

**Tematy Prac Magisterskich (z abstraktami) - propozycje  
r. akad. 2014/2015**

**Dr hab. prof. AJD Jacek Filipecki**

**1. Badanie stopnia zdefektowania struktury szkieł tlenkowych domieszkowanych jonami lantanowców metodą spektroskopii czasów życia pozytonów PALS.**

Jedną z najczęściej używanych metod do badań struktury materiałów jest spektroskopia anihilacji pozytonów, a w szczególności spektroskopia czasów życia pozytonów PALS. Metoda ta jest szczególnie przydatną techniką do zbadania cech materialnych, głównie takich jak defekty i wolne objętości. Badania będą przeprowadzane na próbkach szkieł tlenkowych zbudowanych na bazie Te-Pb-Bi – SiO<sub>2</sub> domieszkowanych jonami lantanowców takich jak Pr, Er, Nd. Materiały te mają szerokie zastosowanie w telekomunikacji i optoelektronice..

W wyniku przeprowadzonych pomiarów uzyskane widma czasów życia pozytonów, będą liczone przy użyciu programu LT. Wyniki będą analizowane i dyskutowane na bazie strukturalnego modelu wolnych objętości i dwustanowego modelu anihilacji

**Prof. dr. hab. Stefan Giller**

**1. Kwaziklasyczne kwantowanie prostych układów kwantowych (dwuwymiarowych bilardów) za pomocą skeletonów”**

Metoda skeletonów jest kwaziklasyczną metodą budowania funkcji falowej na klasycznych trajektoriach. Tematem pracy będzie wykorzystanie tej metody do znalezienia kwantowego widma energetycznego dla prostych całkowalnych klasycznie studni potencjałów mających kształt dwuwymiarowych bilardów.

**Dr hab. prof. AJD Jacek Kasperczyk**

**1. Oddziaływanie wymienne i efekt delokalizacji w superklasterach żelazowo-siarkowych z ośmioma jonami żelaza.**

Klaster żelazowo-siarkowy stanowią istotną część wielu białek, które odgrywają ważną rolę w układach biologicznych. Właściwości fizyczne tych klasterów występujących w naturze lub syntetyzowanych sztucznie zostały już dobrze zbadane doświadczalnie i opisane teoretycznie, zwłaszcza w przypadku mniejszych klasterów, np. Fe<sub>4</sub>S<sub>4</sub> lub superklastera Fe<sub>6</sub>S<sub>6</sub>.

Istnieje potrzeba analizy bardziej złożonych superklasterów, np. Fe<sub>8</sub>S<sub>8</sub> ( t.j. z ośmioma jonami żelaza). Model teoretyczny powinien być zbudowany w oparciu o Hamiltonian Heisenberga dla spinów zlokalizowanych uzupełniony o efekty delokalizacji elektronów (tzw. podwójna wymiana). Metoda diagonalizacji takiego hamiltonianu, chociaż podobna do sposobu znajdowania spektrum energetycznego w superklasterach Fe<sub>6</sub>S<sub>6</sub>, w przypadku superklastera Fe<sub>8</sub>S<sub>8</sub> wymaga przeprowadzenia numerycznych obliczeń w oparciu o unikalny program komputerowy, wcześniej prezentowany w publikacjach M. Matusiewicza, M. Czerwińskiego, J. Kasperczyka i innych. Podstawowym celem pracy jest modyfikacja metody diagonalizacji i tego programu obliczeniowego w przypadku superklastera żelazowo-siarkowego z ośmioma jonami żelaza. Numeryczne obliczenia będzie można przeprowadzić, wykorzystując grant obliczeniowy **PWSU 0421 w Ohio Superkomputer Center** ( Columbus, Ohio, USA ). Ośrodek ten znajduje się na niezłym **78** miejscu na liście **500** największych centrów superkomputerowych świata ( według danych z roku 2010 ). Obliczone parametry fizyczne ( pojemność cieplna, podatność magnetyczna, itp. ) układów zawierających tytułowy superklaster Fe<sub>8</sub>S<sub>8</sub> mogą być porównane z dostępnymi danymi eksperymentalnymi w celu weryfikacji omawianego modelu. Podstawowa literatura dostępna jest w języku angielskim, ale są również obszernie pozycje po polsku, np. M. Matusiewicz, praca doktorska, Politechnika Wroclawska, 1999.

**Dr hab. prof. AJD Małgorzata Makowska-Janusik**

**1. Własności optyczne związków biologicznie czynnych – symulacje komputerowe**

Terapię fotodynamiczną (PDT, ang: *photodynamic therapy*) powszechnie wykorzystuje się w schorzeniach przednowotworowych i nowotworowych skóry. Polega ona na współdziałaniu światła laserowego oraz fotouczulacza gromadzonego wybiórczo w tkance nowotworowej, w efekcie czego następuje jej selektywne niszczenie poprzez aktywację procesów fotobiochemicznych. W wyniku szeregu reakcji

fizykochemicznych, generowanych po aktywacji fotobarwnika światłem o odpowiedniej długości fali dochodzi do powstania reaktywnych form tlenu i stresu oksydacyjnego, a w rezultacie do śmierci komórki. Podstawowym problemem metody fotodynamicznej jest brak takich związków, które efektywnie niszczyłyby komórki nowotworowe, przy jednoczesnym minimalnym oddziaływaniu na tkanki zdrowe. Ważnym zagadnieniem dalszego rozwoju terapii PDT jest otrzymanie i wdrożenie fotouczulaczy zapewniających efektywną generację tlenu singletowego, czynnika odpowiedzialnego za uszkodzenie i śmierć komórek nowotworowych. Celem proponowanej pracy będą symulacje komputerowe własności optycznych i zmian fotochemicznych syntetycznych fotouczulaczy porfiryńowych z dołączonymi półprzewodnikowymi nanocząsteczkami o potencjalnym zastosowaniu w terapii fotodynamicznej.

## **2. Kwantowo-chemiczne modelowanie własności elektronowych cienkich warstw wybranych struktur półprzewodnikowych.**

Przedstawiony temat obejmuje symulacje komputerowe i obliczenia numeryczne własności elektronowych cienkich warstw wybranych struktur półprzewodnikowych z wykorzystaniem pakietów kwantowo-chemicznych. Szczególny nacisk będzie położony na modelowanie zmian własności elektronowych warstw poprzez dołączenia sensybilizatorów (molekuł organicznych).

Wymagana jest znajomość języka angielskiego w stopniu komunikatywnym. Nie wymagana jest znajomości programowania.

### **prof. Arkadiusz Mandowski**

#### **1. Badanie percepcji generowanych dwudźwięków w różnych strojach muzycznych.**

Strojenie instrumentu (np. fortepianu) w systemie 12-interwałowym jest zadaniem nietrywialnym, wymagającym trudnego kompromisu pomiędzy konsonansowością podstawowych interwałów a wymogiem jednorodności skali. Idealna jednorodność interwałów skali chromatycznej, realizowana w praktyce, jako tzw. „skala równomiernie temperowana”, sprawia, że wszystkie dźwięki są równoprawne i każdy utwór można wykonywać w dowolnej tonacji. Pojawiające się w niej dysonanse są często trudne do zaakceptowania. Na przestrzeni wieków opracowano różne stroje będące rozsądnym kompromisem pomiędzy tymi sprzecznymi wymogami. Celem pracy jest praktyczne przetestowanie stopnia konsonansowości generowanych elektronicznie podstawowych dwudźwięków w wybranych strojach muzycznych.

### **Dr P. Brągiel**

#### **1. Struktura elektronowa cząsteczki 5-amino-1-naftolu oraz struktura pasmowa kryształu 5-amino-1-naftolu.**

Struktura kryształu 5-amino-1-naftolu została rozwiązana przez profesora B.Marciniaka z ICHOŚiB – dostępny jest plik \*.cif.

Od magistranta/magistrantki oczekuje się przeprowadzenia serii obliczeń pakietem Gaussian 09. Dla cząsteczki obliczenia metodą DFT z użyciem trzech różnych potencjałów: optymalizacja struktury, opis poziomów elektronowych, symulacja widm IR oraz Ramana, wyliczenie składowych tensorów polaryzowalności i hiperpolaryzowalności.

Obliczenia te mają zostać uzupełnione obliczeniami TDFT oraz HF+CI dla opisu widma absorbcyjnego.

Dla kryształu: wyznaczenie struktury pasmowej, przynajmniej w punkcie  $\Gamma$ .

Narzędzia: Gaussian 09 z opcją Periodic Boundary Condition oraz Wien2K –metoda LAPW.

#### **2. Przejście szkliste oraz zmiany lepkości w serii szkieł $30\text{Li}_2\text{O}-(5-x)\text{Al}_2\text{O}_3-65\text{B}_2\text{O}_3; x\text{TiO}_2$ ; $x=0,0.2,0.4,0.8$ .**

Oczekuje się, iż dyplomant/dyplomantka wykona serie pomiarów metodą Różnicowej Kalorymetrii Skaningowej (DSC) tak w trybie izotermicznym jak i przy stałej prędkości narastania temperatury. Uzyskane wyniki mają stanowić podstawę do przygotowania, dla każdego ze szkieł, krzywej TTT ( Time-Temperature – Transformation) jak też wyliczenia krytycznej szybkości chłodzenia. Powstająca faza

krystaliczna ma zostać zidentyfikowana przy użyciu dyfraktogramów XRD, rozmiary kryształów w warstwie powierzchniowej techniką mikroskopii SEM. Zakres zmian ciepła właściwego w temperaturze przejścia szklistego ma posłużyć do wyliczenia współczynników lepkości.

### **3. Struktura elektronowa I symulacja właściwości optycznych dwucyjanowinyłowych jednostek akceptorowych: $C_8H_4N_2S$ ; $C_{12}H_6N_2S_2$ ; $C_{13}H_8N_2OS_2$ ; $C_{16}H_{15}N_3S_2$ .**

### **4. Struktura elektronowa I symulacja właściwości optycznych trójcyjanowinyłowych jednostek akceptorowych: $C_{14}H_7N_3OS_2$ ; $C_{15}H_9N_3OS_2$ .**

Zadaniem magistranta/magistrantki będzie przeprowadzenie serii obliczeń, pakietem Gaussian09, dla grupy związków o potencjalnym zastosowaniu w obszarze optyki nieliniowej. Optymalizacja geometrii, wyznaczenie struktury elektronowej, symulacja widm IR, Ramana i absorpcyjnego, uzyskanie składowych tensorów polaryzowalności i hiperpolaryzowalności, w kilku modelach obliczeniowych to zasadnicza część wysiłku numerycznego. Ponieważ materiały tego typu wykorzystuje się jako rozproszone w matrycy polimerowej jej wpływ zostanie zasymulowany przez uwzględnienie polaryzującego wpływu matrycy w obliczeniach SCRF.

#### **Dr I. Fuks-Janczarek**

##### **1 Wyznaczenie właściwości nieliniowo optycznych w materiałach organicznych metodą z-scan.**

Głównym celem pracy będzie wyznaczenie wartości nieliniowości trzeciego rzędu oraz współczynnika absorpcji dwufotonowej dla wybranej grupy materiałów organicznych, a następnie określenie wpływu struktury chemicznej na otrzymane wyniki.

#### **Dr Ewa Mandowska**

##### **1. Badanie fadingu wybranych detektorów hybrydowych OSL.**

Detektory hybrydowe powstają z połączenia polimerów z nieorganicznymi izolatorami. Tlenek aluminium domieszkowany węglem ( $Al_2O_3:C$ ) jest dobrze znanym materiałem wykorzystywanym w dozymetrii osobistej i środowiskowej bazującej na zjawisku optycznie stymulowanej luminescencyjnej (OSL). Jego połączenie z wybranymi polimerami pozwala uzyskać detektory hybrydowe. Celem pracy jest przyjrzenie się, jaki jest zanik własności dozymetrycznych (fading) w czasie. Pomiary będą przeprowadzane z wykorzystaniem czytnika OSL Helios-1.

*Konieczna jest znajomość języka angielskiego, w celu korzystania zasobów literaturowych..*

#### **dr Rafał Miedziński**

##### **1. Porównanie teoretycznie wyznaczonych wartości czasów pogłosów z modelem rzeczywistym dla typowego pomieszczenia w budynku Instytutu Fizyki AJD.**

Czas pogłosu pomieszczenia określony jest jako czas spadku wartości ciśnienia akustycznego o 60dB - oznaczany jako RT60 (ang. Reverberation Time). Od pionierskich badań W.C. Sabine wyprowadzono wiele teoretycznych równań pozwalających na obliczenie parametru RT60. W zależności od badanego pomieszczenia, które może być silnie bądź słabo absorpcyjne, równania wyprowadzone przez wielu badaczy sprawdzają się z różną dokładnością. Niniejsza praca określi przydatność modeli teoretycznych do typowego pomieszczenia (modułu) znajdującego się w budynku Wydziału Matematyczno-Przyrodniczego.

##### **2. Wpływ rozmieszczenia ustrojów dźwiękochłonnych na parametry akustyczne typowego pomieszczenia w budynku Instytutu Fizyki AJD.**

Typowymi parametrami określającymi własności akustyczne pomieszczenia są rezonanse własne oraz czas pogłosu. Rozmieszczenie ustrojów dźwiękochłonnych w pomieszczeniu modyfikuje te parametry w sposób znaczący. Praca określi wpływ rozmieszczenia w różnych konfiguracjach ustrojów dźwiękochłonnych (maty akustyczne, pułapki basowe, zasłony, dywany) na akustykę typowego pomieszczenia (modułu) znajdującego się w budynku B2 Wydziału Matematyczno - Przyrodniczego.

## **Dr Dominik Szczęśniak**

### **1. Teoretyczny opis własności nano-układów na bazie grafenu do zastosowań optoelektronicznych**

Grafen, poza niezwykle ciekawymi własnościami elektronicznymi, cieplnymi oraz mechanicznymi [1-3], wykazuje również interesujące własności optyczne [4]. Niedawno pokazano iż grafen pozwala na wysoce wydajny proces generacji elektronów pod wpływem padającego światła [5]. Podczas gdy tradycyjne materiały pozwalają na generację pojedynczego elektronu dla każdego zaabsorbowanego fotonu, w grafenie możliwa jest jednoczesna generacja wielu elektronów. W przyszłości, zjawisko to może doprowadzić do uzyskania wysoce wydajnych ogniw słonecznych. Dodatkowo, pojedyncza warstwa grafenu odbija tylko  $<0.1\%$  [6] padającego światła widzialnego, a wartość ta wzrasta do jedynie 2% dla dziesięciu warstw [7]. Ponadto, grafen jako materiał o zerowej wartości przerwy energetycznej, pozwala na absorpcję promieniowania elektromagnetycznego w znacznie szerszym zakresie widma niż obecne materiały półprzewodnikowe.

Na podstawie powyższych obserwacji, można zakładać, że elementy optoelektroniczne na bazie grafenu, np. fotodetektory grafenowe (rysunek obok), okażą się niezwykle wydajnymi urządzeniami. Wspomniane fotodetektory zostały już poddane analizie na drodze eksperymentalnej [8, 9], jednak ich opis teoretyczny, jak i opis teoretyczny innych układów optoelektronicznych na bazie grafenu, nie jest jeszcze pełny.

Niniejsza propozycja tematu pracy magisterskiej dotyczy będzie teoretycznego opisu nano-układów na bazie grafenu o możliwych zastosowaniach optoelektronicznych w przyszłości. W pierwszym kroku rozpatrzone zostanie oddziaływanie elektron-foton, stanowiące podstawę działania urządzeń optoelektronicznych. W przyszłości pozwoli to na rozwój autorskiej metody dopasowania pól fazowych [10-11], pozwalającej na opis zjawiska transportu elektronowego w nano-układach, o oddziaływania nowego typu. W praktyce powinno to pozwolić na uzyskanie wydajnego i przejrzystego modelu teoretycznego pozwalającego na badanie kwantowych procesów transportu w układach optoelektronicznych.

## **Dr Stanisław Tkaczyk**

### **1. Przewodnictwo elektryczne nanostruktur hybrydowych polimer- $Al_2O_3$**

W pracy Student opisuje własności polimerów (1,4-cis-polibutadienu i chitozanu). W dalszej części praca będzie zawierała opis mechanizmów transportu nośników ładunków elektrycznych przez objętość cienkich warstw oraz sposoby ich wprowadzania do badanych struktur hybrydowych. W części eksperymentalnej wykonane będą pomiary przewodnictwa elektrycznego polimerów domieszkowanych  $Al_2O_3$  zaopatrzonych w elektrody Al. i Au

w zależności od stopnia domieszkowania, grubości warstw hybrydowych oraz temperatury pomiaru i wartości natężeń pól elektrycznych.

Na podstawie uzyskanych wyników ze stałoprądowego przewodnictwa elektrycznego określona zostanie energia aktywacji przewodnictwa samoistnego badanego materiału oraz podana zostanie propozycja mechanizmów transportu elektrycznego w tych warstwach

## **Dr Bogdan Wszolek**

### **1. Scenariusz prezentacji planetaryjnej „Źródła energii”.**

Sporządzenie scenariusza dla 30-minutowej prezentacji planetaryjnej na temat źródeł energii. Oprócz przygotowania merytorycznego, od studenta oczekuje się odpowiednich predyspozycji w zakresie wyobraźni, poczucia estetyki, operowania dźwiękiem i obrazem.

### **2. Międzygwiazdowe struktury absorpcyjne w widmach wybranych gwiazd wczesnych typów widmowych”**

Praca badawcza polegająca na analizie spektroskopowej oryginalnych obserwacji astronomicznych. W widmach gwiazd są linie absorpcyjne pochodzenia międzygwiazdowego, które trzeba będzie odnaleźć i pomierzyć dla nich położenia, szerokości równoważne i głębokości. Każda z gwiazd będzie mieć inną charakterystykę widmową. Jednym z celów pracy będzie uchwycenie zależności intensywności wybranych linii widmowych od stopnia poczerwienienia gwiazdy. Trzeba będzie częściowo opanować programy komputerowe do analizy widm (DECH) oraz do sporządzania rysunków (np. ORIGIN). Od studenta oczekuje się czasowej dyspozycyjności oraz dużego zaangażowania w realizację tematu. Przydatna znajomość języka angielskiego oraz „zacięcie” naukowe.