

Proponowane tematy prac licencjackich

Rok akademicki 2013/2014

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

1. Charakterystyka stanów elektronowych cząsteczek dwuatomowych z III okresu układu Mendelejewa.
2. Wyznaczanie stabilnych konformacji wybranych cząsteczek.
3. Częstości harmoniczne w stanach wzbudzonych molekuł.
4. Energie wzbudzeń elektronowych cząsteczek zawierających wiązania wielokrotne.
5. Własności elektryczne małych molekuł w stanach wzbudzonych.
6. Precyzyjne wyznaczanie energii wzbudzeń w jonach dodatnich molekuł występujących w przestrzeni międzygwiazdnej.

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

7. Struktura i widma elektronowe związków o własnościach fotochromowych. Obliczenia metodą DFT i TDDFT.
8. Korelacji własności elektronowych i konformacji z aktywnością wybranych związków o działaniu leczniczym. Obliczenia metodą DFT.

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

9. Krzywe energii potencjalnej dla cząsteczek dwuatomowych.
10. Elektronowe stany wzbudzone układów z wiązaniem podwójnym.
11. Podwójny potencjał jonizacji w obliczeniach energii wzbudzeń dla atomów i molekuł.
12. Podwójne powinowactwo elektronowe w obliczeniach energii wzbudzeń dla atomów i molekuł.
13. Potencjał jonizacji w obliczeniach energii wzbudzeń dla molekuł.
14. Własności spektroskopowe cząsteczek.

Promotor: **dr hab. Rafał Podeszwa**

15. Oddziaływania małych cząsteczek.
16. Rozkład energii oddziaływania na fizyczne składowe.
17. Własności oddziaływań układów pi-elektronowych.
18. Oddziaływania grafenu, półprzewodnika przyszłości.
19. Komputerowe modelowanie kryształów.
20. Modelowanie jak krystalizuje paracetamol.

- 21. Nowe metody badania oddziaływań międzycząsteczkowych.
- 22. Oddziaływania międzycząsteczkowe dla nanoukładów.
- 23. Modelowanie klastrów molekularnych.
- 24. Trzy oddziałujące cząsteczki, czyli kiedy całość to nie suma par.
- 25. Modelowanie własności wody.
- 26. Oddziaływania cząsteczek o znaczeniu biologicznym.

Promotor: **dr hab. Tadeusz Pluta**

- 27. Teoretyczne wyznaczanie polaryzowalności dynamicznej cząsteczek organicznych z wykorzystaniem funkcjonałów gęstości z poprawioną częścią wymienną dla dużych odległości.
- 28. Teoretyczne wyznaczanie statycznych własności elektrycznych wyższego rzędu cząsteczek elektrycznych z wykorzystaniem funkcjonałów gęstości z poprawioną częścią wymienną dla dużych odległości.

Promotor: **dr Joachim Włodarz**

- 29. Oprogramowanie typu open source dla potrzeb chemii obliczeniowej.

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