

Seminarium wydziałowe, FORUM MŁODYCH, 2.06.2022, informacje o wolontariuszach i ich tematyce badawczej

1.

Wolontariusz: Daniel Pazdro (II Liceum Ogólnokształcące im. Mikołaja Kopernika w Mielcu, matura 2022)

Opiekun na WCh UJ: Dr hab. Marlena Gryl, prof. UJ (Zespół Inżynierii Krystalicznej i analizy strukturalnej)

Temat pracy badawczej: Krystalizacja i badania struktury materiałów zawierających cząsteczki aktywne farmakologicznie

Nauczyciel: Mgr Anna Lewandowska

Zainteresowania i aktywność społeczna: nauki ścisłe, fizyka i chemia, oraz otaczający świat, kartografia, geopolityka, historia i sport, działalność społeczna – praca w lokalnej parafii i prowadzenie kół naukowych w swojej szkole.

Abstrakt: Tematem mojej pracy będzie analiza próbki tolbutamidu krystalizowanej w acetonitrylu, próba określenia jej własności i porównanie otrzymanego polimorfu z dostępnymi w bazie danych. Wykorzystam do tego nie tylko dane komórki, długości wiązań ale i mapy gęstości elektronowych oraz tak zwane powierzchnie Hirshfelda.

2.

Wolontariusz: Kacper Siąkała (Technikum nr 4 w Jastrzębiu-Zdroju, matura 2022, profil technik analityk, absolwent, uzyskane kwalifikacje w zawodzie)

Opiekunowie na WCh UJ: prof. dr hab. Małgorzata Barańska, dr Anna Nowakowska (Zespół Obrazowania Ramanowskiego)

Temat pracy badawczej: Spektroskopowa charakterystyka komórek w modelu *in vitro* białaczki.

Nauczyciele prowadzący: mgr Jerzy Maduzia, mgr Edyta Kozielska

Zainteresowania: słuchanie muzyki, czytanie książek, sport rekreacyjny; tematyka budowlano-remontowa

Abstrakt:

Prezentacja obejmuje:

- Wprowadzenie do spektroskopii ramanowskiej oraz obrazowania ramanowskiego.
- Przedstawienie rodzaju informacji, który można uzyskać z widm – “odcisk palca”, omówienie widma standardu, przypisanie pasm.
- Spektroskopowa charakterystyka białaczki - kilka słów o tym czym jest, o podstawowym jej podziale. - Krótkie scharakteryzowanie ostrej białaczki limfoblastycznej.
- Omówienie wyników badań spektroskopowych białaczki na podstawie publikacji naukowej.
- Przedstawienie spektroskopowej charakterystyki rearanżacji genetycznej KMT2A w modelu *in vitro* białaczki.

3.

Wolontariusz: Zofia Sudoł (I LO. im. Seweryna Goszczyńskiego w Nowym Targu, klasa o profilu biologia-chemia-matematyka, matura 2023)

Opiekun na WCh UJ: dr Paweł Miśkowiec (Zespół Fizykochemicznych Badań Środowiskowych)

Temat pracy badawczej: Gleby Kotliny Orawskiej – ich stan i podatność na zanieczyszczenia. Analiza wybranych parametrów fizykochemicznych.

Nauczyciel prowadzący: mgr Anna Róg

Zainteresowania: podróże, spotkania z przyjaciółmi

Abstrakt: Omówione zostaną charakterystyka Kotliny Orawskiej, zanieczyszczenia występujące na jej terenie i jej charakterystyka gleboznawcza. Celem badań jest analiza zawartości metali ciężkich z podziałem na grupy: pierwiastki naturalnie występujące w glebie, mikroelementy i toksykanty, a także porównanie wyników z wartościami mierzonymi w ramach państwowego monitoringu gleb.

4.

Wolontariusz: Michał Lipiec (V LO im. Augusta Witkowskiego w Krakowie, matura 2024)

Opiekun na WCh UJ: Dr hab. James Hooper, prof. UJ (Zespół Chemii Kwantowej)

Temat pracy badawczej: Modelling of doped graphene nanoribbons with the use of various computational methods

Nauczyciel prowadzący: dr Wojciech Przybylski

Abstrakt: Modelling of doped graphene nanoribbons with the use of various computational methods Doped graphene nanoribbons are compounds that have many potential uses, e.g. in electronics or as catalysts in fuel cells converting oxygen (and hydrogen) to water. However, the synthesis of such systems is a challenging task.

In order to save time on the effort and materials required during synthesis, it is important to predict the properties of potentially synthesizable compounds and to select as targets only the ones with the highest expected performance. Various computational have been used for this purpose. One of the most common and validated approaches is Density Functional Theory (commonly used in the DFT-PBE and DFT-BLYP functional forms), but such methods still are time-consuming for systems with a large number of atoms.

The objective of this study was to determine the feasibility and accuracy of faster computational methods (“semi empirical” PM7 and density functional tight-binding GFN1-xTB) in reproducing the DFT energies and certain geometric parameters of O₂ interacting with a N- and B-doped graphene nanoribbon.

All calculations were performed using the Polish PL-Grid computing infrastructure. The Avogadro program (and its built-in Molecular Mechanics method) and Gaussian09 (with its PM7 method) were used to build the N-doped models by hand and then preliminarily optimize them. These models were then used to create the B-doped models and all of the singlet geometries were optimized with the PM7 and GFN1-xTB methods (within the Amsterdam Modelling Suite). The resulting structures, as well as the corresponding triplet states for O₂-containing systems, were then checked with the DFT-BLYP and DFT-PBE methods (using the Gaussian09 program).

PM7 failed to predict the partial oxygen charges and oxygen–oxygen distances in the modelled molecules and thus erroneously predicted some key geometries. Therefore, even though the accuracy of energy predictions was found to be better for PM7 than for GFN1-xTB, the GFN1-xTB method is recommended as the best choice for use in future structure-searching studies of doped graphene nanoribbons. The PM7 and GFN1-xTB methods both, however, accurately indicate that the boron doped nanoribbon absorbs oxygen better than its nitrogen doped analogue.