

**Proponowane tematy prac licencjackich prowadzonych na Wydziale Chemii UW
w roku akademickim 2014/2015 dla studentów kierunku Energetyka i chemia
jądrowa.**

**Pracownia Fizykochemicznych Podstaw Technologii Chemicznej - Zakład
Dydaktyczny Technologii Chemicznej**

1. *Indywidualny temat zgłoszony przez kandydata / kandydatkę i przedyskutowany z przyszłym opiekunem. Zakres tematyki realizowanej w Pracowni: chemia rodników, autooksydacja lipidów, antyoksydanty, flawonoidy, katecholaminy, kalorymetria, mikrofluidyka, kontrolowana polimeryzacja rodnikowa, kompleksy palladu – aktywność katalityczna i przeciwnowotworowa.*
2. Synteza funkcjonalizowanych fulerenów C₆₀ oraz C₇₀ z użyciem reakcji cykloaddykcji (opiekunowie: mgr Piotr Piotrowski i dr hab. inż. Andrzej Kaim, prof. UW).
3. Zastosowanie wysokosprawnej chromatografii cieczowej (HPLC) do rozdziału złożonych mieszanin pochodnych fulerenów C₆₀ oraz C₇₀ (opiekunowie: mgr Piotr Piotrowski i dr hab. inż. Andrzej Kaim, prof. UW).
4. Zbudowanie i rozruch stanowiska do mikroprzepływowego tworzenia liposomów (dr inż. Krzysztof Churski)
5. Badanie kinetyki reakcji erucyny i erysoliny z rodnikiem dpph w rozpuszczalnikach o różnej polarności (opiekunowie: mgr Jakub Cędrawski i dr hab. Grzegorz Litwinienko, prof. UW)
6. Właściwości antyoksydacyjne erucyny i erysoliny (opiekunowie: mgr Jakub Cędrawski i dr hab. Grzegorz Litwinienko, prof. UW)
7. Badanie rozpuszczalności związków biologicznie aktywnych w układach micelarnych (opiekun: dr Hanna Wilczura-Wachnik)
8. Badanie oddziaływań peptyd- układ modelowy biomembrany metodami ITC i UV-vis. (opiekun: dr Hanna Wilczura-Wachnik)
9. Monitoring on-line wpływu ciśnienia i temperatury na struktury micelarne. (opiekun: dr Hanna Wilczura-Wachnik)
10. Zastosowanie ITC do badania funkcjonalnej aktywności peptydów i polipeptydów. (opiekun: dr Hanna Wilczura-Wachnik)
11. Oddziaływania antyoksydantów z biomembranami metodą Izotermicznego Miareczkowania Kalorymetrycznego (opiekun: dr hab. Grzegorz Litwinienko lub dr inż. Katarzyna Jodko-Piórecka).
12. Izotermiczne Miareczkowanie Kalorymetryczne jako narzędzie do badań rozpoznania molekularnego. (opiekun: dr hab. Grzegorz Litwinienko, prof. UW)
13. Funkcjonalizacja i badanie właściwości pochodnych fulerenu C₆₀ (opiekunowie: mgr Robert Czochara i dr hab. Grzegorz Litwinienko, prof. UW).
14. Wykorzystanie metod DSC i TG do otrzymywania nanocząstek metali (opiekunowie: dr Agnieszka Krogul, dr inż. Jadwiga Skupińska).

15. Synteza nanocząstek metali w obecności surfaktanta (opiekunowie: dr Agnieszka Krogul, dr inż. Jadwiga Skupińska).
16. Funkcjonalizacja alkanów w obecności kompleksów metali (opiekunowie: dr Agnieszka Krogul, dr inż. Jadwiga Skupińska).
17. Wysokociśnieniowe procesy z wykorzystaniem CO (opiekunowie: dr Agnieszka Krogul, dr inż. Jadwiga Skupińska).
18. Testowanie reaktora ciśnieniowego firmy Parr (opiekunowie: dr Agnieszka Krogul, dr inż. Jadwiga Skupińska).
19. Synteza nanocząstek palladu o potencjalnym zastosowaniu do magazynowania wodoru (opiekunowie: dr Agnieszka Krogul, dr inż. Jadwiga Skupińska).
20. Optymalizacja warunków syntezy nanocząstek srebra stabilizowanych rodnikami TEMPO (opiekun dr Elżbieta Megiel).
21. Synteza kompozytu polistyrenu z nanocząstkami srebra o potencjalnie medycznych zastosowaniach (opiekun: dr Elżbieta Megiel).

Zakład Dydaktyczny Chemii Organicznej

Pracownia chemii Związków Naturalnych

Nanotechnologia w dostarczaniu leków: synteza i aplikacje hybryd organiczno-nieorganicznych na przykładzie nanocząstek złota pokrytych glutationem, sprzężonych z kwasem foliowym.

Promotor: dr Michał Wójcik (mwojcik@chem.uw.edu.pl), pok. 235, I p., Wydział Chemii.

Praca teoretyczna lub praktyczna.

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

Proponowana literatura prezentująca perspektywy tematu:

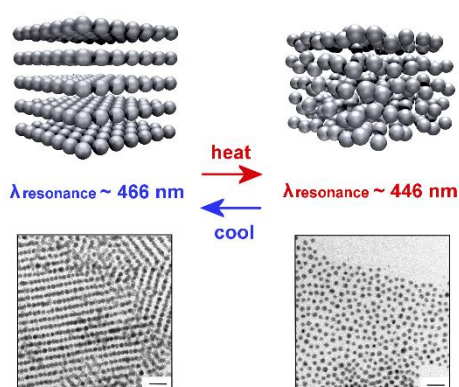
1. „Nanocarriers as an emerging platform for cancer therapy”, Peer, D., Karp, J.M., Hong, S., Farokhzad, O.C., Margalit, R., Langer, R. 2007, *Nature Nanotechnology* 2 (12), pp. 751-760
2. „Magnetic nanoparticles in MR imaging and drug delivery”, Sun, C., Lee, J.S.H., Zhang, M. 2008
Advanced Drug Delivery Reviews 60 (11), pp. 1252-1265

3. „Nanomedicine: a systems engineering approach” ; Mingjun Zhang, Ning Xi; PSPP Ltd. Singapore 2009

Synteza dynamicznie kontrolowanych metamateriałów zbudowanych z nanocząstek srebra – na drodze do „peleryny niewidki”.

Promotor: dr Wiktor Lewandowski (wlewandowski@chem.uw.edu.pl), pok. 235, I p., Wydział Chemii.

1011Praca obejmuje syntezę (związków organicznych, nanocząstek) i badania fizykochemiczne (NMR, TEM, SAXS, WAXRD, TGA, XPS, UV-Vis) – nacisk na syntezę organiczną, nieorganiczną i badania fizykochemiczne w zależności od preferencji studenta. W



trakcie pracy student przejdzie szkolenie z wykonywania pomiarów lub analizy wyników badań zleczanych. Praca polega na przygotowaniu nanocząstek srebra i złota, które na powierzchni pokryte są ciekłymi kryształami, które również syntezowane są przez studenta. Takie nanocząstki, pod wpływem temperatury organizują się w przestrzennie uporządkowane struktury. Superstruktury zbudowane z nanocząstek wykazują ciekawe właściwości optyczne i mogą być zastosowane do uzyskania metamateriałów (typu

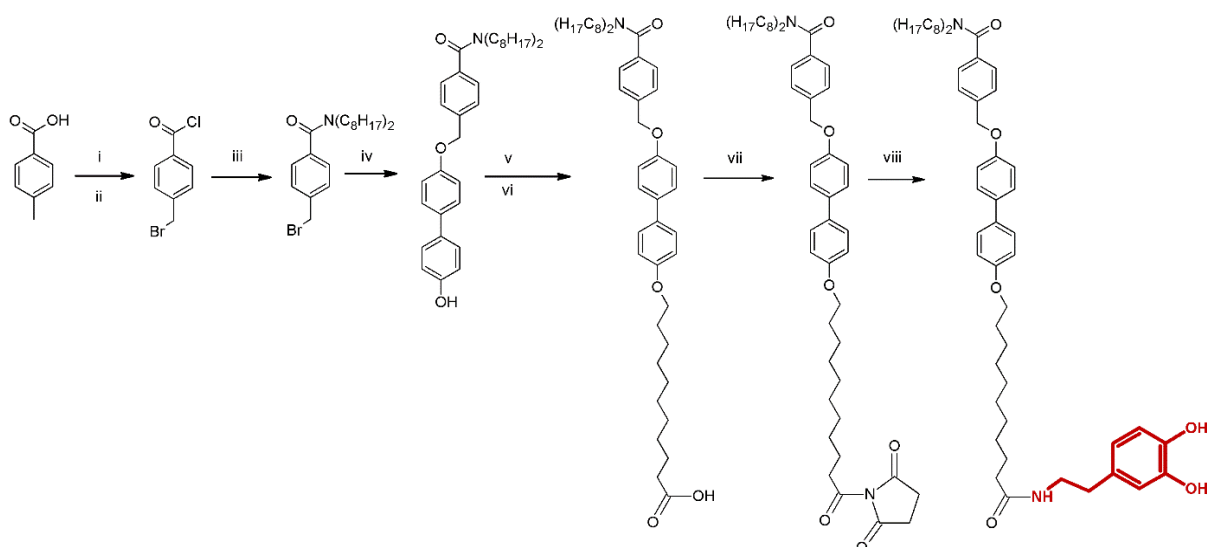
„peleryna niewidka”).

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

Synteza mezogenicznych i promezogenicznych pochodnych dopaminy do modyfikacji powierzchni nanocząstek magnetycznych" oraz "Dynamiczna kontrola ciekłokrystalicznych nanoukładów za pomocą oddziaływan supramolekularnych.

Promotor: dr Michał Wójcik (mwojcik@chem.uw.edu.pl).

Praca będzie obejmować wieloetapową syntezę pochodnych ligandów ciekłokrystalicznych lub ligandów zdolnych do generowania zachowania ciekłokrystalicznego (promezogenicznych) na drodze syntezy wieloetapowej. W wyniku syntezy otrzymane zostaną pochodne zakończone fragmentem pochodzącym od dopaminy, pozwalającym na modyfikację powierzchni nanocząstek magnetycznych (tlenku żelaza, kobaltu). Poniżej zamieszczono proponowany schemat syntezy:

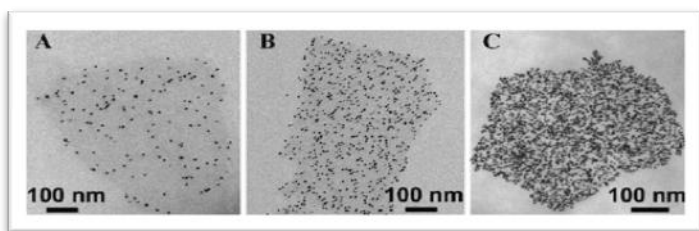


Synteza hybrydowych nanomateriałów typu grafen/nanocząstki metali o kontrolowanych parametrach strukturalnych.

Promotor: dr Wiktor Lewandowski (wlewandowski@chem.uw.edu.pl), pok. 235, I p., Wydział Chemii.

Praca obejmuje syntezę (tlenku grafenu, grafenu, nanocząstek) i badania fizykochemiczne (TEM, SAXS, WAXRD, TGA, XPS, UV-Vis) – nacisk na syntezę i badania w zależności od preferencji studenta. W trakcie pracy student przejdzie szkolenie z wykonywania pomiarów lub analizy wyników badań zleczanych.

1Opis: Struktury hybrydowe, składające się z grafenu i nanocząstek metali są interesujące zarówno dla naukowców, jak i inżynierów, ze względu na szerokie możliwości zastosowań.



W niniejszym projekcie proponuję rozwiązanie problemów z uzyskiwaniem takich struktur poprzez kowalencyjne przyłączenie nanocząstek do karboksylowej pochodnej grafenu.

Rys. Przykładowe zdjęcie TEM grafenu udekorowanego nanocząstkami – takie struktury będą uzyskiwane w projekcie.

Modyfikacje chemiczne nanocząstek metali za pomocą pochodnych związków naturalnych i ich zastosowanie w nanomedycynie.

Promotor: dr Michał Wójcik (mwojcik@chem.uw.edu.pl), pok. 235, I p., Wydział Chemii.

Natura od zawsze była jedną z podstawowych inspiracji dla nauki. Choć metody syntezy totalnej oraz przemysłowej syntezy chemicznej są wciąż rozwijane, to coraz większy nacisk kładzie się na rozwój metod biotechnologicznych, pozwalających np. na otrzymanie skomplikowanych substancji przy użyciu organizmów żywych. Z analogiczną sytuacją

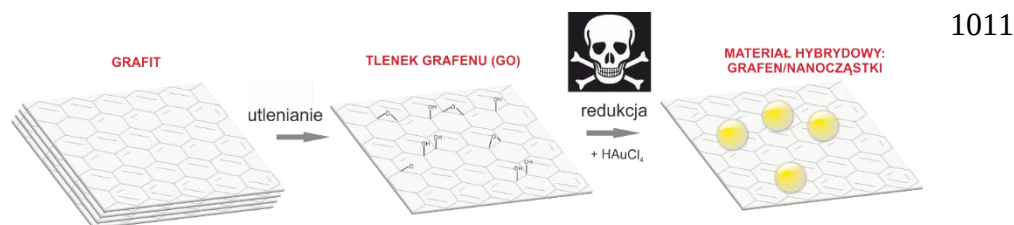
możemy mieć do czynienia w przypadku nowych substancji leczniczych opartych na nanomateriałach. Perspektywa połączenia nanoprzenośników oraz obecnie stosowanych substancji pochodzenia naturalnego może wiązać się ze znacznym obniżeniem kosztów syntez chemicznych oraz ich szkodliwości w stosunku do środowiska naturalnego, przez co będzie możliwa realizacja postulatów „green chemistry”.

W proponowanej pracy student skupi się na obecnie opisanych w literaturze przykładach połączenia substancji naturalnych, bądź pochodzenia naturalnego z nanomateriałami. Celem będzie opisanie możliwych dróg syntez, przedstawienie wad i zalet takich połączeń oraz ewentualnych perspektyw zastosowania tych substancji w terapii.

Charakterystyka fizykochemiczna grafenu uzyskiwanego na drodze mikrobiologicznej redukcji.

Promotor: dr Wiktor Lewandowski (wlewandowski@chem.uw.edu.pl), pok. 235, I p.,
Wydział Chemii.

Praca obejmuje syntezę (tlenku grafenu) i badania fizykochemiczne (TEM, SAXS, WAXRD, TGA, XPS, UV-Vis). W trakcie pracy student przejdzie szkolenie z wykonywania pomiarów lub analizy wyników badań zleczanych. Następnie, we współpracy z Wydziałem Biologii UW przeprowadzona zostanie mikrobiologiczna redukcja tlenku grafenu do grafenu (oraz w obecności jonów metali do grafenu modyfikowanego nanocząstkami), używając bakterii zdolnych do „oddychania” tlenkiem grafenu. Ostatnim etapem będzie opracowaniem metody oczyszczania grafenu od bakterii oraz analiza fizykochemiczna uzyskanego materiału. Praca ma na celu zastąpienie szkodliwych chemikaliów używanych na etapie redukcji „zieloną” metodą biologiczną. Schemat metody chemicznej poniżej.



Nanokrystaliczna celuloza materiałem przyszłości - studia literaturowe.

Promotor: dr Joanna Matraszek (jmatraszek@chem.uw.edu.pl).

Nanokrystaliczna celuloza (NCC) cieszy się w ostatnich latach coraz większym zainteresowaniem ze względu na swoje właściwości fizykochemiczne. Jej atrakcyjność jako nowego materiału zwiększa fakt, że jest pozyskiwana ze źródeł naturalnych, co wpisuje się w ogólny trend rozwoju ekoprzemysłu.

W ramach pracy licencjackiej zostanie zebrany materiał dotyczący sposobów syntezy, modyfikacji powierzchni a także zastosowania NCC.

Modyfikacja powierzchni NCC (nanokrystalicznej celulozy) przy użyciu cząsteczek promezogenicznych.

Promotor: dr Joanna Matraszek (jmatraszek@chem.uw.edu.pl).

W ostatnim okresie nanokrystaliczna celuloza cieszy się dużym zainteresowaniem badaczy ze względu na jej właściwości fizykochemiczne, dzięki którym możliwe będzie zastosowanie jej nie tylko w codziennym życiu ale także w zaawansowanych technologiach. Wprowadzenie zmian w budowie cząsteczki, na ogół, skutkuje zmianą niektórych właściwości badanego materiału.

W trakcie wykonywania pracy licencjackiej student otrzyma cząsteczki promezogeniczne i za ich pomocą zmodyfikuje powierzchnię NCC a następnie zbada wpływ opłaszczenia na właściwości nanocelulozy.

Synteza ligandów służących do powierzchniowych modyfikacji nanocząstek złota.

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

Efektywnych metody otrzymywania uporządkowanych struktur oraz kontrola tego uporządkowania są jednym z ważniejszych wyzwań nauki. Chemiczne przyłączania organicznych związków ciekłokrystalicznych do powierzchni nanocząstek jest niezwykle obiecującą metodą na uzyskanie materiałów samoorganizujących.

W trakcie trwania projektu licencjackiego zostanie przeprowadzona kilkustopniowa synteza związków organicznych o właściwościach ciekłokrystalicznych, które posłużą do powierzchniowej modyfikacji, uprzednio otrzymanych, nanocząstek złota.

Nanomateriały hybrydowe w zastosowaniach medycznych – badania literaturowe.

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

Nanocząstki metali (NP) o powierzchniowych modyfikacjach za pomocą związków o działaniach biologicznych mają potencjalnie szerokie zastosowanie w medycynie. Projekt licencjacki polegał będzie na badaniach literaturowych dotyczących terapeutycznych.

Synteza i badanie aktywności biologicznej heterodimerów serotoniny i fluoro-podstawionej takryny, (student: Marta Ważyńska).

Promotor: dr Anna Zawadzka.

Choroba Alzheimera (AD) jest najczęstszym typem demencji występującej u osób starszych. Nie udało się jak dotąd opracować skutecznej terapii przyczynowej, a leczenie koncentruje się na łagodzeniu symptomów choroby poprzez stosowanie odwracalnych inhibitorów cholinesteraz. Celem pracy licencjackiej będzie synteza heterodimerów zawierających serotoninę oraz podstawioną atomem fluoru takrynę, a następnie określenie stopnia inhibicji acetylo- oraz butyrylocholinoesterazy w badaniach biologicznych *in vitro*.

Opracowanie metody reakcji znakowania atomem fluoru wybranych molekuł o działaniu cholinomimetycznym, (student: Paweł Halik).

Promotor: dr Anna Zawadzka.

W celu oceny możliwości pokonywania bariery krew-mózg wykorzystuje się badanie PET-metodę umożliwiającą również monitorowanie lokalizacji znakowanych molekuł.

Celem pracy licencjackiej będzie opracowanie metody wprowadzania atomu fluoru do cząsteczek wybranych cholinomimetyków, będącą teoretyczną podstawą do analogicznej

reakcji wprowadzania znakowanego fluoru ^{18}F . Związki te zostaną następnie poddane badaniom biologicznym w kierunku inhibicji ludzkich cholinoesteraz.

Pracownia Chemii Biomolekuł

Synteza halogenopochodnych L-tyrozyny znakowanych deuterem i trytem.

Kierownik projektu: dr Małgorzata Pająk, Pracownia Chemii Biomolekuł.

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 (D_2O lub HTO).

Enzymatyczna synteza halogenopochodnych L-fenylalaniny znakowanych izotopami wodoru.

Kierownik projektu: dr Katarzyna Pałka, Pracownia Chemii Biomolekuł.

Tematem projektu licencjackiego jest synteza 2'-bromo-L-fenylalaniny oraz 4'-bromo-L-fenylalaniny 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 (D_2O lub HTO).

Enzymatyczna synteza halogenopochodnych L-tryptofanu znakowanych izotopami wodoru.

Kierownik projektu: dr Elżbieta Winnicka, Pracownia Chemii Biomolekuł.

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 (D_2O lub HTO).

Laboratorium Chemii Supramolekularnej.

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

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

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.

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

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

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, makrocyklicznych i makrobicyklicznych receptorów na aniony, a następnie zostaną zbadane ich właściwości kompleksotwórcze i transportowe w stosunku do modelowych anionów. Praca będzie okazją do praktycznego zapoznania się z problematyką i metodami chemii supramolekularnej. Więcej na www.mchmielewski.pl.

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

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

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 makrocyklizację 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.

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

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

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 TEORETYCZNEJ I
KRYSTALOGRAFII**

Opiekun: dr hab. **Tatiana Korona** Pracownia Chemii Kwantowej

tania@tiger.chem.uw.edu.pl

1. Efekty podstawnikowe w widmach elektronowych dla wybranych cząsteczek.

Celem pracy zbadanie zależności niskoenergetycznej części widma elektronowego dla wybranej klasy cząsteczek od rodzaju podstawników oraz ich umiejscowienia. Praca będzie wymagała analizy wyników obliczeń dla wzbudzeń elektronowych, obliczonych metodami ab initio oraz TD-DFT dla zoptymalizowanych geometrii cząsteczek. Planowana jest też analiza macierzy gęstości przejścia oraz różnicowych gęstości elektronowych.

Od studenta wymagana jest podstawowa wiedza nt. chemii teoretycznej, np. na poziomie wykładu Wstęp do chemii kwantowej (WCh UW, 3. semestr) lub wykładu Mechanika i chemia kwantowa z elementami spektroskopii molekularnej (ChJ/IN UW, 4. semestr).

2. Energie oddziaływania w kompleksach z wiązaniami wodorowymi - analiza za pomocą metod supermolekularnych oraz rachunku zaburzeń o adaptowanej symetrii.

Trwałość wybranych kompleksów międzycząsteczkowych o znaczeniu biologicznym, stabilizowanych wiązaniami wodorowymi, będzie zbadana z wykorzystaniem rozkładu energii oddziaływania na składowe o jasnej interpretacji fizycznej.

Od studenta wymagana jest podstawowa wiedza nt. chemii teoretycznej, np. na poziomie wykładu Wstęp do chemii kwantowej (WCh UW, 3. semestr) lub wykładu Mechanika i chemia kwantowa z elementami spektroskopii molekularnej (ChJ/IN UW, 4. semestr).

3. Modelowanie oddziaływań kompleksów van der Waalsa zawierających fulereny za pomocą metod ab initio

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 fulerenu a cząsteczką gościa za pomocą metod ab initio, takich jak np. rachunek zaburzeń o adaptowanej symetrii SAPT oraz przeprowadzone będzie oszacowanie stabilności kompleksu. Od studenta wymagana jest podstawowa wiedza nt. chemii teoretycznej, np. na poziomie wykładu Wstęp do chemii kwantowej (WCh UW, 3. semestr) lub wykładu Mechanika i chemia kwantowa z elementami spektroskopii molekularnej (ChJ/IN UW, 4. semestr).

Zakład Dydaktyczny Chemii Fizycznej

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

1. Oznaczanie izotopów promieniotwórczych w próbkach gleb

Przedmiotem realizowanej pracy licencjackiej będzie oznaczanie izotopów gamma promieniotwórczych zawartych w dostarczonych przez studenta próbkach gleb. Charakterystyka dostarczonego materiału zostanie dokonana z wykorzystaniem detektora półprzewodnikowego HPGe.

2. Oznaczanie izotopów promieniotwórczych w próbkach nawozów sztucznych

Przedmiotem realizowanej pracy licencjackiej będzie oznaczanie izotopów gamma promieniotwórczych zawartych w próbkach nawozów sztucznych. Charakterystyka dostarczonego materiału zostanie dokonana z wykorzystaniem detektora półprzewodnikowego HPGe.

3. Charakterystyka źródła neutronowego

Przedmiotem realizowanej pracy licencjackiej będzie charakterystyka źródła neutronowego. W tym celu zostaną aktywowane stabilne izotopy np.: indu czy jodu, zawarte w solach próbek ciekłych i stałych. Charakterystyka próbek zostanie dokonana z wykorzystaniem detektora ciekłoscyntylacyjnego.

Dr hab. Michał Grdeń mgrden@chem.uw.edu.pl

Zastosowanie analizy aktywacyjnej w badaniach nad elektrochemicznym rozpuszczaniem metali (2 osoby)

Celem projektu jest zbadanie możliwości zastosowania analizy aktywacyjnej w badaniach nad rozpuszczaniem anodowym elektrod metalicznych w warunkach, w których typowe techniki elektrochemiczne napotykają problemy. Warunki takie powstają gdy elektroda jest spolaryzowana w zakresie silnego wydzielania tlenu. Dwie techniki które są prawdopodobnie najczęściej stosowane w elektrochemii w warunkach in-situ do pomiaru rozpuszczalności elektrod, t.j. wirująca elektroda z pierścieniem (RRDE) oraz elektrochemiczna waga kwarcowa (EQCM), napotykają tutaj wyraźne problemy: udział prądów redukcji tlenu na pierścieniu RRDE może maskować prądy redukcji jonów pochodzących z rozpuszczania elektrody a powstawanie i odrywanie pęcherzy gazu od powierzchni elektrody EQCM może w znaczący sposób zakłócić jej odpowiedź. Jednym z rozwiązań jest użycie metod ex-situ pozwalających na identyfikację i pomiar ilościowy jonów pochodzących z rozpuszczania elektrody w próbkach badanego elektrolitu. Jedną z możliwych technik jest analiza aktywacyjna, w której aktywacji poddawane są próbki roztworu pobierane na różnych etapach polaryzacji anodowej elektrody. Do badań wybrane zostaną przede wszystkim metale, których oznaczanie z wykorzystaniem innych technik ex-situ, takich jak n.p. spektrometria UV-vis wymaga dodatkowej preparatyki, n.p. odpowiedniego skompleksowania, gdyż w badanym elektrolicie ich jony nie dają kompleksów aktywnych w zakresie UV-vis. Nie stanowi to jednak przeszkody w analizie aktywacyjnej, której wynik jest niezależny od postaci chemicznej oznaczanego pierwiastka. Innym kryterium wyboru materiału elektrody będzie ich praktyczne znaczenie, n.p. w układach do elektrolizy wody. Badanymi roztworami elektrolitów będą kwasowe i zasadowe roztwory wodne, także z dodatkiem substancji, n.p. jonów, zwiększających agresywność roztworu. Przy doborze składu elektrolitu jedną ze wskazówek będzie możliwość interferencji innych składników roztworu z oznaczanym pierwiastkiem w trakcie analizy aktywacyjnej.

Dr Zbigniew Rogulski rogul@chem.uw.edu.pl

1. Wykorzystanie związków znakowanych węglem ^{11}C w diagnostyce nowotworów mózgu

Przedmiotem realizowanej pracy licencjackiej będzie udział w pracach nad określeniem rozwoju nowotworu mózgu (glejak) przy użyciu związków znakowanych izotopem węgla ^{11}C . Pomiary in-vivo wykonane zostaną przy użyciu skanera PET/SPECT/CT. W trakcie wykonywania pracy student pogłębi m.in. wiedzę z zakresu procedur związanych z ochroną radiologiczną oraz zapozna się z zasadami pracy ze zwierzętami laboratoryjnymi.

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

1. Otrzymywanie monodispersyjnych nanocząstek złota metodą radiolizy gamma.

Nanocząstki złota będą otrzymywane w wyniku ekspozycji wodnego roztworu kwasu czterochlorozłotowego na promieniowanie gamma (źródło ^{57}Co). Badany będzie wpływ warunków eksperymentalnych (stężenie, pH) na rozmiary nanocząstek. Przeprowadzona zostanie wszechstronna charakterystyka fizykochemiczna otrzymanego nanozłota z wykorzystaniem m. in. technik mikroskopowych (SEM, TEM, AFM), spektroskopowych (Raman, UV-VIS) i rentgenowskich (XPS).

2. 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 *in vivo* na szczurach z wykorzystaniem skanera SPECT.

3. Nanosfery PLGA modyfikowane radionuklidem ^{198}Au : badania detekcji nanonośników leków z wykorzystaniem tomografii SPECT.

Nanosfery PLGA (kopolimer laktydu i glikolidu) będą modyfikowane nanocząstkami złota domieszkowanego radionuklidem ^{198}Au . ^{198}Au jest emitentem β^- i γ , a jego okres półtrwania wynosi 2.7 dnia, dzięki czemu może być wykorzystywany z jednej strony w terapiach przeciwnowotworowych (β^-), a z drugiej do obrazowania 3D metodą tomografii SPECT (dzięki promieniowaniu γ).

W ramach realizacji pracy licencjackiej komercyjne nanosfery PLGA będą kondycjonowane w roztworze kwasu czterochlorozłotowego (z dodatkiem radioizotopu), a następnie redukowane borowodorkiem sodu. Morfologia otrzymanych struktur będzie badana w wykorzystaniu transmisyjnej mikroskopii elektronowej, a zawartość złota zostanie określona na podstawie pomiarów termogravimetrycznych. Przeprowadzone zostaną również pomiary aktywności otrzymanych nanonośników (β^- , γ). Opcjonalnie, wykonane zostaną pomiary *in vivo* na uśpionych szczurach, z wykorzystaniem tomografu SPECT (współpraca z dr hab. Katarzyną Kaczyńską z Instytutu Medycyny Doświadczalnej i Klinicznej PAN oraz dr Maciejem Chotkowskim z Wydziału Chemii UW).

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

1. Nanostruktury magnetyczne jako nośniki radionuklidów

Synteza nanostruktur magnetycznych na bazie tlenków metali o zróżnicowanym rdzeniu. Analiza właściwości magnetycznych w zależności od składu rdzenia. Badanie adsorpcji/desorpcji kationów metali czterowartościowych na zmodyfikowanej powierzchni nanoferrytów jako modelowego układu nanocząstka-radionuklid.

dr hab. Andrzej Kudelski; akudel@chem.uw.edu.pl

1. „Synteza i charakterystyka nowego typu nanorezonatorów srebrnych do ramanowskiej analizy powierzchni”

Celem proponowanych badań jest znaczące zwiększenie czułości i selektywności pomiarów SHINERS (nazwaną SHINERS - akronim nazwy angielskiej shell-isolated nanoparticle-enhanced Raman spectroscopy) poprzez zastosowanie nanorezonatorów srebrnych nowego typu. Jak pokazało wiele wcześniejszych eksperymentów, w przypadku standardowo stosowanych kulistych nanocząstek srebra, nawet znaczna zmiana średnicy nanocząstki powoduje tylko niewielką zmianę położenia maksimum pasma plazmonowego. Dla silnie anizotropowych nanocząstek Ag (na przykład cienkich płytek Ag o kształcie trójkątnym) możliwe jest jednak uzyskanie maksimum pasma plazmonowego w zasadzie przy dowolnej długości fali w zakresie promieniowania widzialnego. Innym rodzajem przestrzajalnych nanorezonatorów, które mogą być badane w ramach pracy licencjackiej, są puste w środku nanocząstki Ag. Dzięki możliwości zmiany częstości przy której nanorezonator jest najbardziej efektywny, można będzie łatwiej połączyć technikę nanorezonatorów z klasycznym rezonansowym efektem ramanowskim, co pozwoli na dodatkowy wzrost czułości i selektywności techniki SHINERS.

2. „Uruchamiana przez rezonans plazmonowy synteza różnych nanostruktur ze srebra.”

W wielu zastosowaniach (szczególnie związanych z lokalnym ogniskowaniem fali elektromagnetycznej, na przykład w fotokatalizie) o wiele lepsze niż nanocząstki kuliste są nanocząstki anizotropowe, takie jak nanodruły czy nanopryzmaty. Jedną z obiecujących metod otrzymywania anizotropowych nanocząstek niektórych metali, która pozwala na uzyskanie bardzo dobrej kontroli nad kształtem i rozmiarem syntezowanych układów, jest przekształcanie zoli metali uruchamiane przez rezonans plazmonów powierzchniowych (ang.; plasmon-driven transformation PDTr). Celem badań jest zwiększenie kwantowej wydajności procesu PDTr i osiągnięcie lepszej kontroli nad kształtem i wielkością otrzymywanych nanocząstek.

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

1. "Obliczenia kwantowochemiczne wpływu zmian geometrii na stałe ekranowania NMR

¹⁹⁹Hg" Nasze wstępne badania wskazują, że efekty relatywistyczne mogą mieć kluczowe znaczenie w obliczeniach wpływu zmian geometrii na stałe ekranowania NMR ciężkich jąder, w tym rtęci. Projekt polegałby na obliczeniu pochodnych stałych ekranowania ¹⁹⁹Hg (możliwy jest też wybór innych ciężkich jąder) po długości wiązań i kątach płaskich w kilku wybranych związkach metodami z uwzględnieniem efektów relatywistycznych i bez ich uwzględnienia, i porównaniu wyników. Projekt ten ma znaczenie dla dokładnej symulacji parametrów widm jądrowego rezonansu magnetycznego metodami chemii kwantowej (w tym ustaleniu wielkości stałych ekranowania stosowanych wzorców przesunięcia chemicznego), jako że pochodne stałych ekranowania po parametrach geometrycznych określają wielkość efektów temperaturowych.

Dr Janusz Cukras januszc@chem.uw.edu.pl

1. Analiza konformacyjna małych chiralnych cząsteczek organicznych (na przykład limonenu, karwonu, metylocyklopropanonu, proliny, fluorocyklopropanonu) za pomocą metod obliczeniowych chemii.

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

2. Modelowanie widm ECD i MCD małych chiralnych cząsteczek organicznych.

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

3. Modelowanie struktur prostych klastrów cząsteczkowych i ich właściwości.

Opis: Struktury takie jak klastry wody są bardzo ważne z punktu widzenia wielu dziedzin nauki: biologii, chemii atmosfery czy fizyki. Na przykład istnieniu wiązania wodorowego, które jest formą oddziaływania w klastrze międzycząsteczkowym, zawdzięczamy fakt, że woda jest ciekła w zakresie temperatur 0–100 °C. W przyrodzie występuje wiele różnych klastrów o bardzo dużym znaczeniu, które warto badać z punktu widzenia ich energii oddziaływania czy interpretacji widm w podczerwieni.

4. Modelowanie struktury i właściwości kompleksów związków gazów szlachetnych.

Opis: Chemia związków gazów szlachetnych jest stosunkowo nową dziedziną, rozwiniętą szczególnie przez naukowców w Helsinek na końcu XX i początku XXI wieku. Pomimo tego, że związki te są już scharakteryzowane eksperymentalnie, mamy odnośnie do nich wiele pytań, na które można odpowiedzieć za pomocą metod modelowania chemii kwantowej.

Zakład Dydaktyczny Chemii Nieorganicznej i Analitycznej

➤ **Opiekun: dr Ewelina Zabost** (Pracownia Teorii i Zastosowań Elektrod)

1. Synteza oraz badania wpływu zmiany stanów elektronowych biokompozytów przewodzących na jego parametry fizykochemiczne (2 osoby).

Propozycja pracy licencjackiej dotyczy syntezy oraz badań fizykochemicznych dwóch nowych rodzajów biokompozytów hydrożelowych zmodyfikowanych biopolimerami zawierającymi centra redox oraz układy metaliczne i półprzewodnikowe. W ramach projektu zoptymalizujemy warunki syntezy materiałów oraz zbadamy takie parametry fizykochemiczne jak: proces transportu elektronów, przewodnictwo, morfologię, łącząc wpływ stanów elektronowych danego materiału na ich własności fizykochemiczne, które potem mogą znaleźć przełożenie na ich aplikacyjność.

➤ **Opiekun: prof. dr hab. Agata Michalska-Maksymiuk** ([Pracownia Teoretycznych Podstaw Chemii Analitycznej](#)) →

1. Modyfikacja nanocząstek optycznie czułych – droga do uzyskania optymalnych parametrów analitycznych nanocząstek.
2. Nanostruktury przewodzące w jednorazowych elektrodach jonoselektywnych.
3. Nowe membrany jonoczułe dla sensorów potencjometrycznych