

Ankieta Tutora SMP: Mateusz Brela

Stan na: 13.09.2021

1) Proponowana tematyka (hasłowo):

Teoretyczna spektroskopia molekularna. Obliczenia metodami dynamiki molekularnej dla układów polimerowych oraz krystalicznych. Modelowanie molekularne procesów degradacji polimerów metodami chemii kwantowej (DFT).

2) Jak będzie wyglądała współpraca w ramach tutorialu ?

Spotkania co najmniej raz w tygodniu, praca samodzielna, współpraca z członkami zespołu, uczestnictwo w seminariach zespołowych.

3) Jakiego typu praca roczna może być wykonywana ?

Praca roczna może być literaturowa lub badawcza. Preferowana jest praca badawcza o charakterze teoretycznym/obliczeniowym. W zależności od preferencji studenta może być realizowana we współpracy z innymi zespołami.

4) Jaka jest proponowana przez tutora tematyka prac rocznych?

W ciągu ostatnich lat moje zainteresowania obejmowały badania spektroskopowe i teoretyczne układów z wiązaniami wodorowymi. W badaniach używam głównie metod dynamiki molekularnej połączonych z kwantowym opisem ruchu protonów.

Wybrane tematy:

„Badanie reakcji rozkładu biogenego dopaminy w obecności oksydazy monoaminowej B za pomocą metod hybrydowych (QM/MM).

„Opis dynamiki oddziaływań międzycząsteczkowych podczas przejść fazowych w wybranych kryształach”

5) Jaka jest aktualna tematyka badań naukowych/współpracy międzygrupowej tutora?

- Wyjaśnienie różnic w mocy i kierunkowych oddziaływaniach wiązań wodorowych występujących w polimerach krystalicznych (np. dwóch formach polikrystalicznego Nylonu-6), współpraca z: Panią Prof. Harumi Sato (Uniwersytet w Kobe), Dr Takahito Nakajima (Centrum obliczeniowe Riken, Kobe, Japonia,).
- Neurodegeneracja, działanie oksydazy monoaminowej A i B, współpraca z: prof. Janezem Mavri, Narodowy Instytut Chemii w Lublanie, Słowenia.

6) Jaka wiedza byłaby przydatna przed rozpoczęciem współpracy z tutorem? Czy tutor wymaga/zaleca odbycie konkretnych kursów, lub zdobycie konkretnych umiejętności przed/na samym początku współpracy?

Dobór kursów zależy od preferencji i zainteresowań studenta. Mile widziane (ale nie wymagane) jest zaliczenie kursu Analizy Matematycznej i Algebry, a także kursu Chemii Fizycznej.

7) Jakie jest podejście tutora do ewentualnej współpracy ze studentem: nastawione na specjalizację w danej dziedzinie czy bardziej interdyscyplinarne? Czy tutor może podać przykłady swoich publikacji popularnonaukowych (ze szczególnym uwzględnieniem publikacji interdyscyplinarnych)?

Oba podejścia są możliwe, zarówno badania interdyscyplinarne jak i wąska specjalizacja (teoretyczna spektroskopia, modelowania molekularne).

Przykłady publikacji interdyscyplinarnych:

Hyeongrae Cho, Dirk Henkensmeier, Mateusz Brela, Artur Michalak, Jong Hyun Jang, Hyoung-Juhn Kim, Kwan-Young Lee, Jonghee Han, Suk Woo Nam *Anion conducting methylated aliphatic PBI and its calculated properties*, *Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics*, 2017, 5, 256-265.

Piotr Goszczycki, Katarzyna Stadnicka, Mateusz Z Brela, Jarosław Grolik, Katarzyna Ostrowska, *Aggregation Induced Emission Enhancement (AIEE) of the π - π interacting pyrrolo[2,3-b]quinoxaline derivatives containing 2-thienyl substituent*. **Journal of Molecular Structure**, 2017, 1146, 337-346.

Leszek, M. Malec Mateusz Z. Brela, Katarzyna M. Stadnicka, *Displacive or Order-Disorder Phase Transition? The H-bond Dynamics in Multicaloric Ammonium Sulfate* **Acta Materialia**, 2021, 116782.

8) Informacje dodatkowe

Zachęcam do osobistego kontaktu w celu omówienia ewentualnej współpracy.