

**PROPONOWANE TEMATY PRAC LICENCJACKICH
W ROKU AKADEMICKIM 2018/2019
DLA STUDENTÓW KIERUNKU
ENERGETYKA I CHEMIA JĄDROWA
PRACE WYKONYWANE NA WYDZIALE CHEMII UW**

ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ I RADIOCHEMII

Wpływ podstawienia izotopowego H/D na mieszalność cieczy jonowych

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 obszarze 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 narzędzia w badaniu oddziaływań międzycząsteczkowych, pozwala poznać bliżej rodzaje oddziaływań pomiędzy składnikami mieszanin zawierających ciecze jonowe.

[Temat może być realizowany na kierunku: Energetyka i Chemia Jądrowa]

Effekt izotopowy szybkości ultradźwięków dla dwuskładnikowych mieszanin ciekłych

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 opisanego jego struktury. Z danych szybkości rozchodzenia fal ultradźwiękowych i gęstości roztworu można wyznaczyć współczynniki ściśliwości, których analiza dostarcza informacji o strukturze mieszanych substancji.

Tworzenie asocjatów 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 mieszaniny ściśliwości wykazują odchylenia od addytywności. Szczególnie interesujące rezultaty można uzyskać prowadząc badania dla różnych izotopów wodoru.

Badanie szybkości rozchodzenia się ultradźwięków oraz analiza odchylenia od addytywności dla mieszanin binarnych zawierających rozpuszczalniki deuterowane będzie celem projektu licencjackiego.

[Temat może być realizowany na kierunku: Energetyka i Chemia Jądrowa]

Biotransformacje halogeno- i metylopo 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 metylopo 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 metylopo 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 metylopo pochodna indolu. Deuter i tryt 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 licencjackiego 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 tryptofanę (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]

Elektrochemiczna i spektroskopowa charakterystyka procesu osadzania technetu z roztworów jego soli.

dr Maciej Chotkowski, Pracownia Elektrochemicznych Źródeł Energii, grupa: Radiochemia Dla Medycyny i Przemysłu, email: mchotk@chem.uw.edu.pl; tel: 22 55 26 565

Tematem pracy licencjackiej jest opisane procesu redukcji jonów technetianowych(VI) w roztworach wodnych prowadzącego do wytworzenia depozytu TcO_2 lub metalicznego Tc.

Technet-99 jest jednym z głównych produktów rozszczepienia jąder uranu-235 powstających podczas normalnej pracy reaktora jądrowego. Ze względu na jego długi okres półtrwania wynoszący 211 000 lat, stanowi on poważny problem podczas zagospodarowania wypalonego paliwa jądrowego (SNF). Dodatkowo, ze względu na występujące zjawisko współekstrakcji jonów TcO_4^- razem z jonami UO_2^{2+} , pierwiastek ten występuje we wszystkich etapach procesu przetwarzania SNF. Stanowi on znaczące zanieczyszczenie otrzymywanego uranu.

Badania realizowane w ramach pracy licencjackiej prowadzone będą w roztworach wodnych o szerokim zakresie pH oraz różnej mocy jonowej. Głównymi technikami stosowanymi do opisu omawianego procesu będą techniki elektrochemiczne oraz scyntylacyjne (LSC)- mające na celu określenie ilości zdeponowanego na elektrodzie materiału a także spektroskopowe (UV-Vis) służące do identyfikacji jonowych form technetu na III oraz IV stopniu utlenienia.

[Temat może być realizowany na kierunku Energetyka i Chemia Jądrowa]

Biotransformacje halogenopochodnych L-fenyloalaniny 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-fenyloalaniny 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-fenyloalaniny 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]

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 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]

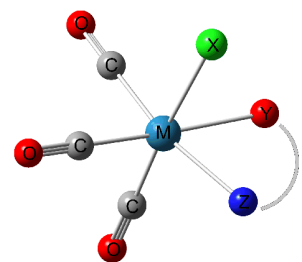
Trikarbonylkowe kompleksy technetu(I) i renu(I) w układzie 2+1 (temat już zarezerwowany)

Dr Marek Pruszyński, Pracownia Elektrochemicznych Źródeł Energii, Radiochemia dla Medycyny i Przemysłu, mpruszynski@chem.uw.edu.pl, 22 5526565

Dr Krzysztof Łyczko, Centrum Radiochemii i Chemii Jądrowej, Instytut Chemii i Techniki Jądrowej, k.lyczko@ichtj.waw.pl, 22 5041252

Związki technetu i renu są przedmiotem wielu badań ze względu na ich zastosowanie w medycynie jako diagnostyki i terapeutyki. Oba pierwiastki, ze względu na podobne właściwości chemiczne, stanowią swoisty tandem umożliwiający zastosowanie szerokiego wachlarza metod badawczych dla analogicznych kompleksów różniących się jedynie centralnym atomem metalu. Celem pracy jest otrzymanie trikarbonylkowego połączenia technetu(I) w tzw. układzie „2+1” z wybranym ligandem bidentnym oraz zbadanie jego właściwości za pomocą dostępnych technik radiochemicznych. Do tego celu wykorzystany zostanie technet-99m w postaci technecjanu(VII) sodu pochodzący z generatora molibdenowo/technetowego ($^{99}\text{Mo}/^{99m}\text{Tc}$). Zostanie również zsyntezowany w ilościach wagowych analogiczny trikarbonylkowy kompleks stabilnego renu(I), co umożliwi określenie jego struktury monokrystaliczną dyfrakcją rentgenowską i właściwości wybranymi metodami fizykochemicznymi obejmującymi spektrometrię FTIR i UV-VIS.

[Temat realizowany na kierunku Energetyka i Chemia Jądrowa]



M - Tc, Re; X - ligand monodentny;
Y, Z - atomy donorowe ligandu bidentnego

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 elektrodzie, 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, I stopień (praca licencjacka)]

Biocząstki modyfikowane nanocząstkami renu do zastosowań w terapii przecinowotworowej

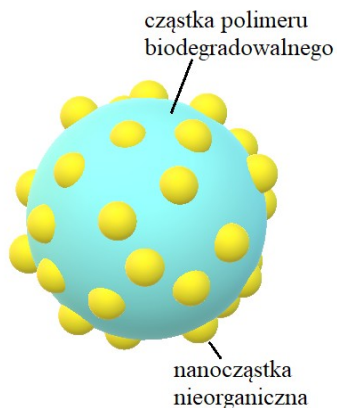
dr hab. Maciej Mazur, prof. UW, Pracownia Elektrochemii, mmazur@chem.uw.edu.pl, tel. 26-418; <http://beta.chem.uw.edu.pl/people/MMazur/>

Celem projektu jest otrzymanie hybrydowych cząstek o właściwościach przeciwnowotworowych. Materiałem wyjściowym w syntezie będą sferyczne kapsułki powstałe w wyniku modyfikacji drożdżaków *Saccharomyces boulardii*. W ścianach kapsułek osadzane będą nanocząstki renu w wyniku reakcji jonów nadrenianowych z borowodorkiem sodu.

Następnie w otrzymanych strukturach inkorporowany będzie lek przeciwnowotworowy - doksorubicyna.

Otrzymany materiał badany będzie z wykorzystaniem technik mikroskopowych, spektroskopowych i termicznych. Opcjonalnie otrzymane zostaną cząstki modyfikowane renem 186, który będąc emitery beta wykazuje działanie przeciwnowotworowe.

[Temat może być realizowany na kierunku Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa oraz innych.]



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/>

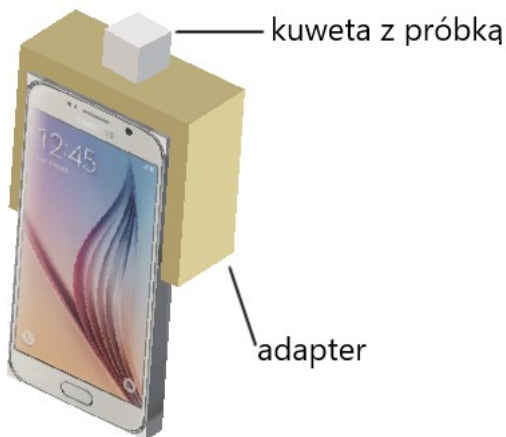
Celem pracy licencjackiej będzie skonstruowanie i przetestowanie czułego i precyzyjnego czujnika do wykrywania białka w warunkach domowych. Urządzenie to przeznaczone jest dla osób monitorujących poziom białkomoczu w przebiegu chorób nerek, np. zespołu nerczycowego.

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 Pediatricznego 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]



Wypełnienie do masek przeciwsmogowych

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 projektu jest opracowanie materiału aktywnego maski przeciwsmogowej. Materiał będzie składał się z cząstek hydrożelowych modyfikowanych nanocząstkami metalicznymi. W założeniu materiał ten ma pochłaniać wydychaną parę wodną i jednocześnie wykazywać właściwości przeciwdrobnoustrojowe. Projekt będzie realizowany we współpracy z firmą Maskiss w ramach programu Bony na Innowacje.

[Temat może być realizowany na kierunku Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa oraz innych.]



Test paskowy do półilościowego oznaczania białka w moczu

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 projektu jest opracowanie nowego typu pasków diagnostycznych pozwalających na pomiar stężenia białka w próbkach moczu samodzielnie przez pacjenta. Paski takie mogłyby być stosowane w monitorowaniu przebiegu chorób nerek, np. zespołu nerczycowego, cukrzycy, itp. Na rynku dostępne są komercyjne paski diagnostyczne wykorzystujące zjawisko tzw. błędu białkowego błękitu tetrabromofenolowego. W ramach realizacji pracy licencjackiej opracowane zostanie rozwiązanie wykorzystujące innego rodzaju barwnik oraz inne zjawisko zmiany barwy pola testowego.

[Temat może być realizowany na kierunku Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa oraz innych.]



Rekalibracja zbioru wielowymiarowych widm NMR biomolekuł dla automatyzacji przypisań sygnałów

dr Jan Stanek, grupa badawcza „Nowe metody spektroskopii NMR w badaniach strukturalnych biomolekuł”, janstanek@chem.uw.edu.pl, 26 519; nmr.cent3.uw.edu.pl

Wielowymiarowe techniki NMR są niezbędne dla przypisania sygnałów w makromolekułach o znaczeniu biologicznym. Ze względu na dużą ilość danych standardowo przypisanie wspomaga się komputerowo, jednakże wymaga to przygotowania spójnych (skalibrowanych) list rezonansów. Rezonanse NMR w różnych widmach mogą być systematycznie przesunięte o stałą w wyniku (a) nieprawidłowej kalibracji (różnice temperatur, pH, bufora itp. pomiędzy próbkami; błąd przy przetwarzaniu danych) lub (b) niestabilności pola (braku układu locku, np. w NMR w fazie stałej). Celem pracy jest opracowanie i implementacja ogólnego algorytmu do wzajemnej kalibracji list rezonansów z różnych widm (w preferowanym przez studenta języku: Python, C++, Java lub in.) oraz demonstracja jego zalet dla przykładowych zestawów wielowymiarowych (3D+) widm NMR zarejestrowanych dla białek w roztworze i w fazie stałej.

[kierunki: chemia, inżynieria nanostruktur, energetyka jądrowa, MISMaP, ZMITP]

Efektywne połączenie więzów NMR i ewolucyjnych dla zautomatyzowanego określenia struktury trójwymiarowej białek

dr Jan Stanek, grupa badawcza „Nowe metody spektroskopii NMR w badaniach strukturalnych biomolekuł”, janstanek@chem.uw.edu.pl, 26 519; nmr.cent3.uw.edu.pl

Jądrowy rezonans magnetyczny jest, obok krystalografii rentgenowskiej i mikroskopii krioelektronowej, jedną z podstawowych metod określenia struktury trójwymiarowej biomolekuł. Jakość i kompletność danych (typowo: przesunięć chemicznych i więzów z efektu Overhausera) determinuje precyzję struktury. Jest ona często niewystarczająca dla białek powyżej 200-250 aminokwasów lub w fazie stałej, z powodu niskiej czułości bądź niejednoznaczności danych. Niedawno odkryto metodami bioinformatycznymi korelację pomiędzy częstością występowaniem mutacji par aminokwasów a ich odległością przestrzenną, którą można uznać za probabilistyczny wiąz strukturalny. Informacja ta jest uzyskiwana wyłącznie na podstawie porównania sekwencji aminokwasów w bazach danych i nie opiera się na homologii zdeponowanych już struktur. Jest więc ortogonalna do wszelkich danych eksperymentalnych, np. z NMR. Celem pracy jest określenie sposobu efektywnego połączenia więzów ewolucyjnych z danymi NMR, biorąc pod uwagę ich probabilistyczny charakter, tj. możliwość występowania fałszywych kontaktów. Oczekuje się opracowania skryptu(ów) lub miniprogramów do zautomatyzowanego przygotowania danych wejściowych dla 1-2 standardowych programów obliczających strukturę białek (np. Aria, Cyana, xplor-nih).

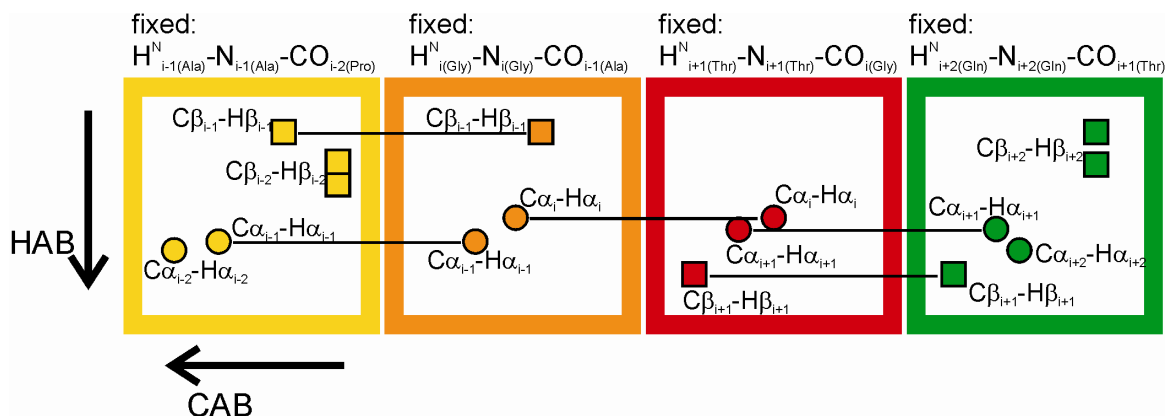
[kierunki: chemia, inżynieria nanostruktur, energetyka jądrowa, MISMaP, ZMITP]

Przypisywanie sygnałów w widmach NMR białek niezwinionych metodami wysokiej wymiarowości

Dr 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 niezwinietego, wykorzystując te metody.

[Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa]

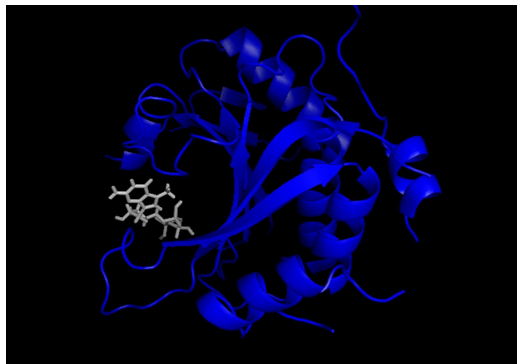


Badanie oddziaływań białko-ligand metodami spektroskopii NMR

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

[Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa]



Wyznaczenie struktury przestrzennej modyfikowanych enkefalin

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

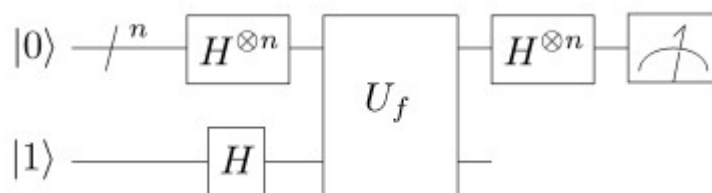
Jednym z najczęściej wykorzystywanych leków w terapii bólu jest morfina bądź jej analogi. Jej oddziaływanie z receptorami opioidowymi prowadzi do efektu przeciwbólowego. Oprócz związków egzogennych z receptorami opioidowymi mogą oddziaływać również związki endogenne - peptydy opioidowe takie jak endorfiny, dynorfiny bądź enkefaliny. W ramach pracy zostanie wykorzystana spektroskopia NMR do wyznaczenia struktury przestrzennej w serii modyfikowanych enkefalin.

[Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka i Chemia Jądrowa]

Zastosowanie spektroskopii MRJ do implementacji algorytmu Deutsch-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 Deutsch-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]

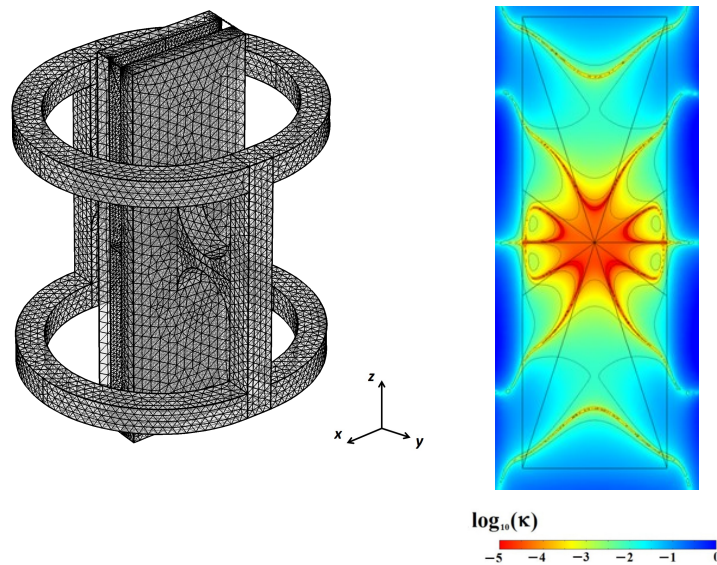


Rezonator do badań jądrowego rezonansu magnetoelektrycznego

dr Piotr Garbacz, Pracownia Spektroskopii magnetycznego Rezonansu Jądrowego,
pgarbacz@chem.uw.edu.pl, +48 22 55 26

Celem projektu jest optymalizacja i budowa rezonatora częstotliwości radiowej, który wytwarza silne pole elektryczne. Projekt rezonatora zostanie wykonany na podstawie wyników obliczeń metodą elementów skończonych w programie COMSOL. Zoptymalizowany rezonator może zostać następnie użyty jako element sondy do obserwacji magnetycznego rezonansu jądrowego w polu magnetycznym i elektrycznym, który pozwala na uzyskanie nowych informacji o strukturze cząsteczek.

[Chemia, Inżynieria Nanostruktur, Energetyka Jądrowa]

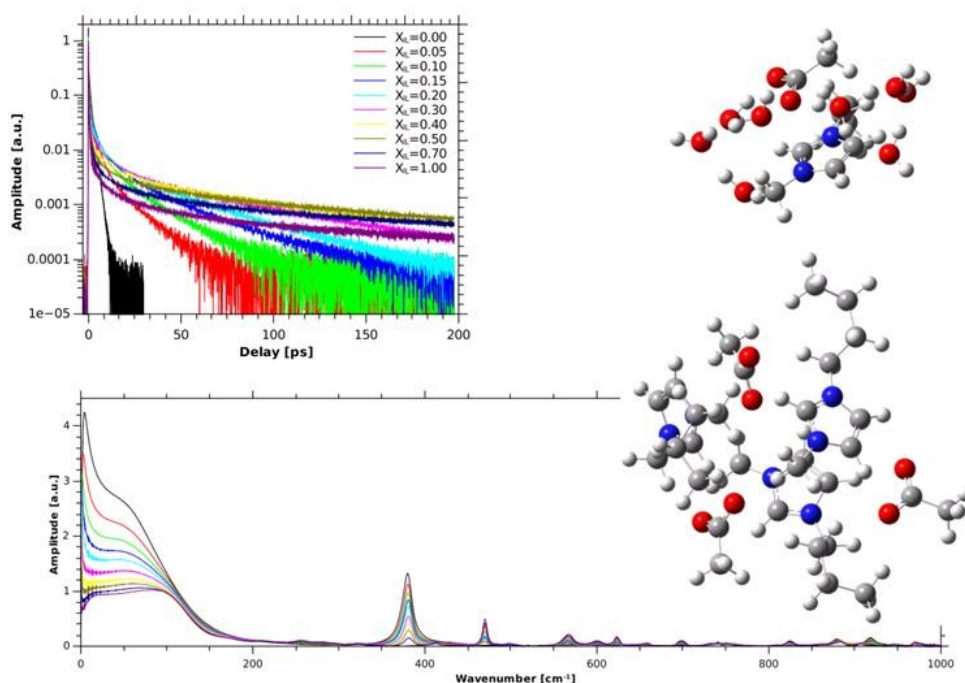


Struktura i dynamika cieczy jonowych i ich mieszanin z rozpuszczalnikami organicznymi

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 doświadczenia 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 doświadczałnej zadaniem studenta będzie rejestracja sygnału optycznego efektu Kerra dla przygotowanych próbek, a następnie obróbka i analiza otrzymanych wyników. Projekt jest 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 (możliwość wyjazdu w ramach umowy Erasmus+).

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



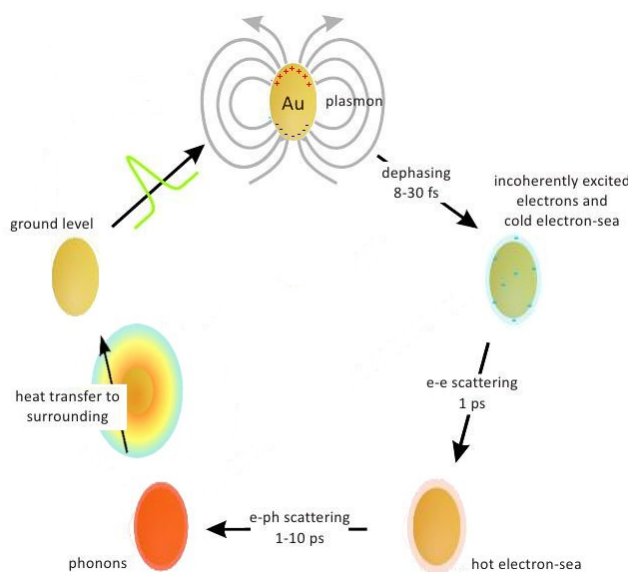
Ultraszybka dynamika anizotropowych nanocząstek złota wywołana impulsem femtosekundowym

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. nanopreciki 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]

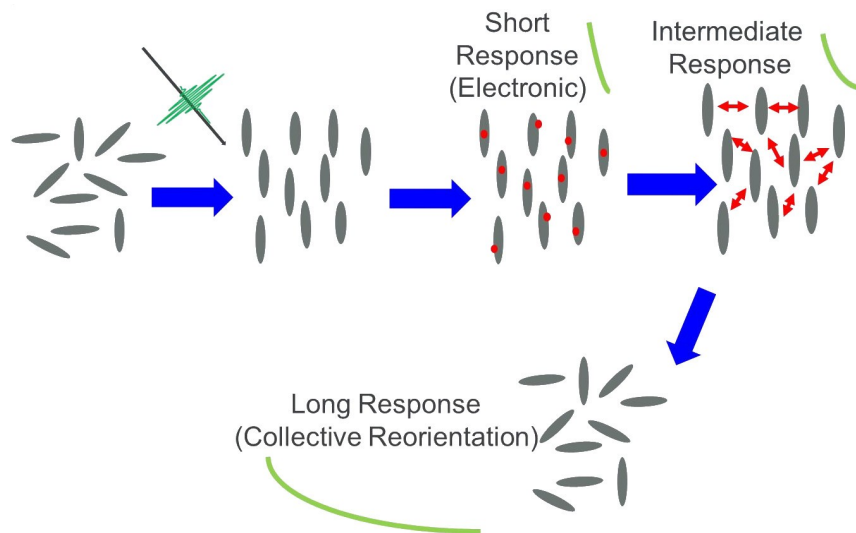


Badanie dynamiki orientacyjnej prostych cząsteczek poprzez symulacje dynamiki molekularnej oraz pomiary elektro-optycznego i femtosekundowego optyczno-optycznego efektu Kerra

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]



Badanie efektu synergicznej solwatacji

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 badany jest efekt synergicznej solwatacji w mieszaninie metanolu z chloroformem. Mieszanina ta jest interesująca ze względu na większy efekt solwatochromowy (maximum dla 40% metanolu) niż w czystym metanolu bądź chloroformie. Świadczy to o zwiększonej polarności mieszaniny, która jest tłumaczona przez tworzenie słabych wiązań wodorowych chloroform – metanol. Częsteczka chloroformu jest w takim połączeniu donorem protonu i może przyłączać się jedynie na końcu łańcuchów tworzonych przez cząsteczki metanolu. Obecność tej cząsteczki może powodować pewne przesunięcie ładunku wzdłuż kolejnych wiązań wodorowych w łańcuchu, co w efekcie może prowadzić do ich wzmocnienia. W niniejszym projekcie student wziąłby udział w badaniu lokalnej struktury i ultraszybkiej dynamiki cieczy z wykorzystaniem symulacji dynamiki molekularnej oraz pomiarów femtosekundowego optycznego efektu Kerra. Badania tego typu mają pozwolić na dokładniejsze zrozumienie efektu synergicznej solwatacji na poziomie molekularnym. Projekt ten jest realizowany we współpracy z grupą prof. Pratika Sen z Indian Institute of Technology, Kanpur.

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

