

Studencka Konferencja Nauk Ścisłych
im. prof. Antoniego Hoborskiego

Materiały konferencyjne

8-9 listopada 2019

Spis treści

Powitanie	v
Plan konferencji	1
Najważniejsze lokalizacje	3
Abstrakty	5
Pułapka jonowa (<i>Marzena Kozak, Kacper Kaperek, Dawid Pietruch</i>)	5
Konstrukcja i optymalizacja działka Gaussa (<i>Krzysztof Olech, Jacek Gancarek, Daniel Grzelec</i>)	6
Badanie właściwości procesów dyfrakcyjnych na podstawie wyników z generatora Monte Carlo (<i>Aleksandra Kukielka</i>)	6
Przybliżenie równoważnych fotonów (<i>Michał Kluz, Łukasz Rudyk</i>)	7
Magazynowanie energii w ogniach sodowych z wykorzystaniem MoS ₂ jako materiału anodowego, (<i>Justyna Płotek</i>)	8
Wodór – przyszłość energetyki? (<i>Mikołaj Krupa, Maciej Kalka</i>)	8
High Yield Dynamic Railgun Automaton (<i>Mateusz Kłeczek</i>)	9
Analiza porównawcza Franka i Cyjana, czyli dwóch bezzałogowych samolotów (<i>Dominika Pancierz¹, Aleksandra Furgat²</i>)	9
Modelowanie rzek w warunkach laboratoryjnych (<i>Tomasz Mikołajków</i>) . .	10
Zmiany wiekowe deklinacji magnetycznej w Gdańsku (<i>Mikołaj Zawadzki</i>) .	10
Badanie procesu wykwitania siarki w wulkanizatach kauczuku s-SBR (<i>Karol Tutek</i>)	11
Zwiększanie precyzji tanich metod obliczania energii korelacji (<i>Alicja Kawala</i>)	11
Symulacja rozkładu naprężeń w stawie biodrowym z wykorzystaniem metody elementów skończonych (<i>Mateusz Aleksander Gala</i>)	12
Jak obrazować metabolizm za pomocą antymaterii? (<i>Karolina Klimek</i>) . .	12
Metalocenowe pochodne S-trytylo-L-cysteiny jako potencjalne środki przeciwnowotworowe (<i>Zuzanna Sroczyńska</i>)	13
Badania chromatograficzne tiolaktanu N-acetylohomocysteiny (<i>Maciej Waligórski</i>)	13
Hybrydowe materiały gumowo-tekstylne (<i>Kamila Zglińska</i>)	14
Zastosowanie metod spektrofotometrycznych do oceny jakości wód powierzchniowych na przykładzie analizy próbek pobranych na terenie Nadmorskiego Parku Krajobrazowego (<i>Katarzyna Klimsiak</i>)	14

Solarigrafia - podstawy fizyczne, chemiczne i matematyczne uzyskiwanego obrazu (<i>Maciej Fabich</i>)	15
Czy to był bolid? (<i>Aleksandra Fronczak, Helena Ciechowska</i>)	15

Powitanie

Serdecznie witamy na **Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie** podczas obchodów **100-lecia AGH** oraz **Święta Nauk Ścisłych w AGH - Dni prof. Antoniego Hoborskiego**. Bardzo miło nas Was gościć na drugiej edycji **Studenckiej Konferencji Nauk Ścisłych im. prof. Antoniego Hoborskiego** (pierwsza edycja odbyła się pod nazwą Konferencja Studenckich Kół Naukowych im. prof. Antoniego Hoborskiego), a pierwszej edycji ogólnopolskiej.

Celem organizacji **Święta Nauk Ścisłych w AGH - Dni prof. Antoniego Hoborskiego** jest upowszechnienie i popularyzacja potrzeby rozwoju nauk ścisłych i świadomości ich właściwego nauczania w szczególności w środowiskach nauczycieli szkół ponadgimnazjalnych i akademickich oraz otoczeniu przedsiębiorców - jako konsumentów efektów pracy naukowców oraz potencjalnych przyszłych pracodawców dla absolwentów szkół wyższych.

Prof. Antoni Hoborski - wybitny matematyk był pierwszym rektorem Akademii Górniczej (później AGH) w latach 1920-1922 i jednocześnie dziekanem pierwszego w AG Wydziału Górniczego. Jego działalność naukowa, dydaktyczna i organizacyjna to wspaniały przykład idei łączenia podstawowych nauk ścisłych z aplikacyjnymi naukami technicznymi.

Plan konferencji

Piątek (sala B, bud. D-10, Reymonta 19)		
09:30 - 09:45	Otwarcie konferencji	
09:45 - 10:00	Kacper Kaperek, Marzena Kozak, Dawid Pietruch	<i>Pułapka jonowa</i>
10:00 - 10:15	Jacek Gancarek, Daniel Grzelec, Krzysztof Olech	<i>Konstrukcja i optymalizacja działka Gaussa</i>
10:15 - 10:30	Aleksandra Kukielka	<i>Badanie właściwości procesów dyfrakcyjnych na podstawie wyników z generatora Monte Carlo</i>
10:30 - 10:45	Michał Kluz, Łukasz Rudyk	<i>Przybliżenie równoważnych fotonów</i>
10:45 - 11:00	Przeza kawowa	
11:00 - 11:15	Justyna Płotek	<i>Magazynowanie energii w ogniwach sodowych z wykorzystaniem MoS₂ jako materiału anodowego.</i>
11:15 - 11:30	Maciej Kalka, Mikołaj Krupa	<i>Wodór – przyszłość energetyki?</i>
11:30 - 11:45	Mateusz Kleczek	<i>High Yield Dynamic Railgun Automaton</i>
11:45 - 12:00	Aleksandra Furgał, Dominika Pancerz	<i>Analiza porównawcza Franka i Cyjana, czyli dwóch bezzałogowych samolotów</i>
12:00 - 12:15	Przeza kawowa	
12:15 - 13:45	prof. dr hab. Krzysztof Kurek (Narodowe Centrum Badań Jądrowych)	<i>POLFEL - Polski laser na swobodnych elektronach</i>
13:45 - 15:15	Obiad (Stołówka Krakus, Reymonta 15)	
15:15 - 15:30	Tomasz Mikołajków	<i>Modelowanie rzek w warunkach laboratoryjnych</i>
15:30 - 15:45	Mikołaj Zawadzki	<i>Zmiany wiekowe deklinacji magnetycznej w Gdańsku</i>
15:45 - 16:00	Karol Tutek	<i>Badanie procesu wykwitania siarki w wulkanizatach kauczuku s-SBR</i>
16:00 - 16:15	Alicja Kawala	<i>Zwiększanie precyzji tanich metod obliczania energii korelacji</i>
19:00	Integracja (AFK eSports & Gaming Cafe, Toruńska 5, Kraków)	

Sobota (sala B, bud. D-10, Reymonta 19)		
10:15 - 10:30	Przeza kawowa	
10:30 - 10:45	Mateusz Aleksander Gala	<i>Symulacja rozkładu naprężeń w stawie biodrowym z wykorzystaniem metody elementów skończonych</i>
10:45 - 11:00	Karolina Klimek	<i>Jak obrazować metabolizm za pomocą antymaterii?</i>
11:00 - 11:15	Zuzanna Sroczyńska	<i>Metalocenowe pochodne S-trytylo-L-cysteiny jako potencjalne środki przeciwnowotworowe</i>
11:15 - 11:30	Maciej Waligórski	<i>Badania chromatograficzne tiolaktanu N-acetylohomocysteiny</i>
11:30 - 11:45	Przeza kawowa	
11:45 - 12:00	Kamila Zglińska	<i>Hybrydowe materiały gumowo-tekstylne</i>
12:00 - 12:15	Katarzyna Klimsiak	<i>Zastosowanie metod spektrofotometrycznych do oceny jakości wód powierzchniowych na przykładzie analizy próbek pobranych na terenie Nadmorskiego Parku Krajobrazowego</i>
12:15 - 12:30	Maciej Fabich	<i>Solarigrafia - podstawy fizyczne, chemiczne i matematyczne uzyskiwanego obrazu</i>
12:30 - 12:45	Helena Ciechowska, Aleksandra Fronczak	<i>Czy to był bolid?</i>
12:45 - 14:15	Obiad (Stołówka Krakus, Reymonta 15)	
14:15 - 14:35	Zakończenie	

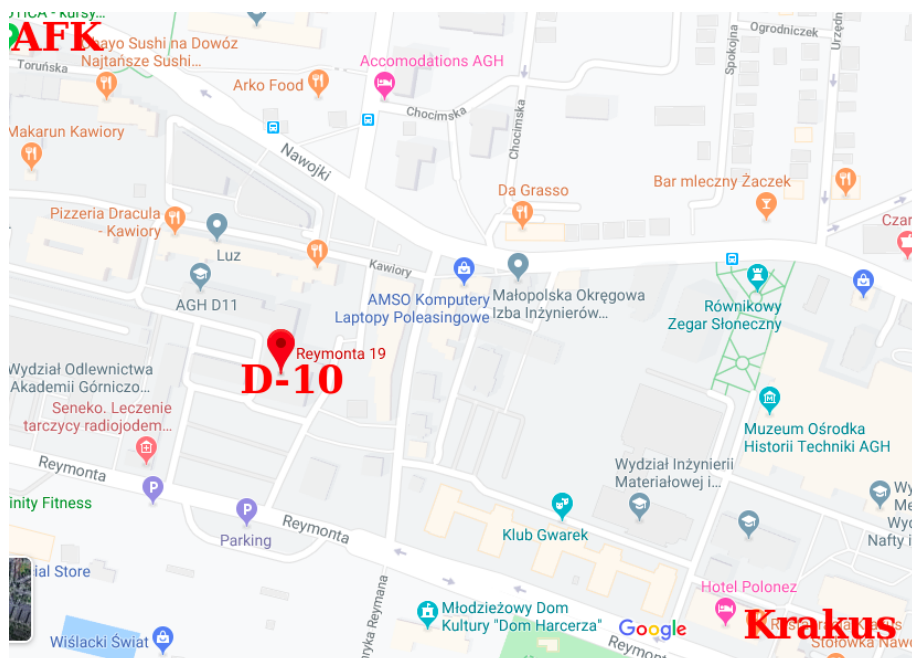
Najważniejsze lokalizacje

Sesje referatowe - sesje odbędą się w sali B na I piętrze w budynku D-10 Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH na ulicy Reymonta 19.

Wykład - wykład prof. dra hab. Krzysztofa Kurka z Narodowego Centrum Badań Jądrowych *POLFEL - Polski laser na swobodnych elektronach* będzie połączony z Seminarium Wydziałowym WFiIS i odbędzie się w sali A w budynku D-10.

Obiady - obiady w oba dni odbędą się w Stołówce Krakus (Reymonta 15, 30-059 Kraków). Do dostania obiadu upoważnia bilet, który otrzymaliście razem z materiałami konferencyjnymi.

Integracja - integracja rozpocznie się w piątek o 19:00 w barze AFK eSports & Gaming Cafe (Toruńska 5, 30-056 Kraków) niedaleko budynku D-10.



Abstrakty

Pułapka jonowa

Marzena Kozak, Kacper Kaperek, Dawid Pietruch

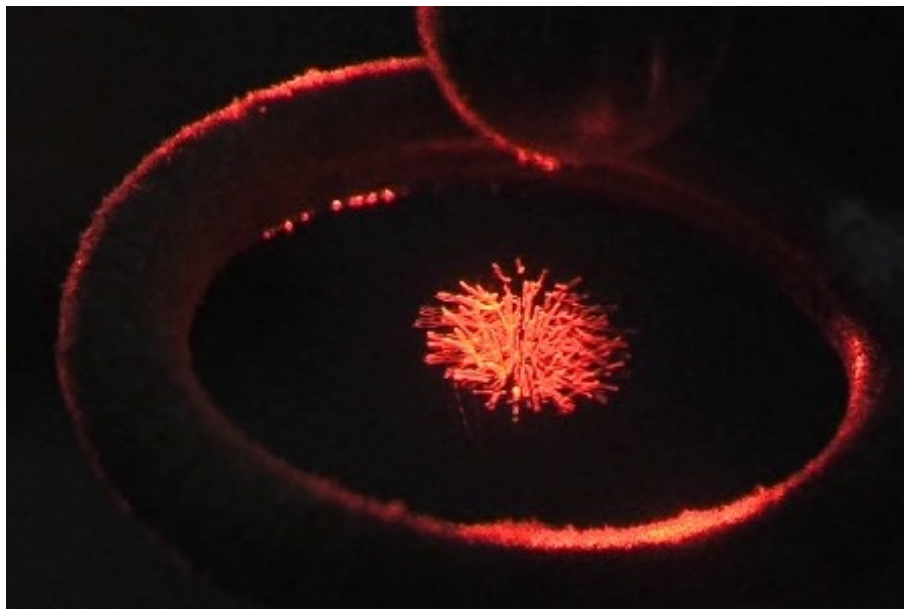
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Piątek
09:30

Stałe pole elektrostatyczne nie pozwala na utrzymanie jonu w bezruchu, możliwe jest jednak utrzymanie cząstek naładowanych w polu oscylującym. Warunki takiego pułapkowania odkryli Wolfgang Paul i Hans Dehmelt, którzy otrzymali nagrodę Nobla z fizyki w 1989 za technikę pułapkowania jonów w oscylującym polu elektrycznym. Szeroko stosowane w technice stanowi podstawę kwadrupolowych spektrometrów masowych i umożliwia utrzymanie pojedynczych atomów, żeby je obserwować.

Celem projektu będzie zbudowanie stanowiska do generowania oscylującego pola, obserwacji i więzienia jonów.



Rysunek 1: Uwięzione naładowane drobiny w pierścieniowej pułapce

Źródło: Ludwig-Maximilians-Universität München

Opiekun naukowy projektu: dr hab. inż. Andrzej Bernasik prof. nadzw. AGH

Piątek
09:45

Konstrukcja i optymalizacja działka Gaussa

Krzysztof Olech, Jacek Gancarek, Daniel Grzelec

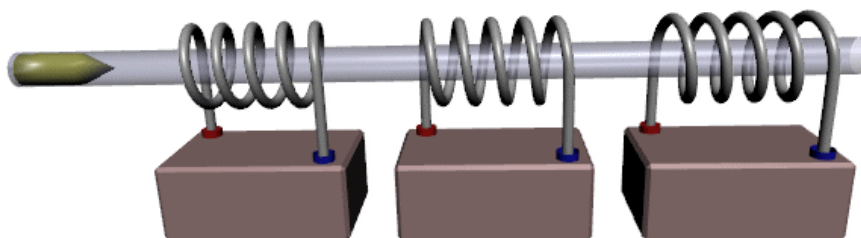
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Projekt ma na celu wykonanie działka Gaussa o jak najwyższej sprawności, przy równoczesnym utrzymaniu możliwie niewielkich rozmiarów urządzenia. Pierwszym zadaniem jest konstrukcja modelu matematycznego, który umożliwi wstępną optymalizację projektu.

Następnym krokiem jest konstrukcja działka i porównanie wyników wyliczonych z doświadczalnymi. Sterowanie i przyrządy pomiarowe mają być obsługiwane przez popularny mikrokontroler.

Kolejne poruszane zagadnienie to miniaturyzacja zasilania, w celu zwiększenia mobilności i ogólnej wygody w posługiwaniu się urządzeniem.



Rysunek 2

Opiekun naukowy referatu: prof. dr hab. inż. Andrzej Zięba

Piątek
10:00

Badanie właściwości procesów dyfrakcyjnych na podstawie wyników z generatora Monte Carlo

Aleksandra Kukielka

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Miękkie procesy dyfrakcyjne stanowią około połowę całkowitego przekroju czynnego dla zderzeń proton-proton na LHC. Badanie ich właściwości nie jest jednak proste, gdyż wymaga tagowania protonów “do przodu”. W ciągu ostatnich dwóch lat takie dane były zbierane przez eksperyment ATLAS. Okazało się, że wstępnie sporządzone rozkłady m.in. krotności cząstek produkowanych w tych procesach nie są zgodne z przewidywaniami generatorów Monte Carlo uzyskanymi przy domyślnych ustawieniach.

Celem projektu jest zrozumienie jak zmiana domyślnych ustawień w generatorze Pythia 8 wpływa na rozkłady w procesach dyfrakcyjnych. Projekt zakłada również stworzenie narzędzia umożliwiającego szybkie i zautomatyzowane porównanie wyników uzyskanych z wielu próbek.

Przybliżenie równoważnych fotonów

Piątek
10:15

Michał Kluz, Łukasz Rudyk

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Za początek metody przybliżenia równoważnych fotonów (ang. Equivalent Photon Approximation, EPA) uznaje się rok 1924 i artykuł E. Fermiego pt. "On the Theory of the impact between atoms and electrically charged particles". Fermi zauważył, że pole szybkiej naładowanej cząstki jest podobne do promieniowania elektromagnetycznego. To promieniowanie może być interpretowane jako strumień fotonów, który podlega pewnemu rozkładowi częstotliwości. Wtedy oddziaływanie elektromagnetyczne dwóch naładowanych cząstek sprowadza się do oddziaływania między wyemitowanymi przez nie fotonami.

Dzisiaj EPA stosujemy do opisu ultrarelatywistycznych zderzeń ciężkich jonów. Zderzenia takie są mierzone w eksperymentach działających przy akceleratorze LHC (ang. Large Hadron Collider). My skupiamy się na przypadkach ultraperyferycznych, czyli takich, w których odległość między jądrami jest większa niż suma ich promieni. Jądrowy przekrój czynny na produkcję pary cząstek $\sigma(A + A \rightarrow A + A + X_1 + X_2)^*$ zależy od strumienia fotonów i elementarnego przekroju czynnego $\sigma(\gamma + \gamma \rightarrow X_1 + X_2)^*$.

Policzenie tego strumienia wymaga znajomości tzw. czynnika kształtu, który zależy od rozkładu gęstości ładunku w jądrze. W literaturze można spotkać różne modele gęstości i odpowiadające im czynniki kształtu. Celem prezentacji będzie ilościowe porównanie jądrowego przekroju czynnego przy zastosowaniu różnych modeli gęstości. Przewiduje się, że różnica w wyniku może być na poziomie nawet 20%.

Opiekun naukowy referatu: dr Mariola Klusek-Gawenda

* Gdzie: A - jądro, X_i - wyprodukowana cząstka, γ - foton"

Piątek
11:00

Magazynowanie energii w ogniwach sodowych z wykorzystaniem MoS_2 jako materiału anodowego,

Justyna Płotek

Wydział Energetyki i Paliw

Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

We współczesnym świecie można zauważyć znaczny wzrost udziału energetyki odnawialnej, rosnący rynek samochodów elektrycznych oraz przenośnej elektroniki. Technologie te wymagają wykorzystania systemów magazynowania energii. Najpopularniejsze magazyny - ogniwa Li-ion, pomimo wysokiej gęstości energii mają swoje minusy, takie jak: wysoka cena litu oraz jego ograniczone zasoby sprawiają. Rozwiązaniem problemu mogą być ogniwa sodowe, o analogicznej zasadzie działania. Przeszkodą w komercjalizacji tego rozwiązania jest brak materiału anodowego. Propozycją może być siarczek molibdenu o wzorze MoS_2 ze względu na pożądaną warstwową strukturę, wysoką pojemność teoretyczną oraz dwuetapowy proces interkalacji, umożliwiające zwiększenie pojemności magazynu.

Podczas referatu przedstawiona zostanie idea działania ogniw sodowych, proces syntezy MoS_2 oraz MoS_2 z dodatkiem zredukowanego tlenku grafenu, a także wyniki badań ich właściwości strukturalnych i właściwości elektrochemicznych ogniw zbudowanych z wykorzystaniem otrzymanych materiałów.

Piątek
11:15

Wodór – przyszłość energetyki?

Mikołaj Krupa, Maciej Kalka

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Idący ciągle do przodu świat opiera swój rozwój na energetyce, bezustannie poszukiwane są alternatywne źródła energii – ma to związek z nieuniknionym wyczerpaniem się paliw kopalnych na naszej planecie, a także zwróceniem uwagi ludzi na potrzebę ochrony środowiska. Oprócz energetyki wiatrowej, solarnej czy geotermalnej od wielu lat mówi się o wodorze jako paliwie przyszłości. Problemy związane ze współczesną energetyką można rozwiązać proponując metody efektywnego magazynowania energii w okresie nadpodaży. Tak zwana energetyka wodorowa wychodzi z rozwiązaniami, które z racji walorów ekologicznych oraz dużej gęstości magazynowanej energii wskazuje się jako niezwykle perspektywiczne. Podczas łączenia wodoru z tlenem w ogniwie paliwowym nie powstają szkodliwe produkty uboczne, otrzymujemy tylko parę wodną i pokaźną ilość energii. To stanowi o przewadze, jaką ma wodór nad konwencjonalnymi metodami. Oprócz tego, wodór jest powszechnie dostępny, choć nie w formie pierwiastkowej.

Projekt jest kontynuacją pracy, która polegała na konstrukcji samokompozującego się zbiornika na wodór opartego na materiale aktywnym LaNi_5 , a także konstrukcji prostej łodzi zasilanej wodorem. W ramach rozwoju projektu zaprojektowano nowy rezerwuuar oparty na materiale Hydralloy C. W konstrukcji zbiornika wykorzystano dwa innowacyjne rozwiązania, pozwalające znaczne zwiększenie

jego wydajności. Przeprowadzono także szereg badań laboratoryjnych materiału Hydralloy C (dyfrakcja rentgenowska XRD, analiza fluorescencyjna XRF, pomiary sorpcyjne) by zbadać kinetykę reakcji i precyzyjnie określić wydajność zbudowanego zbiornika. Zgodnie z uzyskanymi wynikami badań sorpcyjnych koncentracja wagowa wodoru w nowym rezerwuarze jest wysoka i bardzo zadowalająca. Wskazuje to na duży potencjał w wykorzystaniu tej metody konstrukcyjnej do magazynowania wodoru w przyszłości.

Udoskonalono również łódź, którą wyposażono w moduł zdalnego sterowania oraz dzięki zastosowaniu ulepszanego reduktora ciśnienia, znacznie zwiększono jej wydajność.

Opiekun naukowy referatu: dr hab. inż. Łukasz Gondek

High Yield Dynamic Railgun Automaton

Mateusz Kłeczek

Wydział Inżynierii Mechanicznej i Robotyki
Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Piątek
11:30

Projekt ma na celu projektowanie, testowanie i budowę szynowych dział elektromagnetycznych. Prąd elektryczny płynie przez pocisk i szyny i wytwarza wokół nich pole magnetyczne, w efekcie siła elektrodynamiczna przyspiesza pocisk.

Jako źródła energii używane są superkondensatory, ponieważ mogą dostarczać dużą moc przez długi czas. Pozwalają również na łatwą rekonfigurację baterii zasilającej.

Głównym przedmiotem badań są metody zapobiegania powstawaniu plazmy z użyciem ciekłego metalu, który wypełnia wszelkie nierówności na powierzchni styku szyna-pocisk nie pozwalając na zajarzenie się łuku elektrycznego. Stosowany jest stop eutektyczny galu, indu i cyny o temperaturze topnienia poniżej minus 10 stopni Celsjusza, który jest również niereaktywny i cechuje go niska toksyczność.

Analiza porównawcza Franka i Cyjana, czyli dwóch bezzałogowych samolotów

Dominika Pancerz¹, Aleksandra Furgał²

Wydział Inżynierii Mechanicznej i Robotyki¹, Wydział Energetyki i Paliw²
Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Piątek
11:45

AGH Solar Plane to studenckie koło naukowe zajmujące się budową bezzałogowych samolotów napędzanych jedynie energią słoneczną. Do tej pory zespół skonstruował już kilka prototypów, jednak to Franek i Cyjan – czyli dwa duże modele – mają dla projektu największe znaczenie. Podczas prezentacji skupimy się na analizie porównawczej naszych latających podopiecznych. Przede wszystkim zwrócimy uwagę na różnice w konstrukcji, zastosowanych materiałach, a także osiągnięciach obu modeli. Franek zbudowany jest głównie z balsy, czyli drewna charakteryzującego się dużą lekkością i elastycznością. Cyjan natomiast posiada skrzydła wykonane z materiałów kompozytowych, takich jak włókno szklane i włókno węglowe.

Piątek
15:15

Modelowanie rzek w warunkach laboratoryjnych

Tomasz Mikołajków

Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski

Prezentacja obejmuje wyniki eksperymentalnych symulacji rzek w basenie sedymentacyjnym – zbiorniku o wymiarach około 1 x 4 metry, w którym stabilny przepływ wody rzeźbi koryto w piasku. Warunki laboratoryjne umożliwiają obserwację zarówno dynamicznego tworzenia się nowych koryt, jak i pomiar stabilnych struktur po osiągnięciu stanu równowagi.

Kontrola nad warunkami eksperymentu – rodzajem piasku, nachyleniem koryta, czy wydatkiem przepływu – pozwala na poszukiwanie zależności pomiędzy rzeczonymi warunkami a rodzajem i dynamiką tworzącego się koryta rzecznego.

Prezentacja obejmuje przystępne omówienie zagadnienia od strony teoretycznej, oraz przykładowe zdjęcia struktur utworzonych w eksperymencie.

Piątek
15:30

Zmiany wiekowe deklinacji magnetycznej w Gdańsku

Mikołaj Zawadzki

Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski

Dokonano porównania badań deklinacji magnetycznej ziemskiego pola magnetycznego przeprowadzonej pięciokrotnie w Gdańsku przez Jana Heweliusza w roku 1628, 1632, 1642, 1670 i 1682 oraz przez Edmunda Halleya w roku 1679 z modelem deklinacji magnetycznej gufm1. Analiza tych danych miała na celu zweryfikowanie zasadności modelu gufm1 przy założeniu, że badania Jana Heweliusza i Edmunda Halleya jako naukowców o wysokiej renomie i znacznych osiągnięciach cechowały się wysoką precyzją, znacznie wyższą, niż badania, na których oparto model gufm1. Analiza ta wykazała, że model gufm1 sprawdza się jako model wskazujący kierunek zmian deklinacji ziemskiego pola magnetycznego, a jego wskazania w niewielkim stopniu odbiegają od wartości wyznaczonych przez Heweliusza i Halleya. Gdańska seria pomiarowa stanowi najstarszy tak dobrze udokumentowany zapis ziemskiej deklinacji magnetycznej. Podobną analizę wykonano dla XVII-wiecznego Londynu porównując badania ówczesnych uczonych z gufm1.

Badanie procesu wykwitania siarki w wulkanizatach kauczuku s-SBR

Piątek
15:45

Karol Tutek

Instytut Technologii Polimerów i Barwników, Wydział Chemiczny
Politechnika Łódzka

Siarka jest jednym z najpowszechniej wykorzystywanych w przemyśle pierwiastków. Jedną z bezpośrednich metod wykorzystania siarki jest proces sieciowania kauczuku, podczas którego w podwyższonej temperaturze pierścienie siarki rozpadają się na reaktywne dirodniki siarkowe tworzące następnie tzw. mostki siarczkowe pomiędzy poszczególnymi makrocząsteczkami kauczuku ($-C-Sn-C-$ gdzie $n > 1$). Prowadzi to do utworzenia struktury przestrzennej wulkanizatu i nadania mu właściwości użytkowych. Zjawisko wulkanizacji zostało użyte do produkcji różnego rodzaju elastomerów, w tym do produkcji opon samochodowych. Jednakże podczas produkcji tego typu złożonych wyrobów napotyka się na zjawisko migracji^[1] małych cząsteczek siarki wchodzącej w skład podstawowego zespołu sieciującego. Zjawisko to jest niepożądane i niekorzystne, ze względu na pogorszenie właściwości adhezyjnych poszczególnych warstw fabrykatu. Z tego powodu celem naszych badań jest zniwelowanie okoliczności występowania wykwitów siarki na powierzchni wulkanizatów kauczuku SBR. Naszym głównym aspektem stał się zamysł zastąpienia siarki małych cząsteczek jako substancji sieciującej jej oczyszczonymi, wielkocząsteczkowymi związkami siarkoorganicznymi^[1], przy jednoczesnym zachowaniu właściwości użytkowych wulkanizatów.

[1] E. Koczorowska, Z. Górski i B. Jurkowski, *Journal of Applied Polymer Science*, **59**, 639, (1996).

[2] Jakub Wręczycki, Dariusz M. Bieliński, Rafał Anyszka, *Polymers*, **10**, 870, (2018).

Zwiększanie precyzji tanich metod obliczania energii korelacji

Piątek
16:00

Alicja Kawala

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

W dziedzinie chemii kwantowej cały czas trwają poszukiwania jak najbardziej precyzyjnych i tanich metod obliczania energii układów elektronowych w molekułach. Teoria rachunku zaburzeń Møllera-Plesseta jest jedną z najstarszych metod uzyskiwania energii korelacji. Jej wariant z drugim rzędem zaburzenia (MP2) jest wciąż często używanym podejściem w chemii obliczeniowej i znajduje swoje zastosowanie w niemal każdym pakiecie programów do chemii kwantowej. W związku z tym jest dostępnych wiele efektywnych implementacji tej metody. Zazwyczaj jest ona wstępem do bardziej wyrafinowanych i kosztownych sposobów otrzymywania energii korelacji. Celem tego projektu jest zbadanie możliwości poprawy precyzji metody MP2 przy jednoczesnym braku zwiększenia kosztów obliczeniowych.

Sobota
10:30

Symulacja rozkładu naprężeń w stawie biodrowym z wykorzystaniem metody elementów skończonych

Mateusz Aleksander Gala

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Tematem prezentacji będzie przedstawienie wyników symulacji naprężeń występujących w głowie kości udowej. Alloplastyka stawu biodrowego odgrywa wielką rolę w przywracaniu pacjentom ruchliwości po zużyciu się stawów, wypadkach lub urazach. Dlatego ważnym zagadnieniem w konstrukcji protez biodrowych jest optymalizacja budowy protezy pod względem jej kształtu, materiału z którego jest zbudowana oraz sposobu mocowania. Optymalizacja ta jest możliwa jedynie przy dokładnej znajomości zachowania się stawu, poznania zakresu i warunków jego pracy. Znajomość naprężeń działających w stawie oraz na kość podczas standardowych zachowań obiektu pozwala dobrać materiał i zoptymalizować kształt protezy tak, aby jej bezobsługowa eksploatacja trwała jak najdłużej. W celu wykonania obliczeń rozkładu naprężeń na podstawie danych tomograficznych wykonano model stawu biodrowego. Wykonanie pomiarów tomograficznych umożliwiło zbadanie struktury przestrzennej (niejednorodności gęstości jak i anizotropii) kości gąbczastej oraz uwzględnienie w symulacjach komputerowych. Poprawna definicja własności jest kluczowa w celu uzyskania wiarygodnych wyników obliczeń.

Na podstawie literatury odtworzono obciążenia, jakim poddana jest głowa kości oraz przewidziano rozkład naprężeń w wykorzystaniem metody elementów skończonych. Obliczenia pokazały, że otrzymany rozkład kierunków głównych jest zgodny z hipotezą Wolfa oraz danymi klinicznymi.

Ponadto w wystąpieniu przedstawiony zostanie potencjał komercjalizacyjny projektu w obliczu uzyskania przez Akademię Górniczo-Hutniczą statusu uczelni badawczej oraz rola transferu wiedzy naukowej do przemysłu i wdrażania rozwiązań innowacyjnych.

Sobota
10:45

Jak obrazować metabolizm za pomocą antymaterii?

Karolina Klimek

"Wydział Fizyki

Uniwersytet Jagielloński

Podczas referatu zostanie przedstawiona ogólna zasada działania tomografu typu PET (ang. positron emission tomography), począwszy od podania pacjentowi radiofarmaceutyka, aż po otrzymanie obrazu ciała człowieka. Może on być na przykład wykorzystywany przez lekarzy do diagnozy nowotworów. Zostanie zaprezentowane także, jakie udoskonalenia zostały wprowadzone w tomografie J-PET (Jagiellonian PET). Na koniec zostaną przedstawione możliwości zastosowania tomografu J-PET oraz porównanie jego względem klasycznych tomografów PET.

Metallocenowe pochodne S-trytylo-L-cysteiny jako potencjalne środki przeciwnowotworowe

Sobota
11:00

Zuzanna Sroczyńska

Wydział Chemii
Uniwersytet Łódzki

Kinezyiny to białka zaliczane do białek motorycznych, które są obecne w komórkach eukariotycznych. Dzięki energii uwolnionej w wyniku hydrolizy ATP wykazują zdolność do poruszania się w kierunku dodatnim mikrotubul. Kinezyiny w dużym stopniu biorą udział w procesie mitozy. Szczególną uwagę należy zwrócić na kinzynę-5 (Eg5), która jest odpowiedzialna za utworzenie dwubiegunowego wrzeciona kariokinetycznego w prometafazie. S-trytylo-L-cysteina (STLC) jest selektywnym małocząsteczkowym inhibitorem kinezyiny-5^[1]. Poprzez wiązanie w miejscu allosterycznym, blokuje aktywność ATP-azy oraz indukuje wytworzenie monopolarnego wrzeciona mitotycznego, powodując zatrzymanie mitozy komórki. Badania nad odpowiednio zmodyfikowanymi analogami STLC dają szansę na wykorzystanie ich w terapii przeciwnowotworowej. W komunikacie przedstawię wyniki naszych badań dotyczące ferrocenyłowych analogów S-trytylo-L-cysteiny jako metaloorganicznych inhibitorów kinezyiny-5.

[1] D. A. Skoufias, S. DeBonis, Y. Saoudi, L. Lebeau, I. Crevel, R. Cross, R. H. Wade, D. Hackney and F. Kozielski, *J. Biol. Chem.* **2006**, *281*, 17559-17569.

Badania chromatograficzne tiolaktonu N-acetylohomocysteiny

Sobota
11:15

Maciej Waligórski

Wydział Chemii
Uniwersytet Łódzki

Od wielu lat ważnym tematem społecznym stały się choroby cywilizacyjne. Należą do nich m. in. nadciśnienie tętnicze i zawał serca. Stwierdzono związek między podwyższonym stężeniem homocysteiny (Hcy) i jej pochodnych m. in. tiolaktonu homocysteiny (HTL), a występowaniem w/w chorób. Początkowo naukowcy skupiali się nad poznaniem chemii Hcy, jednak od niedawna ich uwagę skupiają również jej pochodne HTL i AcHTL. Ten ostatni może być wykorzystywany jako lek mukolityczny oraz przy leczeniu niektórych chorób wątroby, jednak dawkowanie i działanie uboczne tego związku wzbudzają pewnie kontrowersje. Z tego powodu istotnym elementem jest opracowanie metody do wykrywania i oznaczania AcHTL w organizmie człowieka.

Zaprezentuję tutaj wyniki badań chemii AcHTL oraz próbę opracowania metody umożliwiającej oznaczanie tego związku w próbkach biologicznych. Opracowanie takiej metody właściwości chemicznych AcHTL jest niezbędnym elementem przy analizie mechanizmów jego działania w organizmie człowieka.

Sobota
10:45

Hybrydowe materiały gumowo-tekstylne

Kamila Zglińska
Wydział Chemiczny
Politechnika Łódzka

W związku z intensywnym rozwojem przemysłu chemicznego, wiążącym się z zastosowaniem nowych, wcześniej nieznanych chemikaliów, konieczne jest opracowanie materiałów umożliwiających wytworzenie zbiorników zapewniających ich bezpieczne przechowywanie, a także odzieży zapewniającej ochronę podczas pracy z nimi.

W związku z tym, opracowane zostały materiały kompozytowe, w których włókna poliamidowe zostały powleczone cienką, hybrydową warstwą dwóch polimerów: kauczuku butylowego (IIR) oraz kauczuku butadienowo-akrylonitrylowego (NBR). Miało to na celu wykorzystanie dobrych właściwości mechanicznych kauczuku NBR oraz dobrych właściwości barierowych kauczuku IIR. Oba polimery zostały napełnione talkiem lub miką oraz zostały zmodyfikowane cieczą jonową: chlorkiem 1-butylo-3-metyloimidazoliowym.

Dodatek cieczy jonowej znacząco wpływa na zmniejszenie palności materiałów, bez osłabienia ich właściwości mechanicznych. Ponadto, ciecz jonowa ma pozytywny wpływ na dyspersję składników w matrycy polimerowej.

Następnym etapem pracy będzie zbadanie właściwości oraz adhezji w wytworzonych kompozytach powleczonych warstwami mieszanymi.

Zastosowanie metod spektrofotometrycznych do oceny jakości wód powierzchniowych na przykładzie analizy próbek pobranych na terenie Nadmorskiego Parku Krajobrazowego

Sobota
11:00

Katarzyna Klimsiak
Wydział Chemiczny
Politechnika Gdańska

Antropogeniczne zanieczyszczenia środowiska są rosnącym problemem ekologicznym. Teren Nadmorskiego Parku Krajobrazowego jest szczególnie narażony na ten typ zanieczyszczeń, ze względu na wysoką eksploatację rolniczą, poprzez stosowanie dużej ilości nawozów sztucznych. Ważnym aspektem jest również obciążenie systemów sanitarnych, nieprzystosowanych dla wzrastającej nawet 4-krotnie liczby ludności w sezonie letnim, z uwagi na dużą atrakcyjność turystyczną regionu.

Badania 40 próbek cieków wodnych, pobranych z terenu Nadmorskiego Parku Krajobrazowego, przeprowadzono latem i jesienią 2019 roku, z wykorzystaniem technik spektrofotometrycznych oraz przenośnych mierników parametrów fizykochemicznych. Ocenę jakości wód uzyskano poprzez porównanie wyników z wartościami odniesienia zamieszczonymi w Rozporządzeniu Ministra Środowiska z dnia 21 lipca 2016 r. w sprawie sposobu klasyfikacji stanu jednolitych części wód powierzchniowych oraz środowiskowych norm jakości dla substancji priorytetowych (Dz. U. 2016 poz. 1186). Do oceny wybrano: przewodność elektrolityczną, odczyn pH, stężenie

tleniu rozpuszczonego, zawartość ogólnego węgla organicznego, stężenie anionów ortofosforanowych(V), azotanowych(V), azotanowych(III), kationów amonowych oraz chemiczne zapotrzebowanie na tlen (ChZT-Cr).

Solarigrafia - podstawy fizyczne, chemiczne i matematyczne uzyskiwanego obrazu

Sobota
11:15

Maciej Fabich

Wydział Chemiczny
Politechnika Gdańska

Solarigrafia to technika fotograficzna, dzięki wykorzystaniu której możliwe jest rejestrowanie śladów pozornej wędrówki słońca na niebie w czasie od kilku dni do kilku lat. W celu uzyskania ekstremalnie długich czasów ekspozycji stosowane są aparaty otworkowe z umieszczonym wewnątrz materiałem światłoczułym. Uzyskany szerokokątny obraz zależy od wielu czynników, między innymi od kształtu aparatu, ustawienia w przestrzeni, czy orientacji obiektywu. Na skutek reakcji fotochemicznej bezpośrednio na materiale światłoczułym uzyskuje się fotografię, bez potrzeby stosowania procesu wywoływania zdjęcia. Solarigrafia może stanowić analogowy zapis poziomu nasłonecznienia w danym punkcie pomiarowym, możliwe jest także a po wprowadzeniu niezbędnych modyfikacji zarejestrowanie tzw. analemmy, a nawet pozornego ruchu księżyca. Zaletą solarigrafii jest brak konieczności wykorzystywania chemikaliów oraz drogiej aparatury badawczej.

Czy to był bolid?

Sobota
11:30

Aleksandra Fronczak, Helena Ciechowska

Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski

31 października 2015 roku nad północną Polską miał miejsce przelot oraz eksplozja bolidu. Zjawisko to zarejestrowane zostało nie tylko poprzez fotografie, nagrania oraz relacje świadków zdarzenia. Fala dźwiękowa powstała w wyniku eksplozji obiektu zapisana została przez sejsmografy pasywnego eksperymentu sejsmicznego 13 BB Star oraz stację sejsmologiczną w Górze Klasztornej (GKP). Na podstawie zapisów sejsmicznych zlokalizowane zostało miejsce i czas eksplozji obiektu. Wyznaczone wartości, potwierdziły hipotezę że źródłem zapisu sejsmicznego był bolid, którego miejsce eksplozji pokrywało się z trajektorią wyznaczoną na podstawie obserwacji świadków oraz fotografii i filmów, na których widoczny był obiekt.
