Proponowane tematy prac magisterskich

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

1. Stany elektronowe w układach otwartopowłokowych na podstawie obliczeń potencjałów jonizacji.
2. Własności molekularne prostych cząsteczek w stanach wzbudzonych.
3. Powinowactwo elektronowe w zastosowaniu do opisu stanów wzbudzonych cząsteczek.

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

4. Własności spektroskopowe cząsteczek dwuatomowych w stanach wzbudzonych.
5. Krzywe energii potencjalnej dwuatomowych cząsteczek metali alkalicznych.
6. Wyznaczanie struktury elektronowej cząsteczek na podstawie podwójnego powinowactwa elektronowego.
7. Struktura wibracyjna w wybranych stanach elektronowych cząsteczek dwuatomowych.

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

8. Właściwości wielordzeniowego kompleksu niklu i żelaza występującego w centrum aktywnym enzymu syntazy acetylo-koenzymu A. Obliczenia DFT z uwzględnieniem otoczenia białkowego. *(2 osoby)*

Promotor: **dr hab. Tadeusz Pluta**

9. Dynamiczne własności elektryczne cząsteczek organicznych w zakresie częstotliwości bliskich rezonansu w oparciu o metodę funkcji odpowiedzi.

Promotor: **dr hab. Rafał Podeszwa**

10. Paracetamol, jak zaprojektować skuteczną i przyswajalną tabletkę.
11. Pierwszy etap na drodze projektanta leku, modelowanie klastrów molekularnych.
12. Oddziaływania grafenu, półprzewodnika przyszłości.
13. Rozkład energii oddziaływania na fizyczne składowe.
14. Własności oddziaływań układów pi-elektronowych.
15. Nowe metody badania oddziaływań międzycząsteczkowych.
16. Oddziaływania międzycząsteczkowe dla nanoukładów.
17. Trzy oddziałujące cząsteczki, czyli kiedy całość to nie suma par.
18. Modelowanie własności wody, najbardziej nietypowego związku chemicznego na ziemi.
19. Oddziaływania cząsteczek o znaczeniu biologicznym.

Promotor: **dr Piotr Lodowski**

20. Charakterystyka powierzchni energii potencjalnej zredukowanej metylokobalaminy względem wybranych współrzędnych geometrycznych.

21. Struktura elektronowa niskoleżących stanów wzbudzonych metylorodobalaminy w świetle obliczeń metodą funkcjonałów gęstości.

22. Struktura elektronowa niskoleżących stanów wzbudzonych 5'-deoksyadenozylorodobalaminy w świetle obliczeń metodą funkcjonałów gęstości.

Promotor: **dr Joachim Włodarz**

23. Oprogramowanie typu open source dla potrzeb chemii obliczeniowej. *(2 osoby)*