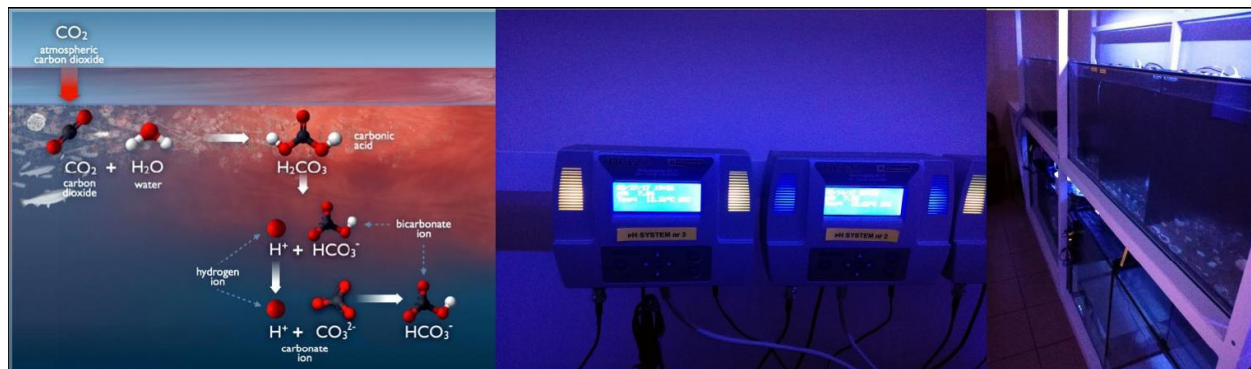
Uwagę mediów, ale i naukowców na całym świecie przyciągają zmiany klimatyczne na naszej planecie. Na tym tle narosło wiele mitów, ale obiektywne dane pomiarowe pokazują, że zawartość dwutlenku węgla w atmosferze nieustannie wzrasta. Ma to przełożenie na stan równowagi węglanowej w wodach oceanicznych. Obecnie, pH wód morskich spada, co powoduje, że struktury zbudowane z węglanu wapnia (np. szkielety morskich organizmów) zaczynają się rozpuszczać. Zjawisko takie obserwowano u kokolitowców, otwornic czy niektórych mięczaków. Stan taki grozi katastrofą ekologiczną.

Celem proponowanej pracy jest zarówno część teoretyczna - przegląd prac omawiających różne aspekty modeli równowagi węglanowej, jak i praktyczne doświadczenia związane z

pomiarami alkaliczności w doświadczalnych akwariach morskich. W akwariach tych, dostępnych w Instytucie Paleobiologii PAN (współpraca z prof. Jarosławem Stolarskim), komputerowo monitorowane jest pH przez uwalnianie CO₂, natomiast słabo poznane jest to, jak kształtuje się równowaga węglanowa w połączonych ze sobą zbiornikach.

Głównie z uwagi na część praktyczną (rzeczywiste pomiary m.in. alkaliczności) praca ma dużą wartość poznawczą oraz potencjał aplikacyjny.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa



Inkorporacja melatoniny znakowanej fluoresceiną w biodegradowalnych cząstkach polimerowych

dr hab. Maciej Mazur, prof. UW, Pracownia Elektrochemii, mmazur@chem.uw.edu.pl, tel. 26-418; <http://beta.chem.uw.edu.pl/people/MMazur/>

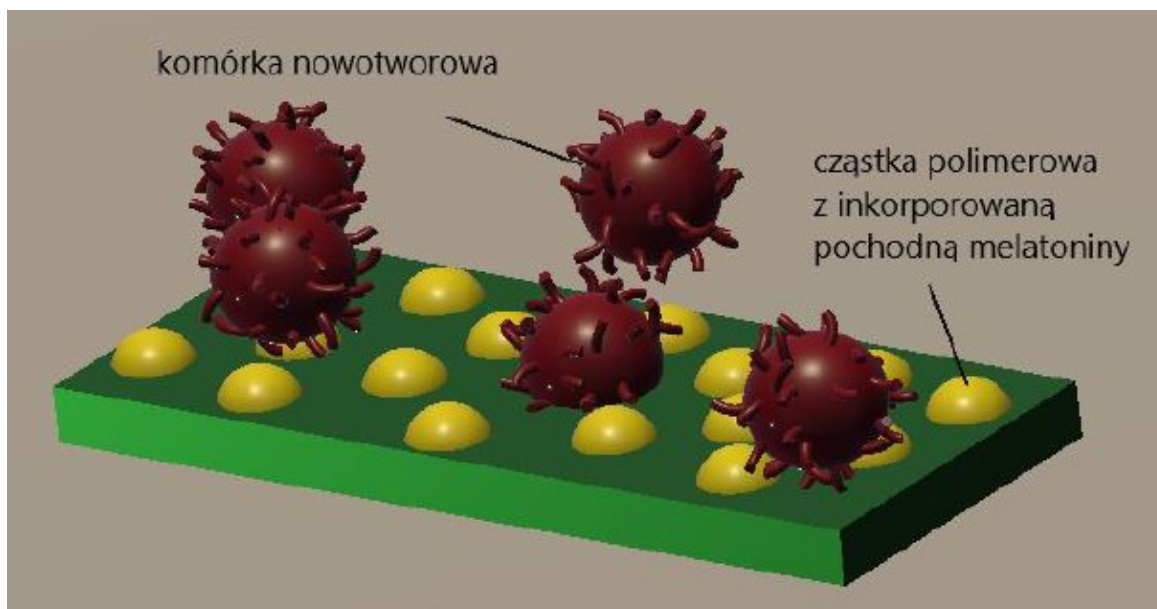
dr Zuzanna Mołęda, Pracownia Chemii Związków Naturalnych, moleda@chem.uw.edu.pl, tel. 26 269; <http://www.pchzn.chem.uw.edu.pl/pl/dr-zuzanna-moleda/#prettyPhoto>

Celem pracy licencjackiej jest otrzymanie pochodnej melatoniny znakowanej fluoresceiną, a następnie jej inkorporacja w cząstkach z biodegradowalnego polimeru (polikaprolaktonu). Otrzymane struktury stanowią będą układ modelowy systemu dostarczania leków.

Pochodna melatoniny otrzymana zostanie poprzez przyłączenie barwnika fluorescencyjnego w wyniku reakcji typu "click". Następnie zsyntezowany związek będzie inkorporowany w cząstkach polimerowych osadzonych na stałym podłożu. W tym celu na powierzchni szklanej płytki wytwarzana będzie cienka warstwa polimeru z wykorzystaniem metody spin-coating. Warstwa ta będzie topiona w kontakcie z fazą wodną, co prowadzić będzie do wytworzenia matrycy cząstek polimerowych na powierzchni podłoża szklanego. Inkorporacja pochodnej melatoniny prowadzona będzie na drodze dyfuzji z fazy ciekłej w wyniku topienia cząstek polimerowych.

Otrzymane struktury polimerowe badane będą technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi. Przeprowadzone zostaną również badania adhezji i przeżywalności komórek nowotworowych na podłożu pokrytym cząstkami polimerowymi z inkorporowanym związkiem.

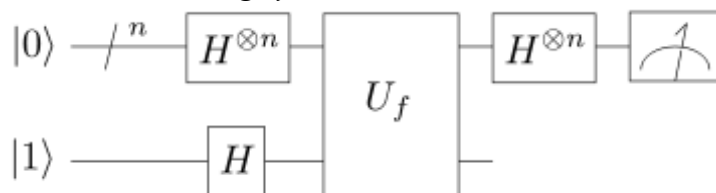
Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa



Zastosowanie spektroskopii MRJ do implementacji algorytmu Deutscha-Jozsy

dr Piotr Garbacz, Pracownia Spektroskopii Magnetycznego Rezonansu Jądrowego,
pgarbacz@chem.uw.edu.pl, tel. 26-346

Celem projektu jest budowa modelu **komputera kwantowego** składającego się z dwóch kubitów pozwalającego na rozwiązanie zagadnienia, którego nie można rozwiązać za pomocą komputera klasycznego. Przykładem takiego zagadnienia jest problem Deutscha-Jozsy, który zostanie rozwiązany z użyciem magnetycznego rezonansu jądrowego węgla i protonu w cząsteczce $^{13}\text{CHCl}_3$. Więcej o tematyce projektu można znaleźć w artykule "Quantum Computing with Molecules", który jest dostępny pod adresem: <http://cba.mit.edu/docs/papers/98.06.sciqc.pdf> *Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka Jądrowa*

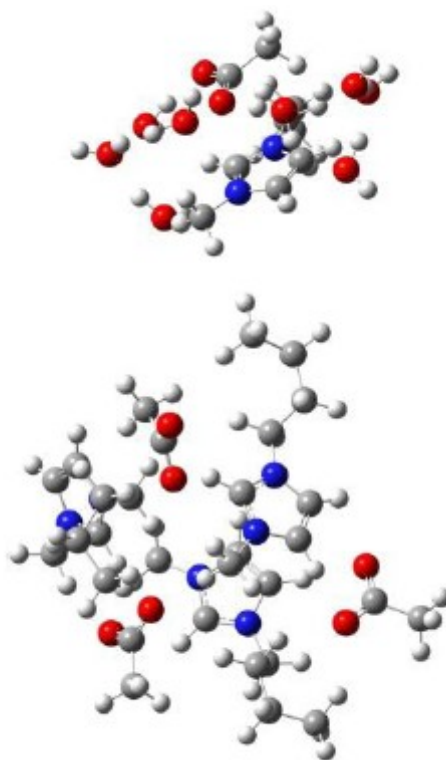
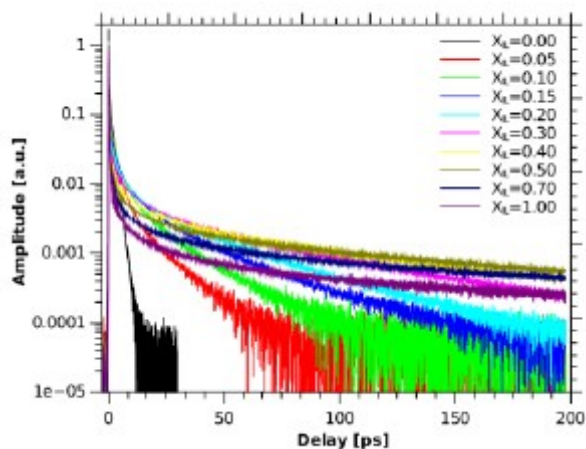


Struktura i dynamika cieczy jonowych i ich mieszanin z rozpuszczalnikami organicznymi

dr Kamil Polok, grupa badawcza InFemto, Pracownia Oddziaływań Międzymolekularnych, polok@chem.uw.edu.pl, +48 (22) 55 26 777; femto.chem.uw.edu.pl

Poszukuję ambitnego i samodzielnego studenta do udziału w projekcie, w ramach którego badana jest dynamika i struktura cieczy jonowych i ich mieszanin z rozpuszczalnikami organicznymi. Celem tych badań jest zrozumienie wpływu różnych rozpuszczalników na lokalną strukturę, a w efekcie również na właściwości badanej cieczy. Praca może mieć charakter doświadczalny i/lub teoretyczny. Część teoretyczna polega na prowadzeniu symulacji dynamiki molekularnej i analizie generowanych przez nią wyników (wymagana jest umiejętność programowania lub chęć jej nabycia). W części doświadczalnej zadaniem studenta będzie rejestracja sygnału optycznego efektu Kerra dla przygotowanych próbek, a następnie obróbka i analiza otrzymanych wyników. Projekt będzie wykonywany we współpracy z grupą prof. Abdenacerem Idrissi z Uniwersytetu w Lille, gdzie będą wykonywane pomiary IR, Ramana oraz NMR, a także część symulacji i obliczenia kwantowo-mechaniczne.

Chemia, Inżynieria nanostruktur, Zaawansowane Metody Instrumentalne i Techniki Pomiarowe, Energetyka i Chemia Jądrowa

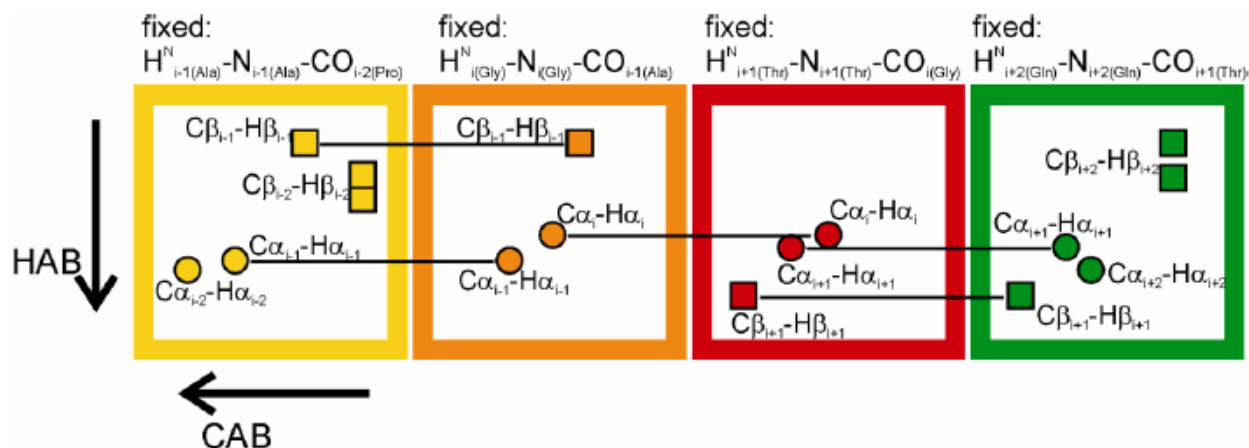


Przypisywanie sygnałów w widmach NMR białek niezwinionych metodami wysokiej wymiarowości

Anna Zawadzka-Kazimierczuk, Pracownia Oddziaływań Międzymolekularnych, grupa Nowe Metody Spektroskopii NMR w Badaniach Strukturalnych Biomolekuł, anzaw@chem.uw.edu.pl, tel. (22) 55-26-585; <http://nmr.cent3.uw.edu.pl>

Białka natywnie nieustrukturyzowane są ważnym i interesującym obiektem badań. Będąc bardziej rozpowszechnionymi w przyrodzie, niż jeszcze niedawno się wydawało, a jednocześnie grając ważną rolę w wielu procesach fizjologicznych, zyskują coraz większą popularność. Przyczynia się do tego również ich związek z wieloma nowotworami i chorobami neurodegeneracyjnymi. Spektroskopia NMR jest najlepszym narzędziem do badania tych białek, a pierwszym etapem niemal każdego badania NMR jest przypisanie sygnałów widmowych. W ramach wykonywania pracy, student pozna specyfikę białek niezwinionych i problemy występujące podczas przypisywania ich sygnałów w widmach NMR, zapozna się z wysokowymiarowymi eksperymentami opracowanymi w naszym laboratorium (i wykorzystywanymi obecnie w kilku laboratoriach w Europie) oraz samodzielnie przypisze sygnały konkretnego białka niezwinionego, wykorzystując te metody.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa



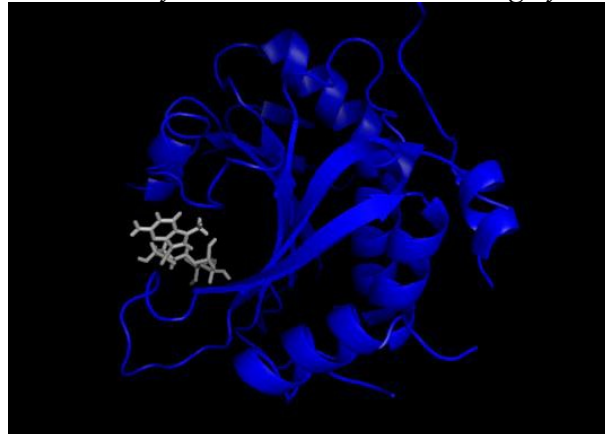
Badanie oddziaływań białko-ligand metodami spektroskopii NMR

Anna Zawadzka-Kazimierczuk, Pracownia Oddziaływań Międzymolekularnych, grupa Nowe Metody Spektroskopii NMR w Badaniach Strukturalnych Biomolekuł, anzaw@chem.uw.edu.pl, tel. (22) 55-26-585; <http://nmr.cent3.uw.edu.pl>

Badanie oddziaływań białko-ligand odgrywa kluczową rolę w opracowywaniu nowych leków. Coraz częściej wykorzystuje się do tego technikę *fragment-based drug design*, w której znajduje się najpierw małe cząsteczki stosunkowo słabo wiążące się z badanym białkiem, by następnie połączyć je kowalencyjnie w większą cząsteczkę wykazującą dużo silniejsze oddziaływanie z białkiem. W poszukiwaniach owych małych cząsteczek powszechnie (w firmach farmaceutycznych) wykorzystuje się spektroskopię NMR, dającą możliwość szybkiego *screeningu* dużej liczby ligandów. W ramach pracy, student pozna techniki NMR pozwalające

badać oddziaływanie białko-ligand oraz zbada oddziaływanie kilku ligandów z badanym w naszej grupie białkiem.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa

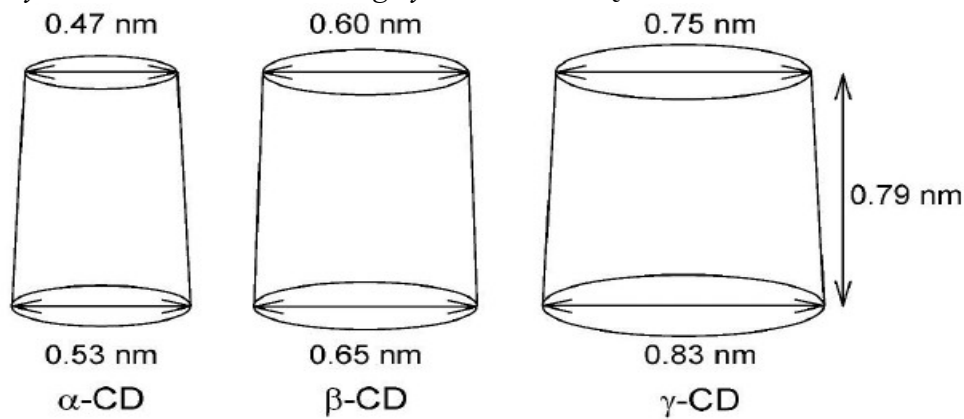


Oddziaływanie chininy z cyklodekstrynami

Dr. Michał Nowakowski, Nowe metody spektroskopii NMR w badaniach strukturalnych biomolekuł, lyam@chem.uw.edu.pl, 225543666; <http://nmr.cent3.uw.edu.pl/>

Kompleksy typu gość gospodarz stanowią bardzo ważną dziedzinę współczesnej chemii koordynacyjnej. Szczególnie istotną rolę odgrywają kompleksy pomiędzy naturalnie występującymi w przyrodzie cyklodekstrynami, a różnego rodzaju słabo rozpuszczalnymi w wodzie cząsteczkami organicznymi – tego typu badania znajdują praktyczne zastosowania zarówno w przemyśle, technologii żywienia jak i medycynie. W ramach zaproponowanego projektu student będzie miał możliwość zapoznania się z obsługą nowoczesnych spektrometrów NMR, technikami służącymi przypisywaniu sygnałów w widmach NMR związków organicznych, jak również z analizą zmian indukowanych w widmach NMR na skutek zmiany stężenia jednego ze składników w kompleksach gość gospodarz.. Ostatecznym celem projektu jest wyznaczenia parametrów termodynamicznych reakcji kompleksowania chininy przez cząsteczki naturalnie występujących cyklodekstryn i ocena wpływu wielkości wnęki w cyklodekstrynie na parametry reakcji kompleksowania.

Chemia , Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa.



Zastosowanie rzadkiego próbkowania w homojądrowych widmach 3D NMR

Dr Michał Nowakowski, Nowe metody spektroskopii NMR w badaniach strukturalnych biomolekuł, lyam@chem.uw.edu.pl, 225543666; <http://nmr.cent3.uw.edu.pl/>

Postępy w dziedzinie pomiaru i przetwarzania widm NMR dokonane w ostatnich latach umożliwiają praktycznie rutynowe pomiary widm cztero i więcej wymiarowych z zastosowaniem rzadkiego próbkowania. Niezwykle ciekawe wydaje się zastosowanie tego typu technik rejestracji widm w trójwymiarowych widmach homojądrowych. Umożliwi to precyzyjniejszą analizę widm nieznakowanych cząsteczek. W ramach zaproponowanego projektu student będzie miał możliwość zapoznania się z obsługą nowoczesnych spektrometrów NMR oraz projektowaniem dla nich sekwencji pomiarowych. Ostatecznym celem projektu jest wykonanie i analiza homojądrowych widm 3D NMR takich jak 3D TocsyNoesy lub 3D Noesy-Noesy, jak również wykorzystanie informacji z nich uzyskanych w przypisywaniu sygnałów w widmach NMR i obliczaniu struktur przestrzennych peptydów.

Chemia , Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa.



Ultraszybka dynamika anizotropowych nanocząstek złota wywołana impulsem femtosekundowym

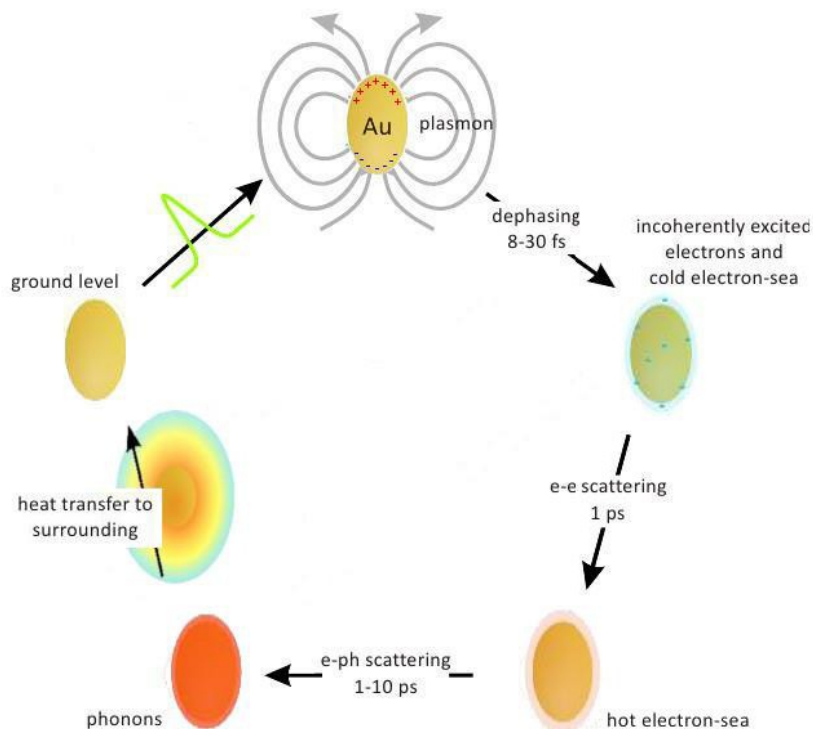
dr Kamil Polok, grupa badawcza InFemto, Pracownia Oddziaływań Międzymolekularnych, polok@chem.uw.edu.pl, +48 (22) 55 26 777; femto.chem.uw.edu.pl

Poszukuję ambitnego i samodzielnego studenta (lub pary studentów) do udziału w projekcie dot. femtosekundowej dynamiki w nanocząstkach wzbudzonych 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 będą już znane 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.

Chemia, Inżynieria nanostruktur, Zaawansowane Metody Instrumentalne i Techniki Pomiarowe, Energetyka i Chemia Jądrowa



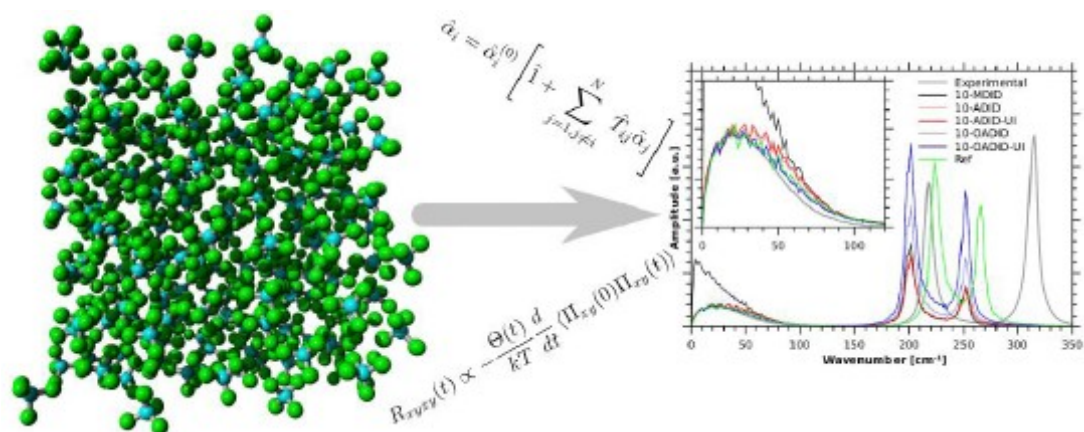
Badanie ultraszybkiej dynamiki prostych cząsteczek wywołanej impulsem laserowym – symulacje vs. eksperyment

dr Kamil Polok, grupa badawcza InFemto, Pracownia Oddziaływań Międzymolekularnych, polok@chem.uw.edu.pl, +48 (22) 55 26 777; femto.chem.uw.edu.pl

Poszukuję ambitnego i samodzielnego studenta do udziału w projekcie, w ramach którego badane są różne podejścia do modelowania sygnału optycznego efektu Kerra w oparciu o symulacje dynamiki molekularnej. Femtosekundowy optyczny efekt Kerra jest techniką pozwalającą na badanie ultraszybkiej dynamiki cząsteczek w cieczy, która to jest związana z oddziaływaniami międzycząsteczkowymi. Z tego też powodu modelowanie sygnału kerrowskiego może być pomocne w testowaniu jakości modeli potencjału stosowanych w symulacjach dynamiki molekularnej. Metody wyznaczania odpowiedzi ośrodka pobudzonego impulsem laserowym zawierają różne uproszczenia, które mogą wpływać na otrzymany wynik, dlatego też ważne jest porównanie wyników uzyskanych przy pomocy różnych podejść i dla

różnego rodzaju cząsteczek. Zadaniem studenta będzie przeprowadzenie symulacji dynamiki molekularnej dla wybranych cząsteczek i modeli potencjału, a następnie wykorzystanie rozwijanego przeze mnie oprogramowania do wyznaczenia sygnału kerrowskiego. Symulacje będą prowadzone na kartach graficznych z wykorzystaniem superkomputera Prometeusz. Otrzymane wyniki trzeba będzie skonfrontować z rzeczywistymi sygnałami uzyskanymi w laboratorium laserowym.

Chemia, Inżynieria nanostruktur, Zaawansowane Metody Instrumentalne i Techniki Pomiarowe, Energetyka i Chemia Jądrowa

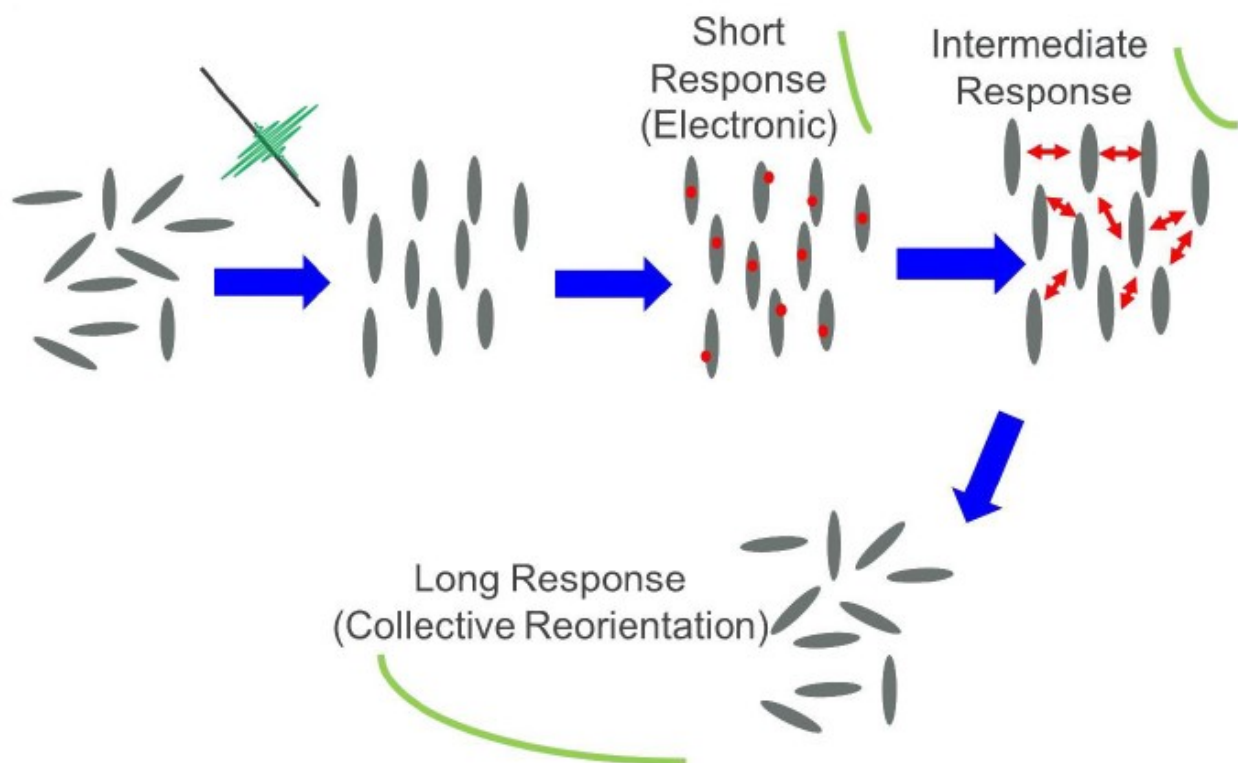


Badanie dynamiki orientacyjnej prostych cząsteczek poprzez symulacje dynamiki molekularnej oraz pomiary elektro-optycznego i femtosekundowego optyczno-optycznego efektu Kerra

dr Kamil Polok, grupa badawcza InFemto, Pracownia Oddziaływań Międzymolekularnych, polok@chem.uw.edu.pl, +48 (22) 55 26 777; femto.chem.uw.edu.pl

Poszukuję ambitnego i samodzielnego studenta do realizacji projektu, w ramach którego badana będzie dynamika orientacyjna prostych cząsteczek o wysokiej symetrii, jak np. chloroform, czterochloroetylen. 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.

Chemia, Inżynieria nanostruktur, Zaawansowane Metody Instrumentalne i Techniki Pomiarowe, Energetyka i Chemia Jądrowa

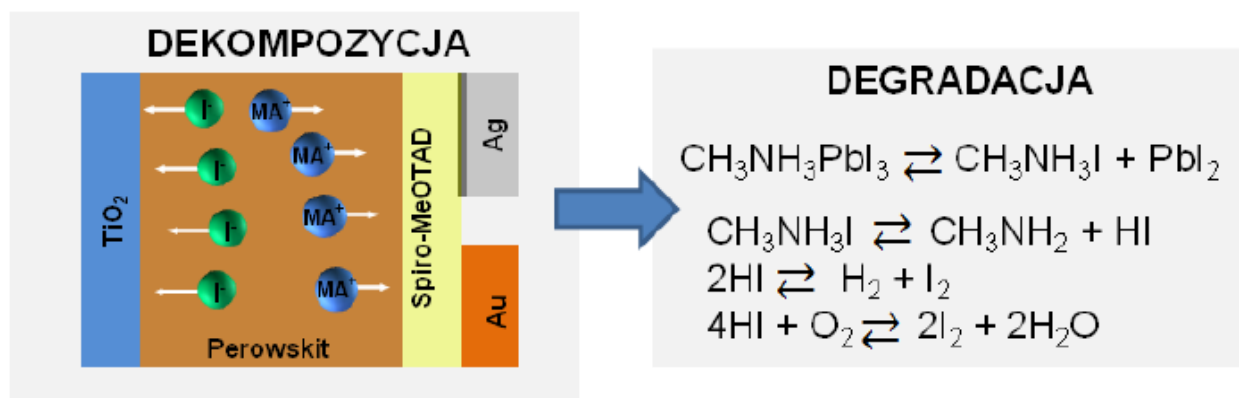


Wpływ elektrod metalicznych na procesy degradacji cienkich warstw organiczno-nieorganicznych trihalogenków ołowiu o strukturze perowskitu.

dr Piotr Piątkowski, grupa badawcza InFemto, Pracownia Oddziaływań Międzymolekularnych, piątek@chem.uw.edu.pl, +48 (22) 55 26 777; femto.chem.uw.edu.pl

Celem projektu będzie przebadanie wpływu elektrod metalicznych (Au i Ag) na procesy dekompozycji, degradacji oraz związane z nimi procesy tworzenia się stanów pułpkowych w ogniwach słonecznych opartych na hybrydowych organiczno-nieorganicznych trihalogenkach ołowiu o strukturze perowskitu (PSCs). Badania PSCs opartych o jodek-chlorek metyloamoniowo-ołowiowy ($\text{MAPbI}_{3-x}\text{Cl}_x$, $x = 0-3$) oraz jodek-chlorek formamidyniowo-ołowiowy ($\text{FAPbI}_{3-x}\text{Cl}_x$, $x = 0-3$) zostaną przeprowadzone za pomocą stacjonarnych i czasowo rozdzielczych technik spektroskopowych, takich jak: stacjonarna spektroskopia absorpcyjna, emisyjna i ramanowska, oraz czasowo-rozdzielcza spektroskopia absorpcji przejściowej.

Chemia, Inżynieria nanostruktur, Zaawansowane Metody Instrumentalne i Techniki Pomiarowe, Energetyka i Chemia Jądrowa



Badanie szybkości ultradźwięków w dwuskładnikowych roztworach zawierających ciecze jonowe nowej generacji.

Kierownik tematu pracy dyplomowej: dr Anna Makowska, Pracownia Radiochemii i Chemii Atmosfery, milew@chem.uw.edu.pl, tel. wew. 26753

Ośrodek, przez który przechodzi fala ultradźwiękowa może być charakteryzowany za pomocą wartości szybkości rozchodzenia ultradźwięków. Gdy długości fal ultradźwiękowych jest porównywalna z rozmiarami molekuł ośrodka, stają się one przydatne do opisu jego struktury. Z danych szybkości rozchodzenia fal ultradźwiękowych i gęstości roztworu można wyznaczyć współczynniki ściśliwości, których analiza dostarcza informacji o strukturze mieszaniny substancji.

Tworzenie asocjacji w roztworze powoduje wzrost ściśliwości. Gdy nie zachodzą żadne zmiany ściśliwość adiabatyczna powinna być addytywna, jednak w rzeczywistości ze względu na oddziaływania międzycząsteczkowe między składnikami, ściśliwości wykazują odchylenia od addytywności. Szczególnie interesujące rezultaty można uzyskać prowadząc badania dla nowych grup związków jakimi są ciecze jonowe.

Badanie szybkości rozchodzenia się ultradźwięków, gęstości oraz w efekcie analiza odchylenia od addytywności ściśliwości dla mieszanin binarnych ciecz jonowa/rozpuszczalnik będzie celem projektu licencjackiego.

Temat może być realizowany na kierunku: Chemia i Energetyka Jądrowa i Chemia oraz Chemia

Efekt izotopowy mieszalności w układach dioli z cieczami jonowymi

Kierownik tematu pracy dyplomowej: dr Anna Makowska, Pracownia Radiochemii i Chemii Atmosfery, milew@chem.uw.edu.pl, tel. wew. 26753

Celem pracy będzie przeprowadzenie badań mieszalności dla układów składających się z dwóch cieczy, które w pewnym zakresie temperatur mieszają się ze sobą w ograniczonym zakresie. Zależności temperatury przejścia fazowego od składu mieszaniny opisywana jest za pomocą diagramów fazowych o charakterystycznych parametrach krytycznych.

Prowadzone badania udowodniły, że ciecze jonowe mogą być medium wielu syntez. Wybór odpowiedniej cieczy wymaga poznania jej właściwości, między innymi mieszalności z często stosowanymi substancjami chemicznymi. Alkohole wielowodorotlenowe stosowane są często w przemyśle farmaceutycznym. Wyznaczenie diagramów fazowych mieszalności szczególnej grupy alkoholi wielowodorotlenowych jakimi są diole oraz zastosowanie metody efektów izotopowych jako pożytecznego narzędzia w badaniu oddziaływań międzycząsteczkowych, pozwala poznać bliżej rodzaje oddziaływań pomiędzy składnikami mieszanin zawierających ciecze jonowe.

Temat może być realizowany na kierunku: Chemia i Energetyka Jądrowa i Chemia oraz Chemia

ZAKŁAD CHEMII TEORETYCZNEJ I STRUKTURALNEJ

Badania strukturalne pochodnych indolu przy użyciu dyfrakcji rentgenowskiej.

dr Maura Malińska, Pracownia Krystalochemii, mmalinska@chem.uw.edu.pl, 26356; crystal.chem.uw.edu.pl

Indol, jak i jego pochodne są powszechnie spotykane w tkankach żywych, są częścią istotnych związków chemicznych jak tryptofan i serotonina oraz wielu związków biologicznie czynnych. Celem pracy będzie wyznaczenie struktur krystalicznych pochodnych indolu i określenie efektu podstawnikowego na występujące motywy oddziaływań w sieci.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa

Badania strukturalne pochodnych pirokatechiny przy użyciu dyfrakcji rentgenowskiej.

dr Maura Malińska, Pracownia Krystalochemii, mmalinska@chem.uw.edu.pl, 26356; crystal.chem.uw.edu.pl

Pirokatechina jest istotnym związkiem, ze względu na występowanie tej struktury w wielu lekach. Celem pracy będzie wyznaczenie struktur krystalicznych pochodnych pirokatechiny i określenie efektu podstawnikowego na występujące motywy oddziaływań w sieci.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa

Badania wpływu warunków krystalizacji na morfologię monokryształów pochodnych indolu.

dr Maura Malińska, Pracownia Krystalochemii, mmalinska@chem.uw.edu.pl, 26356; crystal.chem.uw.edu.pl

Kontrolowanie morfologii kryształów ma kluczowe znaczenie przy projektowaniu nowych materiałów z myślą o konkretnych funkcjach. Ze względu na to istotne jest kontrola morfologii otrzymywanych kryształów w tym szczególnie związków aktywnych. Celem pracy będzie przeprowadzanie krystalizacji indolu z rozpuszczalnikami o zmiennej polarności oraz zbadanie zmian morfologicznych kryształów

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa

Profilowanie termodynamiczne stosując symulacje dynamiki molekularnej dla układów gość-gospodarz.

dr Maura Malińska, Pracownia Krystalochemii, mmalinska@chem.uw.edu.pl, 26356; crystal.chem.uw.edu.pl

Jedyna metoda teoretyczna, która umożliwia wyznaczenie efektu entalpowego i entropowego wiązania międzycząsteczkowego są symulacje dynamiki molekularnej. Celem pracy będzie przeprowadzenie serii 1ms symulacji dla układu gość-gospodarz: kukurbit[6]uryl-piperazyna przy użyciu metody „Amber Wyciągnij-Uwolnij” i wyznaczenie profilu termodynamicznego rozpoznania cząsteczkowego.

Badania strukturalne układów gość-gospodarz na przykładzie kukurbit[6]urylu.

dr Maura Malińska, Pracownia Krystalochemii, mmalinska@chem.uw.edu.pl, 26356; crystal.chem.uw.edu.pl

Po otrzymaniu serii kompleksów gość-gospodarz zostaną one scharakteryzowane ze względu na zmiany entalpii i entropii podczas procesu kompleksowania przy użyciu izotermicznej kalorymetrii miareczkowej oraz badania strukturalne wraz z analizą oddziaływań odpowiedzialnych za ich tworzenie (pomiar rentgenograficzny). Charakterystyka oddziaływań będzie wzbogacona o analizę energii z obliczeń ab-initio. Badania kalorymetrii miareczkowej zostaną zanalizowane w świetle wyników badań strukturalnych dla określenia korelacji między entalpią i energią oddziaływań.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa

Zależność pomiędzy strukturą i morfologią kryształów odmian polimorficznych tlenku trifenylofosfiny.

dr Maura Malińska, Pracownia Krystalochemii, mmalinska@chem.uw.edu.pl, 26356; crystal.chem.uw.edu.pl

Tlenek trifenylofosfiny występuje w czterech odmianach polimorficznych, które otrzymywane są w zależności od polarności rozpuszczalnika użytego do krystalizacji. Odmiany polimorficzne ponadto charakteryzują się różną barwą i morfologią kryształu. Celem badań będzie scharakteryzowanie wpływu polarności rozpuszczalnika na morfologię i otrzymane odmiany polimorficzne badanego związku.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa

Struktura i właściwości kryształów produkowanych przez rośliny

Dr Damian Trzybiński (opiekun), Prof. Krzysztof Wozniak (promotor), Pracownia Krystalochemii, trzybinski@chem.uw.edu.pl, tel. 26 632, kwozniak@chem.uw.edu.pl, 26391 crystal.chem.uw.edu.pl

Wiele roślin produkuje kryształy czasami całkiem zaskakujące. Przedmiotem pracy będzie identyfikacja takich roślin, ich uprawa w celu wytworzenia kryształów, zbadanie od czego zależy proces produkcji takich kryształów przez rośliny a także wyznaczenie ich struktury i roli jaką pełnią w roślinach.

Praca licencjacka

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa

Struktura i właściwości kryształów produkowanych przez grzyby

Dr Damian Trzybiński (opiekun), Prof. Krzysztof Wozniak (promotor), Pracownia Krystalochemii, trzybinski@chem.uw.edu.pl, tel: 26 632 kwozniak@chem.uw.edu.pl, tel: 26 391 crystal.chem.uw.edu.pl

Wiele grzybów produkuje mniejsze lub większe kryształy często całkiem zaskakujące. Przedmiotem pracy będzie identyfikacja takich grzybów, ich uprawa w celu wytworzenia kryształów, zbadanie od czego zależy proces produkcji takich kryształów przez grzyby, a także wyznaczenie ich struktury i roli jaką pełnią w grzybach.

Praca licencjacka

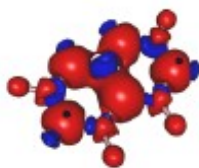
Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa

Rola doboru bazy orbitali atomowych w obliczeniach walencyjnych stanów wzbudzonych dla wybranych cząsteczek organicznych

dr hab. Tatiana Korona, Pracownia Chemii Kwantowej, tania@chem.uw.edu.pl, tel. 225526381

Mimo nieustającego postępu w dziedzinie obliczeń ab initio wzbudzeń elektronowych dobór właściwej bazy orbitalnej pozostaje ciągle poza strefą black box. Wynika to po części z faktu, że charakter stanów wzbudzonych jest o wiele bardziej różnorodny niż to jest dla stanu podstawowego. Rozwiązaniem tego problemu może być skoncentrowanie się wyłącznie na określonych typach wzbudzeń, np. na wzbudzeniach walencyjnych, wzbudzeniach z przeniesieniem ładunku lub rydbergowskich podczas optymalizacji baz. Celem pracy będzie sprawdzenie jakości istniejących baz orbitalnych w odtwarzaniu wybranych stanów wzbudzonych dla kilku reprezentatywnych cząsteczek organicznych, których wielkość umożliwia przeprowadzenie obliczeń dla dużych baz w użyciu metod skorelowanych, oraz wystawienie „rekomendacji” najlepszym bazom. W wersji bardziej ambitnej student wykona także samodzielnie optymalizacje nowej bazy (lub baz), ukierunkowanych na dokładne odtwarzanie wybranych wzbudzonych stanów elektronowych. Obliczenia będą wykonane z użyciem dostępnych funkcjonalności programu Molpro.

[chemia, chemia i energetyka jądrowa, inżynieria nanostruktur]

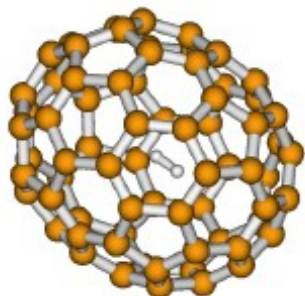


Zmiana własności cząsteczek pod wpływem ograniczeń przestrzennych

dr hab. Tatiana Korona, Pracownia Chemii Kwantowej, tania@chem.uw.edu.pl, tel. 225526381

Z uwagi na coraz bardziej powszechne zastosowanie fulerenów i nanorurek zagadnienie zmiany własności cząsteczek pod wpływem ograniczeń przestrzennych przestało być problemem czysto akademickim. W proponowanej pracy student zbada, jak zmieniają się własności wybranej

cząsteczki (np. wody lub małej cząsteczki organicznej) pod wpływem „ściany” odpychającej. Obliczenia będą wykonane z użyciem dostępnych funkcjonalności programu Molpro.
[chemia, chemia i energetyka jądrowa, inżynieria nanostruktur]



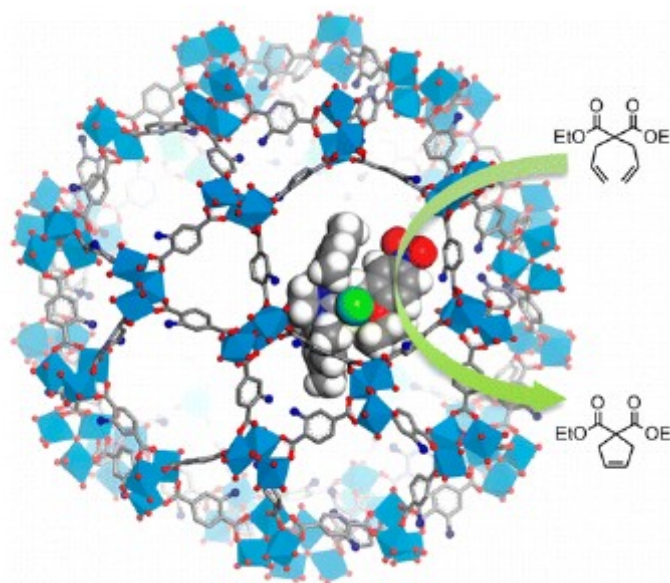
Nowoczesne materiały w katalizie: immobilizacja katalizatorów w szkieletach metalo-organicznych i badanie ich właściwości katalitycznych

Dane kierownika tematu pracy dyplomowej: dr Michał Chmielewski, Laboratorium Chemii Supramolekularnej, e-mail: mchmielewski@chem.uw.edu.pl, telefon wewnętrzny 26630

Szkielety metalo-organiczne, czyli tzw. MOF-y, (z ang. *Metal-Organic Frameworks*), to krystaliczne, porowate i łatwe do modyfikacji materiały, mające unikalne właściwości i szereg ciekawych zastosowań. Z tego względu są one intensywnie badane w czołowych ośrodkach naukowych na całym świecie. Regularne, dobrze zdefiniowane wnęki o rozmiarach nanoskopowych, znajdujące się w strukturze tych materiałów, mogą stanowić unikalne środowisko między innymi dla katalizy. Proponowana praca będzie częścią szeroko zakrojonych badań realizowanych w Laboratorium Chemii Supramolekularnej, których głównym celem jest immobilizacja katalizatorów wewnątrz tych nanoskopowych porów w kryształach MOF-ów i zbadanie, w jaki sposób ograniczona przestrzeń wpływa na chemo-, regio- i stereoselektywność reakcji katalitycznych. W związku z tym możliwych jest szereg wariantów tematu, zależnych od zaawansowania badań w Zespole i od preferencji kandydata. W ramach typowej pracy zsyntezowane zostaną wybrane połączenia MOF–katalizator, a następnie badane będą ich właściwości katalityczne. Wszystkie te badania będą prowadzone w nowych, znakomicie wyposażonych laboratoriach zlokalizowanych w Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych.

Więcej na <http://www.mchmielewski.pl>

Temat ten może być realizowany na kierunkach: chemia, inżynieria nanostruktur oraz chemia i energetyka jądrowa.



Chemia supramolekularna anionów: fluorescencyjne sensory i transportery anionów na bazie 1,8-diaminokarbazolu - synteza i właściwości

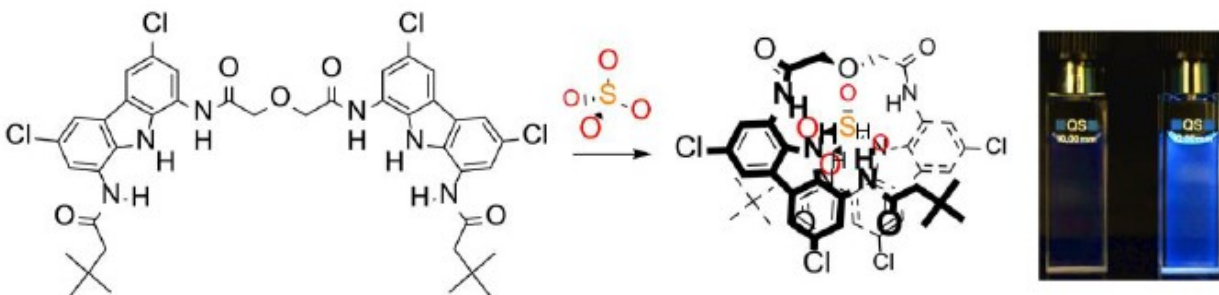
Dane kierownika tematu pracy dyplomowej: dr Michał Chmielewski, Laboratorium Chemii Supramolekularnej, e-mail: mchmielewski@chem.uw.edu.pl, telefon wewnętrzny 26630

Transport anionów przez błony biologiczne ma duże znaczenie w wielu ważnych dla życia procesach komórkowych, takich jak usuwanie CO₂, regulacja pH, zapewnienie równowagi osmotycznej i odpowiedniej objętości komórki. Proponowana praca będzie częścią szeroko zakrojonych badań, prowadzonych w Laboratorium Chemii Supramolekularnej, 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. Możliwych jest zatem szereg wariantów tematu, w zależności od możliwości i zainteresowań kandydatów. Praca będzie okazją do praktycznego zapoznania się z problematyką i metodami chemii supramolekularnej.

Więcej na <http://www.mchmielewski.pl>

Temat ten może być realizowany na kierunkach: chemia, inżynieria nanostruktur oraz chemia i energetyka jądrowa.

Ilustracja z publikacji będącej efektem ostatniego licencjatu w tej tematyce:



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

Dane kierownika tematu pracy dyplomowej: dr Michał Chmielewski, Laboratorium Chemii Supramolekularnej, e-mail: mchmielewski@chem.uw.edu.pl, telefon wewnętrzny 26630

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 promieniowaniem UV oraz właściwości kompleksotwórcze wszystkich form w stosunku do anionów.

Praca będzie realizowana w nowoczesnych i doskonale wyposażonych laboratoriach zlokalizowanych w Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych.

Więcej na <http://www.mchmielewski.pl>

Temat ten może być realizowany na kierunkach: chemia, inżynieria nanostruktur oraz chemia i energetyka jądrowa.

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

Dane kierownika tematu pracy dyplomowej: dr Michał Chmielewski, Laboratorium Chemii Supramolekularnej, e-mail: mchmielewski@chem.uw.edu.pl, telefon wewnętrzny 26630

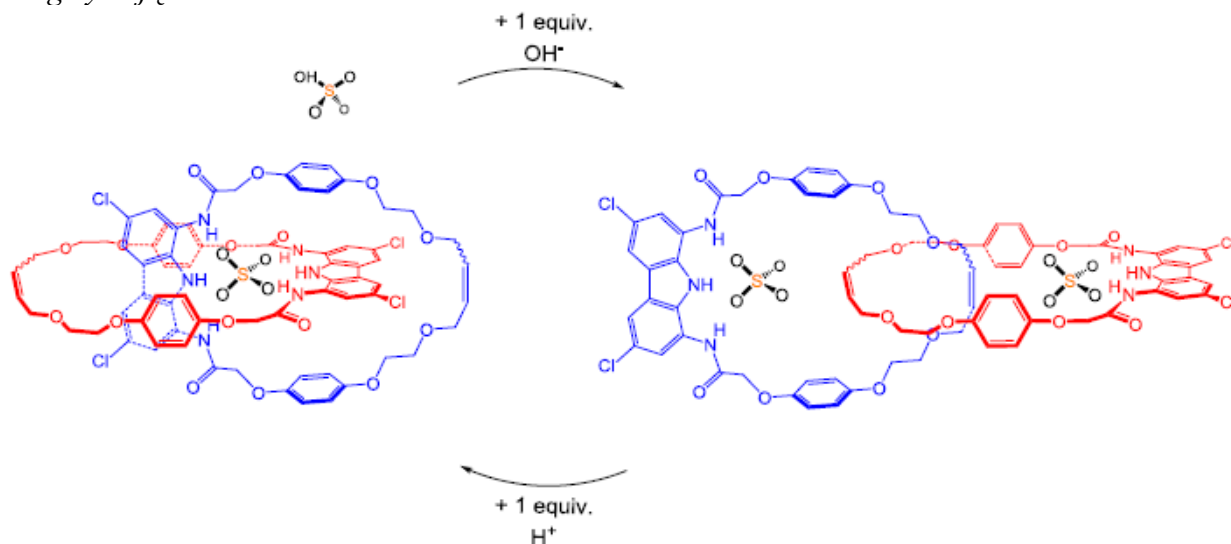
Więcej na <http://www.mchmielewski.pl>

Synteza cząsteczek powiązanych mechanicznie, na przykład w łańcuchy (tzw. katenany), wzbudza duże zainteresowanie przede wszystkim z uwagi na ich potencjalne zastosowanie do konstrukcji przełączników i maszyn molekularnych. O znaczeniu tych badań świadczy nagroda Nobla dla pionierów tej dziedziny przyznana w 2016 r.

W Laboratorium Chemii Supramolekularnej trwają badania nad wykorzystaniem anionów jako templatów do syntezy katenanów i rotaksanów oraz do przełączania tych mechanicznie powiązanych struktur pomiędzy różnymi stanami. W ramach tych badań syntezujemy modelowe receptory molekularne, badamy ich templatowaną anionami makrocyclizację prowadzącą do cząsteczek powiązanych mechanicznie, a następnie strukturę i różne właściwości tych interesujących związków.

Praca będzie realizowana w nowoczesnych i doskonale wyposażonych laboratoriach zlokalizowanych w Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych.

Temat ten może być realizowany na kierunkach: chemia, inżynieria nanostruktur oraz chemia i energetyka jądrowa.

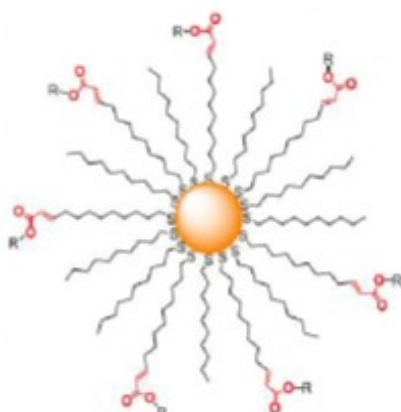


Reakcja metatezy na nanocząstkach złota i srebra

Dr Wiktor Lewandowski, Pracownia syntezy organicznych nanomateriałów i biomolekuł,
wlewandowski@chem.uw.edu.pl, tel. wew. 26-282]
www.nanoorgmat.chem.uw.edu.pl

Nanocząstki metali, ze względu na unikatowe właściwości odróżniające je od materiałów w skali makro, planuje się wykorzystywać w szeregu różnych technologii. Jedną z barier, którą należy pokonać na drodze do praktycznego zastosowania nanocząstek jest opracowanie metody szybkiego i taniego podłączania różnych związków do ich powierzchni (np. leków, ligandów polepszających stabilność, itd.). Celem pracy jest zoptymalizowanie reakcji metatezy na powierzchni nanocząstek. Cele pośrednie obejmują: (i) syntezę serii związków mogących ulegać reakcji metatezy, (ii) przygotowanie nanocząstek, (iii) przeprowadzenie reakcji na powierzchni nanocząstek, (iv) badanie właściwości uzyskanych struktur. Nacisk na poszczególne elementy pracy może być dopasowany do preferencji studenta!

Chemia, Energetyka i chemia jądrowa, Inżynieria nanostruktur



Dynamiczna samoorganizacja ciekłokrystalicznych nanocząstek

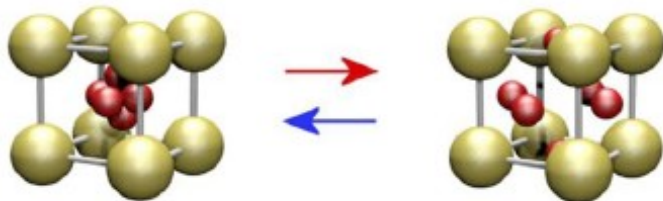
Dr Wiktor Lewandowski, Pracownia syntezy organicznych nanomateriałów i biomolekuł,
wlewandowski@chem.uw.edu.pl, tel. wew. 26-282]
www.nanoorgmat.chem.uw.edu.pl

Budowanie w skali makro jest to zadanie relatywnie proste. Możemy bloki budulcowe (np. cegły) układać jeden po drugim uzyskując zamierzony cel. W ten sposób zbudowano np. piramidę Cheopsa (Rys. 1A). Jednak w przypadku nanocząstek, których rozmiary są ok. 1 000 000 razy mniejsze niż standardowej cegły, ta strategia ma nikłe szanse powodzenia. Jak zatem „budować” materiały z nanocząstek? Najprościej jest przekonać nanocząstki aby same z siebie tworzyły struktury wg naszych planów, czyli wykorzystać proces zwany samoorganizacją. W ten sposób można zbudować fantastyczne struktury w tym np. nanopiramidy (Rys. 1B). Co istotne nie musimy zajmować się każdą „cegłą” – tysiące nanocząstek same się układają!

Celem pracy jest uzyskanie samoorganizujących się nanocząstek, reagujących na zmiany temperatury. Pośrednie cele pracy to: (i) synteza związków organicznych, które po przyłączeniu do nanocząstek spowodują ich samoorganizację, (ii) synteza nanocząstek, (iii) przygotowanie

układów hybrydowych, (iv) badania samoorganizacji nanocząstek. Nacisk na poszczególne elementy pracy może być dopasowany do preferencji studenta!

Chemia, Energetyka i chemia jądrowa, Inżynieria nanostruktur



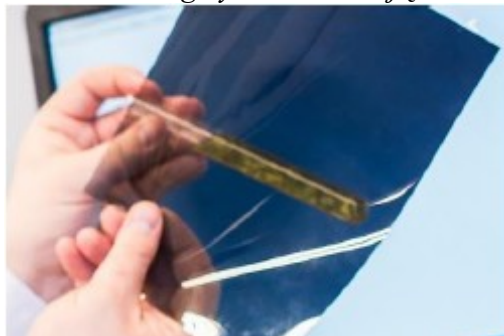
Dynamiczna samoorganizacja ciekłokrystalicznych nanocząstek

Dr Wiktor Lewandowski, Pracownia syntezy organicznych nanomateriałów i biomolekuł, wlewandowski@chem.uw.edu.pl, tel. wew. 26-282]

www.nanoorgmat.chem.uw.edu.pl

Od 2006 roku chemicy dysponują potężnym narzędziem syntetycznym w dziedzinie grafenu - opracowana została łatwa, chemiczna metoda syntezy materiałów grafenowych wychodząca z grafitu: grafit $\rightarrow$ tlenek grafenu $\rightarrow$ zredukowany tlenek grafenu ('grafen'). Tlenek grafenu, ze względu na łatwość redukcji i bogactwo ugrupowań tlenowych na powierzchni, stał się jednym z najpopularniejszych prekursorów do budowy układów hybrydowych. Zatem wiele grup na świecie pracuje z tlenkiem grafenu, ale nie ma szybkich metod badania czy przechowywany dłużej, albo kupiony od producenta tlenek grafenu jest w 'dobrej formie' (czy jest rzeczywiście monowarstwowy). Mamy silne podejrzenie, że bardzo prosty test z użyciem monitora komputerowego i polaryzatora, pozwalający zobaczyć właściwości ciekłokrystaliczne tlenku grafenu (na zdjęciu) pozwoli na ocenę jakości materiału. Zadanie studenta to synteza tlenku grafenu, oraz korelacja jego warstwowości (badane za pomocą AFM) i ciekłokrystaliczności.

Chemia, Energetyka i chemia jądrowa, Inżynieria nanostruktur



Synteza materiałów ciekłokrystalicznych tworzące fazy kubiczne

dr Joanna Wolska Pracownia Syntezy Nanomateriałów Organicznych i Biomolekuł jokos@chem.uw.edu.pl tel. 26 270

Fazy kubiczne jako trójwymiarowe fazy ciekłokrystaliczne charakterystyczne dla związków termotropowych budzą coraz szersze zainteresowanie świata naukowego. Odpowiednie zaprojektowanie cząsteczki zawierającej giętkie elementy polikatenarne połączone ze sztywnymi fragmenty rdzenia promezogenicznego - powinny prowadzić do uzyskania żądanych efektów. Proponowany projekt licencyjki zakłada syntezę związków organicznych wykazujących właściwości ciekłokrystaliczne, a w szczególności fazy kubiczne. Uzyskane produkty zostaną poddane badaniom fizykochemicznym: badaniom mikroskopowym (mikroskopia polaryzacyjna oraz TEM), kalorymetrycznym (DSC), spektroskopowym (IR) oraz dyfrakcyjnym (SAXS) w celu określenia samoorganizacji

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa

Synteza nanocząstek typu core-shell Co@Au modyfikowanych za pomocą związków mezogenicznych

dr Joanna Wolska Pracownia Syntezy Nanomateriałów Organicznych i Biomolekuł
jokos@chem.uw.edu.pl tel. 26 270

Nanocząstki kobaltu ze względu na swoje ferromagnetyczne właściwości są zaliczane do nanomateriałów magnetycznych interesujących z punktu widzenia optoelektroniki. Ze względu na łatwą degradację nanocząstek kobaltu ważne jest zabezpieczenie ich powierzchni przed czynnikami zewnętrznymi. Taką rolę może spełniać powłoka ze złota. W celu zapewnienia nanocząstkom samoorganizacji w złożone struktury trój- i dwuwymiarowe, powierzchnie nanocząstek zostaną zmodyfikowana za pomocą ligandów organicznych o właściwościach ciekłokrystalicznych. Projekt licencyjki połączy kilkietapową syntezę organiczną z syntezą nieorganiczną nanocząstek Co@Au. Uzyskane hybrydy zostaną poddane badaniom fizykochemicznym.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa

Wpływ długości łańcucha metylenowego na aktywność antyoksydacyjną heterodimeru takryny z pochodną serotoniny.

Dr Anna Zawadzka, Pracownia Chemii Związków Naturalnych, azawadzka@chem.uw.edu.pl,
tel.: 55 26 269; <http://www.pchzn.chem.uw.edu.pl/pl/inhibitory-cholinoestazy/>

Celem projektu jest ocena wpływu długości linkera łączącego jednostkę takryny z pochodną serotoniny na aktywność antyoksydacyjną heterodimerów wybranych z grupy inhibitorów cholinoesteraz. W ramach pracy przeprowadzona zostanie synteza związku (ów) o różnej długości łańcucha alkilowego oraz test ORAC określający właściwości przeciwutleniające. Pozwoli to na włączenie heterodimerów do grupy „ligandów wielofunkcyjnych” - potencjalnych kandydatów na leki w terapii choroby Alzheimera.

Chemia, Energetyka i Chemia Jądrowa

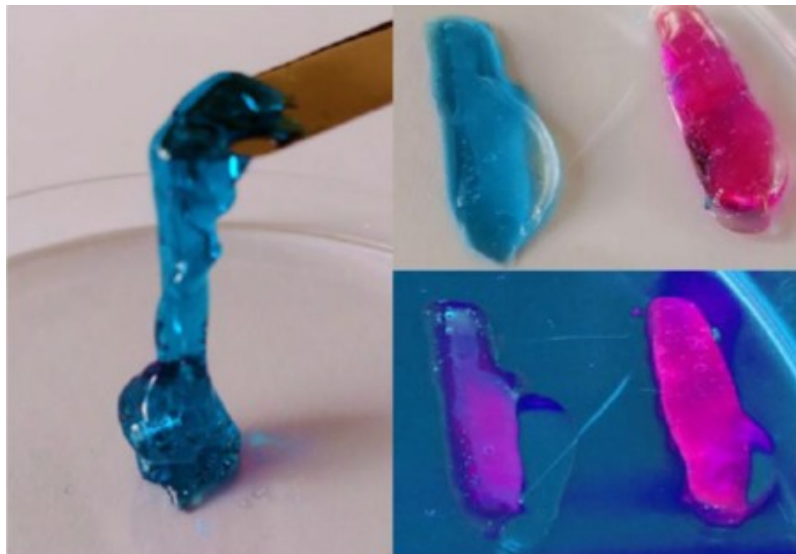
Zamykanie nanocząstek w hydrożelach

Prof. dr hab. Agata Michalska-Maksymiuk, PPChA, email: agatam@chem.uw.edu.pl, tel. wew. 26 331, <http://beta.chem.uw.edu.pl/people/AMichalska/>

Nanocząstki optycznie czułe mają potencjalnie szereg zastosowań – od sensorów do terapii fotodynamicznej. Istotne jest kształtowanie właściwości optycznych nanonocząstek, ale także z punktu widzenia niektórych zastosowań wskazana jest immobilizacja nanodrobin w warstwie o specjalnych właściwościach – przepuszczalnej dla jonów, nietoksycznej dla organizmu, np. w odpowiednim hydrożelu.

Celem projektu jest sprawdzenie, jak zamykanie nanocząstek optycznie czułych w warstwach hydrożeli wpływa na ich właściwości, przede wszystkim fizykochemiczne i optyczne. Projekt ma w dużej mierze charakter eksperymentalny i wymagać będzie otrzymania nanocząstek charakteryzujących się aktywnością optyczną w trybie emisji, wprowadzenia tych układów do hydrożeli i przeprowadzenia eksperymentów optycznych i fizykochemicznych oraz obrazowania (TEM/ SEM). Nanocząstki będą otrzymywane z gotowych polimerów i ewentualnie modyfikowane zgodnie z potrzebami.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa



Hydrożel z nanocząstkami pH czułymi

Elektrycznie przełączane polimery fluorescencyjne

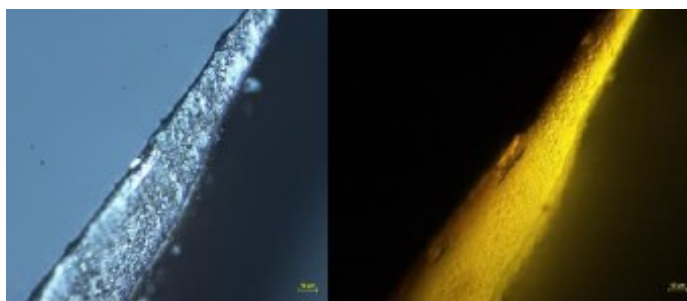
Prof. dr hab. Agata Michalska-Maksymiuk, PPChA, email: agatam@chem.uw.edu.pl, tel. wew. 26 331, <http://beta.chem.uw.edu.pl/people/AMichalska/>

Pewne polimery wykazują różne właściwości optyczne (absorpcyjne i/lub emisyjne) zależne od właściwości polimeru, takich jak np. stopień utlenienia. Daje to możliwość przełączania obserwowanego widma optycznego polimeru poprzez zmianę np. potencjału

przyłożonego do polimeru; co jest istotne z punktu widzenia różnych zastosowań tego typu układów.

Celem pracy jest sprawdzenie możliwości wpływania na właściwości optyczne odpowiednio modyfikowanych warstw polimerowych poprzez zmianę przyłożonego potencjału, oraz sprawdzenie, jak różne warunki wpływają na obserwowane zależności. W założeniu opracowany układ powinien reagować na przyłożony potencjał tylko w określonych warunkach, np. w obecności danego analitu w roztworze. Projekt jest w znacznej mierze eksperymentalny, wymagać będzie eksperymentów elektrochemicznych i rejestracji widm optycznych (absorpcyjnych i emisyjnych), badania warstw pod mikroskopem optycznym i fluorescencyjnym, charakterystyki warstw metodami TEM/ SEM. Warstwy polimerowe będą otrzymywane z gotowych polimerów modyfikowanych zgodnie z potrzebami.

Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa



Zdjęcie modyfikowanej warstwy polimerowej wykonane pod mikroskopem w świetle widzialnym pod mikroskopem fluorescencyjnym.

Wpływ struktury modelowej błony biologicznej na działanie naturalnych peptydów antybiotykowych

dr Joanna Juhaniewicz-Dębińska, Pracownia Teorii i Zastosowań Elektrod,
jjuhaniewicz@chem.uw.edu.pl, tel: 26 660

Coraz szybszy wzrost odporności bakterii na tradycyjne antybiotyki zmusza do poszukiwań nowych substancji aktywnych o szerokim spektrum działania przeciwdrobnoustrojowym. Projekt obejmuje badania syntetycznych peptydów antybiotykowych na modelowe błony komórkowe bakterii Gram-dodatnich i Gram-ujemnych. Bakterie Gram-ujemne charakteryzują się dodatkową zewnętrzną błoną biologiczną, która otacza ścianę komórkową i stanowi pierwszą barierę, jaką muszą pokonać antybiotyki, aby doprowadzić do zniszczenia komórki bakteryjnej. Dlatego do konstrukcji modelowych błon komórkowych zostanie wykorzystany lipopolisacharyd (LPS), naturalnie obecny w komórkach bakterii Gram-ujemnych. Głównym celem badań jest zweryfikowanie podatności biomimetycznych błon bakteryjnych na nowe antybiotykowe peptydy.

[Chemia, EChJ, IN]

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

dr Joanna Juhaniewicz-Dębińska, Pracownia Teorii i Zastosowań Elektrod,
jjuhaniewicz@chem.uw.edu.pl, tel: 26 660

Niniejszy projekt obejmuje badania oddziaływań leku antynowotworowego trzeciej generacji z grupy syntetycznych alkilofosfolipidów (APLs) – peryfozyny- z modelowymi warstwami lipidowymi odzwierciedlającymi składem rafty lipidowe. Nieustanna walka z nowotworami wymusza poszukiwania nowych substancji o działaniu przeciwnowotworowym, które będą charakteryzowały się stabilnością w warunkach fizjologicznych oraz skutecznością przeciwko komórkom rakowym przy jednoczesnej niskiej cytotoksyczności na komórki zdrowe i jak najmniejszych skutkach ubocznych. Peryfozyna zbudowana jest z 18-węglowego nasyconego łańcucha kwasu tłuszczowego połączonego z grupą fosforanową z przyłączoną pochodną piperydyny. Jej przeciwnowotworowe działanie opiera się na zaburzaniu ścieżek przekazywania sygnałów na poziomie błony komórkowej a nie na bezpośrednim oddziaływaniu na DNA. Jeden z postulowanych mechanizmów działania peryfozyny zakłada, że miejscem jej bezpośredniego oddziaływania są licznie występujące w błonach komórek nowotworowych rafty lipidowe, czyli mikrodomeny bogate w sfingomielinę i cholesterol.

[*Chemia, EChJ, IN*]

Rola jonów cynku w tworzeniu się amyloidów w przebiegu cukrzycy typu II

dr Joanna Juhaniewicz-Dębińska, Pracownia Teorii i Zastosowań Elektrod,
jjuhaniewicz@chem.uw.edu.pl, tel: 26 660

Amylina, polipeptyd amyloidowy wysp trzustki tworzy nierozpuszczalne amyloidy w trzustce pacjentów cierpiących na cukrzycę typu II. Amylina jest produkowana i wydzielana razem z insuliną przez komórki beta wysp trzustkowych Langerhansa, w których naturalnie występuje wysokie stężenie jonów cynku. U ponad 90% pacjentów cierpiących na cukrzycę typu II zidentyfikowano depozyty fibrylowe amyliny w komórkach wysp Langerhansa. Oddziaływanie tego amyloidu z błoną biologiczną komórek beta powiązane jest z ich śmiercią, co w konsekwencji przyczynia się do postępu choroby. Niewiele jednak wiadomo, według jakiego mechanizmu zachodzi wywołane amyliną zniszczenie komórek trzustkowych oraz jaka jest rola jonów cynku w promowaniu/inhibitowaniu procesu niszczenia komórek przez amylinę. Celem projektu jest zbadanie wpływu amyliny w obecności i nieobecności jonów cynku na strukturę modelowych błon komórkowych.

[*Chemia, EChJ, IN*]