

### III. Formularz do wypełnienia

Temat pracy dyplomowej  
**ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ, WYDZIAŁ, PW**

Kierujący pracą: ...dr hab. inż. Halina Szatyłowicz.....

Opiekun naukowy: .....

Afiliacja opiekuna naukowego: .....

Praca dyplomowa dotyczyć będzie.....

**Wpływ oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych na strukturę elektronową hydroksyantracenu**

Pochodne antracenu są wszechobecnym elementem strukturalnym wykorzystywanym w chemii supramolekularnej do projektowania i syntezy polimerowych materiałów funkcjonalnych [Chem. Soc. Rev., 2014, 43, 1885]. Skondensowane pierścienie chętnie uczestniczą w oddziaływaniach, na przykład z cząsteczkami rozpuszczalnika. O wyjątkowych „urokach” grupy hydroksylowej przekonywać nie trzeba. Powyższe fakty uzasadniają wybór hydroksyantracenu: 1-OH, 2-OH i 9-OH jako obiektów badań. Celem pracy jest określenie i porównanie wpływu miejsca podstawienia grupy hydroksylowej na strukturę elektronową antracenu. Dodatkowo, właściwości elektrono-donorowe grupy OH można modyfikować poprzez jej uczestnictwo w międzycząsteczkowym wiązaniu wodorowy, na przykład z F<sup>-</sup>. Do opisu struktury elektronowej wykorzystany będzie model cSAR (suma ładunków podstawnika i atomu węgla *ipso*) oraz indeks aromatyczności HOMA.

**(nie więcej niż 1500 znaków ze spacjami)**

Proponowana praca obejmuje:

1. Wybór metody obliczeniowej do wyznaczenia geometrii cząsteczek
2. Wybór metody wyznaczania ładunków poszczególnych atomów cząsteczki
3. Analiza wpływu miejsca podstawienia grupy hydroksylowej oraz jej oddziaływań poprzez międzycząsteczkowe wiązania wodorowe na strukturę elektronową hydroksyantracenu.

Temat przeznaczony jest dla:	Proszę zaznaczyć właściwe pola wstawiając w sąsiedniej komórce znak „X”	
studentów kierunku*	<b>Biotechnologia **</b>	
	<b>Technologia Chemiczna</b>	X
studentów studiów*	<b>I stopnia – praca inżynierska</b>	X
	<b>II stopnia – praca magisterska</b>	
<b>Wyrażam zgodę na zamieszczenie streszczenia pracy dyplomowej w wirtualnym dziekanacie ***</b>		

\* proszę wybrać jedną z 2 możliwych opcji

\*\* jeżeli temat może być również przeznaczony dla studentów specjalności *Applied biotechnology*, proszę wstawić AX

\*\*\* proszę o wpisanie słowa **TAK** lub **NIE**