

Chemia studia II stopnia/stacjonarne
Tematy prac na rok 2024/2025

	Nazwisko, imię promotora	Temat pracy	Kierunek, rok	Liczba studentów proponowanych do realizacji tematu	Cel i zakres pracy oraz planowane metody badawcze	Instytut/Katedra/Zakład
1.	dr hab. Barbara Morzyk-Ociepa, prof. UJD	Struktury molekularne i widma oscylacyjne wybranych pochodnych benzotriazolu - badania eksperymentalne i obliczenia DFT	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Celem badań jest opracowanie pełnej charakterystyki strukturalnej i spektroskopowej badanych związków. Zakres badań obejmuje przegląd literatury oraz analizę widm oscylacyjnych wybranych związków w fazie stałej przy użyciu metod chemii kwantowej. Przeprowadzone zostaną obliczenia struktur molekularnych i widm oscylacyjnych dla założonych modeli teoretycznych, wykorzystując metody DFT przy użyciu programu Gaussian 16. Dodatkowo, przeprowadzona zostanie analiza współrzędnych normalnych za pomocą programu FCART. Część obliczeniowa będzie realizowana w ramach grantu obliczeniowego w WCS.	Instytut Chemii
2.	prof. dr hab. Marczak Wojciech	Równania alternatywne wobec wielomianów Redlicha-Kistera do aproksymowania termodynamicznych funkcji nadmiarowych	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	W opisie termodynamicznym rozтворów dwuskładnikowych powszechnie stosuje się funkcje nadmiarowe definiowane jako różnice pomiędzy wartościami danej funkcji (np. entalpii, entropii czy objętości) dla układu rzeczywistego a odpowiedniego układu idealnego doskonałego. Do ich aproksymowania zwykle wykorzystuje się empiryczne wielomiany Redlicha-Kistera. Podstawową wadą interpolowanych wielomianów są nieliczne punkty przegięcia. Skutkiem tego odliczenia z nich otrzymane funkcje cząstkowe mogą być całkowicie błędne. Praca polega na	Instytut Chemii
3.	prof. dr hab. Piotr Balczewski	Mechanochemiczna synteza ko-amorficznych formułacji blokerów receptora angiotensyny II z polifenolami	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Praca eksperymentalna, której celem jest wyizolowanie ko-amorficznych formułacji farmaceutycznych, otrzymanych na drodze mechanochemicznej syntezy, z przeciwnadciśnieniowych blokerów angiotensyny II i polifenoli, jako ko-formerów. Otrzymane substancje zostaną scharakteryzowane z wykorzystaniem metod spektroskopowych, termicznych oraz rentgenograficznych.	Instytut Chemii
4.	prof. dr hab. Robert Biczak	Oddziaływania wybranych cieczy jonowych na wzrost i rozwój niektórych gatunków warzyw	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	W ramach realizacji części badawczej pracy magisterskiej zostaną przeprowadzone badania naukowe z zakresu chemii środowiska i ekotoksykologii, których celem będzie określenie i porównanie fitotoksyczności wybranych cieczy jonowych dla wczesnych stadiów rozwojowych niektórych gatunków warzyw (np. rzodkiewka, ogórek). W ramach eksperymentu zostaną określone zmiany poziomu świeżej i suchej masy roślin, długość korzeni i części nadziemnych, wielkość stresu oksydacyjnego mierzona poziomem wolnej proliny, dialdehydu malonowego i nadtlenku wodoru, oraz wizualna ocena roślin potwierdzona fotografiami cyfrowymi. Otrzymane wyniki zostaną poddane obróbce statystycznej. Wszystkie badania zostaną przeprowadzone w hali wegetacyjnej i laboratoriach KBBIE	KBBIE
5.	Prof. dr hab. Wołodmyr Pavlyuk	Analiza fazowa stopów układu Zr-Mg-Ni-Sn	Chemia, II st., studia stacjonarne	1	Celem pracy jest analiza fazowa syntezowanych stopów, ustalenie diagramu fazowego, określenie struktury związków międzymetalicznych. Synteza stopów w piecu łukowym. Rentgenowska oraz mikroskopowa analiza polikryształów oraz monokryształów.	Instytut Chemii