

Dr hab. Teobald Kupka, prof. UO

19 Maja 2017

Zakład Chemii Fizycznej i Modelowania Molekularnego
pok. 511, tel. 665 921 475
teobaldk@gmail.com

Propozycje tematów prac doktorskich:

1. Charakterystyka eksperymentalna i teoretyczna uporządkowanych struktur (nano)węglowych:

- a) fulereny
- 2) nanorurki węglowe
- 3) grafeny.

W zespole ukończono trzy prace doktorskie, opublikowaliśmy wspólnie ok. 30 publikacji (w tym oraz jedną monoautorską doktoranta). Dwa doktoraty ukończono z wyróżnieniem i nasz najlepszy doktorant do chwili obrony swojej pracy doktorskiej opublikował 17 prac, cytowanych ponad 130 razy, w tym dwie w bardzo dobrych czasopismach (IF = 5.3 i 5.4).

Proponowana tematyka jest kontynuowana w naszym zespole od 2006 r, głównie we współpracy z PAN Warszawa, Laboratorium Grafenowym Politechniki Warszawskiej, Uniwersytetem Śląskim, Śląskim Uniwersytetem Medycznym, Tatung Technical University (Taipei, Taiwan), Uniwersytetem w Kopenhadze (Dania), Czeską Akademią Nauk w Pradze. Wyniki badań są publikowane w uznanych czasopismach z listy filadelfijskiej (IF od 1 do 6) i szeroko cytowane w świecie. Doktoranci mają okazję do współpracy ze znanymi specjalistami z najlepszych ośrodków zagranicznych, wykonywania obliczeń teoretycznych w różnych ośrodkach superkomputerowych (m. in. ACK Kraków i WCCS Wrocław), wykonania szeregu pomiarów w zaprzyjaźnionych krajowych i zagranicznych ośrodkach badawczych oraz współudziału w organizowaniu konferencji międzynarodowych.

Dla uzupełnienia, proponowana tematyka wpisuje się w nowoczesne podejście do nanotechnologii i inżynierskiego projektowania nowych materiałów (material science, tj. Inżynierii materiałowej).

Przykładowe prace z proponowanej tematyki można zobaczyć na stronie www.scopus.com :

<https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8138012100#>

2. Rozwoj teoretycznych metod stosowanych do poprawy dokładności przewidywania (modelowania ab initio i DFT) struktury molekularnej oraz wybranych parametrów spektroskopowych (NMR, poprawki ZPV i relatywistyczne, IR, Raman, anharmoniczność) małych i średniej wielkości molekuł, w tym biologicznie czynnych. Szczegóły w bazie scopus.

3. Nanofotonika. Badania teoretyczne i eksperymentalne, m. in. nanocząstki srebra i pochodne polikarbazoli. Przykładowe prace własne:

1. Gray*, S.K., Kupka, T.,

Propagation of light in metallic nanowire arrays: Finite-difference time-domain studies of silver cylinders,

Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, 68 (2003) 454151-454151. Cytowane 192 razy (bez autocytowań).

2. Radula-Janik, K., Kupka*, T., Ejsmont, K., Daszkiewicz, Z., Sauer, S.P.A.,

DFT and experimental studies on structure and spectroscopic parameters of 3,6-diiodo-9-ethyl-9H-carbazole, Structural Chemistry, 27 (2016) 199-207. Cytowane 2 razy.

4. Badania eksperymentalne i teoretyczne układów porowatych (beton, cement) oraz uzdatniania odpadów komunalnych i rolnych we współpracy z lokalnymi i krajowymi firmami (ochrona środowiska).