

ZAKŁAD CHEMII TEORETYCZNEJ

Prof. Krzysztof Nieszporek – Kierownik Zakładu

Prof. Krzysztof Woliński

Prof. Paweł Szabelski

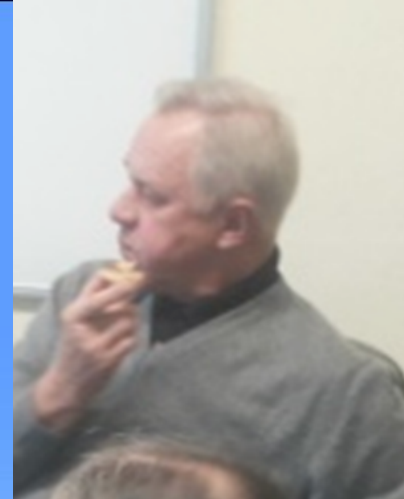
Dr Mariusz Barczak

Dr Damian Nieckarz

Dr Przemysław Podkościelny

prof. Krzysztof Woliński

Prof. Woliński jest czołowym specjalistą na Wydziale Chemii UMCS w dziedzinie metod obliczeniowych chemii kwantowej, m.in. jest współtwórcą profesjonalnego pakietu obliczeniowego PQS (*Parallel Quantum Solutions*).



Badania naukowe obejmują następujące zagadnienia:

Molekuły w zewnętrznym niejednorodnym polu elektrycznym

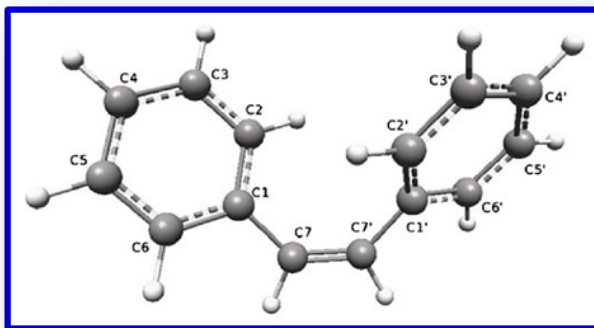
Molekuły w polu ładunków punktowych

Wpływ rozpuszczalnika na widma NMR i wibracyjne (IR i Raman)

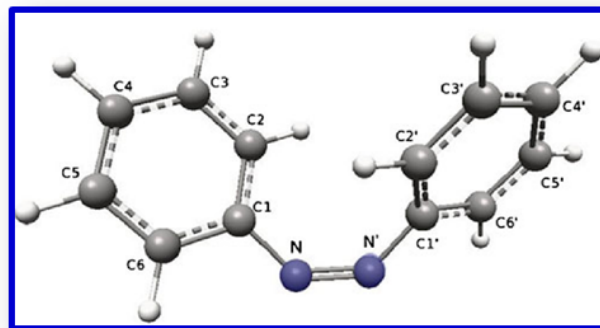
Opis układów molekularnych będących pod wpływem sił zewnętrznych

Do wybranych atomów (jąder) w molekuale przykładamy zewnętrzne siły. Molekuła odpowiada na taki stres poprzez zmianę swojej geometrii. W ten sposób wywołujemy w molekuale różne zmiany strukturalne takie jak np. przejścia konformacyjne i izomeryzację, rozrywanie i tworzenie nowych wiązań. Ma to bezpośredni związek z eksperymentami AFM. Obecnie stosujemy to podejście do badania układów molekularnych pod (wysokim) ciśnieniem.

- Przejścia konformacyjne w pierścieniu pyranozowym
- Izomeryzacja azobenzenu i stilbenu



cis-stilbene



cis-azobenzene

Opis układów molekularnych będących pod wpływem sił zewnętrznych

Izomeryzacja azobenzenu i stilbenu

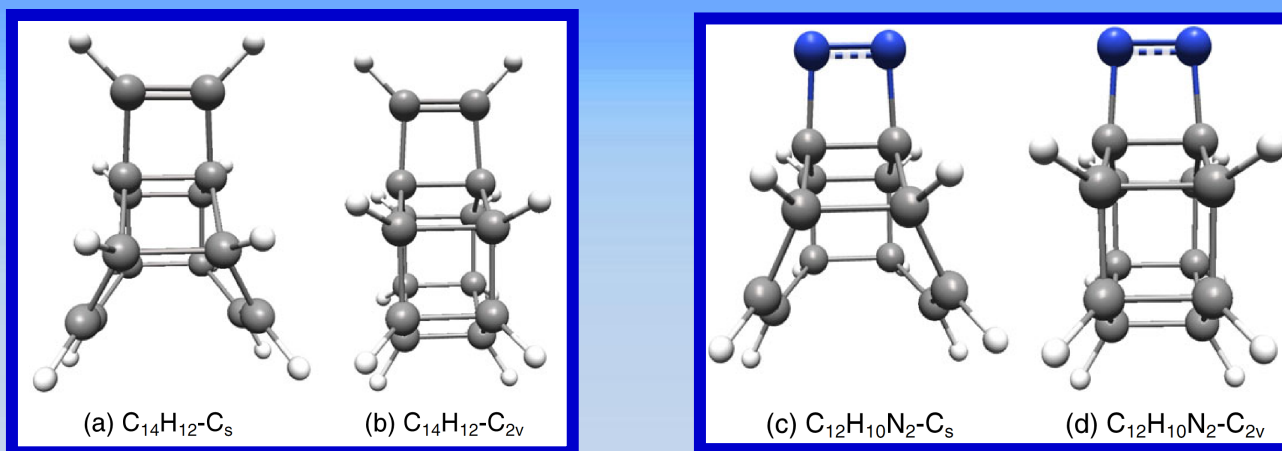
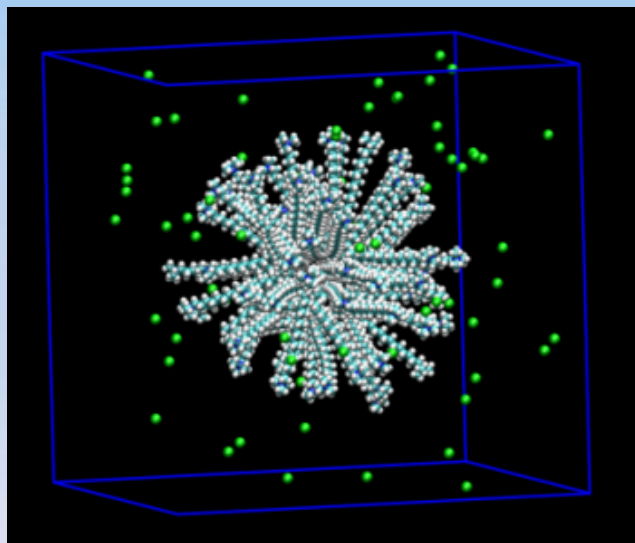


Fig. 2 High energy isomers of $C_{14}H_{12}$ and $C_{12}H_{10}N_2$ obtained via an enforced geometry optimization by pushing together all symmetry related pairs of carbon atoms in the phenyl rings of *cis*-stilbene and *cis*-azobenzene, respectively

Zainteresowania naukowe prof. Krzysztofa Nieszporka związane są z trzema zagadnieniami. Stosując klasyczną dynamikę molekularną badane są następujące układy:

1) Micelizacja i solubilizacja substancji biologicznie aktywnych. Metody dynamiki molekularnej oferują możliwość uzyskania informacji na temat solubilizacji wybranych cząsteczek organicznych. Można określić np. miejsce lokowania się cząsteczki w miceli oraz jej orientację przestrzenną.

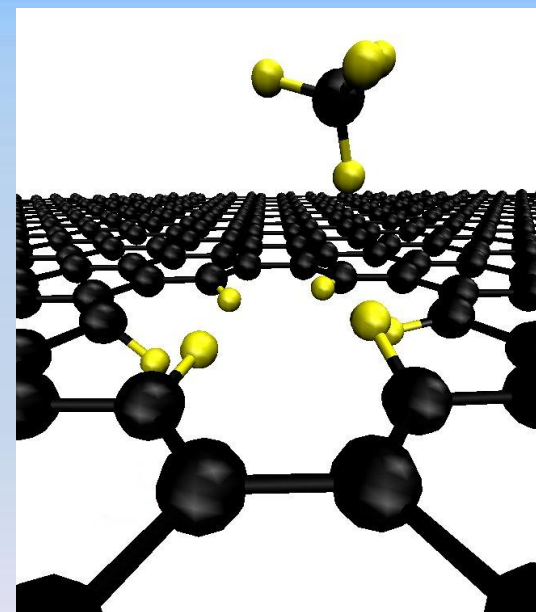
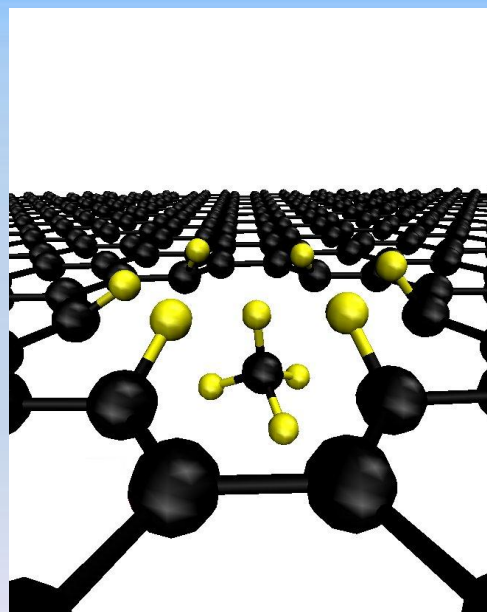
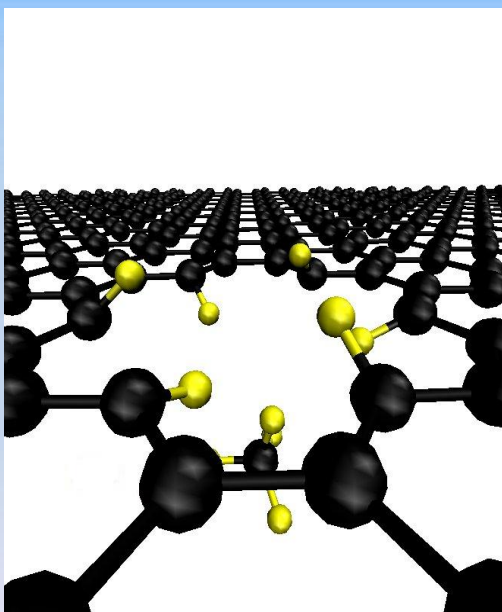


Teoretyczne badania micelizacji i solubilizacji substancji biologicznie aktywnych (dynamika molekularna)

2) Symulacje procesów separacji nanoporowatym grafenem. Spośród wielu potencjalnych zastosowań grafenu można go również wykorzystać w procesach separacji membranowej. Ponieważ szybkość permeacji jest odwrotnie proporcjonalna do grubości membrany, grafen wydaje się idealnym materiałem. Dodatkowo jest on bardzo odporny mechanicznie i nieprzepuszczalny nawet dla atomów helu. Ponadto, nowoczesne metody syntezy oraz nowe technologie takie jak skaningowy mikroskop jonowy (Focus Ion Beam FIB) umożliwiają otrzymywanie w arkuszu grafenowym nanoporów o ściśle określonej geometrii. Dotychczasowe badania wskazują na dużą złożoność procesu separacji w której oprócz efektów sita molekularnego istotną rolę odgrywają np. efekty adsorpcyjne.

prof. Krzysztof Nieszporek

Symulacje metodami dynamiki molekularnej procesów separacji nanoporowatym grafenem



3) Dynamika reorientacyjna wody w warstwie solwatacyjnej jonów Hofmeistera. Przez dziesięciolecia wpływ jonów na rozpuszczalność białek w wodzie wiązana była ze strukturą wiązań wodorowych w roztworze. Wierzano, że niektóre z tych jonów powodują większe uporządkowanie struktury roztworu (jony kosmotropowe) a inne niszczą sieć wiązań wodorowych (jony chaotropowe).

Dynamika molekularna definiuje wiązanie wodorowe za pomocą parametrów geometrycznych układu donor-akceptor wiązania. Stwarza to możliwość śledzenia zmian orientacji cząsteczek podczas tworzenia/zrywania wiązania wodorowego. Badania tego typu przyczyniły się w ostatnich latach do wyjaśnienia aktywności jonów z szeregu Hofmeistera. Okazało się, że wpływ jonów na wiązania wodorowe w roztworze pomiędzy cząsteczkami wody ogranicza się tylko do pierwszej warstwy solwatacyjnej a obserwowane efekty mają związek z dynamiką reorientacyjną wody w warstwach solwatacyjnych jonów.

Dynamika reorientacyjna wody w warstwie solwatacyjnej jonów Hofmeistera

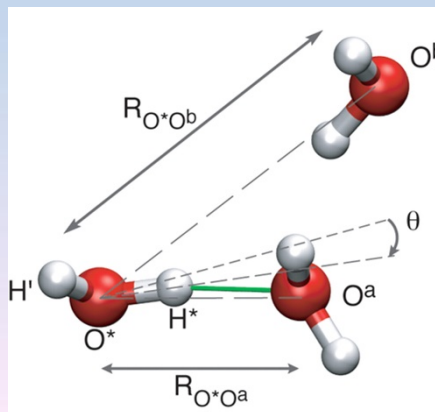


zdolność wysalania białek

aniony: PO_4^{3-} , SO_4^{2-} , CH_3COO^- , Cl^- , Br^- , NO_3^- , ClO_4^- , I^- , SCN^-

kationy: NH_4^+ , Rb^+ , K^+ , Na^+ , Cs^+ , Li^{2+} , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Ba^{2+}

efekt chaotropowy



prof. Krzysztof Nieszporek

Wyżej wymienione zagadnienia związane są z tematami prac magisterskich. W przypadku prac licencjackich tematyka może być bardziej ogólna. W ubiegłych latach zrealizowane prace licencjackie dotyczyły takich zagadnień jak: nanomateriały węglowe, charakterystyka wybranych witamin, antyoksydanty stosowane w żywności itp. Temat pracy licencjackiej może być dostosowany do zainteresowań naukowych studenta.

Dr Mariusz Barczak



Tematyka badawcza, którą mogą realizować studenci obejmuje:

Otrzymywanie materiałów porowatych i ich wykorzystanie do usuwania różnego typu zanieczyszczeń z wód i ścieków.

Wykorzystanie elastycznych tkanin węglowych jako adsorbentów, np. leków czy surogatów broni chemicznej oraz materiałów bakteriobójczych.

Zastosowanie metod spektroskopowych do wykrywania/oznaczania różnego typu substancji, np. w kosmetykach, produktach naturalnych i spożywczych, itp.

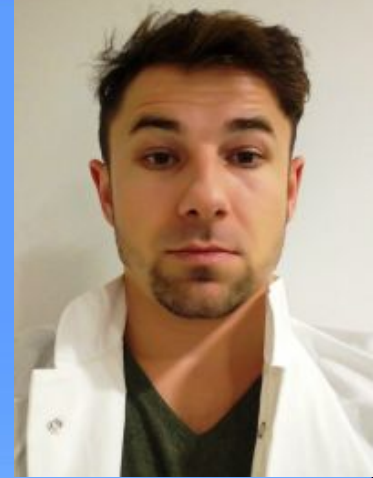
Moje najnowsze badania dotyczą otrzymywania magnetycznych hydrożeli i ich zastosowania do regeneracji tkanek miękkich (np. wątroba, mięśnie, rogówka). Jest to niezwykle ciekawy temat a zainteresowanych nim studentów proszę o kontakt.

W przypadku prac licencjackich tematyka może być bardziej ogólna i może zostać zaproponowana przez studenta, co zresztą najczęściej ma miejsce. W razie pytań proszę o kontakt: **mbarczak@umcs.pl**

Laboratorium jest wyposażone w nowoczesną aparaturę pomiarową dostępną dla studentów podczas prowadzenia badań.



dr Damian Nieckarz



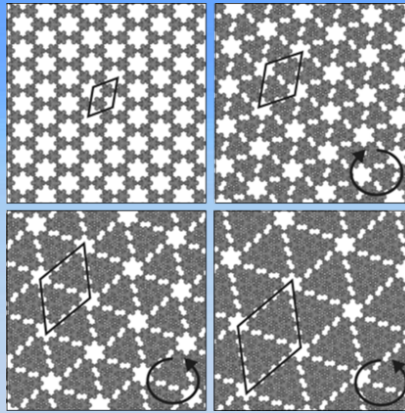
Tematyka badawcza obejmuje następujące zagadnienia:

- Nanomateriały
- Uporządkowane warstwy zaadsorbowane
- Reakcje chemiczne zachodzące na granicach faz
- Symulacje komputerowe
- Metoda Monte Carlo
- Struktury fraktalne

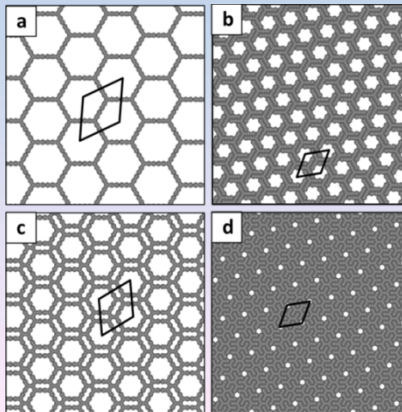
dr Damian Nieckarz

Proponowana tematyka prac magisterskich

1. *Symulacje komputerowe powstawania porowatych struktur supramolekularnych*



2. *Powstawanie hierarchicznych struktur supramolekularnych na powierzchniach płaskich - symulacje Monte Carlo.*



dr Damian Nieckarz

Proponowana tematyka prac licencjackich

1. *Liczby pseudolosowe - metody otrzymywania i zastosowania praktyczne*
2. *Systemy Lindenmayera*
3. *Fraktale stochastyczne w chemii*
4. *Otrzymywanie nanomateriałów z zastosowaniem technik top-down*

Tematy prac licencjackich mogą być również dostosowane do indywidualnych zainteresowań naukowych studenta.

prof. Paweł Szabelski

Proponowana tematyka prac magisterskich

1. Adsorpcja na powierzchniach nanostrukturalnych: Badania modelowe

Tematem pracy będą symulacje komputerowe adsorpcji i samoorganizacji cząsteczek funkcjonalnych na powierzchniach płaskich zawierających niejednakowe centra adsorpcyjne. Celem badań będzie określenie roli powierzchniowej dystrybucji centrów aktywnych w procesie tworzenia superstruktur przez zaadsorbowane cząsteczki. Metodą stosowaną w pracy będą obliczenia techniką Monte Carlo w układach siatkowych.

prof. Paweł Szabelski

2. Symulacje komputerowe ograniczonej przestrzenie samoorganizacji cząsteczek funkcjonalnych

Tematem pracy będzie samoorganizacja cząsteczek funkcjonalnych na powierzchniach zawierających dodatkowe elementy strukturalne takie jak rowki czy uskoki krystaliczne. Realizacja zadań pracy polegać na wykonaniu symulacji Monte Carlo w układach siatkowych zawierających cząsteczki funkcjonalne o różnym kształcie. Celem obliczeń będzie zbadanie w jaki sposób niejednorodność strukturalna powierzchni wpływa na budowę warstw zaadsorbowanych złożonych z rozpatrywanych cząsteczek.

prof. Paweł Szabelski

Proponowana tematyka prac licencjackich

1. *Zjawisko perkolacji w układach rzeczywistych i modelowych*
2. *Polimery z odciskiem molekularnym: adsorpcja na powierzchniach heterogenicznych*
3. *Modele adsorpcji na powierzchniach chiralnych*

dr Przemysław Podkościelny

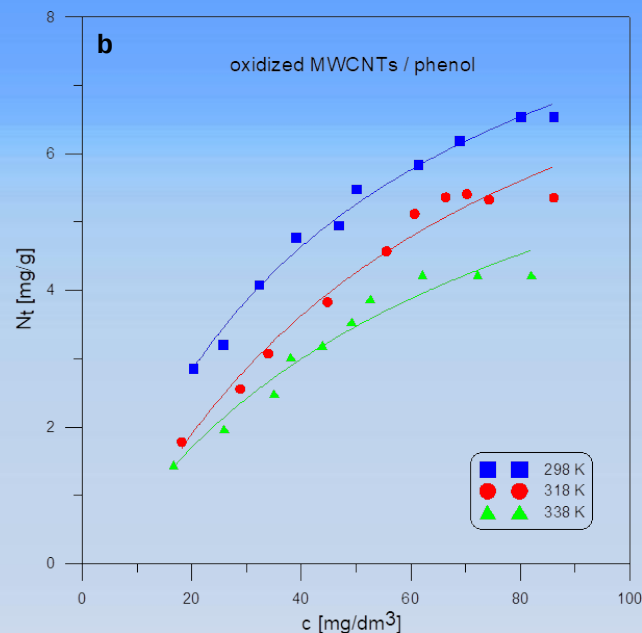
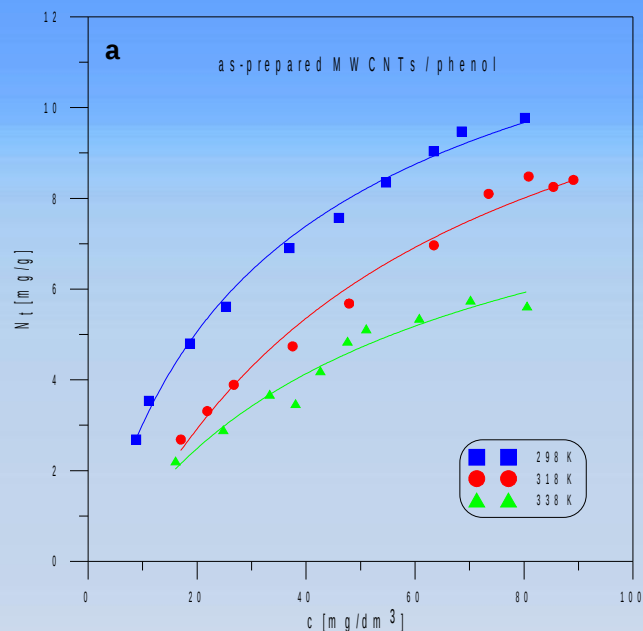


Stanowisko: starszy wykładowca

Tematyka badań naukowych obejmuje następujące zagadnienia:

- Adsorpcja związków aromatycznych z roztworów wodnych na adsorbentach węglowych: opis równowagi, efekty entalpowe oraz kinetyka adsorpcji
- Teoretyczny opis adsorpcji prostych związków aromatycznych z roztworów wodnych na wielościennych nanorurkach węglowych (MWCNTs)
- Usuwanie jonów metali ciężkich z roztworów wodnych
- Zastosowanie adsorbentów w ochronie środowiska ze szczególnym uwzględnieniem zasobów wodnych

Adsorpcja fenolu z roztworów wodnych na niemodyfikowanych oraz utlenionych powierzchniach wielościennych nanorurek węglowych



Izotermy adsorpcji fenolu z roztworów wodnych na niemodyfikowanych (a) i utlenionych (b) powierzchniach wielościennych nanorurek węglowych. Symbole oznaczają zmierzone wartości izoterm (Sheng i inni, 2010), natomiast linie są izotermami teoretycznymi obliczonymi z równania (DA).

W Zakładzie Chemii Teoretycznej (ZChT) funkcjonuje pracownia komputerowa, która jest wykorzystywana do prowadzenia zajęć laboratoryjnych z chemii teoretycznej oraz obliczeń z chemii kwantowej. Korzystają z niej studenci wykonujący prace magisterskie i licencjackie w ZChT.