

Proponowane tematy prac licencjackich

Rok akademicki 2014/2015

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

1. Energie wzbudzeń elektronowych cząsteczek zawierających wiązania wielokrotne.
2. Własności elektryczne małych molekuł w stanach wzbudzonych.
3. Energie termów dla atomów w atomach z dwoma niesparowanymi elektronami na podstawie metody sprzężonych klasterów.

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

4. Wyznaczanie energii dysocjacji wybranych wiązań pojedynczych.
5. Energie termów dla wybranych atomów z jednym niesparowanym elektronem.
6. Wyznaczanie częstości harmoniczných w stanach wzbudzonych molekuł.
7. Krzywe energii potencjalnej dla cząsteczki B2 na podstawie metody sprzężonych klasterów.

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

8. Mechanizmy działania występujących w naturze filtrów UV. Obliczenia metodami DFT i TDDFT. (2 osoby)

Promotor: **dr hab. prof. UŚ Michał Daszykowski**

9. Chromatograficzne odciski palca - praktyczne wykorzystanie.
10. Wykorzystanie techniki spektroskopii w bliskiej podczerwieni do kontroli jakości wybranych produktów spożywczych.

Promotor: **dr hab. Tadeusz Pluta**

11. Molekularne własności elektryczne i optyczne wyznaczane metodami DFT. (2 osoby)

Promotor: **dr hab. Rafał Podeszwa**

12. Paracetamol, jak zaprojektować skuteczną i przyswajalną tabletkę.
13. Pierwszy etap na drodze projektanta leku, modelowanie klastrów molekularnych.
14. Oddziaływania grafenu, półprzewodnika przyszłości.
15. Rozkład energii oddziaływania na fizyczne składowe.
16. Własności oddziaływań układów pi-elektronowych.

- 17. Nowe metody badania oddziaływań międzycząsteczkowych.
- 18. Oddziaływania międzycząsteczkowe dla nanoukładów.
- 19. Trzy oddziałujące cząsteczki, czyli kiedy całość to nie suma par.
- 20. Modelowanie własności wody, najbardziej nietypowego związku chemicznego na ziemi.
- 21. Oddziaływania cząsteczek o znaczeniu biologicznym.

Promotor: **dr Piotr Lodowski**

- 22. Wyznaczanie widma elektronowego rodokoryny z zastosowaniem metody funkcjonałów gęstości. (2 osoby)
- 23. Wyznaczanie widma elektronowego metylorodobalaminy z zastosowaniem metody funkcjonałów gęstości. (2 osoby)
- 24. Wyznaczanie widma elektronowego 5'-deoksyadenozylorodobalaminy z zastosowaniem metody funkcjonałów gęstości. (2 osoby)

Promotor: **dr Joachim Włodarz**

- 25. Oprogramowanie typu open source dla potrzeb chemii obliczeniowej. (2 osoby)

Promotor: **dr Ivana Stanimirova-Daszykowska**

- 26. Praktyczne aspekty fuzji danych.