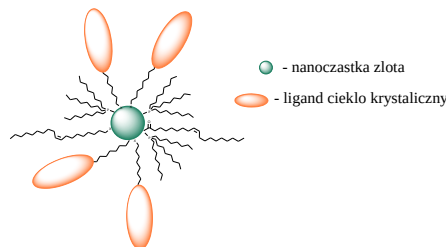


Proponowane tematy prac licencjackich dla studentów kierunku Inżynieria Nanostruktur

Temat: Samoorganizujące nanoczątki złota

Opiekun: dr Joanna Wolska (jokos@chem.uw.edu.pl, www.mieczkowski.edu.pl), Pracownia Chemii Związków Naturalnych, Wydział Chemii UW

Uzyskanie efektywnych metod otrzymywania uporządkowanych struktur oraz kontrola tego uporządkowania jest jednym z ważniejszych wyzwań nauki. Chemiczne przyłączania organicznych związków ciekłokrystalicznych do powierzchni nanocząstek, gdzie metaliczne jądro otoczone jest przez ligandy organiczne, jest niezwykle obiecującą metodą na uzyskanie materiałów samoorganizujących.



Projekt licencjacki będzie łączył metody syntezy organicznej i nieorganicznej z badaniami fizykochemicznymi. Projekt będzie polegał na kilkuetapowej syntezie związku organicznego, który posłuży do powierzchniowej modyfikacji, uprzednio otrzymanych, nanocząstek złota. Następnie uzyskana hybryda zostanie poddana badaniom mikroskopowym (mikroskopia polaryzacyjna oraz TEM), kalorymetrycznym (DSC), spektroskopowym (IR) oraz dyfrakcyjnym (SAXS) w celu określenia samoorganizacji nanocząstek w struktury dwu- lub trójwymiarowe.

Temat: "Zastosowanie syntezy spaleniowej do otrzymywania wybranych nanomateriałów"

Opiekun: Dr hab. inż. Andrzej Huczko, prof. UW

"Synteza spaleniowa to bynajmniej nie tytułowe "spalanie", ale wysokotemperaturowa/wysokociśnieniowa autogeniczna (w sensie energetycznym) i egzotermiczna reakcja typu 'redox', gdzie w wyniku szybkiej reakcji mieszaniny reagentów (silny utleniacz + silny reduktor) w zmodyfikowanej bombie kalorymetrycznej powstają sprzyjające warunki do powstawania nowych materiałów - przykładowo związków niestechiometrycznych, nanometrowych czy też nowych faz. Tą techniką produkowane są w Pracowni Fizykochemii Nanomateriałów efektywnie nanowłókna węgla krzemu ze sproszkowanego krzemu oraz organicznych utleniaczy (przykładowo teflon)."

Temat: Otrzymywanie i charakterystyka multiwarstw polielektrolitowych.

Dr Marcin Strawski

Przeciwnie naładowane polielektrolity tworzą w procesie samoorganizacji układy wielowarstwowe. Układy takie mogą znaleźć zastosowanie w modyfikacji powierzchni stałych (np. w celu podniesienia stopnia zwilżalności danej powierzchni) lub nawet układów komórkowych. Izolacja materiału w membranie polielektrolitowej sprawia, że może on być atrakcyjnym obiektem dla transplantologii. By jednak komórkę zabezpieczyć przed atakiem

immunologicznym, a jednocześnie nie zakłócić jej funkcjonowania użyta membrana musi być cienka i szczelna.

Praca będzie dotyczyła tworzenia i badania układów polielektrolitowych na powierzchniach stałych w celu określenia ich morfologii, grubości (mikroskopia AFM) jak i zdolności do transportu substancji (badania elektrochemiczne), które na dalszych etapach będą użyte do pokrywania materiału komórkowego.

Temat: Porównanie efektywności nanorezonatorów Ag o różnej wielkości i kształcie.

Opiekun: dr hab. Andrzej Kudelski

W trakcie wykonywania pracy planowana jest synteza nanocząstek Ag o różnym kształcie i wielkości, a następnie porównanie efektywności różnych układów zawierających taką samą ilość srebra jako nanorezonatorów do pomiaru widm powierzchniowo wzmocnionego rozpraszania ramanowskiego (SERS). Celem planowanych badań jest sprawdzenie, jakie nanocząstki będą najbardziej efektywne jako podłoża SERS.

Temat: Próby syntezy układów hybrydowych nieorganiczno-organicznych opartych o Ag(II)SO_4 .

dr hab. Wojciech Grochala

Temat: Obliczenia metodami DFT struktury krystalicznej, elektronowej i własności magnetycznych dla faz $\text{M}_2\text{Ag}(\text{SO}_4)_2$ ($\text{M}=\text{Cs}$, NMe_4 , $\text{Ba}_{0.5}$)

dr hab. Wojciech Grochala

Temat: Reaktywność nowego utleniacza, Ag(II)SO_4 , w stosunku do związków organicznych.

dr hab. Wojciech Grochala

Temat: Charakteryzacja nowych faz opartych o Ag(II)SO_4 metodami spektroskopii oscylacyjnej, elektronowej, EPR, i metodami kalorymetryczno-termicznymi

dr hab. Wojciech Grochala

Temat: Magnetyczne i magneto-transportowe badania nanokrystalicznych manganitów

dr hab. Marek Pękała

Temat: Zastosowanie nanostruktur węglowych w elektroforezie kapilarnej.

Prof. M. Trojanowicz

Elektroforeza kapilarna jest nowoczesną metodą chemii analitycznej, coraz powszechniej stosowaną szczególnie w biochemii, analizie klinicznej i środowiskowej. Zastosowanie nanostruktur węglowych może sprzyjać zarówno poprawie rozdzielczości metody - a więc umożliwiając jednoczesną detekcję bardzo wielu związków, lub też wpływać na poprawę wykrywalności w różnych metodach detekcji. Nanostruktury węglowe takie jak nanorurki, włókna oraz grafen - bez lub z dodatkową modyfikacją chemiczną powierzchni - zostaną zastosowane w optymalizacji oznaczania wybranych peptydów i prostych białek.

Czy grafen i nanorurki uszkadzają białka?

Symulacje oddziaływania z enzymami

Prof. dr hab. Sławomir Filipek, e-mail: sfilipek@chem.uw.edu.pl, www: biomodellab.eu

Lepsze zrozumienie zjawisk zachodzących na powierzchni grafenu i nanorurek w szczególności oddziaływań związków chemicznych oraz biomolekuł będzie grało istotną rolę w użyciu tych materiałów jako nanorusztowań w tak różnorodnych zastosowaniach jak procesy katalizy, czujniki chemiczne i biologiczne, nanoelektronika czy ogniwa słoneczne. Badania mechanizmów adsorpcji na powierzchni grafenu i nanorurek, orientacji biomolekuł oraz jak te oddziaływania wpływają na transport elektronów będą miały znaczny wpływ na postęp w przyszłych zastosowaniach tych materiałów.

Praca licencjacka będzie polegała na sprawdzeniu metodami symulacji dynamiki molekularnej w jakim stopniu grafen i nanorurki modyfikują strukturę i własności wybranego enzymu.

- 1. Otrzymywanie i badanie właściwości nowych „inteligentnych” mikro- i nanożeli**
- 2. Mikro- i nanożele jako materiały stosowane w układach kontrolowanego uwalniania substancji czynnych**
- 3. Materiały hybrydowe składające się z mikro-/nanożeli i nanocząstek metali, półprzewodników „kropek kwantowych” jako materiały stosowane w układach kontrolowanego uwalniania substancji czynnych i diagnostyce medycznej**

Opiekun: dr Marcin Karbarz

e-mail: karbarz@chem.uw.edu.pl

Żele polimerowe można określić jako jedną makromolekułę tworzącą trójwymiarową sieć wypełnioną rozpuszczalnikiem. Duża zawartości rozpuszczalnika oraz stała konsystencja powoduje, że materiały te łączą w sobie cechy charakterystyczne dla ciał stałych i cieczy. Specyficzne właściwości tych materiałów i czułość na warunki środowiskowe wpływają na szerokie możliwości ich zastosowania. Jednak głównym ograniczeniem dla praktycznych zastosowań środowisko czułych żeli jest długi czas odpowiedzi na zmieniające się warunki środowiskowe oraz niezadowalające właściwości mechaniczne. Jedną z możliwości rozwiązania tych problemów jest otrzymanie żeli o niewielkich rozmiarach tzw. mikro- i nanożeli. W ostatnich latach żele o rozmiarach mniejszych od 1 μm cieszą się dużym zainteresowaniem w biotechnologii i medycynie jako nośniki leków; chodzi o kontrolowane dostarczanie i uwalnianie leków. Specyficzna budowa żeli powoduje, że powstaje swojego rodzaju zbiornik/rezerwuuar do magazynowania farmaceutyków. W odpowiedzi na fizyczne lub chemiczne bodźce zewnętrzne, mikro- i nanożele mogą uwalniając zawartość, chroniąc ją wcześniej przed szkodliwymi czynnikami zewnętrznymi, np. enzymami trawiennymi, lub chroniąc zdrowe komórki przed toksycznym lekiem. Ważną rzeczą jest, że żelom można nadawać właściwość kierowania się w określone miejsca organizmu poprzez ich biofunkcjonalizację odpowiednimi receptorami zdolnymi do specyficznego rozpoznania konkretnego obiektu (komórki, tkanki) i procesu fizykochemicznego. Uwalnianie z struktury żelu substancji czynnych może następować na kilka sposobów. Jedną z nich opiera się na zmianach objętości żeli pod wpływem niewielkich zmian parametrów otoczenia. Można wykorzystać różnicę w wartości współczynnika dyfuzji molekuł w strukturze żelu napężonego oraz skurczonego. Inny sposób opiera się na gwałtownym kurczeniu się hydrożelu, w trakcie którego woda wydostaje się na zewnątrz wraz z rozpuszczonymi w niej substancjami aktywnymi. Istnieje także możliwość wprowadzenia do organizmu leku uwięzionego w żelu znajdującym się w fazie skurczonej. Żel pod wpływem odpowiedniego bodźca, np. temperatury lub pH, pęcznieje i uwalnia powoli substancję aktywną. Do tego typu zastosowań najbardziej odpowiednie wydają się być żele pH- i termoczułe, gdyż parametry te w sposób naturalny ulegają zmianie w organizmie ludzkim. W innych sposobach wykorzystuje się degradację sieci polimerowej. Degradacji może ulegać cała sieć polimerowa, wiązania w monomerze pełniącym rolę czynnika sieciującego lub wiązania chemiczne odpowiedzialne za utrzymywanie leku w strukturze żelu.

Materiały hybrydowe składające się z mikro-/nanożeli i nanocząstek metali, półprzewodników „kropek kwantowych” posiadają bardzo interesujące właściwości. Składnik żelowy nadaje im m.in. biokompatybilność i czułość na warunki zewnętrzne natomiast nanokryształy ciekawe właściwości optyczne. Przykładowo hybryda utworzona z termo czułego żelu i nanokryształów złota jest czuła zarówno na światło jak i temperaturę. Absorbowane przez

nanokryształy złota światło o określonej długości powoduje lokalne zwiększenie temperatur co skutkuje skurczeniem się termo czułego żelu, który może uwolnić substancje czynną. Natomiast silne właściwości fluorescencyjne „kropek kwantowych” mogą być wykorzystywane w diagnostyce medycznej.

1. Enzymatyczne mikrosensory fluorescencyjne

Praca eksperymentalna, dotyczy przygotowania/ charakterystyki biouczulanych, fluorescencyjnych mikrosfer poliakrylnowych.

Opiekun: Prof. A. Michalska-Maksymiuk

2. Enzymatyczne nanosensory fluorescencyjne.

Praca eksperymentalna, dotyczy przygotowania/ charakterystyki biouczulanych, fluorescencyjnych nanostruktur.

Opiekun: Prof. A. Michalska-Maksymiuk

3. Jednorazowe czujniki elektrochemiczne wykorzystujące nanostruktury węglowe.

Praca eksperymentalna, dotyczy przygotowania/ charakterystyki czujników elektrochemicznych wykorzystujących nanostruktury węglowe (nanorurki, nanowłókna).

Opiekun: Prof. A. Michalska-Maksymiuk

Zastosowanie nanorurek węglowych jako nośników leków i ich oddziaływania z modelowymi błonami komórkowymi.

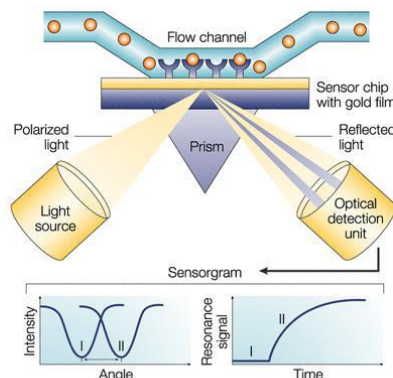
Praca teoretyczna lub eksperymentalna

dr Dorota Matyszewska (dorota.matyszewska@chem.uw.edu.pl), Prof. Renata Bilewicz (bilewicz@chem.uw.edu.pl)

Nanorurki węglowe w badaniach są często stosowane jako alternatywny nośnik leków w porównaniu do szeroko stosowanych liposomów. W porównaniu z nimi, są one odporne na działanie enzymów, lecz w zależności od swoich właściwości mogą wykazywać działanie toksyczne. Celem studenta/tki w ramach przygotowywania pracy licencjackiej będzie dokonanie przeglądu literaturowego na temat nanorurek węglowych modyfikowanych wybranymi lekami antynowotworowymi (np. dokсорubicyną) stosowanych jako potencjalne nośniki leków, ich wpływu na błony komórkowe, a także podsumowanie metod przyłączania leków do nanorurek. W części eksperymentalnej możliwe będzie wykonanie eksperymentów mających za zadanie określenie wpływu nanorurek węglowych modyfikowanych lekiem na właściwości modelowych błon biologicznych przygotowanych metodą Langmuira.

Badanie oddziaływania nanocząstek złota z modyfikowanym podłożem złotym przy użyciu techniki rezonansu plazmonów powierzchniowych (SPR).

Praca eksperymentalna



Nature Reviews | Drug Discovery

dr Agnieszka Więckowska, awiec@chem.uw.edu.pl

Rezonans plazmonów powierzchniowych jest doskonałą techniką do badania oddziaływań biomolekularnych w czasie rzeczywistym, bez potrzeby znakowania poszczególnych indywiduów. Jedna z substancji umieszczana jest na powierzchni sensora podczas gdy druga, rozpuszczona w roztworze, przepływa nad sensorem. Na podstawie zmian kąta przy którym występuje rezonans pomiędzy plazmonami a padającym światłem można wnioskować o sile oddziaływań badanych substancji. Zastosowanie tej techniki nie ogranicza się tylko do białek, ale przy jej użyciu można badać oddziaływania biomolekuł także w układach hybrydowych z nie-biologicznymi komponentami. Praca licencjacka będzie polegała na syntezie nanocząstek złota i zbadaniu metodą SPR ich oddziaływania z modyfikowanym podłożem złotym. Różne sposoby modyfikacji podłoża będą oparte na modyfikowanych nanorurkach otrzymywanych w zespole prof. Biernata z Politechniki Gdańskiej. Układ o największym powinowactwie zostanie użyty jako elektrochemiczny bioczułnik tlenu.

„Mikrobioogniwa przepływowe z wykorzystaniem nanorurek kowalencyjnie modyfikowanych enzymami”

Praca eksperymentalna

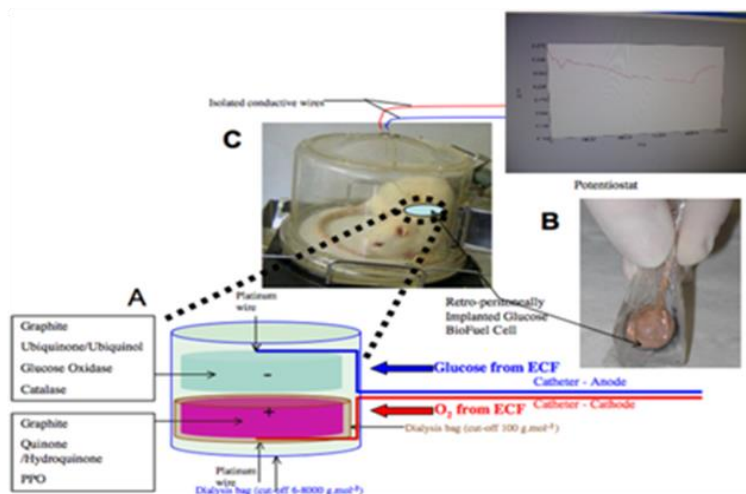
Dr Krzysztof Stolarczyk kstolar@chem.uw.edu.pl, Prof. Renata Bilewicz (bilewicz@chem.uw.edu.pl)

Bioogniwa paliwowe są obecnie uważane za jedne z przyszłych źródeł energii. Enzymatyczne bioogniwa są urządzeniami małej mocy do zasilania czujników, mierników i samozasilających się czujników, implantowanych urządzeń medycznych. Głównym problemem zastosowania jest ich trwałość, która jest zbyt krótka, a także uzyskiwane moce bioogniwa, które są czasami zbyt małe z punktu widzenia zastosowania.

Celem niniejszego projektu jest opracowanie prototypu bioogniwa przepływowego zbudowanego z bioelektrod na bazie nanorurek kowalencyjnie modyfikowanych enzymami do zasilania urządzeń medycznych wszczepialnych pacjentom. Bioogniwo ma wykorzystywać źródła energii naturalnie występujące w płynach ustrojowych (glukozę, rozpuszczony ditlen itd.) i ich konwersję w energię elektryczną.

„Czułnik tlenu do

do



Bioogniwo wszczepione do szczura (Cosnier et al. PLoS ONE 2010,5,e10476)

monitorowania stężenia tlenu w organizmie człowieka”

Praca eksperymentalna

Dr Krzysztof Stolarczyk kstolar@chem.uw.edu.pl, Prof. Renata Bilewicz (bilewicz@chem.uw.edu.pl)

Stopień natlenienia organizmu jest parametrem informującym o stanie natlenienia krwi organizmu ludzkiego. Kontrola natlenienia krwi jest jednym z podstawowych badań wykonywanych

u rodzących się dzieci, inkubowanych noworodków, pacjentów w śpiączce farmakologicznej itd. Obecnie do kontroli nasycenia krwi tlenem najczęściej stosuje się pulsoksymetrię, ogniwa Clarka i gazometrię. Stosowane metody i urządzenia mają dużo wad np. duże rozmiary, wymagają pobrania krwi, dlatego są stosowane sporadycznie w diagnostyce medycznej.

Najnowsze badania wskazują możliwość stosowania bioogniw, jako samo zasilających urządzeń, niewymagających do pracy zewnętrznego źródła energii, dzięki wykorzystaniu substancji chemicznych zawartych w organizmie, przetwarzając energię chemiczną zachodzących reakcji redoks w energię elektryczną, co stanowiłoby przełom w medycynie oraz implantowanych urządzeniach. Do konstrukcji czujnika zostanie zastosowana biobateria zbudowana z anody cynkowej i katody pokrytej nanorurkami węglowymi modyfikowanymi kowalencyjnie lakazą, jako samozasilający się czujnik tlenu wszczepialny do organizmu.

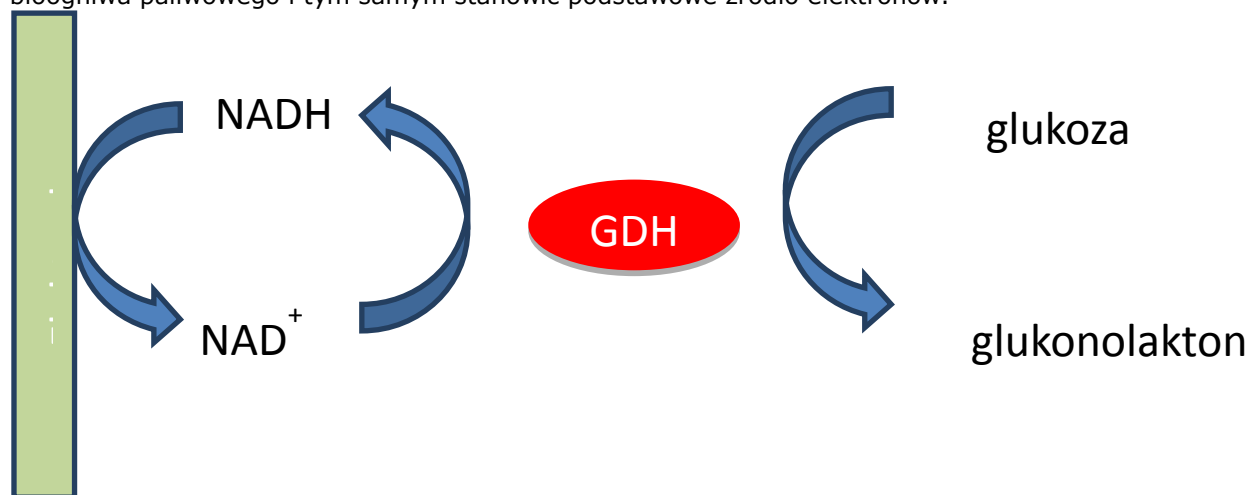


Wpływ sztucznych nośników elektronów na proces utleniania dinukleotydu nikotynoamidoadeninowego.

Praca eksperymentalna

Maciej Karaśkiewicz (mkaraskiewicz@chem.uw.edu.pl), Prof. Renata Bilewicz (bilewicz@chem.uw.edu.pl)

Dinukleotyd nikotynoamidoadeninowy (NAD), z biologicznego punktu widzenia, jest bardzo ważną molekułą, która bierze udział w wielu szlakach metabolicznych organizmów żywych. Jest kofaktorem (labilnym centrum aktywnym) wielu enzymów z grupy oksydoreduktaz będąc jednocześnie donorem elektronów. Jednym z biokatalizatorów, które do pracy wymagają obecności NAD jest NAD-zależna dehydrogenaza glukozy, która katalizuje utlenianie glukozy do kwasu glukonowego i redukcję NAD^+ . Reakcja ta mogłaby zachodzić na anodzie enzymatycznego bioogniwa paliwowego i tym samym stanowić podstawowe źródło elektronów.



Schemat procesu zachodzącego podczas utleniania glukozy katalizowanego przez NAD-zależną dehydrogenazę glukozy.

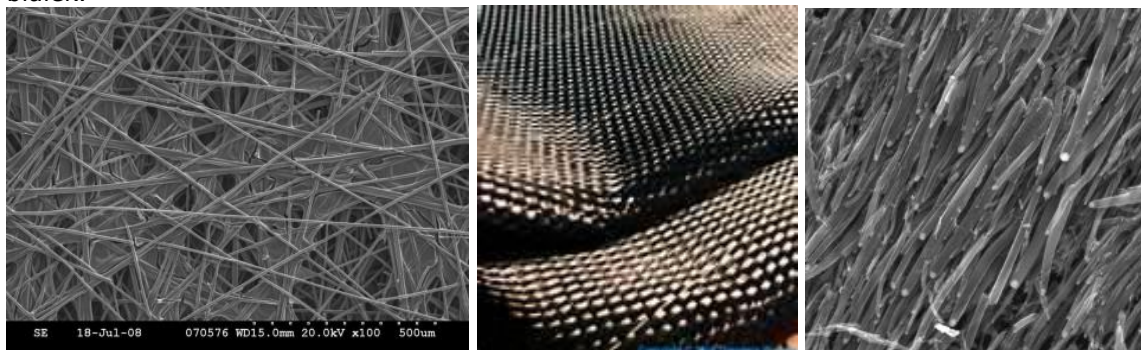
Praktyczne zastosowanie dehydrogenazy glukozy możliwe będzie dopiero wtedy, gdy nadpotencjał utleniania NADH zostanie obniżony do takiej wartości by anoda, skonstruowana w oparciu o ten system posiadała dość niski potencjał. W ramach projektu przeprowadzane będą eksperymenty elektrochemiczne, mające na celu określenie wpływu różnych nośników elektronów (mediatorów) na proces utleniania NADH.

Konstrukcja elektrod bioogniwa paliwowego na różnych materiałach węglowych.

Praca eksperymentalna

Maciej Karaśkiewicz (mkaraskiewicz@chem.uw.edu.pl), Prof. Renata Bilewicz (bilewicz@chem.uw.edu.pl)

Enzymatyczne bioogniwa paliwowe to urządzenia elektrochemiczne, które są w stanie produkować energię elektryczną zużywając proste substancje występujące w przyrodzie, takie jak tlen i glukoza. Ich przewagą nad tradycyjnymi ogniwami jest praca w warunkach bardzo zbliżonych do fizjologicznych, prostota oraz całkowita biokompatybilność i biodegradowalność. Do konstrukcji tego typu układów używa się enzymów z grupy oksydoreduktaz (lakaza, dehydrogenaza glukozy czy oksydaza bilirubiny), które wymagają odpowiedniego unieruchomienia na elektrodzie. Ponieważ biokatalizatory są bardzo delikatnymi białkami nie bez znaczenia jest technika immobilizacji jak również materiał, z którego wykonana jest sama elektroda. Najodpowiedniejszymi materiałami są różne formy węgla, ponieważ w przeciwieństwie do elektrod metalicznych nie powodują denaturacji białek.



Zdjęcia (kolejno od prawej) nanorurek węglowych, przewodzącej tkaniny węglowej oraz mikrowłókien węglowych papieru TORAY.

Tematem pracy jest zbadanie wpływu i różnych materiałów węglowych na procesy katalizowane przez lakazę czy dehydrogenazę glukozy i porównanie otrzymanych wyników. Przeprowadzona zostanie seria eksperymentów elektrochemicznych, a następnie podjęta próba złożenia bioogniwa i badanie jego właściwości w układzie przepływowym.

Lipidowe mezofazy do konstrukcji urządzeń molekularnych

Praca eksperymentalna

dr Ewa Nazaruk, (enaz@chem.uw.edu.pl), Prof. Renata Bilewicz (bilewicz@chem.uw.edu.pl)

Celem projektu będzie opracowanie metody unieruchamiania białka membranowego w ciekłokrystalicznej matrycy o strukturze kubicznej. Umożliwi to badania właściwości tych białek w formie natywnej i wykorzystanie ich do konstrukcji urządzeń molekularnych.

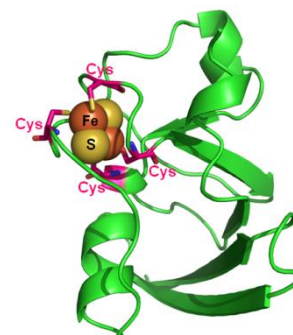
Obecność w strukturze fazy kubicznej zdefiniowanych hydrofilowych i hydrofobowych domen, umożliwia wprowadzenie zarówno rozpuszczalnych jak i membranowych białek, które w tej matrycy zachowują swą natywną strukturę oraz aktywność. Membranowe białka redoks są wyjątkowo wrażliwe i tracą zwykłą aktywność, gdy są izolowane ze swego naturalnego środowiska – błony biologicznej. Te negatywne z punktu widzenia ich zastosowań cechy można usunąć poprzez rekonstytucję tych białek do matrycy, która przypomina naturalne środowisko.

Oksydoreduktaza ferredoksyna - NADP^+ jako potencjalny enzym do konstrukcji bioogniwa

Praca literaturowa lub eksperymentalna

mgr Dominika Łyp (dlyp@chem.uw.edu.pl), Prof. Renata Bilewicz (bilewicz@chem.uw.edu.pl)

Oksydoreduktaza ferredoksyna- NADP^+ (FNR) jest powszechnie występującym enzymem w różnorodnych organizmach żywych. Najczęściej opisywana jest jednak z uwagi na uczestnictwo w ostatnim etapie łańcucha elektronowego przebiegającego w fotosystemie I, gdzie FNR mediuje przeniesienie elektronów ze zredukowanej formy ferredoksyny na NADP^+ z wytworzeniem NADPH. Celem studenta/teki w ramach przygotowywania pracy licencjackiej będzie przegląd literatury poświęconej oksydoreduktazie ferredoksyna- NADP^+ w kontekście zastosowania tego białka do konstrukcji bioogniwa. Możliwe będzie również wykonanie eksperymentów mających na celu określenie wpływu enzymu na gęstości prądów bioogniwa oraz jego wpływ na zachowanie innych enzymów obecnych w układzie.



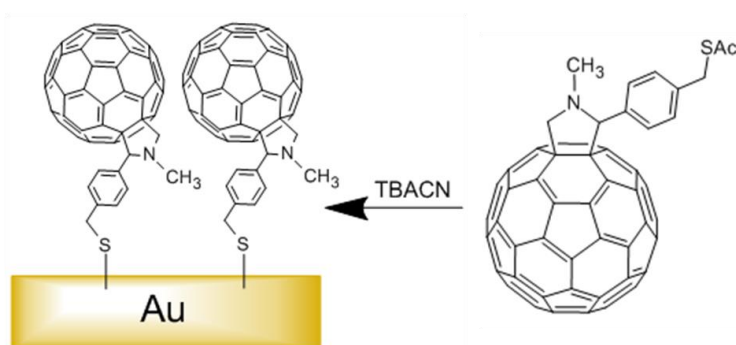
Struktura ferredoksyny

Właściwości elektrochemiczne fullerenu C_{60} modyfikowanego grupą tiooctową

praca eksperymentalna

Joanna Pawłowska, jmalecka@chem.uw.edu.pl

Fulereny są związkami hydrofobowymi, co pozwala na wykorzystanie ich do blokowania aktywności wirusów HIV-1 i HIV-2, odpowiedzialnych za szerzenie się choroby AIDS. Pochodne tiooctowe tych związków charakteryzują się lepszą rozpuszczalnością niż czysty C_{60} . Poznanie właściwości elektrochemicznych badanych pochodnych pozwoli na wykorzystanie ich do tworzenia maszyn molekularnych, np. rotaksanów lub pseudorotaksanów.

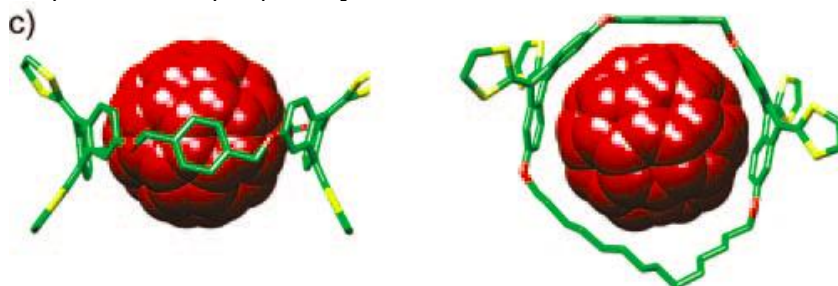


Właściwości elektrochemiczne fullerenu C_{60} modyfikowanego grupą tiooctową i ich zastosowanie w maszynach molekularnych (praca literaturowa)

Joanna Pawłowska, jmalecka@chem.uw.edu.pl

Fulereny są związkami hydrofobowymi, co pozwala na wykorzystanie ich do blokowania aktywności wirusów HIV-1 i HIV-2, odpowiedzialnych za szerzenie się choroby AIDS. Pochodne tych związków charakteryzują się natomiast lepszą rozpuszczalnością niż czysty C_{60} i mogą być wykorzystane w

wielu dziedzinach nauki - w nanomedycynie czy nanotechnologii do tworzenia przełączników molekularnych sterowanych potencjałem.



J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, 3184–3190

Magnetyczne hydrożele oparte na łańcuchu poliakrylamidowym. Wytwarzanie oraz badanie przejść fazowych wywołanych polem magnetycznym

Opiekun pracy: dr Wojciech Hyk

Wydział Chemii UW

ul. Pasteura 1

02-093 Warszawa

pokój nr 152

e-mail: wojhyk@chem.uw.edu.pl

Hydrożele traktować można jako sieci połączonych ze sobą w nieregularny sposób łańcuchów polimerowych, wypełnione wodnym roztworem. Łączą zatem cechy ciał stałych oraz cieczy. Wprowadzenie do matrycy hydrożelu cząstek wykazujących silne właściwości magnetyczne nadaje hydrożelom właściwości magnetyczne. Mono-domeny cząstek ferromagnetycznych o rozmiarach w zakresie mikro i nanometrów są elementarnymi nośnikami momentu magnetycznego w tego typu żelach. Dodatkowo, hydrożele oparte na łańcuchu poliakrylamidowym (np. N-izopropylakrylamidowym, NIPA) należą do grupy tzw. „inteligentnych żeli”, tj. wrażliwych na zmianę warunków otoczenia. Hydrożele NIPA ulegają przejściu fazowemu wywołanemu zmianą temperatury otoczenia. Zmiana temperatury wywołuje drastyczną zmianę objętości żelu (przejście od stanu napężnialego do stanu skurczonego). Odkryto, że kurczliwość żeli może odgrywać funkcje, które realizują mięśnie, aktywatory w zaawansowanej robotyce, mikromaszynach, biomedycynie oraz w układach kontrolowanego transportu.

Celem pracy jest znalezienie optymalnej drogi syntezy żelu opartego na łańcuchu N-izopropylakrylamidowym zawierającego mikro- lub nanocząstki o właściwościach ferromagnetycznych. Uzyskany żel magnetyczny w pierwszej fazie badań scharakteryzowany zostanie pod kątem zmian namagnesowania wywołanego zewnętrznym polem magnetycznym. Kolejne fazy badań będą związane z określeniem wpływu zewnętrznego pola magnetycznego na dynamikę przejścia fazowego magnetycznego żelu oraz na transport substancji w matrycy żelowej w fazie napężnialej oraz skurczonej.

Tytuł: Zbadanie wpływu sprzężenia rotacji i wibracji oraz efektów relatywistycznych na ciepło właściwe i entropię molową wodoru.

Opiekun: prof. dr hab. Bogumił Jeziorski

Opis: Przewiduje, że korzystając z niedawno obliczonych bardzo dokładnych poziomów rowibracyjnych molekuł wodoru i deuteru student wykona obliczenia ciepła właściwego i entropii molowej tych substancji przy pomocy poziomów obliczonych na różnym poziomie dokładności, wykona wykresy zależności tych funkcji termodynamicznych od temperatury i przedyskutuje wpływ różnych efektów fizycznych na ostateczny wynik. Jako punkt odniesienia należy przyjąć standardowy model rotatora sztywnego/oscylatora

harmonicznego.

Tytuł: Modelowanie oddziaływań kompleksów van der Waalsa zawierających fulereny za pomocą metod *ab initio*

Opiekun: Dr hab. Tatiana Korona

Opis: Trwałość kompleksów van der Waalsa, w których jednym ze składników jest cząsteczka fulerenu, jest interesującym zagadnieniem badawczym z uwagi na duże zainteresowanie fulerenami i ich pochodnymi. W proponowanej pracy przeprowadzona będzie analiza składników energii oddziaływania między cząsteczkami kompleksu za pomocą metod *ab initio*, takich jak np. rachunek zaburzeń o adaptowanej symetrii SAPT.

Tytuł: Samoorganizacja w układach zawierających kopolimery - symulacja metodą Monte Carlo.

Opiekun: Dr hab. Andrzej Sikorski

Opis: Statystyka łańcucha polimerowego. Reprezentacja makrocząsteczek w uproszczonych modelach. Zastosowanie modeli sieciowych polimerów. Symulacja Monte Carlo: algorytmy wzbogacania/usuwania PERM oraz wymiany kopii. Badanie wpływu architektury wewnętrznej makrocząsteczek (liniowe, cykliczne, gwiazdźście rozgałęzione) oraz sekwencji segmentów (kopolimery naprzemienne, losowe, blokowe) na strukturę układu. Wizualizacja uzyskanych mikrostruktur.

Tytuł: Przewodnictwo w nanokompozytach polimerowych.

Opiekun: Dr hab. Andrzej Sikorski

Opis: Proste modele wykorzystywane do badania własności nanokompozytów polimerowych. Przewodnictwo w układach zawierających polimery. Perkolacja i maksymalne wypełnienie powierzchni. Perkolacja w złożonych układach molekularnych, a zwłaszcza w układach zawierających łańcuchy polimerowe. Metoda losowej adsorpcji sekwencyjnej. Algorytmy dla dużych gęstości (algorytm ruchów kooperacyjnych, algorytm cieczy dynamicznej). Algorytm Hoshena-Kopelmana. Analiza struktury warstw kompozytowych

TEMATY PRAC LICENCJACKICH dla makrokierunku INŻYNIERIA NANOSTRUKTUR

- 1) "Modelowanie struktury elektronowej taśm grafenowych metodami *ab initio*"
- 2) "Modelowanie struktury elektronowej taśm grafenowych domieszkowanych borem i azotem używając metody ciastego-wiązania (tight-binding)"
- 3) "Modelowanie efektów kwantowych w laserowych strukturach azotkowych"
- 4) "Model pól silowych dla grafenu"

Tematy 1), 2) & 4) są ściśle związane z realizacją projektu SiCMAT, Innowacyjna Gospodarka, "Opracowanie Technologii Otrzymywania Nowoczesnych Materiałów Półprzewodnikowych na Bazie Węgla Krzemu"