Proponowane tematy prac licencjackich

Rok akademicki 2012/2013

Promotor: **prof. dr hab. Stanisław Kucharski**

1. Wyznaczanie stabilnych konformacji wybranych cząsteczek.
2. Częstości harmoniczne w stanach wzbudzonych molekuł.
3. Energie wzbudzeń elektronowych cząsteczek zawierających wiązania wielokrotne.
4. Własności elektryczne małych molekuł w stanach wzbudzonych.
5. Poszukiwanie wzbudzonych stanów dysocjatywnych.
6. Precyzyjne wyznaczanie energii wzbudzeń w jonach dodatnich molekuł występujących w przestrzeni międzygwiezdnej.

Promotor: **dr hab. prof. UŚ Maria Jaworska**

7. Kompleksy metali przejściowych (Mn, Fe, Ru) jako donory tlenku azotu i tlenku węgla o potencjalnym zastosowaniu terapeutycznym. Wyznaczanie widm elektronowych i badanie reakcji uwalniania NO i CO pod wpływem światła metodami DFT i TDDFT.
8. Wyznaczanie struktury i widm elektronowych naturalnych i syntetycznych filtrów UV przy użyciu metody DFT i TDDFT.
9. Wyznaczanie widm elektronowych i reaktywności organicznych i nieorganicznych związków o właściwościach fotochromowych z zastosowaniem metod DFT i TDDFT.
10. Oddziaływanie NO i CO z metaloenzymami – struktura i widma elektronowe. Obliczenia z zastosowaniem metod DFT i TDDFT.

Promotor: **dr hab. prof. UŚ Monika Musiał**

11. Wyznaczanie powinowactwa elektronowego związków organicznych zawierających heteroatomy.
12. Własności spektroskopowe cząsteczek w stanach wzbudzonych.
13. Krzywe energii potencjalnej dla cząsteczek dwuatomowych w różnych stanach elektronowych.
14. Energie termów dla wybranych atomów w oparciu o metodę sprzężonych klasterów.
15. Podwójny potencjał jonizacji w obliczeniach energii wzbudzeń dla atomów i molekuł.
16. Podwójne powinowactwo elektronowe w obliczeniach energii wzbudzeń dla atomów i molekuł.

Promotor: **dr hab. Rafał Podeszwa**

17. Oddziaływania małych cząsteczek.
18. Rozkład energii odziaływania na fizyczne składowe.
19. Własności oddziaływań układów pi-elektronowych.
20. Oddziaływania grafenu, półprzewodnika przyszłości.
21. Komputerowe modelowanie kryształów.
22. Modelowanie jak krystalizuje paracetamol.
23. Nowe metody badania oddziaływań międzycząsteczkowych.
24. Modelowanie klastrów molekularnych.
25. Trzy oddziaływujące cząsteczki, czyli kiedy całość to nie suma par.
26. Modelowanie własności wody.
27. Oddziaływania cząsteczek o znaczeniu biologicznym.

Promotor: **dr Tadeusz Pluta**
28. Teoretyczne wyznaczanie parametrów widm NMR cząsteczek organicznych.
29. Modelowanie teoretyczne nieliniowych właściwości optycznych (NLO) cząsteczek organicznych.

Promotor: **dr Joachim Włodarz**
30. Oprogramowanie typu open source dla potrzeb chemii obliczeniowej.

Uwaga! *W ramach każdego tematu istnieje możliwość realizacji od* ***jednej*** *do* ***czterech*** *prac licencjackich.*