

Proponowane przez Wydział Chemii UW tematy prac licencjackich w roku akademickim 2013/2014 dla studentów makrokierunku Energetyka i chemia jądrowa

Pracownia Fizykochemicznych Podstaw Technologii Chemicznej - Zakład Dydaktyczny Technologii Chemicznej

1. *Indywidualny temat zgłoszony przez kandydata / kandydatkę i przedyskutowany z przysłym opiekunem. Zakres tematyki realizowanej w Pracowni: chemia rodników, autooksydacja lipidów, antyoksydanty, flawonoidy, katecholaminy, kalorymetria, modyfikacja fullerenów i kaliksarenów, kontrolowana polimeryzacja rodnikowa, kompleksy palladu – aktywność katalityczna i przeciwnowotworowa.*
2. Oddziaływania antyoksydantów z biomembranami metodą Izotermicznego Miareczkowania Kalorymetrycznego (opiekun: dr hab. Grzegorz Litwinienko).
3. Termoanalityczne badanie aktywności przeciwutleniającej nowych antyoksydantów. (opiekun: dr hab. Grzegorz Litwinienko).
4. Izotermiczne Miareczkowanie Kalorymetryczne jako narzędzie do badań rozpoznania molekularnego. (opiekun: dr hab. Grzegorz Litwinienko)
5. Funkcjonalizacja i badanie właściwości pochodnych fulerenu C₆₀ (opiekunowie: mgr Robert Czochara i dr hab. Grzegorz Litwinienko).
6. Badanie aktywności i mechanizmu antyrodnikowego działania sulforafanu i izotiocyjanianów (opiekunowie: mgr Jakub Cędrowski i dr hab. Grzegorz Litwinienko).
7. Badanie mechanizmu synergistycznego działania wybranych antyoksydantów (dr hab. Grzegorz Litwinienko).
8. Badanie rozpuszczalności związków biologicznie aktywnych w układach micelarnych (opiekun: dr Hanna Wilczura-Wachnik).
9. Badanie procesów transportowych związków aktywnych biologicznie przez modelowe struktury błon naturalnych z wykorzystaniem metod ITC (Isothermal Titration Calorimetry) i spektroskopii UV-vis. (opiekun: dr Hanna Wilczura-Wachnik).
10. Badanie oddziaływań pochodnych cis-platyny z modelowymi strukturami domen bio membranowych metodą ITC (Isothermal Titration calorimetry). – (opiekun: dr Hanna Wilczura-Wachnik).
11. Synteza kompozytu polistyrenu z nanocząstkami srebra o potencjalnie medycznych zastosowaniach. (opiekun: dr Elżbieta Megiel)
12. Zastosowanie metody Dynamicznego Rozpraszania Światła DLS w analizie struktur typu nanocząstka metaliczna pokryta polimerem. (opiekun: dr Elżbieta Megiel)
13. Optymalizacja warunków syntezy nanocząstek złota stabilizowanych rodnikami nitroksylowymi. (opiekun: dr Elżbieta Megiel)

14. Optymalizacja warunków syntezy nanocząstek srebra stabilizowanych rodnikami nitroksylowymi. (opiekun: dr Elżbieta Megiel)
15. Otrzymywanie kopolimeru blokowego o właściwościach amfifilowych z wykorzystaniem kontrolowanej polimeryzacji rodnikowej. (opiekun: dr Elżbieta Megiel)
16. Testowanie reaktora ciśnieniowego firmy Parr (opiekun: dr Agnieszka Krogul).
17. Optymalizacja warunków syntezy N-fenylkarbaminianu etylu w obecności katalizatorów palladowych w reaktorze ciśnieniowym (opiekun: dr Agnieszka Krogul).
18. Optymalizacja warunków syntezy N,N'-difenyloczynnika w obecności katalizatorów palladowych w reaktorze ciśnieniowym (opiekun: dr Agnieszka Krogul).
19. Synteza nanocząstek palladu o potencjalnym zastosowaniu do magazynowania wodoru (opiekun: dr Agnieszka Krogul).
20. Synteza nowych kompleksów metali o właściwościach magnetycznych (opiekun: dr Agnieszka Krogul).
21. Funkcjonalizowanie fulerenów w celu modyfikacji powierzchni metali (opiekunowie: mgr Piotr Piotrowski i dr hab. inż. Andrzej Kaim).
22. Nanodruty organiczne zawierające grupę kotwiczącą do złota (opiekun: dr hab. inż. Andrzej Kaim).
23. Ligandy fenantrolinowe modyfikowane rodnikami nitroksylowymi. (opiekun: dr hab. inż. Andrzej Kaim).
24. Synteza i badanie właściwości fizykochemicznych nanocząstek złota opłaszczonych pochodnymi fulerenu C₆₀ (opiekun: dr hab. inż. Andrzej Kaim i mgr Piotr Piotrowski).
25. Synteza i oczyszczanie nowych thio- pochodnych kaliks[4]arenu (opiekun: dr Tomasz S. Pawłowski).
26. Badanie kompleksotwórczych właściwości nowych thio- pochodnych kaliks[4]arenu (opiekun: dr Tomasz S. Pawłowski).

Zakład Dydaktyczny Chemii Organicznej

Laboratorium Badań Strukturalnych

1. Nieskotemperaturowa oksydacyjna aktywacja niereaktywnych n-alkanów i cykloalkanów oraz ich pochodnych.

Promotor: prof. dr hab. inż. Karol Grela.

Energetyka naszej cywilizacji opiera się (nadal) w dominującej mierze (na zasobach paliw kopalnych: węgla (25%), metanu (21%) i ropy naftowej (34%)). Wielka synteza organiczna również bazuje na tych najbardziej podstawowych prekursorach. Przerób węglowodorów alifatycznych (parafinowych) oraz cyklicznych (nafteny), stanowiących dominującą frakcję ropy naftowej jest jednak kłopotliwy ze względu na niską reaktywność chemiczną tych związków - do ich aktywacji używane są wysokotemperaturowe procesy crackingu, co wiąże się ze znacznym zużyciem energii i jej nieodwracalną dyssypacją do atmosfery ziemskiej w postaci ciepła, wnosząc swój wkład do ogrzewania planety. Dużo lepiej byłoby w sposób

inteligentny niskotemperaturowo aktywować węglowodory nasycone przerabiając je bezpośrednio w pożądane produkty. W projekcie licencjackim podjęte zostaną badania reaktywności wybranych silnych utleniaczy w funkcji temperatury w stosunku do niektórych węglowodorów nasyconych.

Pracownia Chemii Biomolekuł

1. Synteza halogenopochodnych L-tyrozyny znakowanych deuterem i trytem.

Promotor: dr Małgorzata Pająk.

Tematem projektu licencjackiego jest synteza 3'-chloro-L-tyrozyny oraz 3'-fluoro-L-tyrozyny znakowanej w pierścieniu izotopami wodoru. Związki te zostaną otrzymane na drodze wymiany izotopowej zachodzącej pomiędzy protonami pierścienia aromatycznego 3'-Cl-L-Tyr oraz 3'-F-L-Tyr a deuterem lub trytem pochodzącym ze środowiska reakcji (D₂O lub HTO).

2. Enzymatyczna synteza halogenopochodnych L-feniloalaniny znakowanych izotopami wodoru.

Promotor: dr Katarzyna Pałka.

Tematem projektu licencjackiego jest synteza 2'-bromo-L-feniloalaniny oraz 4'-bromo-L-feniloalaniny znakowanej w łańcuchu bocznym izotopami wodoru. Związki te zostaną otrzymane na drodze enzymatycznej reakcji addycji amoniaku do halogenopochodnych kwasu *E*-cynamonowego. Deuter i trytem pochodzi ze środowiska reakcji (D₂O lub HTO).

3. Enzymatyczna synteza halogenopochodnych L-tryptofanu znakowanych izotopami wodoru.

Promotor: dr Elżbieta Winnicka.

Tematem projektu licencjackiego jest synteza bromo- i fluoropochodnych 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 bromo- lub fluoroindol. Deuter i trytem pochodzi ze środowiska reakcji (D₂O lub HTO).

Pracownia Stereokontrolowanej Syntezy Organicznej

Promotor: dr Michał Chmielewski (mchmielewski@chem.uw.edu.pl), Laboratorium Chemii Supramolekularnej, Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych UW, pok. 3.24.

1. Synteza i właściwości katalityczne nowych szkieletów metaliczno-organicznych (Metal Organic Frameworks, MOFs).

MOF-y, czyli Metal-Organic Frameworks, to krystaliczne, porowate i łatwe do modyfikacji struktury, 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 pokazanie, że osadzenie katalizatorów homogenicznych wewnątrz kanałów w MOF-ach ułatwia opracowanie nowych systemów katalitycznych do reakcji tandemowych poprzez ograniczenie wzajemnej dezaktywacji katalizatorów. W ramach tych badań zostanie zsyntezowany szereg połączeń katalizator – MOF, a następnie badane będą ich właściwości katalityczne. Więcej na www.mchmielewski.pl.

2. Fluorescencyjne sensory i transportery anionów na bazie szkieletu 1,8-diaminokarbazolu - synteza i właściwości kompleksotwórcze.

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 realizowanych w ramach grantu Narodowego Centrum Nauki, którego 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, makrocyclicznych 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 www.mchmielewski.pl.

3. Synteza i właściwości kompleksotwórcze fluorescencyjnych rotaksanów i katenanów selektywnych na aniony

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

4. Fotoprzełączalne receptory molekularne na bazie grupy acylohydrazonowej – synteza i badania właściwości kompleksotwórczych

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. Więcej na www.mchmielewski.pl.

Zakład Dydaktyczny Chemii Fizycznej

Dr hab. Wojciech Grochala; wgroch@chem.uw.edu.pl

"Nowe skalowalne mokre metody syntezy stałych magazynów paliwa wodorowego"

Wprowadzenie na szeroką skalę energetyki wodorowej napotyka obecnie na liczne bariery. Jedną z nich jest brak mokrych skalowalnych metod syntezy stałych wysokowydajnych magazynów paliwa wodorowego. W niniejszym projekcie podejmiemy próby syntezy wydajnych, niskotemperaturowych magazynów wodoru opartych o borowodorki metali alkalicznych, ziem alkalicznych oraz metali przejściowych, w oparciu o skalowalne reakcje metatezy prowadzone w rozpuszczalnikach organicznych. Testowana będzie czystość otrzymywanych produktów, wydajność, oraz podjęte zostaną próby zawrócenia do ciągu reakcji produktów ubocznych.

Dr hab. Barbara Pałys; bpalys@chem.uw.edu.pl

Właściwości elektrochemiczne warstw tlenku grafitu i zredukowanego tlenku grafitu

Tlenek grafitu jest substratem do otrzymywania grafenu. Elektrochemiczna redukcja tego związku umożliwia pokrywanie grafenem różnego rodzaju innych powierzchni. W zależności od warunków w jakich prowadzi się redukcję można otrzymać grafen lub grafen

z grupami powierzchniowymi. Część doświadczalna pracy polega na prowadzeniu redukcji tlenku grafitu w roztworach o różnym pH oraz badaniu otrzymanych warstw za pomocą metod elektrochemicznych (badanie elektroaktywności i pojemności warstw).

Prof. dr hab. Wiktor Koźmiński; kozmin@chem.uw.edu.pl

1. Badanie współczynników dyfuzji w roztworach mieszanin

Celem pracy jest poznanie technik pomiaru współczynników dyfuzji metodami spektroskopii NMR, oraz zastosowanie ich w praktyce w badaniu złożonych mieszanin, na przykład substancji spożywczych.

2. Badanie własności cieczy jonowych metodami spektroskopii NMR

Celem pracy jest przebadanie szeregu cieczy jonowych w tym ich dynamiki molekularnej metodami spektroskopii NMR z uwzględnieniem pomiarów relaksacyjnych.

3. Przypisanie sygnałów NMR dla białek nieustrukturyzowanych

Celem pracy jest poznanie i zastosowanie w praktyce opracowanych w naszym zespole technik wielowymiarowych NMR do przypisania sygnałów ^1H , ^{13}C i ^{15}N w łańcuchu peptydowym i grupach bocznych białek częściowo lub całkowicie nieustrukturyzowanych.

4. Wyznaczenie struktury białka lub peptydu

Celem pracy jest poznanie metod NMR służących wyznaczaniu przestrzennej struktury cząsteczek białek.

Dr hab. Marek Szklarczyk; szklarcz@chem.uw.edu.pl

1., „Wyznaczanie wydajności przetwarzania energii słonecznej w fotoogniwach.”

Celem projektu jest opis różnych metod wyznaczania wydajności przetwarzania energii słonecznej w fotoogniwach oraz sprawdzenie uzyskiwanych z nich wartości dla jednego wybranego układu pomiarowego.

2., „Wyznaczanie pasm energetycznych nanostruktur półprzewodników typu SiO_x ”

Celem projektu jest opis różnych metod wyznaczania pasm energetycznych i przerwy energetycznej półprzewodników oraz wyznaczenie tych właściwości dla jednego wybranego układu.

Prof. dr hab. Andrzej Czerwiński; aczerw@chem.uw.edu.pl

1. Rozkład błękitu pruskiego z wykorzystaniem metod elektrochemicznych

Po awarii w Fukushima bardzo ważnym zagadnieniem, z punktu widzenia ochrony radiologicznej, stało się zabezpieczenie zniszczonych rdzeni reaktorów atomowych. Nieustanne chłodzenie stopionego paliwa jądrowego powoduje przedostawanie się do obiegu chłodzącego znaczących ilości produktów rozszczepienia jąder uranu. Jednym z powszechnych sposobów wychwytywania radiocezu, ^{134}Cs , ^{137}Cs , z wody jest jego adsorpcja na błękitie pruskim. W związku ze znaczącymi ilościami tego związku, narastającym problemem jest jego bezpieczna utylizacja. Przedmiotem pracy licencjackiej będzie zbadanie możliwości wykorzystania elektrolizy roztworów wodnych do produkcji silnych utleniaczy, które byłyby w stanie rozkładać z dużą wydajnością ten materiał.

2. Elektrowydzielanie pierwiastków grupy platynowców z roztworów kwasu azotowego(V)

Odpady promieniotwórcze uważane są zwykle za źródło niepotrzebnych i bardzo niebezpiecznych izotopów promieniotwórczych. W dobie zwiększonego zapotrzebowania na pierwiastki rzadkie, np. platynowce, poszukuje się ich nowych źródeł. Jednym z nich może być wypalone paliwo jądrowe, w którym znajdują się znaczące ilości palladu czy

rutenu. Badania prowadzone w ramach pracy licencjackiej będą dotyczyły sposobów skutecznego wydzielenia platynowców z symulowanych ciekłych, wysoce aktywnych odpadów promieniotwórczych (HLLW).

Dr Maciej Chotkowski; mchotk@chem.uw.edu.pl

Wpływ temperatury na stopień adsorpcji ^{133}Xe na podłożach węglowych

Podczas normalnej eksploatacji reaktora jądrowego dochodzi do niewielkich pęknięć osłonek paliwa jądrowego. Produkty rozszczepienia przedostają się do obiegu pierwotnego układu chłodzącego. W celu detekcji rozmiarów uszkodzeń stosuje się pomiary stężeń krótkożyciowych izotopów promieniotwórczych. Izotopy ksenonu, głównie ^{133}Xe , stanowią znaczący procent produktów rozszczepienia jąder uranu a ze względu na krótki okres połowicznego zaniku, np. dla ^{133}Xe wynosi on 5,24 dnia, mogą być wykorzystywane do oznaczania rozmiarów uszkodzeń prętów paliwowych.

Dr hab. Maciej Mazur; mmazur@chem.uw.edu.pl

1. Nanosfery z sulfonianu polistyrenu z inkorporowanymi jonami galu: nowe nośniki w obrazowaniu SPECT.

^{67}Ga jest radionuklidem wykorzystywanym w tomografii emisyjnej pojedynczych fotonów (ang. *Single Photon Emission Computed Tomography*, SPECT) do trójwymiarowego obrazowania guzów, ognisk zapalnych oraz ostrych i przewlekłych zakażeń.

Celem projektu licencjackiego będzie opracowanie metody immobilizacji jonów Ga^{3+} w nanosferach z sulfonianu polistyrenu (PSS). Nanosfery PSS mogą pełnić rolę nośników leków umożliwiając ich dotarcie do ściśle określonego organu lub tkanki. Jednocześnie dzięki inkorporowaniu ^{67}Ga wędrówka nanosfer w organizmie może być śledzona z wykorzystaniem obrazowania SPECT. W ramach realizacji pracy licencjackiej opracowana zostanie metoda inkorporacji kationów Ga^{3+} w nanosferach oraz przeprowadzona charakterystyka fizykochemiczna otrzymanych struktur.

W zależności od dostępności izotopu ^{67}Ga przeprowadzone zostaną również próbne badania *ex vivo* na tkankach zwierzęcych z wykorzystaniem skanera SPECT.

2. Inkorporacja 2-fluoro-2-deoksy-D-glukozy w nanosferach PLGA: nowe nośniki w obrazowaniu PET.

Deoksyglukoza (FDG) znakowana fluorem ^{18}F jest szeroko wykorzystywana w obrazowaniu PET (Pozytronowa Tomografia Emisyjna). Jako pochodna glukozy, FDG jest przyswajana przez tkanki ciała z różną szybkością, dzięki czemu możliwe jest trójwymiarowe obrazowanie m.in. nowotworów.

Celem pracy licencjackiej będzie opracowanie metody inkorporacji FDG w nanosferach z kopolimeru kwasu mlekowego i glikolowego (PLGA) z punktu widzenia zastosowań takich struktur w obrazowaniu PET. Zarówno FDG jak i PLGA są biokompatybilne, nietoksyczne i biodegradowalne. Przeprowadzone zostaną badania mające na celu potwierdzenie obecności deoksyglukozy zainkorporowanej w nanosferach PLGA oraz określenia jej ilości na podstawie badań spektroskopowych (FTIR, Raman) oraz HPLC sprzężonego z MS.

W zależności od dostępności ^{18}F FDG, przeprowadzone zostaną pilotażowe badania *in vivo* na szczurach Wistar z wykorzystaniem skanera PET.

3. Nanosfery z kaprolaktamu modyfikowane nanocząstkami złota: Nowe środki kontrastujące w rentgenowskiej tomografii komputerowej (ang. X-ray Computed Tomography).

Jednym z obiecujących zastosowań nanocząstek złota jest ich wykorzystanie jako środka kontrastującego w rentgenowskiej tomografii komputerowej (CT). Metoda CT polega na rejestracji transmisyjnych obrazów rentgenowskich próbki pod zmienianym krokowo kątem, a następnie rekonstrukcji trójwymiarowej obiektu.

Celem projektu licencyjnego będzie modyfikacja nanosfer z polimeru biodegradowalnego (kaprolaktam) nanocząstkami złota. Dzięki tej modyfikacji nanosfery polimerowe (które mogą pełnić rolę nośników leków) będą mogły być lokalizowane wewnątrz organizmu metodą CT.

W ramach pracy licencyjnej przeprowadzona zostanie charakterystyka eksperymentalna uzyskanych układów (mikroskopia elektronowa, fluorescencja rentgenowska, termogravimetria) oraz wstępne badania z wykorzystaniem skanera CT.

4. Nanosfery z kopolimeru kwasu mlekowego i glikolowego (PLGA) modyfikowane nanocząstkami ferrytu niklowo cynkowego.

Nanosfery z PLGA mogą być wykorzystane jako nanośniki leków podawanych dożylnie lub domięśniowo. Modyfikacja nośników nanocząstkami magnetycznymi w założeniu ma pozwolić na lokalizację cząstek PLGA wewnątrz organizmu z wykorzystaniem obrazowania metodą rezonansu magnetycznego (MRI). Nanocząstki magnetyczne skracają czasy relaksacji T1 i T2 protonów cząsteczek wody będących w sąsiedztwie nanocząstek, dzięki czemu obraz MRI organu, w którym zakumulowały się nanosfery jest zaciemniony. Celem pracy licencyjnej będzie opracowanie nowej metody modyfikacji cząstek PLGA (polimeru biodegradowalnego) nanocząstkami ferrytu niklowo cynkowego, charakteryzacja otrzymanych struktur z wykorzystaniem różnorodnych technik fizykochemicznych (mikroskopowych, spektroskopowych i magnetycznych) oraz przeprowadzenie pomiarów czasów relaksacji protonów na podstawie pomiarów NMR w wodzie oraz próbkach krwi szczura.

Prof. dr hab. Paweł Krysiński; pakrys@chem.uw.edu.pl

1.Kontrola właściwości powierzchniowych superparamagnetycznych układów nanostrukturalnych.

- a) Synteza nanocząstek superparamagnetycznych na bazie tlenku żelaza (SPION)
- b) Modyfikacja właściwości hydrofilowo-hydrofobowych w celu stabilizacji zawiesiny
- c) Wykorzystanie powierzchniowych grup funkcyjnych do dalszej modyfikacji, np. zmianie ładunku powierzchniowego, chromoforu, układu redoks.

2.Nanocząstki superparamagnetyczne jako nośniki radiofarmaceutyków.

- a) Synteza nanocząstek superparamagnetycznych na bazie tlenku żelaza (SPION)
- b) Nadanie powierzchni SPION właściwości koordynacyjnych niektórych kationów metali (reprezentantów radiofarmaceutyków z grupy aktynowców) przez wprowadzenie odpowiednich grup funkcyjnych, np. karboksylowych lub aminowych
- c) Badanie wiązania kationów metali z grupami powierzchniowymi SPION.

3.Oddziaływanie nanocząstek z warstwowymi układami biomimetycznymi.

- a) Synteza nanocząstek superparamagnetycznych na bazie tlenku żelaza (SPION) o właściwościach hydrofilowych lub hydrofobowych
- b) Tworzenie molekularnych biomimetycznych układów warstwowych metodami samoorganizacji, Langmuira-Blodgett lub/i Langmuira-Schaeffera (lub innymi).
- c) Badanie wpływu SPION na strukturę molekularną w/w układów metodami elektrochemicznymi i spektroskopowymi.

Dr hab. Magdalena Pecul-Kudelska; mpecul@chem.uw.edu.pl

1. "Parametry ^{199}Hg NMR kompleksu rtęć - proteinaza K: symulacje teoretyczne"

Praca polega na wykonaniu obliczeń jądrowych stałych ekranowania i stałych sprzężenia spinowego rtęci z pobliskimi jądrami w kompleksie rtęci z enzymem proteinazą K. Obliczenia wykonane będą z uwzględnieniem efektów relatywistycznych za pomocą metody ZORA (zeroth order regular approximation). Celem jest zbadanie, jak różne miejsce wiązania rtęci wpływa na jej parametry NMR.

2. "Symulacja kwantowochemiczna zależności wycinalnych stałych sprzężenia $J(^1\text{H}-^{199}\text{Hg})$ od kąta dwuściennego".

Celem pracy jest opracowanie zależności analogicznej do równania Karplusa łączącej stałą spinowo-spinowego $J(^1\text{H}-^{199}\text{Hg})$ i kąt dwuścienny za pomocą obliczeń kwantowochemicznych uwzględniających efektów relatywistycznych za pomocą metody ZORA (zeroth order regular approximation).

Zakład Dydaktyczny Fizyki i Radiochemii

1. Wpływ podstawienia izotopowego H/D w grupach polarnych i niepolarnych na mieszalność nitrozwiązków z diolami

Przedmiotem pracy będzie wyznaczenie diagramów fazowych dla dwuskładnikowych mieszanin nitrometanu z prostymi diolami (glikol etylenowy, propylenowy) oraz dla ich deuterowanych pochodnych (nitrometan deuterowany w grupie metylowej, diole deuterowane w grupie hydroksylowej).

Opiekun pracy: prof.dr hab. Jerzy Szydłowski/dr Anna Makowska
jszydlow@chem.uw.edu.pl

2. Efekt izotopowy H/D we właściwościach fizykochemicznych wodnych roztworów laktamowych cieczy jonowych

Przedmiotem pracy będą pomiary podstawowych wielkości charakteryzujących cieczy jonowe nowej generacji (laktamowe cieczy jonowe), takich jak gęstość, lepkość, szybkość ultradźwięków, przewodnictwo elektrolityczne, napięcie powierzchniowe w funkcji temperatury. Podobne pomiary będą wykonane dla wodnych roztworów, gdzie dojdzie badanie zależności stężeniowej. Te pomiary będą uzupełnione pomiarami wyżej wymienionych wielkości charakteryzujących roztwory cieczy jonowych w wodzie ciężkiej (D_2O).

Opiekun pracy: prof.dr hab. Jerzy Szydłowski/dr Anna Makowska
jszydlow@chem.uw.edu.pl