Chemia studia II stopnia/stacjonarne

Tematy prac na rok 2021/2022

	Nazwisko, imię promotora	Temat pracy	Kierunek, rok, forma studiów	Liczba studentów w proponowanych do realizacji tematu	Krótka charakterystyka pracy, planowane metody badawcze	Instytut/Zakład
1	prof. dr hab. Józef Drabowicz	Reakcja optycznie czynnej N,N-dimetylo-α-fenyloetyloaminy z dichlorokarbenem generowanym *in situ*	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Zbadanie syntetycznych i mechanistycznych aspektów tytułowej reakcji włącznie z jej aspektami stereochemicznymi	Instytut Chemii
1	prof. dr hab. Piotr Bałczewski	Synteza dwufunkcyjnych farmaceutyków na bazie antagonistów receptora angiotensyny II	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Praca eksperymentalna, której celem jest synteza kokryształów lub ko-amorficznych stałych dyspersji składających się z: (1) leku z grupy antagonistów receptora angiotensyny II stosowanego w leczeniu nadciśnienia i (2) innej substancji biologicznie aktywnej (ko-former) korzystnie oddziałującej na układ sercowo-naczyniowy. Synteza prowadzona będzie z wykorzystaniem metod w roztworze oraz fazie stałej. Dodatkowo, wykorzystane zostaną niekonwencjonalne źródła energii (sonikacja). Otrzymane związki scharakteryzowane zostaną metodami spektroskopowymi, termicznymi i rentgenograficznymi. Wymagana znajomość języka angielskiego	Instytut Chemii
2	dr hab. Morzyk-Ociepa Barbara, prof. UJD	Synteza, badania właściwości strukturalnych i spektroskopowych związków kompleksowych o potencjalnej aktywności biologicznej	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Badania obejmują przegląd literaturowy, przeprowadzenie reakcji syntezy nowych związków kompleksowych z wybranymi ligandami i jonami metali, pomiary ich widm w podczerwieni techniką pastylek KBr i ATR oraz zbadanie widm w podczerwieni i ramanowskich otrzymanych związków w zakresie 4000-50 cm-1. Przeprowadzenie obliczeń teoretycznych struktur molekularnych, i widm oscylacyjnych dla założonych modeli teoretycznych, które obrazują struktury występujące w sieci krystalicznej otrzymanych związków przy użyciu metod DFT z zastosowaniem pakietu programów Gaussian 2009 oraz przeprowadzenie analizy współrzędnych normalnych i wizualizacji drgań normalnych. Ostateczny temat pracy zostanie uszczegółowiony po zakończeniu części eksperymentalnej pracy	Instytut Chemii
3	prof. dr hab. Marczak Wojciec	Zastosowanie zmodyfikowanego modelu Grunberga-Nissana do aproksymownia lepkości ciekłych mieszanin binarnych z wiązaniami wodorowymi	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Oryginalny model Grunberga-Nissana ma zastosowanie do ciekłych mieszanin niezacjowanych. W publikacji W. Marczak, N. Adamczyk, M. Łężniak, Int. J. Thermophysics, 33 (2012) 680-691 zaproponowano modyfikację modelu polegającą na zastąpieniu stężeń analitycznych stężeniami "kinetycznymi", tj. ułamkami molowymi agregatów cząsteczek. Celem pracy będzie zweryfikowanie zmodyfikowanego modelu z wykorzystaniem dostępnych w literaturze przedmiotu danych doświadczalnych. Praca polegać będzie na dokonaniu przeglądu literatury i wykonaniu stosownych obliczeń. Nie przewiduje się wykonywania eksperymentu	Instytut Chemii
4	dr hab. inż. Iwona Zawierucha, prof. UJD	Zastosowanie immobilizowanych ligandów cyklodekstrynowych do usuwania farmaceutyków z roztworów wodnych	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Analiza procesu usuwania wybranych farmaceutyków z roztworów wodnych z wykorzystaniem żywic impregnowanych ligandami cyklodekstrynowymi lub immobilizowanych membran, określenie ich efektywności w zależności od zmiennych parametrów procesowych. Analiza farmaceutyków techniką LC, HPLC i wykorzystanie technik analizy instrumentalnej	Instytut Chemii
5	dr hab. E.Mielniczek-Brzóska prof. UJD	Badanie procesów krystalizacji metodą politermiczną oraz przeciwrozpuszczalnikową	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Praca eksperymentalna, której celem jest określanie szerokości metastabilnego obszaru dla krystalizacji wybranego związku chemicznego w różnych warunkach temperatury i stężenia. Badania prowadzone 1) metodą plitermiczną or 2) metodą przeciwrozpuszczlnikową.	Instytut Chemii
6	dr Kończyk Joanna	Usuwanie wybranych jonów metali ciężkich z roztworów wodnych przy użyciu sorbentów węglowych	Chemia II st. studia stacjonarne	1	Celem pracy jest opracowanie metody efektywnego usuwania wybranych jonów metali ciężkich z syntetycznych i rzeczywistych roztworów wodnych w procesie sorpcji na materiałach węglowych - praca eksperymentalna (metody badawcze: sorpcja, atomowa spektrometria absorpcyjna)	Instytut Chemii
7	dr Kończyk Joanna	Oznaczanie wybranych metali w wodach z kranu pobranych na terenie Częstochowy	Chemia II st. studia stacjonarne	1	Celem pracy jest określenie stężeń wybranych metali alkalicznych, ziem alkalicznych oraz ciężkich w wodach z kranu pobieranych bezpośrednio u konsumentów - mieszkańców Częstochowy oraz porównanie uzyskanych wyników z wymogami prawnymi oraz składem wybranych polskich wód butelkowanych (metody badawcze: atomowa spektrometria absorpcyjna lub emisyjna)	Instytut Chemii
8	prof. dr hab. Volodymyr Pavlyu	Nowe materiłay anodowe ogniw wodorkowych	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Celem pracy jest jest przegląd literatury dotyczącej nowych materiałów elektrodowych ogniw wodorkowych. Praca o charakterze doświadczalnym w ktorej będzie opisana synteza stopów w piecu łukowym. Rentgenowska analiza polikryształów oraz monokryształów. Rozwiązania struktur. Badania procesów elektrochemicznych	Instytut Chemii
9	dr Piotr Brągiel	Synteza i charakteryzacja nanoziaren perowskitu strontowo-cyrkonowego, $SrZnO_3$, domieszkowanych manganem	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Praca doświadczalna. Etap I. Otrzymywanie nanokrystalitu. Etap II. Charakteryzacja materiału. Pomiary: XRD, IR, UV-VIS, Luminescencyjne (PL i PLE), SEM Cel pracy: poszukiwanie materiału na wydajne źródło światła w czerwonej części zakresu widzialnego. Projektowany materiał może też być rozważany jako warstwa w stałych komórkach paliwowych (Solid State Fuel Cell).	Katedra Fizyki Doświadczalnej

10	dr Piotr Brągiel	Analiza składu przypowierzchniowej warstwy szkła bioaktywnego, przed i po imersji w SBF, techniką mikroskopii ramanowskiej.	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Pierwszym testem potencjalnej bioaktywności materiału jest badanie in vitro – materiał poddany jest immersji w SBF (SBF- simulated body fluid, sztuczne osocze, roztwór, którego skład jonowy jest identyczny ze składem osocza krwi ludzkiej, pozbawiony składników organicznych). W jej trakcie na powierzchni tworzy się warstwa hydroksyapatytu (HPA). Materiał bioaktywny ulega stopniowej degradacji. Etap I 1. Uczestnictwo w szkoleniach prowadzonych przez firmę która wygra postepowanie na dostawę spektrometru a związanych z obsługą urządzenia. 2.Przygotowanie przeglądu literaturowego dotyczącego badań struktury warstwy przypowierzchniowej szkieł bioaktywnych oraz warstwy apatytowej tworzonej na ich powierzchni podczas immersji w SBF. Etap II Przebadanie szkieł bioaktywnych dostępnych w Katedrze (szkła bioaktywne o różnym składzie) techniką obrazowania ramanowskiego. Analiza i opis wyników.	Katedra Fizyki Doświadczalnej
11	dr Piotr Brągiel	Nieliniowe własności optyczne (NLO) wybranych azo-chalkonów – prognozowanie właściwości na podstawie eksperymenty in silico.	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Chalkon, ze względu na swą strukturę, powinien umożliwić swobodny transfer ładunków w obrębie całej cząsteczki, azobenzen również posiada strukturę ułatwiającą relokację ładunków, a ponadto wykazuje fotochromizm (– zjawisko odwracalnej zmiany barwy związku pod wpływem odpowiednich długości fali światła elektromagnetycznego wiążące się z przejściami izomerycznymi (cis i trans) tego związku), który także umożliwia przenoszenie ładunków elektrycznych dzięki znacznym zmianom strukturalnym cząsteczki. Badania mają mieć charakter obliczeniowy. Należy wyznaczyć składowe tensorów polaryzowalności oraz hiperpolaryzowalności pierwszego i drugiego rzędu dla serii cząsteczek.	Katedra Fizyki Doświadczalnej
12	dr Piotr Brągiel	Znaczenie oddziaływań dyspersyjnych dla stabilności fotooksydacyjnej podstawionych heteroacenów.	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Praca doświadczalna. Etap I Wykonanie obliczeń dla serii trzech molekuł (różniących się podstawnikam), metodą DFT/TDFT z użyciem funkcjonałów APFD oraz ωB97XD. Dodatkowo uzupełnienie obliczeń z funkcjonałem B3LYP o poprawki dyspersyjne Grimme'go w wersji D3, B3LYP-D3. Obliczenia do wykonania pakietem Gaussian16. Etap II Zebranie i opracowanie wyników.	Katedra Fizyki Doświadczalnej
13	prof. dr hab. Piotr Dobrzyński	Modyfikacja wybranych polisacharydów w celu uzyskania nosników substancji aktywnych wykazujacych własności antybakteryjne	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	W pracy przeprowadzone zostaną próby modyfikacji chemicznej chitozanu, karagenianu i kwasu poligalakturonowego . Planowane jest otrzymanie kopolimerów tych polisacharydow zawierających alifatyczne poliestrowe i / lub poliwęglanowe bloki naszczepione w miejsca części grup hydroksylowych na drodze polimeryzacji ROP, a także na drodze przyłączania do tych grup wczesniej otrzymanych oligomerów, o potwierdzonym działaniu przeciwbakteryjnym i przeciwgrzybicznym, uzyskanych na wcześniejszym etapie badań. Prace wykonywane będą w ramach prac zaplanowanych w projekcie Narodowego Centrum Nauki "Bioresorbowalne polimery i mieszaniny polimerowe o własnościach bakteriobójczych do stosowania w kosmetyce i dermatologii". Przebieg prowadzonych syntez, jak i charakterystykę otrzymanych kopolimerów bedzie śledzony z pomocą pomiarów NMR, chromatografii GPC, kalorymetrii DSC, mikroskopii SEM, oraz badaniach aktywności biologicznej na wybranych szczepach bakterii i grzybów.	Katedra Biochemii, Biotechnologii i Ekotoksykologii
14	prof. dr hab. Cezary Kozłowski	Immobilizowane membrany w separacji farmaceutyków i metali toksycznych	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Zastosowanie kwasów fosforoorganicznych i makrocykli do separacji metali i ich połączeń z lekami. Techniki analityczne ASA, LC oraz HPLC.	Instytut Chemii
15	dr Ewa Różycka-Sokołowska	Struktura krystaliczna i cząsteczkowa wybranego związku organicznego o aktywności farmakologicznej	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Celem pracy jest wyznaczenie i udokładnienie oraz analiza struktury krystalicznej wybranego związku organicznego o aktywności farmakologicznej. Praca eksperymentalna	Instytut Chemii
16	dr Ewa Różycka-Sokołowska	Przewidywania toksyczności wybranej grupy związków organicznych o aktywności farmakologicznej	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Celem pracy jest określenie toksyczności grupy związków o aktywności farmakologicznej w drodze obliczeń w wykorzystaniem programu ACD/Percepta i określenie różnych parametrów (strukturalne, fizykochemiczne) na toksyczność. Praca obliczeniowa	Instytut Chemii
17	dr Piotr Rychter, prof. UJD	Badania przydatności mieszanin wybranych polimerów biodegradowalnych jako nośników farmaceutyków.	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Praca eksperymentalna będzie dotyczyć badań nad zastosowaniem wybranych mieszanin polimerowych opartych o poli(węglan propylenu) i polilaktyd jako nośników famaceutyków. Charakterystyka fizykochemiczna otrzymanych nośników polimerowych będzie wykonana przy pomocy standardowych metod charakteryzujących polimery: NMR, DSC, GPC, FTIR, SEM	Katedra Biochemii, Biotechnologii i Ekotoksykologii