

**PROPONOWANE TEMATY PRAC LICENCJACKICH
W ROKU AKADEMICKIM 2015/2016
DLA STUDENTÓW KIERUNKU
INŻYNIERIA NANOSTRUKTUR**

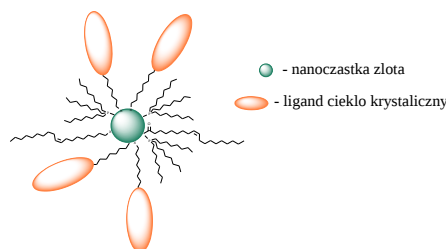
ZAKŁAD DYDAKTYCZNY CHEMII ORGANICZNEJ

Pracownia chemii Związków Naturalnych

Synteza i fizykochemia nanomateriałów modyfikowanych za pomocą ligandów mezogenicznych.

Promotor: 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.

Materiały ciekłokrystaliczne tworzące fazy kubiczne.

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

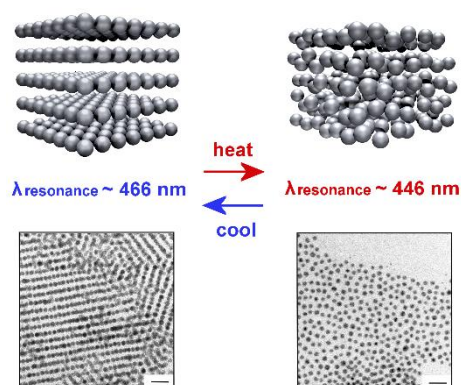
Fazy kubiczne jako trójwymiarowe fazy ciekłokrystaliczne charakterystyczne dla związków termotropowych budzą coraz szersze zainteresowanie świata naukowego. Odpowiednie zaprojektowanie cząsteczki zawierającej giętkie elementy polikatenarne połączone ze sztywnymi fragmenty rdzenia promezogenicznego -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

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

<http://nanoorgmat.chem.uw.edu.pl>

Praca 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.

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

<http://nanoorgmat.chem.uw.edu.pl>

W ostatnich latach obserwuje się wzrastające zainteresowanie nowymi nanomateriałami o potencjalnym zastosowaniu medycznym. Materiały takie mogą być wykorzystywane na dwóch kluczowych drogach: jako terapeutyki, bądź jako układy wspomagające w diagnostyce medycznej. Nieliczne nanoukłady charakteryzują się także właściwościami predysponującymi je do obu zastosowań. Nowe terapeutyki 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 terapeutyków 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

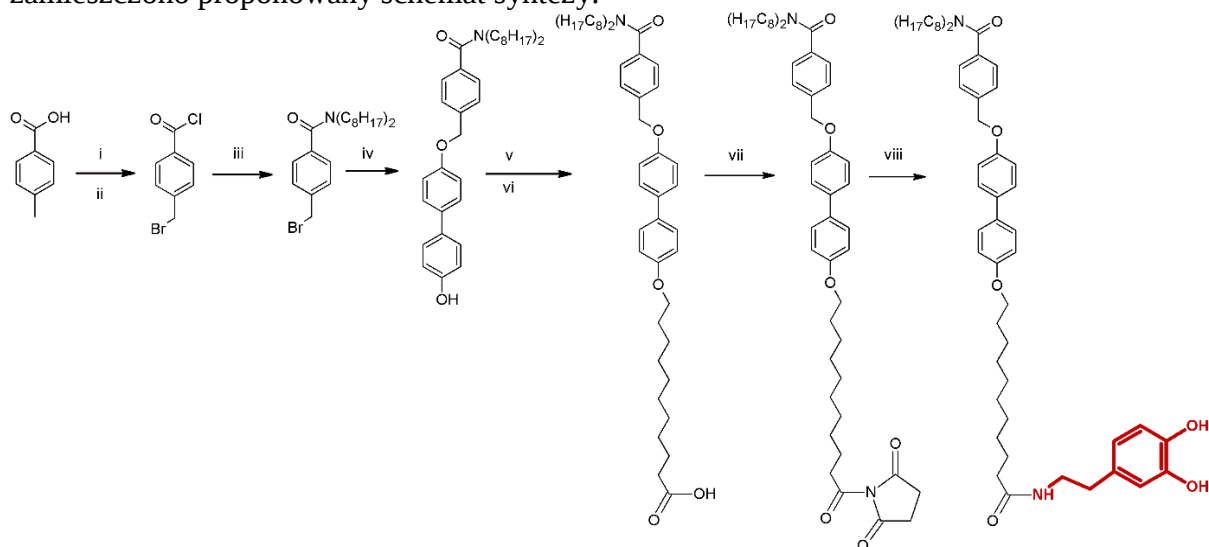
3. „Nanomedicine: a systems engineering approach”; Mingjun Zhang, Ning Xi; PSPP Ltd. Singapore 2009

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

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

<http://nanoorgmat.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:



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
<http://nanoorgmat.chem.uw.edu.pl>

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.

Laboratorium Chemii Supramolekularnej.

Nowoczesne materiały w katalizie: 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.

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

Chemia supramolekularna anionów: 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 których celem jest znalezienie zależności między strukturą a zdolnością do transportu anionów przez dwuwarstwy lipidowe w pewnej nowej, szczególnie obiecującej klasie receptorów molekularnych. W ramach tych badań zostanie zsyntezowany szereg acyklicznych, makrocyklicznych i makrobicyklicznych receptorów na aniony, a następnie zostaną zbadane ich właściwości kompleksotwórcze i transportowe w stosunku do modelowych anionów. Praca będzie okazją do praktycznego zapoznania się z problematyką i metodami chemii supramolekularnej. Więcej na www.mchmielewski.pl.

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

Chemia supramolekularna anionów: 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 kilkietapowej 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.

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

Chemia supramolekularna anionów: 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.

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

ZAKŁAD DYDAKTYCZNY FIZYKI I RADIOCHEMII

1. Dynamika koherentnych wzbudzeń w kryształach w femtosekundowym optycznym efekcie Kerra.

W układzie femtosekundowego spektrometru pompa-sonda, silny femtosekundowy impuls laserowy, zwany pompującym wywołuje w statystycznie izotropowym ośrodku nieznaczną dwójłomność, która jest następnie wykrywana przez słaby impuls sondujący, przechodzący przez skrzyżowane polaryzatory i umieszczoną między nimi próbkę. Zanik dwójłomności w funkcji czasu można obserwować poprzez zmianę opóźnienia czasowego między pompą i sondą.

Celem pracy jest rejestracja oraz interpretacja procesów relaksacji optycznie indukowanej dwójłomności, spowodowanych rozfazowaniem koherentnych drgań wewnątrz- i międzycząsteczkowych, reorientacją cząsteczek w polu sąsiadów oraz ich wpływem na częstości drgań własnych cząsteczki w układach binarnych.

Badane układy to: ciecze proste, mieszaniny binarne, roztwory, zawiesiny nanoobjektów, monokryształy.

2. Czasowo-rozdzielcza spektroskopia koherentnych fononów w metalicznych nanostrukturach.

Opiekun prac: prof. dr hab. Wojciech Gadomski; gado@chem.uw.edu.pl

ZAKŁAD DYDAKTYCZNY CHEMII NIEORGANICZNEJ I ANALITYCZNEJ

1. „Czujnik tlenu do monitorowania stężenia tlenu w organizmie człowieka”.

Praca eksperymentalna

Prof. Renata Bilewicz (bilewicz@chem.uw.edu.pl) mgr Sylwia Damińska

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 pulsoksymetry, 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.

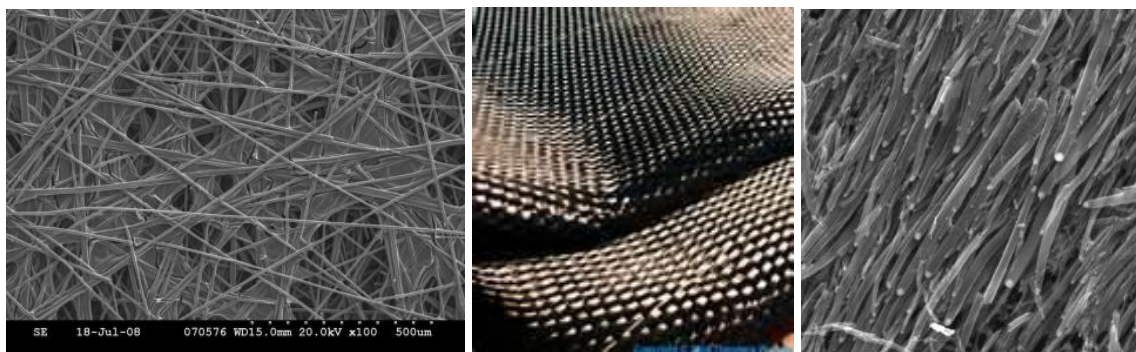


2. Konstrukcja elektrod bioogniwa paliwowego na różnych materiałach węglowych.

Praca eksperymentalna lub literaturowa

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

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.

3. Lipidowe fazy kubiczne jako matryca do unieruchamiania i badań białek.

Praca licencjacka - literaturowa

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

Celem projektu jest przegląd metod unieruchamiania białka membranowego w ciekłokrystalicznej matrycy lipidowej. Umożliwi to badania właściwości oraz funkcji tych białek w formie natywnej.

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 zwykle 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.

4. „Mikrobioogniwa z wykorzystaniem nanorurek kowalencyjnie modyfikowanych enzymami”.

Praca licencjacka eksperymentalna

Prof. Renata Bilewicz (bilewicz@chem.uw.edu.pl), mgr Michał Kizling

Bioogniwa paliwowe są obecnie uważane za jedno 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. Praca obejmuje przygotowanie elektrod do takiego bioogniwa.

5. Przygotowanie i elektrochemia nanocząstek złota rozpuszczalnych w roztworach wodnych.

Prof. Renata Bilewicz (bilewicz@chem.uw.edu.pl), mgr Maciej Dzwonek

Zsyntezujemy nanocząstki złota o różnych rozmiarach i zbadamy ich właściwości elektrochemiczne w roztworach wodnych oraz możliwości ich zastosowania w katalizie.

ZAKŁAD DYDAKTYCZNY TECHNOLOGII CHEMICZNEJ

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.

Badanie antyoksydacyjnych właściwości pochodnych sulforafanu.

Opiekun: mgr Jakub Cędrowski i dr hab. Grzegorz Litwinienko, prof. UW

Badanie kinetyki reakcji rezweratrolu z modelowymi rodnikami.

Opiekun: mgr Michał Symonowicz i dr hab. Grzegorz Litwinienko, prof. UW

Oddziaływania antyoksydantów z biomembranami metodą Izotermicznego Miareczkowania Kalorymetrycznego.

Opiekun: dr hab. Grzegorz Litwinienko, prof. UW lub dr inż. Katarzyna Jodko-Piórecka

Badanie oddziaływania nanocząsteczek z błonami lipidowymi.

Opiekun: dr hab. Grzegorz Litwinienko, prof. UW lub dr inż. Katarzyna Jodko-Piórecka

Określenie potencjalnych właściwości antyoksydacyjnych nanocząstek (metalicznych lub utworzonych przez biopolimer - melaninę) w modelowych układach lipidowych - badania kinetyczne.

Opiekun: dr inż. Katarzyna Jodko-Piórecka, dr hab. Grzegorz Litwinienko, prof. UW

Badanie właściwości antyoksydacyjnych związków aktywnych biologicznie (tokoferole, katecholaminy) w biomembranach utworzonych z ekstraktów lipidowych pochodzenia naturalnego – otrzymywanie biomembran + badania kinetyczne.

Opiekun: dr inż. Katarzyna Jodko-Piórecka, dr hab. Grzegorz Litwinienko, prof. UW

Izotermiczne Miareczkowanie Kalorymetryczne jako narzędzie do badań rozpoznania molekularnego.

Opiekun: dr hab. Grzegorz Litwinienko, prof. UW

Synteza hybrydowych nanocząsteczek o potencjalnym działaniu antyoksydacyjnym.

Opiekun: dr Piotr Piotrowski

Nanocząstki bimetaliczne typu core-shell Ag-Au jako nośniki rodników nitroksylowych.

Kierownik: dr Elżbieta Megiel

Polimery wrażliwe na bodźce w stabilizacji nanocząstek złota.

Kierownik: dr Elżbieta Megiel

Nanocząstki magnetyczne stabilizowane rodnikami TEMPO.

Kierownik: dr Elżbieta Megiel

Funkcjonalizacja alkanów w obecności kompleksów metali.

Opiekun: dr Agnieszka Krogul

Wysokociśnieniowe procesy z wykorzystaniem CO.

Opiekun: dr Agnieszka Krogul

Ligandy fenantrolinowe modyfikowane rodnikami nitroksylowymi.

Opiekun: dr hab. inż. Andrzej Kaim, prof. UW, dr Agnieszka Krogul

Selektywne utlenienie alkoholi i alkanów w obecności kompleksów miedzi(II).

Opiekun: dr Agnieszka Krogul

Fotokatalityczny rozkład nitrozwiązków w obecności *metal organic frameworks* (MOFs).

Opiekun: dr Agnieszka Krogul

Badanie układów micelarnych zawierających związki biologicznie czynne.

Opiekun: dr Hanna Wilczura-Wachnik

Badanie oddziaływań peptyd- układ modelowy biomembrany metodami ITC i UV-vis.

Opiekun: dr Hanna Wilczura-Wachnik

Monitoring on-line wpływu ciśnienia i temperatury na struktury micelarne.

Opiekun: dr Hanna Wilczura-Wachnik

Zastosowanie ITC do badania funkcjonalnej aktywności peptydów i polipeptydów.

Opiekun: dr Hanna Wilczura-Wachnik

ZAKŁAD DYDAKTYCZNY CHEMII NIEORGANICZNEJ I ANALITYCZNEJ

Pracownia Teorii i Zastosowań Elektrod

Opiekun: dr Marianna Gniadek

1. Otrzymywanie i badanie właściwości środowiskowo-czułych kompozytów hydrożeli z polimerami przewodzącymi.

Opis projektu:

Hydrożele polimerowe to nieprzewodzące matryce, które dzięki unikalnym właściwościom tych materiałów umożliwiają zamykanie w swoim wnętrzu różnych roztworów. Wykazują one nieciągłe przejście fazowe wywołane zmianą czynników zewnętrznych, które umożliwia wyrzut lub pobranie roztworu do środka matrycy hydrożelowej.

Celem pracy licencjackiej będzie opracowanie procedury syntezy, która pozwoli na zmodyfikowanie hydrożelowej matrycy polimerem przewodzącym z nanocząstkami metalu. Wprowadzenie polimeru przewodzącego powinno znacznie zwiększyć przewodnictwo takiego układu, a co za tym idzie spowodować, że będzie on się nadawał jako materiał do konstrukcji biosensorów.

2. Badanie właściwości antybakteryjnych kompozytów polimer – metal.

Opis projektu:

Powszechnie wiadomo, że nanocząstki metali (Ag NPs) posiadają właściwości antybakteryjne. Dzięki temu znajdują zastosowanie w różnego rodzaju opatrunkach lub powłokach antybakteryjnych.

Celem pracy licencjackiej będzie otrzymanie cienkich warstw polimerów przewodzących z nanocząstkami srebra na różnych podłożach (w tym na podłożach elastycznych), a następnie we współpracy z Wojskowym Instytutem Higieny i Epidemiologii zbadanie właściwości antybakteryjnych otrzymanych powłok.

Pracownia Teorii i Zastosowań Elektrod

Opiekun: dr hab. Sławomir Sęk

1. Badanie nanomechanicznych właściwości wieloskładnikowych membran lipidowych za pomocą techniki AFM.

Opis projektu:

Badanie struktury oraz powiązanych z nią właściwości biomimetycznych filmów lipidowych pozwala lepiej zrozumieć mechanizmy funkcjonowania membran komórkowych. Jednym z istotnych elementów definiujących funkcję membran oraz ich podatność na czynniki membranolityczne są ich właściwości nanomechaniczne. Projekt zakłada zbadanie dwóch rodzajów wieloskładnikowych membran złożonych z lipidów najczęściej występujących w komórkach ssaków lub bakterii. W badaniach wykorzystana będzie technika mikroskopii sił atomowych.

Opiekun: dr Krzysztof Stolarczyk → patrz tematy dla chemii; mogą być realizowane jako praca licencjacka lub magisterska

ZAKŁAD DYDAKTYCZNY CHEMII FIZYCZNEJ

Dr hab. Michał Bystrzejewski; mibys@chem.uw.edu.pl

1. Nowa koncepcja pieca plazmowego dedykowanego do topienia materiałów trudnotopliwych.

Celem projektu jest opracowanie nowej koncepcji pieca plazmowego dedykowanego do topienia materiałów trudnotopliwych. Student(ka) wykonana serię kilkunastu eksperymentów modyfikując układ do łuku węglowego oraz sprawdzając jak parametry procesowe wpływają na możliwość stapiania wybranych materiałów trudnotopliwych.

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

1. Funkcjonalizacja powierzchni nanostruktur magnetycznych.

Synteza nanostruktur magnetycznych na bazie tlenków metali o zróżnicowanym rdzeniu. Analiza właściwości magnetycznych w zależności od składu rdzenia. Modyfikacja

powierzchni stabilizująca układ dyspersyjny: stabilizacja steryczna lub ładunkiem powierzchni. Wpływ na właściwości magnetyczne całości.

Prof. dr hab. Magdalena Skompska;

mskomps@chem.uw.edu.pl

1. Perowskitowe ogniwa słoneczne

Celem pracy będzie wytwarzanie ogniw słonecznych nowej generacji, w których podłożem jest ZnO, a materiałem fotoaktywnym jest związek nieorganiczno-organiczny typu $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ o strukturze perowskitu, który będzie наносzony na ZnO metodami tzw. „mokrej chemii”. Po oświetleniu w perowskicie wytwarzane są pary elektron-dziura, które po rozdzieleniu muszą zostać przetransportowane do przeciwległych elektrod. Elektrony za pośrednictwem ZnO są przekazywane do transparentnego podłoża przewodzącego (FTO, ITO), natomiast dziury wędrują do przeciwelektrody za pośrednictwem trzeciego komponenta – organicznego lub nieorganicznego półprzewodnika typu p. Celem pracy będzie zbadanie, jak na wydajność ogniw perowskitowych wpływa dobór tego trzeciego składnika ogniwa.

Stosowanymi metodami badawczymi będą: skaningowa mikroskopia elektronowa (SEM) i mikroskopia ze skupioną wiązką jonów (FIB-SEM), które pozwolą obserwować morfologię próbek, metody rentgenowskie (XRD) do określenia struktury krystalograficznej oraz (EDX) do badania składu, metody spektroskopowe (metoda odbiciowa UV-Vis, FTIR, Raman) do badań właściwości absorpcyjnych zastosowanych transporterów dziur.

Dr hab. Barbara Pałys, prof. UW

bpalys@chem.uw.edu.pl

1. Wpływ warunków syntezy tlenku grafenu na zawartość grup karboksylowych

W wyniku utleniania grafitu za pomocą KMnO_4 w środowisku H_2SO_4 otrzymuje się żółto-brązową zawiesinę tlenku grafenu. Proces ten jest znany od dawna jako synteza Hummersona-Offemana. Płatki tlenku grafenu nie ulegają ponownej agregacji do grafitu dzięki między innymi oddziaływaniom elektrostatycznym pomiędzy ujemnie naładowanymi grupami karboksylowymi na powierzchni tlenku grafenu. Zawartość grup karboksylowych jest również istotna ze względu na możliwe zastosowanie warstwy tlenku grafenu do unieruchamiania enzymów. Praca licencjacka będzie polegała na przeprowadzaniu kilku syntez przy różnych proporcjach grafitu do mieszaniny utleniającej. Otrzymane produkty będą badane za pomocą spektroskopii w podczerwieni oraz transmisyjnej mikroskopii elektronowej.

Literatura:

W.S. Hummers Jr., R.E. Offeman, Preparation of graphitic oxide, J. American Chem. Soc. 80 (1958) 1339

A. Świetlikowska, M. Gniadek, B. Pałys, Electrodeposited Graphene nano-stacks for biosensor applications. Surface groups as redox mediators for laccase, Electrochim. Acta 98 (2013) 75–81

2. Elektrochemiczna redukcja tlenku grafenu na gładkiej powierzchni złota oraz na filmie nanocząstek złota

Elektrochemiczna redukcja tlenku grafenu umożliwia pokrycie powierzchni warstwą grafenu lub niecałkowicie zredukowanego tlenku, posiadającego grupy tlenowe. Grupy te z kolei umożliwiają z kolei unieruchamianie na powierzchni enzymów lub innych substancji aktywnych katalitycznie. Rodzaj podłoża wpływa na szybkość redukcji tlenku grafenu i prawdopodobnie także na ilość grup powierzchniowych. Praca licencjacka będzie polegała na przeprowadzeniu elektrochemicznej redukcji tlenku grafenu na elektrodach: polerowanej elektrodzie złotej oraz na powierzchni złota pokrytej filmem nanocząstek złota (osadzonym przez nakrapianie i wysuszenie zawiesiny nanocząstek). Powierzchnia pokryta produktem redukcji będzie badana za pomocą mikroskopii w podczerwieni oraz skaningowej mikroskopii elektronowej.

Literatura:

, M. Gniadek, B. Pałys, Electrochemically Reduced Graphene Oxide on Electrochemically Roughened Gold as a Support for Horseradish Peroxidase, J. Phys. Chem. C 118 (2014) 29731–29738

Dr Piotr Garbacz;

pgarbacz@chem.uw.edu.pl

1. Badanie właściwości transformacyjnych spinora za pomocą spektroskopii MRJ

Intuicja podpowiada, że obrót obiektu geometrycznego o kąt 360° przywraca go do pierwotnego położenia. Nie musi być to jednak prawdą w przypadku układów kwantowych jak np. jądra atomowego o spinie $1/2$ dla którego w celu przywrócenia pierwotnego stanu niezbędny jest obrót o kąt 720° . Celem projektu jest zaobserwowanie tej zaskakującej cechy spinorów z użyciem magnetycznego rezonansu jądrowego węgla i protonu w cząsteczce $^{13}\text{CHCl}_3$. Więcej informacji znajduje się w artykule w Conc. Magn. Reson. 11 (1999) 225-238.

2. Zastosowanie spektroskopii MRJ do implementacji algorytmu Deutscha-Jozsy

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

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

1. Znieczulanie ksenonem: modelowanie molekularne oddziaływania atomu ksenonu z neurotransmiterami aminokwasowymi.

Ksenon jest gazem stosowanym przez anestezjologów do wywołaniu znieczulenia ogólnego. Mechanizm jego działania jest słabo poznany. Dwa główne hipotetyczne mechanizmy to oddziaływanie z receptorem N-metylo-D-asparaginowym oraz oddziaływanie z neurotransmiterami aminokwasowymi. Rozpracowanie obu mechanizmów wiąże się z dokładnym poznaniem sposobu, w jaki atom ksenonu oddziałuje z aminokwasami.

2. Ku sensorom peptydowym na powierzchni metalu: widma oscylacyjne oligopeptydów.

Badania widm oscylacyjnych krótkich oligopeptydów za pomocą modelowania metodami chemii kwantowej na potrzeby interpretacji eksperymentalnych widm i planowania eksperymentu.

3. Modelowanie molekularne konformerów małych chiralnych cząsteczek organicznych (np. limonenu, karwonu, metylocyklopropanonu, proliny, fluorocyklopropanonu).

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 konformera w próbce oraz wkład jego widma w całkowite widmo substancji. Jest to ważny wstępny etap dobrego modelowania widm.

4. Modelowanie widma elektronowego i magnetycznego dichroizmu kołowego (ECD i MCD) małych chiralnych cząsteczek organicznych.

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).

5. Modelowanie struktur i właściwości kompleksów cząsteczkowych mających znaczenie w chemii atmosfery.

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. Jest wiele innych klastrów, których istnienie jest ważne dla dynamiki procesów chemicznych, które zachodzą w przyrodzie. Badamy takie układy ważne z punktu widzenia procesów zachodzących w atmosferze.

6. Modelowanie struktury i właściwości kompleksów związków gazów szlachetnych.

Chemia związków gazów szlachetnych jest nową dziedziną, rozwiniętą szczególnie przez naukowców w Helsinek na końcu XX i początku XXI wieku. Znamy takie cząsteczki, jak HXeOH, HXeSH, HCCXeH, HKrCl, które w dodatku tworzą kompleksy z innymi cząsteczkami, np. HXeOH-H₂O. Pomimo tego, że związki te są już scharakteryzowane eksperymentalnie, głównie w matrycach niskotemperaturowych, mamy odnośnie do nich wiele pytań, na które można odpowiedzieć za pomocą metod modelowania chemii kwantowej.

7. Modelowanie energii oddziaływania stanów stacjonarnych kompleksów molekularnych z udziałem związków gazów szlachetnych za pomocą rachunku zaburzeń o adaptowanej symetrii.

Obliczenia całkowitej energii oddziaływania międzymolekularnego i jej składowych dla struktur kompleksów utworzonych przez nowo odkryte związki gazów szlachetnych, np. HKrCl-HCl, HKrF-HF HXeOH-H₂S, HXeSH-H₂O itp. Obliczenia te będą prowadzone za pomocą programu SAPT, rozwiniętego między innymi na Wydziale Chemii.

8. Rozszerzanie funkcjonalności interfejsu między programem wizualizującym cząsteczki Avogadro, a programem do obliczeń kwantowomechanicznych DALTON.

Programy do budowania struktur cząsteczek oraz wizualizacji wyników obliczeń kwantowomechanicznych są podstawowym narzędziem przy pracy w modelowaniu molekularnym. Avogadro jest jednym z prężnie rozwijanych programów tego typu, opartym na standardach Open Source. Jedną z bardzo przydatnych dla chemika obliczeniowego funkcjonalności Avogadro byłaby możliwie pełna obsługa programu DALTON za pomocą odpowiednio zaprogramowanego interfejsu.

Dr hab. Magdalena Pecul-Kudelska;

mpecul@chem.uw.edu.pl

1. Wpływ efektów relatywistycznych na polaryzowalność molekularną i tensor skręcalności optycznej na przykładzie dihalogenów.

Projekt polega na obliczeniu polaryzowalności molekularnej i tensora skręcalności optycznej (tensora G') szeregu dihalogenów X₂ (X=F, Cl, Br, I, At) używając metod chemii kwantowej opartych na teorii funkcjonału gęstości z hamiltonianem nierelatywistycznym (Schoedingera) i relatywistycznymi (dwu- i czterekomponentowymi). Celem jest sprawdzenie, dla małych modelowych układów, jak istotne są te efekty, i do jakiego stopnia można je uwzględnić bardziej przybliżonymi metodami.

2. Wpływ efektów relatywistycznych na polaryzowalność molekularną i tensor skręcalności optycznej dimeru rtęci.

Projekt polega na obliczeniu polaryzowalności molekularnej i tensora skręcalności optycznej (tensora G') dimeru rtęci Hg₂ używając metod chemii kwantowej opartych na teorii funkcjonału gęstości z hamiltonianem nierelatywistycznym (Schoedingera) i relatywistycznymi (dwu- i czterekomponentowymi). Celem jest sprawdzenie, dla małych modelowych układów, jak istotne są te efekty, i do jakiego stopnia można je uwzględnić bardziej przybliżonymi metodami.

3. Wpływ tworzenia wiązań wodorowych na widma ECD and VCD chiralnych kwasów karboksylowych.

Planowane są pomiary widm ECD i VCD chiralnych kwasów karboksylowych w różnym stężeniu i różnych rozpuszczalnikach w celu oceny wpływu powstawania dimerów na wygląd widma. Równoległe z pomiarami planowane jest przeprowadzenie obliczeń kwantowochemicznych widm monomeru i dimeru metodami opartymi na teorii funkcjonału gęstości.

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.

Dr Marcin Strawski; marcin@chem.uw.edu.pl

1. Wpływ temperatury na adhezję monowarstw polielektrolitowych

Celem pracy jest zmierzenie wpływu temperatury na wartość adhezji (siły i pracy adhezji) za pomocą techniki spektroskopii sił atomowych. W celu pomiaru oddziaływań monowarstw wybranych polielektrolitów pomiary będą wykonane z wykorzystaniem sond ze sferycznym ostrzem.

2. Absorbacja jonów heksacyjanożelazianu (III) przez układy wielowarstw polielektrolitowych

Celem pracy jest zbadanie przepuszczalności układów wielowarstw polielektrolitowych otrzymanych metodą osadzania warstwy po warstwie z wykorzystaniem metod elektrochemicznych. Dla układów, które wykazą zdolność absorpcji jonów żelazicyjankowych pomiary obejmą wpływ absorbowanych jonów na morfologię układów jak i monitorowanie zmian ich grubości. W tym celu zastosowana zostanie mikroskopia sił atomowych.

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

1. Wykorzystanie *Saccharomyces boulardii* jako biotemplatów w syntezie nanocząstek srebra - nowe środki konserwujące do zastosowań w produktach kosmetycznych.

Celem projektu będzie otrzymanie materiału kompozytowego organiczno-nieorganicznego, który będzie wykazywał właściwości antydrobnoustrojowe przy jednoczesnym zachowaniu jego biogodności i nietoksyczności. Synteza będzie polegała na wykorzystaniu cząstek drożdży *Saccharomyces boulardii* jako szablonów do osadzania nanocząstek srebra. W tym celu *S. boulardii* będą kondycjonowane w roztworze jonów srebra, po czym do mieszaniny reakcyjnej dodawany będzie reduktor, co w zamierzeniu powinno prowadzić do wytworzenia nanocząstek metalicznych w strukturze biotemplatu. Otrzymane struktury będą charakteryzowane z wykorzystaniem technik mikroskopowych (SEM, TEM),

spektroskopowych (Raman, FTIR, XPS, TOF-SIMS) i termicznych (TGA, DSC). Opcjonalnie mogą zostać przeprowadzone badania właściwości bakteriobójczych otrzymanego materiału, w tym z punktu widzenia ich zastosowania jako środka konserwującego w produktach kosmetycznych (tzw. challenge test).

2. Otrzymywanie biokompatybilnych nanocząstek magnetycznych modyfikowanych pochodnymi chitozanu.

Celem projektu będzie otrzymanie kompozytowych struktur organiczno-nieorganicznych o właściwościach superparamagnetycznych. Struktury te, o wielkości kilkudziesięciu nanomerów, będą się składały z organicznej matrycy (anionowej pochodnej chitozanu) w której unieruchomione zostaną rdzenie magnetyczne (z magnetytu). W założeniu obiekty takie mają stanowić modelowy układ teranostyczny umożliwiający jednocześnie przenoszenie leków oraz detekcję w organizmie metodą obrazowania rezonansem magnetycznym (MRI).

Oczekuje się, że struktury te będą na tyle duże, aby nie przenikać przez barierę krew-mózg, a na tyle małe że nie będą ulegać szybkiemu usuwaniu z krwiobiegu (po podaniu dożylnym) na drodze fagocytozy. Dodatkowo obecność ładunku ujemnego polimeru pozwoli na inkorporację leków, które mają budowę kationową (np. protonowana dokсорubicyna).

3. Biosynteza nanocząstek złota z wykorzystaniem bakterii *Lactobacillus bulgaricus*.

Celem pracy licencjackiej będzie otrzymanie nanocząstek złota w wyniku bioredukcji jonów czterochlorozłotowych w obecności bakterii *Lactobacillus bulgaricus*. Oczekuje się, że nanocząstki złota będą się wbudowywać w struktury bakteryjne tworząc hybrydowy biomateriał. Przeprowadzona zostanie wszechstronna charakterystyka fizykochemiczna otrzymanych struktur, określona żywotność bakterii po procesie biosyntezy nanocząstek oraz zbadane możliwości zastosowań. Oczekuje się, że otrzymany materiał może znaleźć zastosowanie jako nośnik leków, którego podanie może być monitorowane w organizmie metodą tomografii komputerowej.