## Proponowane tematy prac magisterskich

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

*1.* Stany elektronowe „kosmicznych" molekuł (występujących w przestrzeni międzygwiezdnej).
*2*. Mechanizmy prostych reakcji w stanach wzbudzonych.
*3.* Powierzchnie energii potencjalnej w różnych stanach elektronowych molekuł.
*4.* Dysocjacja molekuł dwuatomowych – opis teoretyczny.
*5.* Powierzchnie energii potencjalnej w różnych stanach elektronowych molekuł.

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

*6.* W jaki sposób filtry UV rozpraszają promieniowanie słoneczne? Procesy fotochemiczne w Porfirze-334.
*7.* Kataliza bionieorganiczna. Utlenianie tlenku węgla przez klastery żelazo-niklowe w dehydrogenazie tlenku węgla.
*8.* Tlenek azotu w biologii i medycynie. Reaktywność kompleksów rutenu z tlenkiem azotu.

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

*9.* Wyznaczanie długości wiązań cząsteczek w stanach wzbudzonych.
*10.* Stany wzbudzone jonów dodatnich.
*11.* Przejścia elektronowe z przeniesieniem ładunku („charge transfer").

*Promotor:* **dr Tadeusz Pluta**

*12.* Geometria i własności elektryczne stanów wzbudzonych wybranych cząsteczek organicznych.
*13.* Własności elektryczne wyższych rzędów cząsteczek organicznych wyznaczane metodą DFT z wykorzystaniem poprawionych funkcjonałów dalekiego zasięgu – LRC.

*Promotor:* **dr Rafał Podeszwa**

*14.* Oddziaływania międzymolekularne - modelowanie komputerowe cieczy.
*15.* Oddziaływania międzymolekularne - modelowanie komputerowe kryształów molekularnych.