

**Tematy Prac Magisterskich (z abstraktami) - propozycje  
r. akad. 2015/2016**

**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.**

Klasterzy żelazowo-siarkowe 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 obszerne pozycje po polsku, np. M. Matusiewicz, praca doktorska, Politechnika Wrocławska, 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 porfirynowych 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.

### **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 dwucjanowinyłowych jednostek akceptorowych:  $\text{C}_8\text{H}_4\text{N}_2\text{S}$ ;  $\text{C}_{12}\text{H}_6\text{N}_2\text{S}_2$ ;  $\text{C}_{13}\text{H}_8\text{N}_2\text{OS}_2$ ;  $\text{C}_{16}\text{H}_{15}\text{N}_3\text{S}_2$ .**

**4. Struktura elektronowa I symulacja właściwości optycznych trójcyjanowinyłowych jednostek akceptorowych:  $\text{C}_{14}\text{H}_7\text{N}_3\text{OS}_2$ ;  $\text{C}_{15}\text{H}_9\text{N}_3\text{OS}_2$ .**

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.

**5. Otrzymywanie i charakterystyka bioaktywnych szkieł i ceramiek fosforanowych do zastosowań medycznych.**

Zadaniem dyplomanta będzie zbadanie i opis właściwości szkieł fosforanowych oraz uzyskanych z nich bioaktywnych ceramiek. Badane będą szkła o składzie  $\text{CaO-Na}_2\text{O-P}_2\text{O}_5$  (z niewielkim, mniej niż 3 mol % dodatkiem  $\text{SiO}_2$ ), ze zmiennym stosunkiem koncentracji  $\text{CaO/Na}_2\text{O}$ . Szkła te będą krystalizowane z dodatkiem  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  w charakterze czynnika nukleującego.

Szkła zostaną przygotowane w grupie prof. N.Veeraiaha w Uniwersytecie Acharya Nagarjuna w Vijajawadzie.

Badania obejmą:

- Wyznaczenie temperatury przejścia szklistego ( $T_g$ ) oraz temperatury krystalizacji ( $T_c$ ) – pomiary metodą różnicowej kalorymetrii skaningowej (DSC).
- Ustalenie końcowego składu, fazy (faz) krystalicznej, określenie rozkładu rozmiarów ziaren krystalicznych w ceramice, zbadanie składu powierzchniowego – metody: XRD, TEM, SEM/EDS.
- Pogłębienie wiedzy o strukturze otrzymanych ceramiek na drodze badań technikami spektroskopii w podczerwieni (IR), spektroskopii Ramana

## **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.

### **2. Technologia wytwarzania, właściwości fizyczne i chemiczne szkieł oraz ich zastosowanie**

Głównym celem pracy będzie uzyskanie oraz zbadanie własności fizycznych szkieł. Cel ten zostanie osiągnięty poprzez:

- syntezę wybranych składów szkieł
- zbadanie ich właściwości optycznych
- wykonanie badań powierzchni skaningowym mikroskopem elektronowym
- badania przemian fazowych różnicową kalorymetrią skaningową (DSC).

W pracy opisane zostaną również właściwości chemiczne badanych szkieł oraz możliwości ich zastosowań w przemyśle.

## **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 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