



Tematy-prac-licencjackich-54

Tematy prac licencjackich i magisterskich w roku akademickim 2017/2018

Prace licencjackie

1.prof. dr hab. Zdzisław Latajka

Nanosamochody molekularne

Praca literaturowa.

2.prof. dr hab. Zdzisław Latajka

Projektowanie nowych biomateriałów.

Praca literaturowa.

3.dr hab. Sławomir Berski, prof. UWr

Numeryczne rozwiązanie niezależnego od czasu równania Schrödingera dla potencjału prostokątnej studni.

Praca programistyczna

4.dr hab. prof. UWr Sławomir Berski

Analityczne rozwiązanie niezależnego od czasu równania Schrödingera dla atomu wodoru.

Praca literaturowa.

5.dr hab. Sławomir Berski, prof. UWr

Ekstrakcja eskuliny, glikozydu kumarynowego, z owoców kasztanowca zwyczajnego (*Aesculus hippocastanum*).

Praca eksperymentalna.

6.dr hab. Sławomir Berski, prof. UWr

Grafy i ich zastosowanie w chemii.

Praca literaturowa.

7.dr hab. Sławomir Berski, prof. UWr

Zastosowanie chemicznej teorii grafów w badaniach QSPR.

Praca obliczeniowa.

8.dr hab. Sławomir Berski, prof. UWr

Zastosowanie automatów komórkowych w modelowaniu właściwości fizykochemicznych.
Praca obliczeniowa.

9.dr hab. Sławomir Berski, prof. UW

Przeszukiwanie przestrzeni konformacyjnej eskuliny metodami obliczeniowymi chemii.
Praca obliczeniowa.

10.dr hab. Sławomir Berski, prof. UW

Badanie energetyki reakcji Dielsa-Aldera metodami obliczeniowymi chemii kwantowej.
Praca obliczeniowa.

11.dr hab. Sławomir Berski, prof. UW

Budowa spektrofotometru UV-VIS oraz proste pomiary fizykochemiczne.
Praca eksperymentalna /konstruktorska, student buduje proste urządzenie

12.dr hab. Sławomir Berski, prof. UW

Opis zjawiska tunelowego i pomiary na skaningowym mikroskopie tunelowym.
Praca literaturowa oraz pomiar na STM (Wydział Fizyki i Astronomii).

13.dr Andrzej Bil

Metody teoretycznego modelowania przesunięć chemicznych 13C.
Praca literaturowa.

14.dr Przemysław Dopieralski

Disiarczki i ich reaktywność.
Praca literaturowa.

15.dr Piotr Durlak

Bioszkło - materiał przyszłości.
Praca literaturowa.

16.dr Piotr Durlak

Chemia snu - kortyzol vs. melatonina.
Praca literaturowa.

17.dr Jarosław Panek

Przegląd współczesnych metod obliczeniowych dla układów biochemicznych (białka, DNA).
Praca literaturowa.

18.dr hab. Jerzy Moc

Sfrustrowane pary Lewisa.
Opracowanie literaturowe plus ewentualnie modelowanie

19.dr hab. Jerzy Moc

Molekularne sześciowodorki.
Opracowanie literaturowe plus ewentualnie modelowanie
Prace magisterskie

1.prof. dr hab. Zdzisław Latajka

Modelowanie molekularne nowych potencjalnych biomateriałów.

2.dr hab. prof. UW Sławomir Berski

Zależność lokalnej struktury elektronowa wiązania C-C od długości wiązania - badania za pomocą topologicznej analizy funkcji lokalizacji elektronów.

3.dr hab. prof. UW Sławomir Berski

Oddziaływanie kationów metali Cu²⁺, Zn²⁺, Ca²⁺ i Ba²⁺ z dwupeptydem Phe-Phe. Badania metodami obliczeniowymi chemii kwantowej.

4.dr Andrzej Bil

Wpływ bazy funkcyjnej na przesunięcia chemiczne 13C.

5.dr Piotr Durlak

Charakterystyka wiązania wodorowego wspomaganego rezonansem (RAHB) w prostych kryształach.
Obliczenia statystyczne na poziomie metod CPMD i PIMD.

6.dr Piotr Durlak

Modelowanie parametrów EPR-owskich wybranych rodników przy zastosowaniu adduktów spinowych opartych na PBN.

7.dr. hab. Jerzy Moc

Modelowanie prostych reakcji chemicznych jednym z programów Hyperchem/Gaussian/Gamess.

8.dr. hab. Jerzy Moc

Molekularna Spinotronika - modelowanie.