Zeszyt Abstraktów
IX Studenckiej Konferencji Nauk Ścisłych

Spis treści

1 Techniczno-konstrukcyjna **4**

1.1 Projekt zdalnie sterowanego modułu uzbrojenia 4
1.2 Projekt oraz optymalizacja urządzenia stabilizującego przedramię na potrzeby zabiegów chirurgicznych. 4
1.3 Prototyp przedwzmacniacza mikrofonowego o impedancji wejściowej regulowanej w sposób dyskretny 5
1.4 Projekt, konstrukcja i kalibracja niskokosztowego, dwuczujnikowego pyranometru 5
1.5 Ten sam numer katalogowy, ten sam krzem? Weryfikacja tożsamości układów COTS przed testem radiacyjnym 5
1.6 Analiza pracy zespołu ekspandera tłokowego z generatorem energii elektrycznej oraz zaproponowanej metody sterowania 6
1.7 Projekt koncepcyjny oraz analiza symulacyjna silnika rakietowego na paliwo ciekłe 7
1.8 Systemy Elektroniczne w Komunikacji Laserowej z Modulacją Polaryzacji w projekcie LPTM . . 7
1.9 Analiza dostępnych modulatorów magnetooptycznych do zastosowania w projekcie LPTM koła AGH Skylink 7
1.10 Akustyczna transmisja danych z wykorzystaniem modulacji FSK 8
1.11 Autonomiczny dron do wykrywania pożarów z wykorzystaniem YOLO i wizji komputerowej . . . 8
1.12 Perypetie przygotowania zbiorów danych i trenowania modeli YOLO do detekcji ludzi z BSP na potrzeby zawodów SUAS 2026 9
1.13 Dlaczego turbiny mogą podlegać korozji podczas zbyt szybkich prędkości obrotu? - konstrukcja układu do badania zjawiska kawitacji 12

2 Inżynierii materiałowej **13**

2.1 Hybrydowe układy aerożel–PCM modyfikowane nanododatkami do magazynowania i konwersji energii cieplnej 13
2.2 Opracowanie wykresu CTPc dla wybranej stali konstrukcyjnej stopowej do ulepszania cieplnego . 13
2.3 Wpływ struktury nanowłóknistej i metalicznych nanowydzieleń na prace symetrycznego ogniwa paliwowego S-SOFC 14
2.4 Utylizacja popiołów lotnych o wysokiej zawartości CaO w produkcji pianobetonów 14
2.5 Wyznaczanie parametrów materiałowych ceramiki do lekkich osłon balistycznych z wykorzystaniem numerycznego modelu próby dwuosiowego zginania punktowego 15
2.6 Studium przypadku nieudanej próby wytworzenia kompozytu SiC z kaolinitem 15
2.7 Aerożele węglowe jako rusztowania do systemów oczyszczania wody 16
2.8 Wykorzystanie zmodyfikowanej dynamicznej analizy mechanicznej do wyznaczenia charakterystyki elektromechanicznej elektroprzędzonych włókien PAN–CNT 16
2.9 Od kofeiny do katalizatora – nanoporowate materiały węglowe do elektrochemicznej redukcji związków organicznych 17
2.10 Zastosowanie samonaprawialnego betonu w energetyce jądrowej 18
2.11 Adsorpcja kropek kwantowych CdSe na wielowarstwowych filmach polielektrolitowych — wpływ na właściwości powierzchniowe 18
2.12 Zwiększenie transferu ładunku w heterozłączach trójwymiarowego, kwiatopodobnego TiO_2 do wysokoczułej diagnostyki fotoelektrochemicznej 19
2.13 Zastosowanie stopów wysokiej entropii jako materiałów referencyjnych w spektrometrii µ-XRF . 20

3 Monitoringu i ochrony środowiska **21**

3.1 Analiza zanieczyszczeń fizykochemicznych wody przybrzeżnej wyspy La Palma 21
3.2 Modelowanie i analiza odzysku ciepła odpadowego ze spalin turbin gazowych małej mocy 21
3.3 Rational pesticide design in agrochemistry for honey bee safety 22

3.4 Wpływ warunków syntezy nanokropek węglowych na ich właściwości i zastosowania w aminowych układach absorpcji . . . 23
3.5 Modelowanie i symulacja procesu bezpośredniego wychwytu CO2 z powietrza (DAC) . . . 23
3.6 Elektryk czy spalinówka? Analiza opłacalności na przykładzie Audi RS 6 Avant i Audi RS e-tron GT . . . 24
3.7 Konstrukcja kompaktowego sensora metanu przeznaczonego do zastosowania na bezzałogowych statkach powietrznych. . . . 24

4 Matematyczno-informatyczna 26
4.1 Aplikacja do rozpoznawania i monitorowania chorób skóry . . . 26
4.2 Koszt niepełnej wiedzy: rola porządku etykiet w uczeniu sieci neuronowych . . . 26
4.3 Optymalizacja wydajności i skalowalności obliczania deskryptorów molekularnych Mordred . . . 27
4.4 MolPILE - large-scale, diverse dataset for molecular representation learning . . . 28
4.5 Platforma do benchmarkingu metod ligand-based virtual screening . . . 28
4.6 Zastosowanie metod informatycznych w analizie danych z obrazowania spektrometrią mas (MSI) 29
4.7 Automated structural classification of molecules with ChEBI ontology using deep learning . . . 29
4.8 Automatyczna segmentacja zębów w obrazach CBCT z wykorzystaniem lekkich modeli uczenia głębokiego i inferencji CPU . . . 30
4.9 Wiedza o świecie zapisana w nazwach: analiza metod dla danych tabelarycznych, od ograniczeń modelu do embeddingów . . . 31
4.10 Analiza przyrostu szumu i jego wpływu na dokładność numeryczną w algorytmie szyfrowania homomorficznego CKKS . . . 32
4.11 Use of deep learning in CR39 detector readout for dosimetry . . . 32
4.12 Półgrupy (C_0) operatorów liniowych - podstawowe własności i zastosowanie do równania transportu 33
4.13 Od zapętleń do zbieżności stanu: Jak ConsensusBench definiuje nowe metryki ewaluacji w architekturach MAS . . . 33
4.14 Efficient algorithms for Maximum Diversity Picking problem . . . 34
4.15 Kompletny system do wykrywania słów kluczowych w układzie FPGA z użyciem grafowych sieci konwolucyjnych i neuromorficznego sensora audio . . . 34
4.16 Chaos Subjugator: A Neural Network for the Duffing Oscillator . . . 35

5 Chemii, biofizyki i fizyki medycznej 36
5.1 Badanie wpływu modyfikacji składu na przełączalność w analogach błękitu pruskiego . . . 36
5.2 Od nanomateriału do sensora: inteligentne nanoarchitektury do wykrywania cukrów . . . 36
5.3 Stymulacja polem elektrycznym jako metoda poprawy kiełkowania . . . 37
5.4 Inżynieria spineli kobaltowych: zależność pomiędzy rozmieszczeniem kationów, deformacją sieci krystalicznej a właściwościami powierzchniowymi . . . 37
5.5 Inżynieria entropii na nanogranicy faz: heterozłącza nanorurek węglowych i wysokoentropowych tlenków do detekcji biomarkerów przewlekłej choroby nerek . . . 38
5.6 Opracowanie i optymalizacja parametrów elektrochemicznej syntezy struktur metaloorganicznych (MOF) . . . 38
5.7 Ilościowa ocena sygnału ROS w komórkach Sertolego eksponowanych na mikroplastiki z wykorzystaniem autorskiego narzędzia do analizy obrazów mikroskopowych . . . 39
5.8 Elektroaktywne rusztowania hydrożelowe wspierające regenerację nerwów obwodowych . . . 39
5.9 Zastosowanie spektrometrii całego ciała do wyznaczania zawartości potasu w organizmie człowieka 40
5.10 Inteligentne opatrunki BNC w zaawansowanej terapii ran . . . 41
5.11 Tlenek żelaza o geometrii płatków śniegu - od modyfikacji mikrostruktury do czujników metali ciężkich . . . 41
5.12 Nanonośniki Fe_3O_4@Au z karboplatyną i koniugatem chitozanowo-folianowym w badaniach nad rakiem jajnika . . . 42
5.13 Zewnątrzkomórkowy transfer elektronów w biofilmach elektroaktywnych w warunkach zmiennej grawitacji – eksperyment BIOVOLT . . . 43
5.14 Algorytmy NLP w warunkach ICE: Detekcja zmęczenia z raportów astronautów . . . 43

6 Fizyczno-astronomiczna 45
6.1 Zastosowanie metody szeregów potęgowych do badania własności spektralnych równania Schrödingera z potencjałami sekstycznymi . . . 45
6.2 Regolit księżycowy jako osłona przed promieniowaniem rentgenowskim . . . 46
6.3 Qutrit dolinowy w elektrycznie strojonej heterostrukturze TMD . . . 46
6.4 Wpływ modyfikacji jonowej oraz inżynierii warstwy aktywnej na przełączanie rezystancyjne w układach memrystorowych z TiO2 . . . 47

6.5 Detekcja gwiazd bozonowych przy użyciu fal grawitacyjnych . . . 47
6.6 Adaptacyjna transformacja Hougha dla rekonstrukcji śladów cząstek: wydajne przeszukiwanie wysoko wymiarowych przestrzeni parametrów . . . 47
6.7 Modelowanie powstawania chmur przy pomocy języka Python . . . 48
6.8 Teoria ekscytonów w potencjałach moiré w dwuwymiarowych strukturach dichalkogenków metali przejściowych . . . 48
6.9 Wpływ modyfikacji składu na właściwości transportowe chalkogenków srebra jako perspektywicznych materiałów termoelektrycznych typu n . . . 49
6.10 Co w piwie piszczy? Fizykochemiczna analiza akustyczna piwa . . . 49

7 Sekcja posterowa **51**
7.1 Autonomiczna stacja monitorowania środowiska i wzrostu roślin . . . 51
7.2 Budowa aparatury oraz przeprowadzenie pomiarów terenowych stężenia pyłów zawieszonych na wyspie La Palma w archipelagu Wysp Kanaryjskich . . . 51
7.3 Co wspólnego ma kadłub łodzi z kością ptak i pszczołami? . . . 51
7.4 Czy rzeżucha może rosnąć na Księżycu? Badania uprawy rzeżuchy na symulancie regolitu księżycowego . . . 52
7.5 Do czterech razy sztuka. Nowe oblicze energetyki jądrowej . . . 52
7.6 Fizyka od kuchni: Po co nam proszek do pieczenia i dlaczego jajko wybucha w mikrofalówce? . . . 53
7.7 Kalendarium astronomiczne . . . 53
7.8 Obiad z żabki a przyjaźń, czyli optymalna strategia korzystania z mikrofalówki . . . 54
7.9 Od sygnału do diagnozy, czyli jak zbudować własne EKG za 100 zł? . . . 54
7.10 Poszukiwania Kwarków Wektorowych w zderzeniach mu+ p z użyciem metod ML . . . 55
7.11 Promieniotwórczość wód butelkowanych . . . 55
7.12 Razem w jednej sieci: SMR i OZE między szansą a wyzwaniem. . . . 55
7.13 Selektywne odbicie światła w trójskładnikowych mieszaninach ciekłokrystalicznych tworzących szkło . . . 56
7.14 Symulacja Monte Carlo możliwości odzysku energii neutronów w układzie warstwowym dla różnych źródeł . . . 56
7.15 Transformacja energetyczna w cieniu konfliktu: atom vs. węgiel jako podstawa systemu . . . 57
7.16 Wpływ kontrolowanej morfologii i sensybilizacji powierzchniowej SnO2 nanostruktur α-Fe2O3 na właściwości elektrochemiczne w kontekście nieenzymatycznej detekcji H2O2 . . . 57
7.17 Wykorzystanie grywalizacji w popularyzacji wiedzy o transformacji energetycznej. . . . 58
7.18 Zastosowania stopów wysokoentropowych w energetyce jądrowej . . . 58
7.19 Zastosowanie matrycy oleożelowej fortyfikowanej chitozanem z biomasy z kultur in vitro P. ostreatus w terapii ran przewlekłych . . . 59

Sekcja tematyczna 1

Techniczno-konstrukcyjna

1.1 Projekt zdalnie sterowanego modułu uzbrojenia

Autor: Gaspar Piotrowski
Koło naukowe: Adamantium
Opiekun projektu: Paweł Rutkowski
Typ projektu: Aplikacyjny

Celem projektu było zaprojektowanie oraz wykonanie prototypu zdalnie sterowanego modułu uzbrojenia (RCWS) przeznaczonego do integracji z lądowymi platformami mobilnymi. Konstrukcja charakteryzuje się lekkim korpusem wytworzonym w technologii druku 3D oraz zintegrowanym systemem sterowania i komunikacji opartym na mikrokontrolerze ESP32.

W ramach prac badawczo-rozwojowych zespół konstrukcyjny opracował w środowisku CAD (Autodesk Fusion 360) model korpusu, dedykowaną przekładnię planetarną o przełożeniu 1:4 oraz pozostałe komponenty wytwarzane addytywnie. Układ sterowania opiera się na algorytmie regulatora LQI (ang. *Linear Quadratic Integrator*) zaimplementowanego na mikrokontrolerze ESP32, który wykorzystuje estymację stanu obiektu realizowaną za pomocą filtru Kalmana. Estymator przetwarza dane pomiarowe z enkoderów silników prądu stałego (pełniących funkcję napędów wykonawczych) oraz inercyjnej jednostki pomiarowej (IMU) zamontowanej na kołysce uzbrojenia. Zasilanie modułu realizowane jest z pakietu akumulatorów połączonych szeregowo, przy czym stabilizacja napięcia na poziomie 12V odbywa się za pomocą przetwornicy DC-DC typu boost.

Projekt sfinansowano ze środków własnych członków Studenckiego Koła Naukowego Konstrukcji Militarnych „Adamantium".

1.2 Projekt oraz optymalizacja urządzenia stabilizującego przedramię na potrzeby zabiegów chirurgicznych.

Autor: Jakub Stefański
Koło naukowe: AGH Solar Boat
Opiekun projektu: Andrzej Zakręcki
Typ projektu: Aplikacyjny

Przedmiotem wystąpienia jest projekt innowacyjnego urządzenia stabilizującego przedramię, dedykowanego do zabiegów chirurgii urazowej, ze szczególnym uwzględnieniem operacji złamań dystalnej nasady kości promieniowej (DRF). Obecnie dostępne na rynku rozwiązania komercyjne charakteryzują się brakiem pełnej personalizacji, niedostateczną blokadą kończyny oraz brakiem płynnej regulacji. Odpowiedzią na tę lukę technologiczną jest autorski mechanizm, który łączy klasyczne metody projektowania CAD/CAE z algorytmami sztucznej inteligencji (Generative Design).

Zastosowanie optymalizacji topologicznej pozwoliło na automatyczną generację spersonalizowanych rynien kontaktowych na podstawie skanów 3D, z rygorystycznym uwzględnieniem docelowych obciążeń śródoperacyjnych: 30 N (statyczne), 110 N (nacisk narzędzia chirurgicznego) oraz 220 N (trakcja). Opracowany układ kinematyczny zapewnia pełną rotację 360°, precyzyjną regulację wózka nadgarstka (od -80 do +80 mm) oraz wielopłaszczyznową stabilizację przegubów kulowych. Fuzja klasycznej inżynierii i AI otwiera nowe możliwości w zakresie bezpiecznego unieruchomienia pacjenta, skracając czas przygotowania do zabiegu i zwiększając jego precyzję.

1.3 Prototyp przedwzmacniacza mikrofonowego o impedancji wejściowej regulowanej w sposób dyskretny

Autorzy: Paweł Klamut, Bartłomiej Indyka, Sebastian Patrias
Koło naukowe: Inżynierii Akustycznej
Opiekun projektu: Karol Czesak
Typ projektu: Aplikacyjny

Celem projektu było zaprojektowanie i konstrukcja modularnego niskoszumowego przedwzmacniacza mikrofonowego, o parametrach odpowiadających profesjonalnemu sprzętowi studyjnemu.

Urządzenie wyposażono w hybrydową sekcję wzmocnienia, moduł regulacji impedancji wejściowej do kształtowania brzmienia mikrofonów pasywnych, aktywne filtry górnoprzepustowe (HPF) oraz stabilizowany zasilacz Phantom Power +48V.

Badania obejmują pomiary pasma przenoszenia, CMRR, szumów i zniekształceń nieliniowych oraz porównanie wpływu różnych modeli tranzystorów wejściowych na parametry wzmacniacza.

Projekt pozwolił na poszerzenie umiejętności projektowania układów analogowych i płytek drukowanych, jak i analizy obwodów za pomocą symulacji w środowisku LTspice. Umożliwił również porównanie kosztów samodzielnej budowy urządzenia z gotowymi rozwiązaniami komercyjnymi.

1.4 Projekt, konstrukcja i kalibracja niskokosztowego, dwuczujnikowego pyranometru

Autor: Oleksandr Maliutin
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Joanna Janik-Kokoszka
Typ projektu: Aplikacyjny

Celem projektu było opracowanie i wdrożenie niskokosztowego pyranometru przeznaczonego do wykorzystania w laboratorium jako alternatywy dla dotychczas stosowanego urządzenia pomiarowego. Pyranometr służy do pomiarów irradiancji w szerokim zakresie widma. Szczególny nacisk położono na praktyczną użyteczność rozwiązania, wiarygodność uzyskiwanych pomiarów oraz możliwość jego zastosowania zarówno w warunkach laboratoryjnych, jak i terenowych. Konstrukcja jest oparta na czujnikach TSL2591 (l: 320–1000 nm) oraz SEN0501 (l: 400–700 nm).

W ramach projektu przeprowadzono serię eksperymentów pomiarowych w dwóch różnych środowiskach. Pierwsze testy wykonano w Stacji Naukowej Zakładu Klimatologii UJ, gdzie wskazania skonstruowanego urządzenia porównywano z pomiarami referencyjnego przyrządu meteorologicznego. Drugą serię badań przeprowadzono w laboratorium optoelektroniki i fotoniki AGH, wykorzystując lampy halogenowe jako sztuczne źródło promieniowania. Pozwoliło to na analizę odpowiedzi czujników w kontrolowanych warunkach oświetleniowych oraz ocenę zachowania urządzenia przy zmianach natężenia promieniowania.

Wstępne wyniki pomiarów terenowych wykazały różnicę rzędu 5–7% względem stacji referencyjnej. Uzyskane rezultaty potwierdzają potencjał opracowanego rozwiązania jako ekonomicznej alternatywy dla komercyjnych urządzeń pomiarowych. Szczególnie istotna jest możliwość wykorzystania go na studenckiej Pracowni Fizycznej jako alternatywy dla dotychczasowego wyposażenia laboratoryjnego. Jednocześnie przyrząd zachowuje funkcjonalność, niezbędną do prowadzenia pomiarów i badań w innych warunkach.

Projekt stanowi przykład praktycznego wykorzystania systemów wbudowanych i metod kalibracji do opracowania dostępnego cenowo urządzenia pomiarowego, które może znaleźć zastosowanie w laboratoriach dydaktycznych, badaniach meteorologicznych oraz eksperymentach związanych z analizą promieniowania słonecznego.

1.5 Ten sam numer katalogowy, ten sam krzem? Weryfikacja tożsamości układów COTS przed testem radiacyjnym

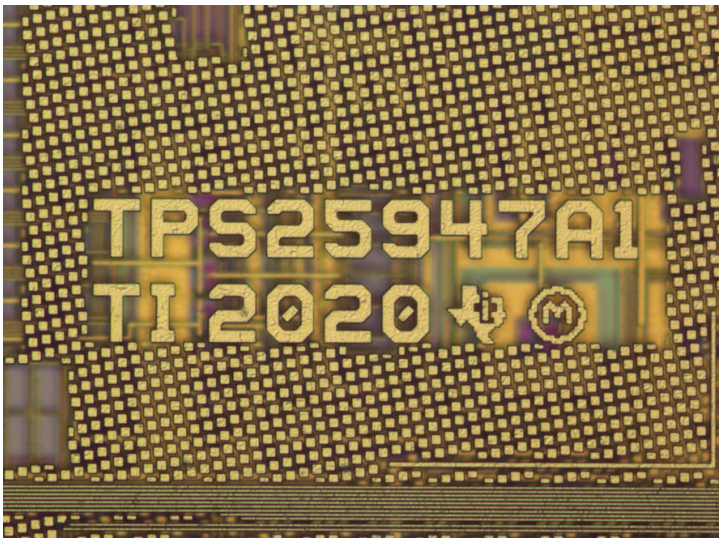
Autor: Krzysztof Garbicz
Koło naukowe: AGH Lunar Technologies
Opiekun projektu: Tadeusz Uhl

Typ projektu: Aplikacyjny

Komercyjne układy scalone (COTS) są coraz częściej stosowane w misjach kosmicznych, a ich odporność na promieniowanie weryfikuje się testami całkowitej dawki jonizującej (TID). Interpretacja wyników takiego testu opiera się na założeniu, że wszystkie badane egzemplarze zawierają identyczną strukturę półprzewodnikową. Numer katalogowy tego nie gwarantuje, ponieważ producent może zmienić rewizję maski litograficznej lub miejsce produkcji bez zmiany oznaczenia układu. Znane są przypadki, w których struktura układu uległa zmianie bez opublikowania przez producenta powiadomienia o zmianie produktu.

Celem pracy była weryfikacja tego założenia dla trzech układów zabezpieczających firmy Texas Instruments (TPS2553-1, TPS259630, TPS259474). Każdy z nich zakupiono w dwóch partiach od dwóch dostawców przed kampanią TID prowadzoną zgodnie z normą ESCC 22900. Z każdej partii pobrano próbki, które poddano inspekcji rentgenowskiej oraz dekapsulacji chemicznej i plazmowej (MIP) w laboratoriach ESA ESTEC i AGH. Następnie przeprowadzono analizę mikroskopową struktur krzemowych wraz z oznaczeniami rewizji (Rys. 1).

W każdym z trzech typów obie partie zawierały tę samą rewizję maski, co uzasadnia łączenie wyników z obu partii w jedną statystykę. Prezentacja pokazuje, jak kosztem kilku zniszczonych egzemplarzy zweryfikować tożsamość układów przed kosztownym testem radiacyjnym.



Rys. 1. Oznaczenie struktury krzemowej układu TPS259474 po dekapsulacji (die TPS25947A1, TI 2020).

1.6 Analiza pracy zespołu ekspandera tłokowego z generatorem energii elektrycznej oraz zaproponowanej metody sterowania

Autor: Przemysław Guziak
Koło naukowe: Nova Energia
Opiekun projektu: Dominik Gryboś
Typ projektu: Aplikacyjny

Praca analizuje działanie zespołu ekspandera tłokowego z generatorem energii elektrycznej w różnych warunkach ciśnienia zasilania i wartości prądu obciążenia. Sprawdza skuteczność zaproponowanej metody sterowania oraz wpływ zmian obciążenia na działanie instalacji. Analizuje również parametry pracy samej instalacji w tym osiąganą moc, sprawność i zależność tych wielkości od innych parametrów. Wyniki pokazują sprawność instalacji w zakresie od 4 do 12 procent w zależności od punktu pracy i moc rzędu kilkudziesięciu watów użytecznej mocy elektrycznej. Poddano analizie poszczególne etapy konwersji energii. Spośród nich największe straty powodują mechaniczne elementy instalacji. Straty te rosną znacząco wraz z prędkością obrotową. Obliczone wskaźniki obrazują rosnącą moc i sprawność wraz ze wzrostem obciążenia, jednak jego wzrost powoduje również wolniejszy dopływ energii do instalacji, co limituje pozytywny wpływ tej korelacji, gdyż ogranicza moc maksymalną.

1.7 Projekt koncepcyjny oraz analiza symulacyjna silnika rakietowego na paliwo ciekłe

Autor: Wojciech Skrzeczyński
Koło naukowe: AGH Space Systems
Opiekun projektu: Mariusz Gibiec
Typ projektu: Aplikacyjny

Celem projektu było zaprojektowanie napędu do eksperymentalnej rakiety na paliwo ciekłe. Zgodnie z założeniami projektowymi używanym paliwem ma być etanol a za utleniacz służyć ma podtlenek azotu. Ciśnienie w komorze spalania wynosi 25 bar a optymalny stosunek mieszania (mixture ratio) ustalono na poziomie 2,2. Uzyskany przy zastosowaniu obliczeń termodynamicznych z biblioteki RocketCEA (NASA) impuls właściwy (Isp) dla silnika wynosi 195 s.

Do zaprojektowania silnika wykorzystano oprogramowanie Solidworks. Powstały projekty dla dwóch wersji komory, bez chłodzenia („heat sink") oraz z chłodzeniem regeneracyjnym. Dysza została zaprojektowana w formie stożkowej de Lavala. Przeprowadzono odpowiednio symulacje numeryczne kolejno dla: przepływu (CFD), wytrzymałościową (MES) i wymiany ciepła.

Ważnym aspektem było również aby konstrukcja silnika pozwalała na możliwie mało skomplikowany proces produkcyjny i możliwość prostej modyfikacji przy użyciu narzędzi którymi dysponuje warsztat koła naukowego.

W kolejnym etapie prac planowane jest wykonanie prototypu i przeprowadzenie testów stanowiskowych (cold flow oraz hot fire), co docelowo pozwoli na integrację napędu z rakietą przenoszącą ładunki badawcze.

1.8 Systemy Elektroniczne w Komunikacji Laserowej z Modulacją Polaryzacji w projekcie LPTM

Autorzy: Aleksander Kopyto, Paulina Guzy, Joanna Gorczyca
Koło naukowe: AGH Skylink
Opiekun projektu: Andrzej Kruk
Typ projektu: Aplikacyjny

W celu osiągnięcia wysokiej prędkości przesyłu danych zaprojektowano sterownik wysokiej mocy, wymagany przez zastosowany modulator magnetooptyczny. Wykorzystany układ mostku H pozwala na modulację dwustanową, ciągłą oraz na demagnetyzację cewki modulatora, która jest dodatkowo chroniona przez układ kontroli cieplnej.

System odbiorczy wykorzystuje 24-bitowy konwerter analogowo-cyfrowy oraz cyfrowe przetwarzanie sygnału, w celu redukcji szumu.

Projekt sfinansowany z grantu rektora AGH: "LPMT – Laser Polarisation Modulation Transceiver.". Autorzy dziękują zespołowi AGH Skylink za wkład w projekt, konstrukcje i testy układu.

1.9 Analiza dostępnych modulatorów magnetooptycznych do zastosowania w projekcie LPTM koła AGH Skylink

Autorzy: Amelia Bartosiak, Aleksander Kopyto
Koło naukowe: AGH Skylink
Opiekun projektu: Andrzej Kruk
Typ projektu: Aplikacyjny

W pracy przedstawiono analizę dostępnych rozwiązań modulacji magnetooptycznej pod kątem zastosowania w projekcie LPMT (Laser Polarisation Modulation Transceiver), realizowanym przez Studenckie Koło Naukowe AGH Skylink. Celem projektu jest opracowanie układu nadawczego wykorzystującego efekt Faradaya do sterowania stanem polaryzacji wiązki laserowej o długości fali 405 nm, docelowo z częstotliwością około 1 kHz. Porównano właściwości wybranych materiałów magnetooptycznych, w szczególności kryształów TGG i TSAG oraz szkieł magnetooptycznych, uwzględniając stałą Verdeta, transmisję optyczną, wymaganą indukcję pola magnetycznego i dostępność komponentów. Omówiono również konstrukcje modulatorów opartych na cewkach

elektromagnetycznych i obwodach magnetycznych, ze szczególnym uwzględnieniem szybkości przełączania, poboru mocy oraz strat optycznych. Wskazano znaczenie geometrii pola magnetycznego i długości drogi optycznej w materiale dla uzyskiwanego kąta skręcenia polaryzacji. Przeprowadzona analiza stanowi podstawę do doboru elementów stanowiska eksperymentalnego i określenia kompromisów pomiędzy sprawnością modulacji, złożonością konstrukcji a kosztami realizacji. Wyniki przeglądu mogą wesprzeć projektowanie kompaktowego, energooszczędnego modulatora przeznaczonego do eksperymentalnej transmisji danych w wolnej przestrzeni.

1.10 Akustyczna transmisja danych z wykorzystaniem modulacji FSK

Autorzy: Joanna Gorczyca, Aleksander Kopyto, Paulina Guzy
Koło naukowe: AGH Skylink
Opiekun projektu: Andrzej Kruk
Typ projektu: Aplikacyjny

W ramach projektu „Laser Polarisation Modulation Transceiver" AGH Skylink opracowano dwie aplikacje okienkowe dla Windows 11, służące do przesyłania informacji za pomocą dźwięku. Program nadawczy umożliwia wysyłanie wiadomości tekstowych z wykorzystaniem modulacji FSK, generowanie sygnałów sinusoidalnych oraz odtwarzanie plików audio. Program odbiorczy rejestruje sygnał z mikrofonu, dekoduje wiadomości i wyświetla odbierany przebieg na oscyloskopie. Użytkownik może wybrać urządzenia audio, ustawić częstotliwości i szybkość transmisji, a także zapisać odebrany tekst. Aplikacje współpracują z częścią elektroniczną projektu, tworząc stanowisko do prowadzenia i obserwacji transmisji akustycznej.

Projekt sfinansowano z grantu Rektora AGH „LPMT - Laser Polarisation Modulation Transceiver".

1.11 Autonomiczny dron do wykrywania pożarów z wykorzystaniem YOLO i wizji komputerowej

Autorzy: Krzysztof Jura, Hubert Gąska
Koło naukowe: AGH Avader
Opiekun projektu: Tomasz Kryjak
Typ projektu: Aplikacyjny

Celem projektu było opracowanie autonomicznego drona realizującego misję wykrywania i raportowania ognisk pożarowych w architekturze ROS2 i PX4, zaprojektowanego na zawody Droniada. System miał umożliwiać detekcję zagrożeń pożarowych oraz autonomiczne podejmowanie decyzji o trajektorii lotu na podstawie wyników tej detekcji, bez udziału operatora.

Tło i znaczenie projektu wynika z potrzeby szybkiego i bezpiecznego monitorowania terenu pod kątem pożarów przy użyciu platform bezzałogowych, co ma istotne zastosowanie w ratownictwie i ochronie środowiska. Prezentowane rozwiązanie pokazuje pełną ścieżkę od symulacji po działanie na sprzęcie rzeczywistym, co czyni je istotnym punktem odniesienia dla podobnych projektów badawczych i inżynierskich.

Metodologia:

Dron testowany był w symulacji Gazebo Harmonic, a następnie na sprzęcie rzeczywistym wyposażonym w kamerę Intel RealSense D435i na platformie Jetson Xavier. Detekcja paneli i znaczników pożarowych realizowana jest przez wytrenowany model YOLO, wspierany klasyczną detekcją kolorów w OpenCV. Węzeł autonomicznego lotu oparty na ROS2 steruje misją na podstawie wyników detekcji, dynamicznie dostosowując trajektorię i raportując wykryte cele do zewnętrznego serwera. Zrealizowany pipeline obejmował przygotowanie datasetu w formacie YOLO, trening i ewaluację modelu, integrację detekcji wizyjnej z logiką lotu autonomicznego oraz pełne środowisko symulacyjne obejmujące: Docker, ROS2 Humble, PX4 oraz Gazebo, umożliwiające testowanie misji od lotu po detekcję i raportowanie.

Wyniki i wnioski:

Opracowany system umożliwia bezpośrednie przeniesienie całego pipeline'u z symulacji na sprzęt pokładowy, zachowując powtarzalność testów misji od startu, przez detekcję, aż po raportowanie wykrytych celów. Prace obejmowały pełną implementację systemu - węzeł detekcji, węzeł autonomicznego lotu, integrację ROS2 oraz

trening modelu YOLO - realizowane wspólnie z pozostałymi członkami sekcji software koła naukowego Avader.

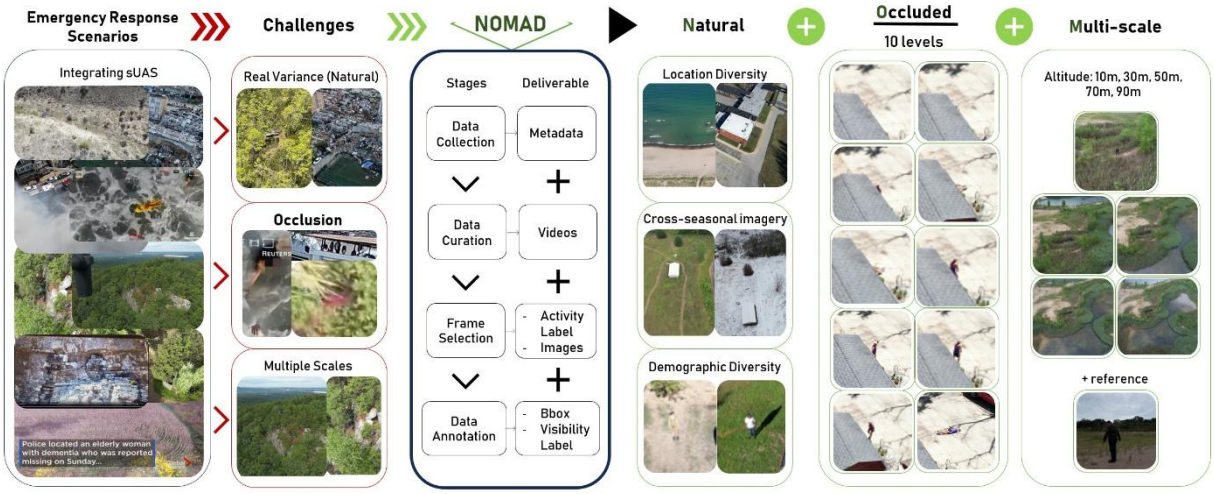
1.12 Perypetie przygotowania zbiorów danych i trenowania modeli YOLO do detekcji ludzi z BSP na potrzeby zawodów SUAS 2026

Autor: Bartosz Królik
Koło naukowe: AGH Solar Plane
Opiekun projektu: -
Typ projektu: Aplikacyjny

Jedną z bardziej obiecujących dziedzin wykorzystania Bezzałogowych Statków Powietrznych (BSP) jest SAR (Search and Rescue). Możliwość sprawdzenie rozległych połaci terenu, wykonanie zdjęć trudno dostępnych miejsc czy szybkość mapowania są przykładami powodów, dlaczego użycie BSP w scenariuszach związanych z reagowaniem na katastrofy naturalne jest uzasadnione. Jednym z możliwych zastosowań jest wykrywanie poszkodowanych w terenie po przejściu kataklizmu. Takie zadanie stanowiło część misji, którą zespół KN AGH Solar Plane miał za zadanie wykonać na zawodach SUAS 2026.

W przypadku naszych BSP pułap przelotu wynosił 60m, a rozdzielczość kamery 1920 x 1200 px. Jakość obrazu stanowiła jedną z głównych przeszkód w stworzeniu efektywnego oprogramowania do detekcji. Sam model miał działać na komputerze umieszczonym na BSP, którym był Jetson Orin Nano. Detekcja miała następować w czasie rzeczywistym, tak by pokryć cały mapowany teren. Misja zawodów obejmowała - oprócz skutecznej detekcji - także wykonanie precyzyjnego zrzutu na wykryty cel.

By wytrenować model do tego rodzaju zadania potrzebne są specyficzne dane. W przygotowaniach do zawodów sprawdzone zostały zbiory danych: NOMAD, WISARD, SARD i C2A. Porównanie właściwości tych zbiorów, pod nasz konkretny cel pokazały, że najbardziej obiecującym zbiorem będzie NOMAD. Składa się on z ponad 42 000 zdjęć wykonanych z różnych wysokości (10 m, 30 m, 50 m, 70 m, 90 m). Na zdjęciach jest 100 różnych aktorów, ponad 20 różnych środowisk, wszystkie pory roku oraz różne pozycje i poziomy zakrycia aktorów. W przypadku tego zbioru największym wyzwaniem było wybranie podzbioru danych, którego rezultaty dałby najlepsze przełożenie na nasze zadanie. Ostatecznie najbardziej obiecujące okazało się zastosowanie połączenia cięcia wyjściowych obrazów na mniejsze ramki, selekcji zdjęć wykonanych z odpowiednich wysokości oraz odrzucenia zdjęć z zbyt zakrytymi aktorami.

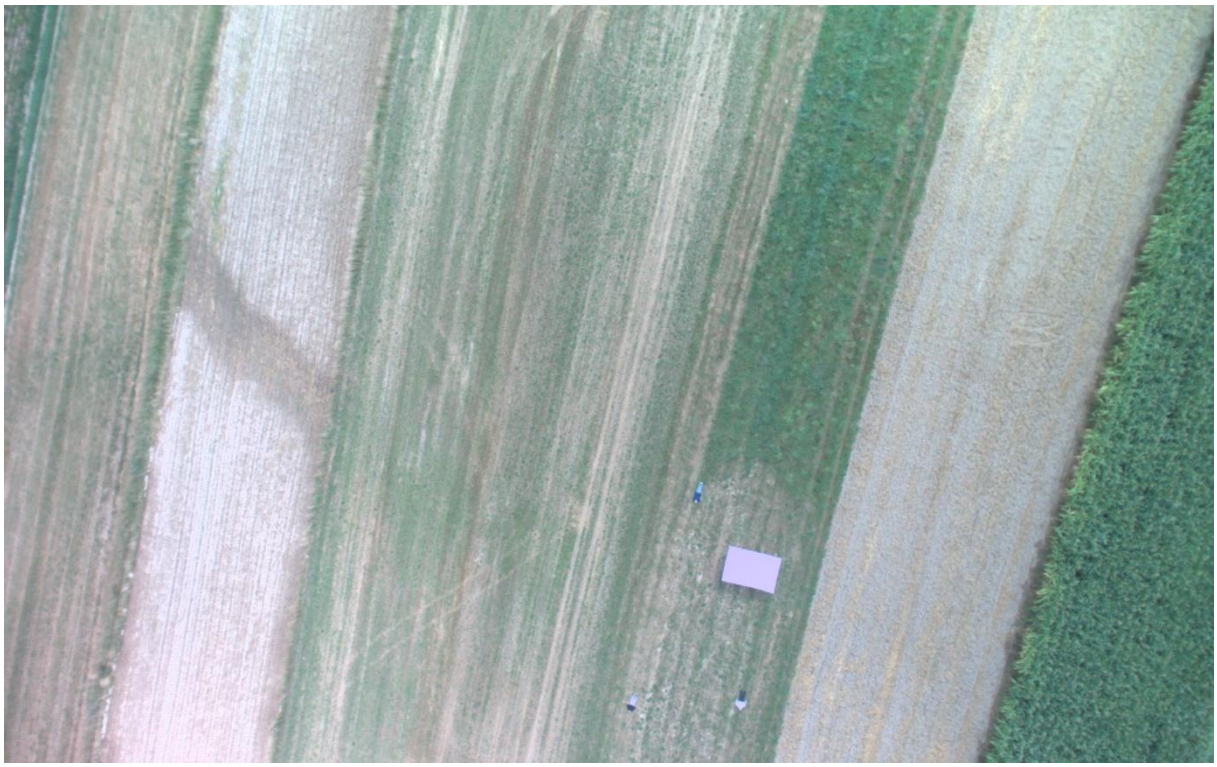


Rysunek 1 Infografika dotycząca zbioru NOMAD. Źródło: https://github.com/artruss/nomad

Najlepszy z wytrenowanych modeli nieoczekiwanie, przy pierwszych testach w warunkach terenowych, zawiódł. Okazało się, że występuje niedopasowanie domenowe pomiędzy zdjęciami ze zbioru, a tymi wykonanymi podczas testów. Kluczowe różnice wynikały z jakości kamery, która przekładała się na znacznie mniejszą ilość informacji jaką YOLO dostawało. W takiej sytuacji zdjęcia z testów stały się częścią zbioru treningowego. Wynikły z tego dwa problemy. Po pierwsze, automatycznie potrzebowaliśmy kolejnych testów by sprawdzić nowy model. Drugą kwestią był problem różnorodności wykonanych zdjęć. W Krakowie testy można przeprowadzać

albo na górce w Pychowicach, albo w pobliskiej wsi Sułoszowa, stąd tak naprawdę każde wykonane zdjęcie było podobne. By temu zaradzić wykorzystano syntetyczną generację nowych zdjęć. Sylwetki ludzi zostały wycięte i przy użyciu skryptu napisanego z użyciem biblioteki OpenCV automatycznie wklejone na różne tła. W ten sposób wygenerowano dodatkowe 4000 zdjęć. Model trenowany na mieszanym zbiorze poprawił znacznie jakość detekcji. Ludzie byli dobrze wykrywani, ale pojawił się problem dużej ilości fałszywych wykryć. Próby dotrenowania modelu na większej ilości pustych zdjęć, tak aby nauczył się jak człowiek „nie wygląda", nie przyniosły oczekiwanych rezultatów. Powodem mógł być fakt, że cześć sylwetek z tej wysokości i przy jakości posiadanej kamery miała podobny układ pikseli, co niektóre gałęzi i krzewy. Rozwiązaniem tego problemu była budowa algorytmu, które decydował o ostatecznym wyborze celu zrzutu. Liczył on nie tylko ilość wykryć, ale także uwzględniał pewność modelu dotyczącą każdego wykrycia. Wykorzystanie tutaj średniej ważonej dało duże prawdopodobieństwo, że cel zostanie poprawnie wybrany. Z perspektywy realnych misji SAR jest to główny problem stworzonego modelu, który trzeba by podjąć. Możliwym rozwiązaniem jest zastosowanie kamery oferującej lepszą jakość.

Przygotowanie i praca nad modelem przyniosły wiele cennych lekcji dotyczących przygotowania modeli wizyjnych. Ostatecznie na zawodach detekcja manekina powiodła się i zrzut został precyzyjnie dostarczony.



Rysunek 2 Zdjęcie wykonane podczas testów na Sułoszowej.



Rysunek 3 Wynik detekcji modelu YOLO trenowanego na mieszanym zbiorze danych.



Rysunek 4 Fałszywe wykrycia podczas testów. Pewność tych wyników była niższa niż wykrycia ludzi.

1.13 Dlaczego turbiny mogą podlegać korozji podczas zbyt szybkich prędkości obrotu? - konstrukcja układu do badania zjawiska kawitacji

Autorzy: Dominik Hec, Aleksander Wróbel
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: -
Typ projektu: Aplikacyjny

Wystąpienie obejmuje teoretyczny opis zjawiska kawitacji, uwzględniający równania Naviera–Stokesa dla płynów nieściśliwych oraz równanie Rayleigha–Plesseta opisujące dynamikę pęcherzyków kawitacyjnych.

Celem wystąpienia jest przedstawienie koncepcji stanowiska badawczego przeznaczonego do analizy kawitacji w turbinach o różnym kącie natarcia, a także dotychczasowych wyników prac związanych z jego projektowaniem i budową. Omówione zagadnienia obejmują:

- koncepcję i projekt turbiny wraz z parametryzacją jej łopatek,
- projekt układu hydraulicznego oraz zmiany względem pierwotnej koncepcji, które okazały się konieczne,
- projekt układu napędowego i elektronicznego.

Na zakończenie przedstawione zostaną założenia dalszych badań, planowana metodyka oraz kolejne etapy realizacji eksperymentów.

Sekcja tematyczna 2

Inżynierii materiałowej

2.1 Hybrydowe układy aerożel–PCM modyfikowane nanododatkami do magazynowania i konwersji energii cieplnej

Autor: Ewa Augustynowicz
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Kinga Pielichowska
Typ projektu: Aplikacyjny

Pomimo wzrostu zainteresowania tematyką magazynowania energii na przestrzeni ostatnich kilku lat, opracowanie materiałów zmiennofazowych o stabilnym kształcie, zwiększonej przewodności cieplnej i długotrwałej niezawodności nadal stanowi wyzwanie inżynierskie. Istotne jest zatem znalezienie rozwiązania, które będzie jednocześnie funkcjonalne i uzasadnione ekonomicznie, umożliwiając efektywne magazynowanie energii cieplnej.

W niniejszej pracy przedstawiono szereg badań, które mogą przyczynić się do rozwiązania takiego problemu. Karbonizaty otrzymano w procesie pirolizy biomasy cytrusowej z dodatkiem polisacharydowego lepiszcza w celu dostosowania struktury porowatej i poprawy ich właściwości mechanicznych jako materiałów nośnych dla materiałów zmiennofazowych. W ten sposób otrzymano materiały węglowe o porowatej strukturze, wykorzystując odpady roślinne jako surowiec. Następnie zaimpregnowano je materiałem zmiennofazowym (PEG6000). W celu ograniczenia wycieku materiału zmiennofazowego zastosowano nanododatki węglowe oraz rozważono wykorzystanie nowej grupy nanomateriałów, MXenów.

Wpływ zawartości lepiszcza na morfologię oraz właściwości termiczne aerożeli zbadano przy użyciu analizy termograwimetrycznej (TGA) oraz skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM). Gotowe kompozyty poddano natomiast badaniom z wykorzystaniem różnych trybów różnicowej kalorymetrii skaningowej (DSC), analizie właściwości związanych z konwersją energii cieplnej oraz testom wycieku. Zastosowanie różnych technik badawczych umożliwiło ocenę stabilności termicznej matryc, charakterystykę przemian fazowych materiału zmiennofazowego oraz obserwację morfologii otrzymanych kompozytów. W rezultacie otrzymano funkcjonalny kompozyt, który po przeprowadzeniu rozszerzonych badań dotyczących jego trwałości, właściwości termicznych i możliwości zastosowania w większej skali ma szansę zostać wprowadzony do użytku komercyjnego w systemach energetycznych budynków, technologiach odzysku ciepła odpadowego oraz rozwiązaniach wykorzystujących odnawialne źródła energii.

Przedstawione podejście stanowi prostą i zrównoważoną metodę przekształcania odpadów z przetwórstwa cytrusów w funkcjonalne węglowe materiały nośne dla zaawansowanych kompozytów materiałów zmiennofazowych (PCM) na bazie PEG6000, modyfikowanych nanorurkami węglowymi (CNT) lub MXenami, w celu uzyskania materiałów o stabilnym kształcie i potencjale zastosowania w magazynowaniu energii cieplnej.

2.2 Opracowanie wykresu CTPc dla wybranej stali konstrukcyjnej stopowej do ulepszania cieplnego

Autor: Julia Gąsiorowska
Koło naukowe: Era Inżyniera
Opiekun projektu: Edyta Rożniata
Typ projektu: Popularnonaukowy

Stale konstrukcyjne stopowe stosowane są do wyrobu części maszyn i pojazdów oraz na wszelkiego rodzaju konstrukcje. Ich własności powinny być dostosowane do warunków pracy. Znaczna część stali konstrukcyjnych to stale średniowęglowe o zawartości min. 0,25% C, przeznaczone do ulepszania cieplnego.

Celem badań było wykonanie i opracowanie wykresu CTPc dla jednej z wybranych stali stopowych do ulepszania cieplnego.

Wykresy CTPc, czyli czas-temperatura-przemiana przy chłodzeniu ciągłym przedstawiają/opisują kinetykę i charakter przemian przechłodzonego austenitu w stalach. „Pomagają" zrozumieć zmiany mikrostruktury stali podczas przemiany austenitu. Dlatego, są cenną pomocą dla technologów, gdyż dzięki nim można prawidłowo zaprojektować obróbkę cieplną dla danego materiału (danej stali) i przewidywać jego własności.

Wykonanie wykresu polega na chłodzeniu próbki z różnymi szybkościami, a następnie na określeniu temperatury początku i końca danej przemiany. Opracowany niniejszy wykres CTPc sporządzono przy użyciu metody dylatometrycznej oraz poparto badaniami metalograficznymi i uzupełniono pomiarami twardości przy użyciu metody Viekersa.

Należy wspomnieć, że wykonane badania zostały zrealizowane w ramach projektu badawczego realizowanego przez SKN AGH pt. "Rozkręć Koło z ArcelorMittal Poland".

2.3 Wpływ struktury nanowłóknistej i metalicznych nanowydzieleń na prace symetrycznego ogniwa paliwowego S-SOFC

Autor: Damian Kaufmann
Koło naukowe: Hydrogenium
Opiekun projektu: Kun Zheng
Typ projektu: Aplikacyjny

W obliczu gwałtownego rozwoju cywilizacyjnego i rosnącego zapotrzebowania na energię, koniecznej jest znalezienie alternatyw dla wyczerpywalnych i emisyjnych paliw konwencjonalnych. W tym celu, rozwój czystych i odnawialnych źródeł energii jest niezbędny w celu zapewnienia niezależności energetycznej oraz utrzymania tempa rozwoju. Symetryczne stałotlenkowe ogniwa paliwowe (ang. Symmetrcial Solid Oxide Cells, S-SOCs) są uznawane za jedno z najbardziej obiecujących i efektywnych rozwiązań technologicznych. Urządzenia te umożliwiają elastyczną konwersje oraz magazynowanie energii w zależności od zapotrzebowania. Czynnikiem ograniczającym wprowadzenie technologii S-SOCs na skale przemysłową jest opracowanie takich materiałów elektrodowych, które spełniają takie wymogi jak wysokie przewodnictwo jonowo-elektrodowe czy stabilność struktura w atmosferze redukującej i utleniającej.

W przedstawionej pracy, nowatorskie materiały o strukturze podwójnego perowskitu Sm0,9Ba0,9Mn1,8-xFex(Co,Ni)0,2O6+δ z wydzielonymi in situ nanocząstkami zostały zaprojektowane jako potencjalne materiały elektrodowe S-SOCs.

Uzyskane wyniki wskazują, że rozwój wcześniej wymienionych materiałów może być ważnym etapem do komercjalizacji symetrycznych ogniw stałotlenkowych w transformacji energetycznej.

2.4 Utylizacja popiołów lotnych o wysokiej zawartości CaO w produkcji pianobetonów

Autor: Aleksandra Mikolaszek
Koło naukowe: CarbON
Opiekun projektu: Jakub Szczurowski
Typ projektu: Aplikacyjny

Produkcja cementu portlandzkiego należy do głównych źródeł emisji CO2 w budownictwie, natomiast spalanie odpadów w instalacjach energetycznych prowadzi do powstawania znacznych ilości popiołów lotnych o wysokiej zawartości CaO, które wymagają zagospodarowania. Jednym ze sposobów ograniczenia obu problemów jest zastąpienie części cementu popiołem lotnym. Celem badań jest ocena wpływu dodatku popiołu oraz stopnia napowietrzenia na właściwości mechaniczne otrzymanych kompozytów. Analiza fazowa popiołu metodą XRD wykazała znaczną zawartość anhydrytu, kalcytu i wolnego CaO, charakterystyczną dla popiołów pochodzących ze spalania odpadów. Do spieniania zaprawy zastosowano albuminę jako naturalny środek pianotwórczy, zapewniający stabilizację pęcherzyków powietrza. Przygotowano próbki referencyjne o różnym stopniu napowietrzenia

oraz mieszanki z dodatkiem popiołu. Wytrzymałość na ściskanie oznaczano po 7, 14 i 28 dniach dojrzewania. Wstępne wyniki wykazały wyraźny spadek wytrzymałości na ściskanie wraz ze wzrostem stopnia napowietrzenia. Po 28 dniach wartość ta zmniejszyła się z 31,40 MPa dla próbki bazowej do 0,31 MPa dla próbki o największym napowietrzeniu. Dodatek surowego popiołu powodował dalsze obniżenie wytrzymałości kompozytu, co może być związane z jego właściwościami fizykochemicznymi i wpływem na strukturę matrycy cementowej. W kolejnym etapie badań popiół poddawany jest wstępnej karbonatyzacji w atmosferze CO2. Proces ma na celu związanie wolnego wapnia, ograniczenie ryzyka pęcznienia oraz poprawę właściwości mechanicznych pianobetonu. W referacie przedstawione zostaną dotychczasowe wyniki badań oraz możliwości wykorzystania karbonatyzowanego popiołu lotnego w produkcji materiałów budowlanych o obniżonym śladzie węglowym.

2.5 Wyznaczanie parametrów materiałowych ceramiki do lekkich osłon balistycznych z wykorzystaniem numerycznego modelu próby dwuosiowego zginania punktowego

Autor: Miłosz Poświatowski
Koło naukowe: Adamantium
Opiekun projektu: Paweł Rutkowski
Typ projektu: Aplikacyjny

Jednym z wyzwań związanych z projektowaniem osłon balistycznych z ceramiki gresowej jest ograniczona dostępność danych literaturowych dotyczących jej właściwości mechanicznych. Ich wyznaczenie pozwala wiarygodniej modelować zniszczenie materiału podczas penetracji, a tym samym ograniczyć kosztowne i czasochłonne prototypowanie. Celem projektu była kalibracja parametrów modelu Johnsona–Holmquista 2 (JH-2) dla ceramiki gresowej wytworzonej na potrzeby projektu lekkich osłon balistycznych. Analizę oparto na numerycznym odwzorowaniu próby punktowego zginania dwuosiowego laboratoryjnie wytworzonych próbek na bazie komercyjnego gresu. Badania eksperymentalne przeprowadzono na maszynie wytrzymałościowej Zwick/Roell Z2.5. Geometrię modelu przygotowano w programie SolidWorks 2025, a symulacje wykonano w Abaqus/CAE 2024. W pracy dokonano oceny wpływ zagęszczenia siatki elementów skończonych na uzyskiwane wyniki oraz przeanalizowano wrażliwość odpowiedzi modelu na zmianę jego parametrów materiałowych. Na podstawie wyników eksperymentalnych skalibrowano parametry modelu JH-2 dla badanej ceramiki. Uzyskany model będzie wykorzystany do szacowania wymaganej grubości osłony balistycznej przed wykonaniem prototypu.

Projekt realizowano w KNKM ADAMANTIUM w ramach przedsięwzięcia dofinansowanego z grantu Rektora nr 141 permilinarz 67/GRANT/2026. Wyrażamy wdzięczność polskiej infrastrukturze obliczeniowej wysokiej wydajności PLGrid (Centrum HPC: ACK Cyfronet AGH) za udostępnienie zasobów obliczeniowych i wsparcie w ramach grantu obliczeniowego nr PLG/2026/019610

2.6 Studium przypadku nieudanej próby wytworzenia kompozytu SiC z kaolinitem

Autor: Krzysztof Łaba
Koło naukowe: Adamantium
Opiekun projektu: Paweł Rutkowski
Typ projektu: Aplikacyjny

Celem projektu było wytworzenie węglika krzemu z modyfikatorem spiekania w postaci kaolinitu, który jednocześnie był prekursorem mulitu.
Mimo poprawnie zaprasowanych materiałów, dobrego skurczu materiału oraz standardowej temperatury spiekania dla węglika krzemu uzyskano tworzywa porowate oraz o niskiej wytrzymałości na zginanie.
W związku z napotkanym problemem podjęto próbę zaproponowania jego rozwiązania oraz modyfikacji procesu wytwarzania kompozytów o osnowie węglika krzemu.
Ustalono przyczynę oraz zaproponowano wprowadzenie dodatkowych pośrednich kroków związanych ze wstępnym przygotowaniem kaolinitu.
W ramach badań przeprowadzono badania zagęszczenia materiału oraz ponownie przestudiowano literaturę, na bazie której, z połączeniem z danymi pochodnych z analizy termicznej wykorzystywanego kaolinitu, zaproponowano poprawki w procesie wytwarzania docelowych tworzyw.

Tak dokonana analiza potwierdziła przypuszczenia prawdopodobnych przyczyn nieudanego eksperymentu. W wyniku wykonanej analizy dopracowano proces technologiczny i opracowano procedurę przygotowania materiału przed procesem spiekania.
Projekt stanowi część badań prowadzonych w KNKM ADAMANTIUM w ramach projektu „Wytworzenie cywilnego pancerza osobistego na bazie gresu oraz węglików z ekonomicznymi prekursorami mulitu obniżającymi temperaturę spiekania" dofinasowanego z grantu Rektora nr 141/26[PR1.1] preliminarz 67/GRANT/2026.

2.7 Aerożele węglowe jako rusztowania do systemów oczyszczania wody

Autor: Mateusz Czajka
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Dorota Lachowicz
Typ projektu: Aplikacyjny

Praca dotyczy otrzymywania i charakterystyki aerożeli rezorcynowo-formaldehydowych oraz pochodzących z nich aerożeli węglowych, modyfikowanych nanocząstkami tlenków żelaza. Celem badań było określenie wpływu warunków syntezy, procesu karbonizacji i zawartości prekursora żelaza na morfologię oraz właściwości adsorpcyjne otrzymanych materiałów, rozpatrywanych jako potencjalne rusztowania do systemów oczyszczania wody. Hydrożele RF suszono w warunkach nadkrytycznych CO_2, a następnie karbonizowano w atmosferze argonu. Morfologię i rozmiary porów analizowano metodą SEM, natomiast obecność i wielkość nanocząstek badano z wykorzystaniem TEM i EDS. Właściwości adsorpcyjne oceniono na podstawie zmian stężenia błękitu metylenowego, monitorowanych metodą UV-Vis. Karbonizacja w 650°C prowadziła do zmniejszenia średnic porów o około 45–65%, bez utraty ciągłości struktury porowatej. W próbkach o większej zawartości prekursora powstały równomiernie rozmieszczone nanocząstki Fe_xO_γ o średnicach około 4,8–5,6 nm. Jednocześnie wzrost ich zawartości obniżał skuteczność adsorpcji barwnika. Wyniki wskazują, że aerożele węglowe RF mogą stanowić obiecującą bazę materiałów sorpcyjnych, jednak ich modyfikacja magnetyczna wymaga optymalizacji udziału fazy nieorganicznej.

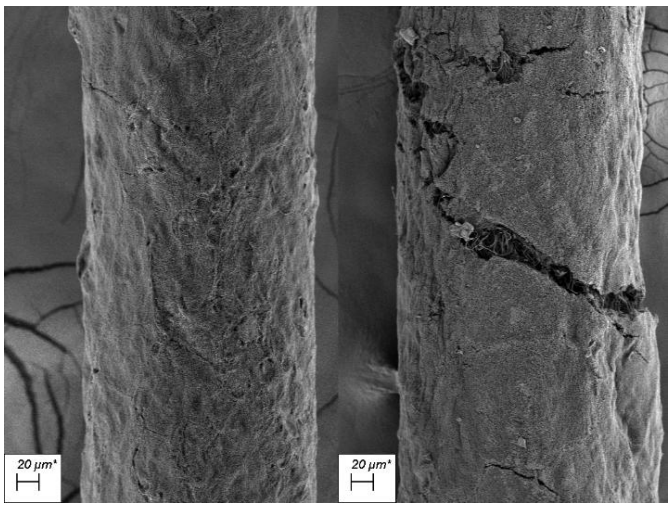
2.8 Wykorzystanie zmodyfikowanej dynamicznej analizy mechanicznej do wyznaczenia charakterystyki elektromechanicznej elektroprzędzonych włókien PAN–CNT

Autor: Mateusz Suliga
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: Jacek Nizioł
Typ projektu: Teoretyczny

Kompozytowe przędze przewodzące polimerowo-węglowe stają się kluczowym elementem konstrukcyjnym inteligentnych tekstyliów (*smart textiles*). Dynamiczna analiza mechaniczna (DMA) jest standardową metodą charakteryzacji właściwości lepkosprężystych materiałów, polegającą na przykładaniu oscylacyjnego wymuszenia mechanicznego. Pozwala ona na rozdział odpowiedzi materiału na składową sprężystą (odpowiedzialną za akumulację energii) oraz lepką (związaną z jej dyssypacją), reprezentowane odpowiednio przez moduł zachowawczy oraz moduł stratności. Niemniej jednak klasyczne pomiary oscylacyjne DMA, realizowane zazwyczaj w zakresie częstotliwości 0,01–200 Hz, ograniczają się do liniowego zakresu lepkosprężystości. Uniemożliwia to rejestrację długoczasowych procesów relaksacji naprężeń (o dużych stałych czasowych), jak również analizę znacznych odkształceń plastycznych.

Aby przezwyciężyć te ograniczenia, opracowano zmodyfikowaną metodykę DMA połączoną ze zsynchronizowanymi pomiarami elektrycznymi DC *in situ*, co pozwala na badanie właściwości elektromechanicznych przędz poliakrylonitrylowych powlekanych nanorurkami węglowymi (PAN–CNT) poddanych dyskretnym krokom odkształcenia.

Próbki o długości pomiarowej 2 cm poddano procedurze stopniowego rozciągania: do całkowitego wydłużenia o 1 mm (w krokach co 0,2 mm) oraz o 5 mm (w krokach co 1 mm). Badania metodą skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM) wykazały, że przy małym odkształceniu (5%) powłoka CNT pozostaje równomiernie



Rysunek 2.1: Zdjęcia SEM przędzy po rozciągnięciu do 5% (po lewej) oraz do 25% (po prawej).

związana z rdzeniem PAN bez powstawania mikropęknięć, co pozwala zachować ciągłe ścieżki perkolacji i stabilność parametrów elektrycznych. Z kolei przy dużym odkształceniu (25%) w warstwie CNT propagują pęknięcia poprzeczne, powodując przesuwanie i reorientację nanorurek wzdłuż osi naprężenia.

Opracowana metodyka zmodyfikowanej DMA pozwala skutecznie powiązać makroskopową relaksację mechaniczną i zmiany rezystancji z mikroskopową ewolucją sieci perkolacyjnej CNT, otwierając nowe możliwości analizy elektromechanicznej odkształceń materiałów włóknistych.

Literatura

[1] A. Moradi, P. K. Szewczyk, and U. Stachewicz, "Scalable and multifunctional PAN–MXene composite fibers for thermal management, photothermal conversion, energy harvesting, and sensing for wearable applications," *Advanced Materials*, p. e22098, 2025.

2.9 Od kofeiny do katalizatora – nanoporowate materiały węglowe do elektrochemicznej redukcji związków organicznych

Autorzy: Marta Anioł, Oliwia Drzewniak
Koło naukowe: Hexa
Opiekun projektu: Mateusz Odziomek
Typ projektu: Aplikacyjny

Poszukiwanie wydajnych, tanich i łatwo dostępnych katalizatorów stanowi jedno z ważnych wyzwań współczesnej chemii. Szczególnie interesującą alternatywą dla tradycyjnych katalizatorów opartych na metalach szlachetnych są materiały węglowe, których właściwości można modyfikować poprzez odpowiedni dobór prekursorów i warunków syntezy. Czy zatem kofeina, znana przede wszystkim jako składnik kawy i napojów energetycznych, może posłużyć do otrzymania wydajnego katalizatora reakcji chemicznych?

W niniejszej pracy wykorzystano kofeinę jako prekursor do syntezy nanoporowatych materiałów węglowych domieszkowanych azotem. Syntezę przeprowadzono w mieszaninie stopionych soli $ZnCl_2$/NaCl, umożliwiającej otrzymanie materiałów o rozwiniętej strukturze porowatej i powierzchni właściwej sięgającej 1600 m^2/g. Obecność azotu w cząsteczce kofeiny pozwala dodatkowo na wprowadzenie tego pierwiastka do struktury węgla, modyfikując jego właściwości chemiczne i elektrochemiczne. Otrzymano trzy materiały, różniące się stosunkiem kofeiny do mieszaniny soli, aby zbadać wpływ warunków syntezy na ich strukturę i aktywność katalityczną.

Właściwości otrzymanych materiałów oceniono w modelowej reakcji elektrochemicznej redukcji *p*- nitrofenolu do *p*-aminofenolu, polegającej na przekształceniu grupy nitrowej (–NO_2) w aminową (– NH_2). Najbardziej aktywny materiał węglowy pozwolił uzyskać 85% konwersji substratu przy wydajności faradajowskiej bliskiej 100%, co oznacza, że niemal cały ładunek elektryczny został wykorzystany do wytworzenia pożądanego produktu. Dla porównania, elektroda platynowa w analogicznych warunkach osiągnęła wydajność faradajowską wynoszącą zaledwie 10%. Wyniki te wskazują, że odpowiednio zaprojektowany materiał węglowy może nie tylko skutecznie zastąpić metal szlachetny, ale również przewyższyć go pod względem efektywności i selektywności procesu elektrochemicznego.

Przeprowadzone badania pokazują, że odpowiednio zaprojektowane materiały węglowe, otrzymywane z łatwo dostępnych prekursorów, mogą stanowić wydajniejszą alternatywę nawet dla katalizatorów opartych na metalach szlachetnych. Kontrola porowatości i składu chemicznego węgla otwiera nowe możliwości projektowania wysoce aktywnych i selektywnych (elektro)katalizatorów. Co istotne, połączenie katalizatorów węglowych z metodami elektrochemicznymi, w których woda stanowi źródło wodoru do reakcji uwodornienia, eliminuje konieczność stosowania sprężonego wodoru. Takie podejście stanowi obiecujący kierunek rozwoju bardziej zrównoważonych metod syntezy związków chemicznych.

2.10 Zastosowanie samonaprawialnego betonu w energetyce jądrowej

Autorzy: Magdalena Teske, Jakub Denisiuk
Koło naukowe: Energetyków Jądrowych Uranium
Opiekun projektu: Filip Jędrzejek
Typ projektu: Teoretyczny

Współczesna infrastruktura jądrowa wymaga ekstremalnej trwałości, spełnienia rygorystycznych standardów bezpieczeństwa oraz niezawodnego działania w wydłużonym cyklu eksploatacyjnym wynoszącym od 60 do 80 lat. Konwencjonalne konstrukcje betonowe są stale narażone na intensywne naprężenia termiczno-mechaniczne oraz promieniowanie, co prowadzi do powstawania mikropęknięć i degradacji materiału. Praca przedstawia założenia projektowe, ramy badawcze oraz aktualny stopień rozwoju projektu wytworzenia innowacyjnego betonu samonaprawialnego z dodatkiem polimerowych kapsułek, rozważanego jako materiał do budowy obudów bezpieczeństwa (*containment*), płyt fundamentowych i innych kluczowych segmentów infrastruktury przemysłu jądrowego.

Metodologia badawcza łączy przeprowadzone badania wytrzymałościowe próbek betonu z dodatkiem polimeru w akredytowanym laboratorium oraz zaawansowane modelowanie numeryczne. Do wstępnej oceny parametrów osłonowych wykorzystuje się symulacje transportu neutronów metodą Monte Carlo w kodzie OpenMC.

Prezentowane podejście ma na celu weryfikację, czy integracja polimerowych kapsułek pozwala na efektywne zamykanie pęknięć bez naruszania krytycznych marginesów bezpieczeństwa. Opracowywane modele symulacyjne mają sprawdzić, czy zmodyfikowany materiał może utrzymać lub zwiększyć skuteczność osłonową, otwierając drogę do bardziej kompaktowych projektów konstrukcyjnych dla reaktorów nowej generacji, w tym małych reaktorów modułowych (SMR), reaktorów badawczych, reaktorów IV generacji i innych elementów krytycznych w infrastrukturze w branży jądrowej.

Praca ukazuje potencjał nowatorskich rozwiązań materiałowych w kontekście wydłużenia cyklu życia infrastruktury jądrowej oraz redukcji kosztów utrzymania. Badania te stanowią ważny krok w kierunku rozwoju pasywnych systemów bezpieczeństwa oraz kształcenia młodych kadr inżynierskich dla sektora energetyki jądrowej, który w związku z planowaną budową pierwszej polskiej elektrowni jądrowej dynamicznie się rozwija i wymaga wysoko wykwalifikowanych specjalistów.

2.11 Adsorpcja kropek kwantowych CdSe na wielowarstwowych filmach polielektrolitowych — wpływ na właściwości powierzchniowe

Autor: Gabriela Gołębiowska
Koło naukowe: Hexa
Opiekun projektu: Jan Michalik
Typ projektu: Aplikacyjny

Kropki kwantowe (ang. Quantum dots, QDs) wzbudzają zainteresowanie ze względu na swoje unikalne właściwości optyczne i elektronowe, zależne od ich rozmiaru. Wbudowane w wielowarstwowe struktury polimerowe mogą pełnić istotną funkcję w kontrolowaniu procesów optycznych, takich jak absorpcja i emisja światła. Badania nad układami polielektrolitowymi zawierającymi kropki kwantowe mają istotne znaczenie ze względu na możliwość charakteryzowania właściwości cienkich filmów oraz ich potencjalne zastosowanie w optoelektronice i biosensoryce.

Celem pracy było określenie wpływu inkorporacji kropek kwantowych selenku kadmu (CdSe) na powierzchnię wielowarstwowych filmów polielektrolitowych otrzymywanych metodą warstwa-po-warstwie (ang. Layer-by-layer, LbL). Technika ta umożliwia kontrolowane formowanie struktur polimerowych poprzez naprzemienną adsorpcję polielektrolitów o przeciwnych ładunkach, a następnie osadzanie na ich powierzchni kropek kwantowych.

Do przeprowadzenia eksperymentu użyto polikationów: chlorowodorek polialiloaminy PAH (ang. poly(allylamine hydrochloride)), poli(chlorek diallilodimetyloamoniowy) PDADMAC (ang. poly(diallyldimethylammonium chloride) oraz polianionu poli(4-styrenosulfonian sodu) PSS (ang. poly(sodium 4-styrenesulfonate)). Adsorpcję nanostruktur CdSe przeprowadzono na układach polielektrolitowych PAH/PSS oraz PDADMAC/PSS, naniesionych na na złote elektrody osadzone na dyskach kwarcowych. Nakładanie warstw prowadzono techniką dyfuzyjną przez zanurzenie w roztworach polijonów i kropek kwantowych oraz w przepływie, w celce QCM.

Dla roztworu kropek kwantowych wyznaczono potencjał zeta używając ZetaSizer oraz długość fali maksimum emisji na widmie emisyjnym przy wzbudzeniu światłem o długości fali 400nm stosując spektrofluorymetrię. Proces formowania wielowarstwowych struktur oraz adsorpcji kropek kwantowych monitorowano za pomocą mikrowagi kwarcowej z pomiarem dyssypacji energii (QCM-D). Zastosowanie tej techniki umożliwiło rejestrację w czasie rzeczywistym zmian zachodzących podczas adsorpcji kolejnych warstw polielektrolitów oraz kropek kwantowych, a także oszacowanie przyrostu masy na podstawie równania Sauerbreya dla cienkich warstw zbudowanych ze sztywnych łańcuchów polielektrolitowych. Ponadto otrzymane układy poddano analizie topografii powierzchni z wykorzystaniem mikroskopii sił atomowych (AFM), co pozwoliło na obserwację nanostruktur osadzonych na powierzchni filmów polielektrolitowych.

Uzyskane wyniki pozwoliły na porównanie efektywności osadzania kropek kwantowych na podłożach polielektrolitowych z wykorzystaniem dwóch metod: zanurzeniowej oraz przepływowej (z zastosowaniem aparatury QCM-D). Obrazowanie metodą AFM potwierdziło obecność klasterów CdSe na analizowanych powierzchniach, natomiast wyniki pomiarów QCM-D umożliwiły określenie przyrostu masy związanej z procesem adsorpcji. Rezultaty przeprowadzonych badań mogą stanowić podstawę do projektowania wielowarstwowych struktur polimerowych z wykorzystaniem nanomateriałów do zastosowań w sensoryce

2.12 Zwiększenie transferu ładunku w heterozłączach trójwymiarowego, kwiatopodobnego TiO_2 do wysokoczułej diagnostyki fotoelektrochemicznej

Autor: Katarzyna Pełech
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Anna Kusior
Typ projektu: Aplikacyjny

Fotoelektrochemiczne (PEC) sensory stanowią obiecującą grupę narzędzi analitycznych łączących zalety materiałów półprzewodnikowych, wzbudzenia światłem oraz elektrochemicznej transdukcji sygnału. Kluczowym czynnikiem warunkującym ich skuteczność jest efektywna separacja nośników ładunku oraz ograniczenie procesów rekombinacji elektron-dziura, co bezpośrednio wpływa na czułość i stabilność odpowiedzi sensorowej.

Celem pracy było opracowanie trójwymiarowych nanostruktur TiO_2 o hierarchicznej, kwiatopodobnej morfologii oraz zbadanie wpływu ich modyfikacji związkami srebra, miedzi i złota na właściwości fotoelektrochemiczne oraz możliwości zastosowania w diagnostyce biomarkerów. Otrzymane materiały zostały scharakteryzowane pod względem struktury, właściwości elektronowych oraz efektywności transportu ładunku. Wyniki badań wykazały, że modyfikacja powierzchni TiO_2 prowadzi do istotnych zmian w strukturze energetycznej materiałów oraz sprzyja bardziej efektywnemu rozdzielaniu fotogenerowanych nośników ładunku. Najkorzystniejszy wpływ na transport ładunku odnotowano w układach modyfikowanych tlenkami srebra, w których zaobserwowano wzrost koncentracji donorów oraz poprawę procesów generacji i transferu ładunku pod wpływem promieniowania świetlnego. Dodatkowo obecność heterozłączy TiO_2/Ag_xO, TiO_2/Cu_xO i TiO_2/Au przyczyniała się do ograniczenia rekombinacji nośników oraz do poprawy aktywności fotoelektrochemicznej.

Praktyczną użyteczność opracowanych materiałów oceniono w procesie detekcji glukozy i kwasu mlekowego. Uzyskane elektrody wykazywały zależną od stężenia odpowiedź fotoelektrochemiczną, co potwierdza możliwość ich wykorzystania jako elementów sensorowych. Szczególnie obiecujące rezultaty uzyskano dla zakresów stężeń odpowiadających poziomom glukozy występującym w ślinie, pocie i łzach, co wskazuje na potencjał zastosowania tych materiałów w nieinwazyjnej diagnostyce oraz urządzeniach ubieralnych. Ponadto heterozłącza TiO_2/Ag_xO oraz TiO_2/Au wykazały zdolność do detekcji kwasu mlekowego, który jest ważnym markerem zaburzeń metabolicznych i niedotlenienia tkanek.

Uzyskane wyniki potwierdzają, że inżynieria heterozłączy opartych na trójwymiarowych nanostrukturach TiO_2 stanowi skuteczną strategię zwiększania efektywności transferu ładunku oraz rozwoju nowej generacji wysokoczułych platform fotoelektrochemicznych przeznaczonych do zastosowań diagnostycznych i biomedycznych.

2.13 Zastosowanie stopów wysokiej entropii jako materiałów referencyjnych w spektrometrii µ-XRF

Autor: Marcin Drąg
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Paweł Wróbel
Typ projektu: Aplikacyjny

Spektrometry µ-XRF są niezwykle czułe na dokładność ustawienia optyki ogniskującej, dlatego wymagają regularnego monitorowania stabilności układu pomiarowego. Przykładem takiego spektrometru jest linia badawcza PolyX, która oferuje wyjątkowe możliwości łatwej rekonfiguracji układu. Wiąże się to z koniecznością częstej kalibracji czułości pierwiastkowej oraz kontroli jego stabilności. Celem projektu było przyspieszenie tego procesu poprzez opracowanie nowych wielopierwiastkowych próbek referencyjnych. Stopy wysokiej entropii (HEA) stanowią klasę materiałów składających się z co najmniej pięciu pierwiastków o zbliżonych udziałach atomowych. Ich wysoka entropia konfiguracyjna sprzyja stabilizacji faz o prostych strukturach krystalicznych (takich jak FCC, BCC czy HCP). Ponadto stopy te mogą wykazywać wyjątkową wytrzymałość mechaniczną, odporność na pękanie oraz stabilność termiczną.

Te unikalne właściwości, w połączeniu z możliwością dostosowania składu chemicznego w celu uzyskania pożądanego zestawu charakterystycznych linii emisyjnych promieniowania X, czynią stopy wysokiej entropii obiecującymi kandydatami na materiały referencyjne umożliwiające kalibrację z wykorzystaniem zaledwie jednej próbki.

Sekcja tematyczna 3

Monitoringu i ochrony środowiska

3.1 Analiza zanieczyszczeń fizykochemicznych wody przybrzeżnej wyspy La Palma

Autorzy: Kamil Czyżowicz, Alicja Jagielska
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: -
Typ projektu: Popularnonaukowy

Choć Wyspy Kanaryjskie kojarzą się przede wszystkim z rajskimi widokami, tłumnie odwiedzanymi przez turystów, to intensywny ruch morski i turystyka wywierają presję na otaczające je oceaniczne wody.

Celem przeprowadzonego projektu była analiza przybrzeżnych wód wyspy La Palma, która staje się coraz popularniejszą destynacją turystyczną. W ramach badań zebrano 14 próbek wody – 13 z nich stanowiły próbki wody morskiej, natomiast jedna pochodziła z ujęcia słodkowodnego (wodospadu). Ponadto analizie poddano również roztwory wody oraz odparowanej soli morskiej wykorzystywanej przez mieszkańców wyspy. W tym celu wykorzystano technologię EDXRF jako narzędzie do ilościowej oceny metali ciężkich w ze- branych próbkach. Otrzymane wyniki wykazały, że zawartość żelaza oscyluje w przedziale od 2,3 do 4,5 μg/l, miedzi – od 2,7 do 5,8 μg/l, natomiast cynku – od 9,3 do 50 μg/l, z kilkoma interesującymi wyjątkami. Odnotowano podwyższoną zawartość żelaza w wodzie oceanicznej w okolicach Tazacorte, kilkusetkrotnie odbiegającą stężeniem od pozostałych próbek, co może być powiązane z erupcją wulkanu Tajogaite w 2021 roku i przedostania się lawy oraz popiołów do oceanu w okolicach tego miasta.

Należy nakreślić, że obecność metali ciężkich w wodach może wynikać zarówno z natu- ralnej aktywności wulkanicznej, jak i z działalności człowieka, a funkcjonowanie morskich ekosystemów opiera się na naturalnym obiegu pierwiastków. Przekroczenie progów stężeń może prowadzić do zaburzeń ekosystemu oraz wpływać na organizmy żywe.

3.2 Modelowanie i analiza odzysku ciepła odpadowego ze spalin turbin gazowych małej mocy

Autor: Szymon Kocot
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Jakub Szczurowski
Typ projektu: Aplikacyjny

W pracy przeprowadzono modelowanie i symulację układu turbiny gazowej, zintegrowanej z kaskadowym systemem odzysku ciepła ze spalin. Model obejmował sprężarkę, komorę spalania oraz turbinę, w której jako paliwo zastosowano mieszaninę gazu ziemnego z dodatkiem wodoru. Takie rozwiązanie rozpatrywano w kontekście możliwości ograniczenia emisji CO_2. Układ odzysku ciepła zaprojektowano jako kaskadę trzech przeciwprądowych wymienników płaszczowo-rurowych, wykonanych zgodnie ze standardami TEMA. Jako czynniki robocze zastosowano oleje termiczne o różnych właściwościach i zakresach temperatur pracy. Symulacje przeprowadzono w programie ChemCAD, analizując wpływ parametrów konstrukcyjnych wymienników, w tym średnicy płaszcza i rozmieszczenia rur, a także właściwości czynników roboczych na efektywność wymiany ciepła i opory przepływu. Szczególną uwagę poświęcono doborowi geometrii wymienników, umożliwiającej intensywny odbiór ciepła

ze spalin przy ograniczeniu spadku ciśnienia w całym układzie. Zastosowanie kaskadowego układu wymiany ciepła pozwoliło obniżyć temperaturę spalin z 529,4°C do 46,13°C. Uzyskane wyniki wskazały na możliwość efektywnego wykorzystania ciepła odpadowego z turbiny gazowej oraz jego dalszego zagospodarowania w układach energetycznych. Opracowany model stanowi podstawę do analizy i optymalizacji systemów odzysku ciepła, z uwzględnieniem parametrów pracy turbiny, konstrukcji wymienników oraz doboru czynników roboczych.

3.3 Rational pesticide design in agrochemistry for honey bee safety

Autor: Jakub Adamczyk
Koło naukowe: Bit
Opiekun projektu: Wojciech Czech
Typ projektu: Aplikacyjny

Introduction. Pesticides - herbicides, insecticides and fungicides - are indispensable for modern agriculture, but their large-scale use harms non-target organisms, in particular the honey bee (*Apis mellifera*), a key pollinator. Acute bee toxicity is regulated through the median lethal dose, and US EPA guidelines classify a compound as toxic when LD50 is at most 11 μg/bee. Developing a new active ingredient costs over $300M and takes about 12 years, while the EU Farm-to-Fork strategy aims to halve the risk of chemical pesticides by 2030 [3]. Rational drug design, where computational prediction of properties guides synthesis, transformed pharmaceutical chemistry. The same *in silico* approach applied to agrochemicals, i.e. rational pesticide design, could prioritize candidate structures before costly and ethically constrained bee testing.

Why is this difficult? Agrochemical chemical space is not the medicinal one. Following EPA and NAFTA QSAR guidance, salts, inorganics, mixtures and metal-containing compounds must be kept, because they carry essential information. For example, Mancozeb and Maneb are distinct registered pesticides differing only in complexation with Zn and Mn ions. Such disconnected structures are almost 20% of agrochemical data, so many computational models from medicinal chemistry, which assume single-component compounds, are not applicable. Raw ecotoxicological records in public databases (e.g. US EPA ECOTOX [8]) mix units and measurement procedures, resulting in many-fold inter-laboratory differences, which requires significant data curation efforts before any data analysis can be carried out.

Aim. To create a reliable, curated dataset of pesticide toxicity to honey bees, to determine structural differences between agrochemical and medicinal chemistry spaces, to establish which computational methods work for modeling bee toxicity, and which chemical motifs drive these predictions.

Materials and methods. Molecules are represented as SMILES [7] text strings. We built ApisTox [1], merging ECOTOX [8], PPDB and BPDB databases with a reproducible data curation pipeline. It includes e.g. unit conversion, CAS normalization, lab assay denoising, and structure deduplication. The final set contains 1035 pesticides, the largest collection to date in literature. We carried out multiple chemical space analyses, based on e.g. molecular filters [9, 11], functional groups counting, and #Circles diversity [12], which revealed significant agro-vs-medicinal differences. Comprehensive computational modeling included e.g. molecular fingerprints [4], graph kernels, deep graph neural networks, and pretrained foundation models. Quality was measured by Matthews correlation coefficient (MCC) and AUROC, due to class imbalance. Explainable AI techniques like MMACE counterfactual explanations [10] were used to further analyze ML models.

Results. Agrochemicals occupy a chemical space clearly separated from medicinal datasets, as indicated by all structural diversity analyses carried out. At the same time 94.4% of pesticides pass the Lipinski filter [11] and 70.9% the Hao pesticide filter [9], showing bioavailability requirements comparable to drugs. In prediction (Table 1), ML models based on molecular fingerprints and WL-OA graph kernel performed best, while all deep learning methods failed to obtain satisfactory performance. Counterfactual analysis is chemically sound: replacing the nitrile group of cyantraniliprole with methyl flips the prediction to non-toxic, consistent with loss of reactive cyanide release, and the decisive motifs are organophosphate esters, sulfides, nitriles and ester bonds, i.e. polarity, ionization and hydrolytic lability.

Table 1. Test MCC for representative methods on the MaxMin and time train-test splits of ApisTox [2].

Method	MaxMin	Time	Method	MaxMin	Time
Avalon fingerprint	0.48	0.43	MOLTOP [5]	0.36	0.33
ECFP fingerprint	0.42	0.48	AttentiveFP (GNN)	0.35	0.29
WL-OA graph kernel	0.49	0.43	ChemBERTa	0.37	0.27

Conclusions. Careful chemical curation, not model complexity, is what makes bee toxicity prediction work. Classical computational chemistry representations - molecular fingerprints and graph kernels - outperform deep learning on agrochemicals, whose chemical space is demonstrably distinct from medicinal benchmarks. The models reproduce regulatory decisions for disputed compounds such as indoxacarb, phosalone and acetamiprid

and highlight meaningful toxicophores, so they can act as early filters in designing safer pesticides. Future work covers a broader ecotoxicological benchmark (fish, birds, algae) to understand how those results generalize to other agrochemical endpoints.

References

[1] J. Adamczyk, J. Poziemski, P. Siedlecki, ApisTox: a benchmark dataset for classification of small molecules toxicity on honey bees, Sci. Data 2025, 12, 5. [2] J. Adamczyk, J. Poziemski, P. Siedlecki, Evaluating ML models for predicting pesticide toxicity to honey bees, Ecotoxicol. Environ. Saf. 2026, 312, 119869. [3] J. Adamczyk, Towards Rational Pesticide Design with Graph ML Models, Proc. CIKM 2025. [4] J. Adamczyk, P. Ludynia, SoftwareX 2024, 28, 101944. [5] J. Adamczyk, W. Czech, Proc. ECAI 2024, 1575-1582. [6] J. Adamczyk, W. Czech, Proc. ICCS 2023, 597-611. [7] D. Weininger, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1988, 28, 31-36. [8] J. H. Olker et al., Environ. Toxicol. Chem. 2022, 41, 1520-1539. [9] G. Hao, Q. Dong, G. Yang, Mol. Inform. 2011, 30, 614-622. [10] G. P. Wellawatte, A. Seshadri, A. D. White, Chem. Sci. 2022, 13, 3697-3705. [11] C. A. Lipinski et al., Adv. Drug Deliv. Rev. 2012, 64, 4-17. [12] Y. Xie, Z. Xu, J. Ma, Q. Mei, Proc. ICLR 2023.

3.4 Wpływ warunków syntezy nanokropek węglowych na ich właściwości i zastosowania w aminowych układach absorpcji

Autor: Małgorzata Hasal
Koło naukowe: CarbON
Opiekun projektu: Jakub Szczurowski
Typ projektu: Aplikacyjny

Nanokropki węglowe (CNDs, carbon nanodots) to nanomateriały charakteryzujące się wyjątkowymi właściwościami, takimi jak fotoluminescencja, stabilność chemiczna oraz niska toksyczność. Ich struktura obejmuje rdzeń węglowy otoczony grupami funkcyjnymi, których modyfikacja umożliwia dostosowanie właściwości materiału do określonych zastosowań. Wraz z rozwojem CNDs rośnie zainteresowanie ich wykorzystaniem w technologiach środowiskowych, w tym w procesach wychwytywania ditlenku węgla metodą absorpcji chemicznej z wykorzystaniem amin. Dotychczasowe badania wskazują, że dodatek nanokropek węglowych może korzystnie wpływać m.in. na pojemność absorpcyjną absorbentów aminowych. Syntezę nanokropek przeprowadzono trzema metodami: solwotermalną, mikrofalową oraz ogrzewania próżniowego. Wykorzystano różne prekursory węglowe, takie jak kwas cytrynowy i L-kwas askorbinowy, a także źródła azotu, m.in. mocznik i monoetanoloaminę. Zróżnicowanie metod syntezy i zastosowanych prekursorów miało na celu zbadanie wpływu tych czynników na właściwości otrzymanych nanomateriałów. Charakterystykę CNDs przeprowadzono z wykorzystaniem spektroskopii UV-Vis, spektroskopii FTIR-ATR oraz skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM). Otrzymane materiały wykorzystano następnie jako dodatki do układów aminowych, których efektywność absorpcji CO_2 oceniano metodą grawimetryczną. Wstępne wyniki wykazały, że dodatek CNDs wpływa na efektywność absorpcji CO_2 w badanych układach aminowych. Zaobserwowane różnice wskazują na znaczenie metody syntezy i rodzaju zastosowanych prekursorów. Dalsze badania pozwolą określić zależność między charakterystyką powierzchni CNDs a ich wpływem na proces absorpcji CO_2.

3.5 Modelowanie i symulacja procesu bezpośredniego wychwytu CO2 z powietrza (DAC)

Autor: Oliwier Skoczylas
Koło naukowe: CarbON
Opiekun projektu: Jakub Szczurowski
Typ projektu: Aplikacyjny

W pracy opracowano modele symulacyjne procesów bezpośredniego wychwytu CO2 z powietrza (Direct Air Capture, DAC) w programie Aspen Plus oraz Aspen Adsorption. Analizie poddano dwie komplementarne konfiguracje technologiczne: adsorpcję na sorbentach stałych oraz absorpcję z wykorzystaniem ciekłych rozpuszczalników. Opracowane modele uwzględniały główne etapy procesu, obejmujące kontakt powietrza z medium wychwytującym, separację CO2, regenerację sorbentu lub rozpuszczalnika oraz recyrkulację medium w układzie zamkniętym. Przyjęte podejście umożliwiło odwzorowanie podstawowych zależności procesowych oraz analizę funkcjonowania instalacji w różnych warunkach operacyjnych. Wyniki symulacji posłużyły do oceny możliwości

zastosowania obu konfiguracji oraz określenia potencjału modeli w analizie wpływu parametrów operacyjnych na efektywność wychwytu i regeneracji. Równoległe opracowanie modeli wykorzystujących odmienne mechanizmy separacji stworzyło podstawę do ich dalszej walidacji, analizy porównawczej i optymalizacji. Uzyskane wyniki potwierdziły przydatność modelowania procesowego w projektowaniu i optymalizacji instalacji DAC. Opracowane modele wspierają rozwój technologii bezpośredniego wychwytu CO2 z powietrza.

3.6 Elektryk czy spalinówka? Analiza opłacalności na przykładzie Audi RS 6 Avant i Audi RS e-tron GT

Autor: Anna Adamaszek
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Mariusz Niekurzak
Typ projektu: Aplikacyjny

Wybór między napędem elektrycznym a spalinowym jest dziś jedną z kluczowych decyzji zakupowych zarówno dla osób prywatnych, jak i przedsiębiorstw. Celem pracy było porównanie całkowitych kosztów posiadania (TCO) dwóch samochodów klasy premium o zbliżonych osiągach: spalinowego Audi RS 6 Avant oraz elektrycznego Audi RS e-tron GT, a także ocena odporności wyniku na zmiany cen nośników energii.

Analizę przeprowadzono w ośmioletnim horyzoncie czasowym przy stopie dyskontowej 4%, z wykorzystaniem metody zaktualizowanej wartości netto (NPV). Uwzględniono cenę zakupu, koszty zasilania wynikające z profilu eksploatacji (rocznie 22 000 km, w tym 65% w mieście i 35% w trasie), koszty serwisu i ubezpieczenia oraz wartość rezydualną pojazdów. Dla pojazdu elektrycznego założono wyłącznie ładowanie domowe, a koszt infrastruktury włączono do nakładów początkowych. Model rozszerzono o analizę wrażliwości, obejmującą scenariusze skrajnie korzystne i niekorzystne dla każdego z napędów, a także o wyznaczenie punktu zrównania kosztów (break-even).

W scenariuszu bazowym NPV kosztów wyniósł około 923 tys. zł dla samochodu spalinowego i 729 tys. zł dla elektrycznego, co daje przewagę EV rzędu 194 tys. zł. W scenariuszach alternatywnych przewaga ta zmieniała się w przedziale od 172 do 197 tys. zł, a zrównanie kosztów wymagałoby rocznego wzrostu cen energii elektrycznej o ok. 52% przez osiem lat. Wyniki wskazują, że korzyść ekonomiczna pojazdu elektrycznego ma charakter strukturalny, a nie koniunkturalny. Wynika ona przede wszystkim z różnicy w kosztach zasilania oraz niższych kosztów serwisowych, które przewyższają wyższą utratę wartości EV. Uczestnicy konferencji zapoznają się z prostą, powtarzalną metodyką porównywania napędów, którą można zastosować do własnych decyzji inwestycyjnych, a także z ograniczeniami przyjętych założeń.

3.7 Konstrukcja kompaktowego sensora metanu przeznaczonego do zastosowania na bezzałogowych statkach powietrznych.

Autor: Urszula Kasprzyk
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: Jakub Bartyzel
Typ projektu: Aplikacyjny

Metan jest jednym z najważniejszych gazów cieplarnianych, a jego potencjał cieplarniany jest znacznie wyższy niż w przypadku dwutlenku węgla. Cząsteczki tego gazu skutecznie pochłaniają promieniowanie podczerwone, zatrzymując ciepło w atmosferze. W skali 100 lat potencjał globalnego ocieplenia metanu jest prawie 30 razy większy niż dwutlenku węgla, natomiast w horyzoncie 20-letnim - aż 82,5 razy większy. Podczas gdy dwutlenek węgla utrzymuje się w atmosferze przez tysiąclecia, czas półtrwania metanu wynosi zaledwie 10 - 12 lat. Z tego powodu szybkie ograniczenie jego emisji ma kluczowe znaczenie w walce z globalnym ociepleniem.

Zanim jednak podejmiemy działania zmierzające do redukcji emisji, musimy dokładnie zlokalizować jej źródła. Obecnie najczęściej stosuje się w tym celu analizatory gazów oparte na laserowej spektroskopii absorpcyjnej w komorze optycznej o wysokiej rozdzielczości. Czujniki te charakteryzują się bardzo wysoką dokładnością, jednak ich wadą są znaczne gabaryty oraz wysoka cena. Zrealizowany projekt polega na zaprojektowaniu autorskiej, kompaktowej płytki PCB, w której jako element pomiarowy wykorzystano czujnik półprzewodnikowy. W trakcie wystąpienia zostaną omówione następujące zagadnienia: idea stojąca za projektem, zalety i ograniczenia opracowanego układu pomiarowego oraz potencjalne obszary jego zastosowania.

Konstrukcja taniego ale wydajnego sensora jest istotna pod kątem środowiskowych badań gazów cieplarnianych. Takie rozwiązanie poszerzy dostępność tego typu czujników, zapewniając alternatywę dla dużych czujników optycznych.

Sekcja tematyczna 4

Matematyczno-informatyczna

4.1 Aplikacja do rozpoznawania i monitorowania chorób skóry

Autorzy: Natalia Poźniak, Patryk Mikos, Adam Czakon, Hubert Wierzbicki, Maria Pichór
Koło naukowe: Glider
Opiekun projektu: Paulina Gacek
Typ projektu: Aplikacyjny

Wstęp. Choroby skóry stanowią rosnący problem zdrowotny, a liczba zachorowań na nowotwory skóry w Polsce w ostatnich dwóch dekadach wzrosła niemal dwukrotnie. Ograniczony dostęp do specjalistów oraz bagatelizowanie wczesnych objawów opóźniają diagnozę. Wykorzystanie algorytmów sztucznej inteligencji stwarza możliwość szerokiego udostępnienia wstępnej analizy diagnostycznej oraz profilaktyki.

Cel pracy. Celem projektu było stworzenie kompleksowego systemu mobilno-serwerowego, wspomagającego użytkowników w domowym monitorowaniu stanu skóry oraz dostarczającego dermatologom uporządkowaną historię zmian wspartą analizą AI.

Materiały i metody. System zaprojektowano w architekturze klient-serwer. Frontend stanowi aplikacja na system Android. Backend oparto na frameworku Spring Boot oraz bazie Supabase. Zastosowano trzy wyspecjalizowane modele AI: klasyfikację chorób skóry, monitorowanie znamion w czasie z obiektem referencyjnym na mapie ciała oraz ocenę nasilenia trądziku. Aplikacja zawiera również ankietowe testy fototypu skóry i szacowania ryzyka raka skóry.

Wyniki. Opracowano działający prototyp aplikacji. Testy potwierdziły wysoką skuteczność zaimplementowanych modeli AI.

Wnioski: "Aplikacja do rozpoznawania i monitorowania chorób skóry" to wartościowe narzędzie, które nie zastępuje lekarza, ale motywuje pacjentów do szybszej konsultacji i dostarcza obiektywnych danych do leczenia.

4.2 Koszt niepełnej wiedzy: rola porządku etykiet w uczeniu sieci neuronowych

Autor: Piotr Kacprzak
Koło naukowe: Bit
Opiekun projektu: -
Typ projektu: Teoretyczny

Standardowa klasyfikacja z entropią krzyżową traktuje uporządkowane etykiety jako odrębne kategorie, pozostawiając odkrycie ich struktury modelowi. W pracy badany jest wpływ jawnego uwzględnienia porządku etykiet na jakość predykcji i zapotrzebowanie na dane treningowe. Analiza obejmuje klasyfikację, regresję kwantylową i metody porządkowe na danych syntetycznych, szeregach czasowych oraz zdjęciach twarzy. Uwzględniono różne liczebności zbiorów treningowych i liczby przedziałów reprezentujących odpowiedź. Eksperymenty kontrolne oddzielają wpływ porządku od wygładzania etykiet i konstrukcji modelu. Wstępne wyniki pokazują korzyści zarówno przy ograniczonych, jak i pełnych zbiorach treningowych. W jednym z eksperymentów metoda porządkowa zmniejsza średni błąd bezwzględny względem entropii krzyżowej o 17,9% przy wykorzystaniu 10% danych i o 4,0% przy pełnym zbiorze. Skala poprawy zależy od metody, zadania i miary jakości. Wyniki wskazują, w jakich warunkach uwzględnienie struktury odpowiedzi może przynieść przewagę.

4.3 Optymalizacja wydajności i skalowalności obliczania deskryptorów molekularnych Mordred

Autorzy: Aleksander Jóźwik, Dariusz Marecik
Koło naukowe: Bit
Opiekun projektu: Wojciech Czech
Typ projektu: Aplikacyjny

Wstęp. Chemoinformatyka wykorzystuje algorytmy i uczenie maszynowe do analizy związków chemicznych, np. w *virtual screeningu*, gdzie model wybiera kandydatów na leki, zanim trafią do laboratorium. Cząsteczka jest grafem z atrybutami (atomy to wierzchołki, wiązania to krawędzie), jednak w naszych benchmarkach modele neuronowe, w tym grafowe (GNN), w większości nie dawały istotnej przewagi nad *fingerprintami* molekularnymi [6, 10], czyli wektorami cech z deterministycznych algorytmów dla klasycznych modeli, np. lasu losowego. Popularny *fingerprint* ECFP [7] haszuje otoczenia atomów do wektora o stałej długości, więc trudno ustalić, która struktura wpłynęła na predykcję. Łatwiej interpretować deskryptory fizykochemiczne i topologiczne, ale ich najpełniejsze zestawy (Dragon, alvaDesc) są komercyjne. Otwartym odpowiednikiem jest Mordred [1]: 1613 deskryptorów 2D i 213 deskryptorów 3D. Miał najlepszy średni ROC-AUC na zbiorze toksyczności Tox21 [5], a jego deskryptory 2D posłużyły jako cele pretreningu *foundation modelu* CheMeleon [3] na ok. 1 mln cząsteczek z PubChem. **Motywacja.** Mordred powstał jako interaktywny kalkulator dla chemików i od 2019 r. nie jest rozwijany. Każdy deskryptor liczy osobno przez rekurencyjny graf zależności z pamięcią podręczną, więc wspólne etapy obliczeń są słabo współdzielone. W trybie równoległym każdy proces buduje własny kalkulator ze wszystkimi deskryptorami, a procesy wymieniają dużo zbędnych danych. Kolejnym krokiem byłby pretrening następcy CheMeleona na zbiorze MolPILE [4] (222 mln cząsteczek), ale przy przepustowości oryginału (53 cząst./s na 96 procesach) samo liczenie deskryptorów trwałoby ok. 7 tygodni.

Cel. Przepisanie Mordreda w bibliotece scikit-fingerprints [2] tak, aby zwracał te same deskryptory, liczył je wielokrotnie szybciej i skalował się z liczbą rdzeni. Kod powinien pozostać w Pythonie, korzystać z istniejącego stosu (NumPy, SciPy, RDKit, joblib) i jawnie pokazywać każdy etap obliczeń.

Materiały i metody. Kalkulator przetwarza cząsteczkę jak *fingerprint*: raz wylicza dane pośrednie (właściwości atomów, macierze odległości, rozkłady własne, podgrafy) i przekazuje je jawnie do 42 modułów deskryptorów. Pętle Pythona zastąpiliśmy operacjami tablicowymi NumPy. Na przykład 606 deskryptorów autokorelacji liczymy jako formy kwadratowe $p^{\mathrm{T}} M_{\mathrm{d}} p$ dla wszystkich właściwości atomów naraz, a deskryptory Walk Count z jednego rozkładu własnego macierzy sąsiedztwa zamiast z kolejnych potęg macierzy. Spójne podgrafy do 7 wiązań (m.in. dla deskryptorów Chi) oryginał wyszukiwał osobno dla każdego rzędu i klasyfikował w pętli Pythona. My wyliczamy je raz algorytmem ESU [8], który generuje każdy podgraf dokładnie jeden raz, i klasyfikujemy wektorowo. Detour Matrix zawiera najdłuższe ścieżki proste między parami atomów, a ich wyznaczanie jest w ogólności NP-trudne. Oryginał dzieli graf algorytmem Hopcrofta-Tarjana na składowe dwuspójne i w każdej przeszukuje DFS ścieżki z każdego wierzchołka. My zaczynamy od macierzy odległości i poprawiamy tylko pary przechodzące przez układy pierścieni. W pojedynczym pierścieniu najdłuższa ścieżka między dwoma atomami biegnie po prostu dłuższą stroną pierścienia, więc DFS zostaje tylko dla pierścieni skondensowanych. Gdzie istnieje implementacja w C++, korzystamy z niej (RDKit, FreeSASA). Zmieniliśmy też sposób zrównoleglenia. Oryginał przygotowuje każdą cząsteczkę w procesie głównym i wysyła ją jako osobne zadanie. My wykorzystujemy to, że problem jest *embarrassingly parallel*, i rozdzielamy całe paczki cząsteczek między procesy, które liczą je od początku do końca i nie współdzielą stanu. Kody 1719 deskryptorów zastąpiliśmy opisowymi nazwami z literatury, co ma ułatwić interpretację modeli. Zgodność z oryginałem sprawdza ponad 3800 testów. Poprawiliśmy też błędny w oryginale wzór LogEE. Wydajność mierzyliśmy na serwerze KN BIT, używając zbiorów MoleculeNet [9], ExpansionRx- OpenADMET, MolPILE i peptydów, czyli małych i dużych cząsteczek.

Wyniki. Na jednym rdzeniu nasza implementacja jest średnio 7,5x szybsza na MoleculeNet, 7,6x na ExpansionRx - OpenADMET i 11,2x na peptydach, a zysk rośnie z rozmiarem cząsteczki: od 5,6x dla najmniejszych do 13,9x dla największych. Szybsza jest też każda rodzina deskryptorów liczona osobno (Tabela 1). Od 1 do 64 procesów przepustowość rośnie 32x dla cząsteczek lekopodobnych i 27x dla peptydów. Oryginał skaluje się na cząsteczkach lekopodobnych tylko 5,2x (na peptydach 34x), co wskazuje na narzut komunikacji przy krótkich zadaniach. Przy 64 procesach nasza wersja jest 51,4x szybsza. Na 96 procesach liczymy 2485 cząst./s wobec 53 dla oryginału, więcej niż każdy z 24 porównanych modeli neuronowych, także uruchamianych na GPU. Milion cząsteczek z MolPILE przeliczamy w 4,5 min (ok. 3800 cząst./s), więc cały zbiór zajmie ok. 16 h. **Tabela 1.** Czas obliczeń wybranych rodzin deskryptorów liczonych osobno, zbiór BACE (1513 cząsteczek), pojedynczy proces.

Rodzina deskryptorów	Oryginał	Nasz	Przysp.	Rodzina deskryptorów	Oryginał	Nasz	Przysp.
Extended Topochemical Atom	24,75 s	2,65 s	9,3x	Barysz Matrix	19,76 s	4,01 s	4,9x
Molecular Distance Edge	9,75 s	1,35 s	7,2x	Chi	49,47 s	10,13 s	4,9x
Autocorrelation	17,11 s	2,61 s	6,6x	Path Count	35,36 s	9,42 s	3,8x
EState	18,18 s	3,53 s	5,1x	Detour Matrix	5,98 s	2,03 s	3,0x

Wnioski. Bez przepisywania kodu do języka niskiego poziomu przyspieszyliśmy Mordreda średnio 7,5-11,2x na jednym rdzeniu i do 51x przy 64 procesach, przy zgodnych wynikach. Policzenie deskryptorów dla MolPILE skraca się z tygodni do godzin, więc przestaje ograniczać pretrening następcy CheMeleona na pełnym zbiorze. Nowa implementacja zostanie domyślną w scikit-fingerprints.

Bibliografia: [1] H. Moriwaki et al., J. Cheminform. 2018, 10, 4. [2] J. Adamczyk, P. Ludynia, SoftwareX 2024, 28, 101944. [3] J. W. Burns et al., arXiv:2506.15792, 2025. [4] J. Adamczyk et al., arXiv:2509.18353, 2025. [5] M. Gray, L. Wu, Chem. Res. Toxicol. 2025, 38, 2061-2070. [6] M. Praski, J. Adamczyk, W. Czech, arXiv:2508.06199, 2025. [7] D. Rogers, M. Hahn, J. Chem. Inf. Model. 2010, 50, 742-754. [8] S. Wernicke, IEEE/ACM Trans. Comput. Biol. Bioinform. 2006, 3, 347-359. [9] Z. Wu et al., Chem. Sci. 2018, 9, 513-530. [10] J. Adamczyk, P. Ludynia, W. Czech, arXiv:2501.17901, 2025.

4.4 MolPILE - large-scale, diverse dataset for molecular representation learning

Autorzy: Franciszek Job, Jakub Adamczyk
Koło naukowe: Bit / Machine Learning and Chemoinformatics Lab
Opiekun projektu: Wojciech Czech
Typ projektu: Aplikacyjny

The size, diversity, and quality of pretraining datasets critically determine the generalization ability of foundation models. Despite their growing importance in chemoinformatics, the effectiveness of molecular representation learning has been hindered by limitations in existing small molecule datasets. To address this gap, we present MolPILE, large-scale, diverse, and rigorously curated collection of 253 million compounds, constructed from 6 large-scale databases using an automated curation pipeline. We present a comprehensive analysis of current pretraining datasets, highlighting considerable shortcomings for training ML models, and demonstrate how retraining existing models on MolPILE yields improvements in generalization performance. This work provides a standardized resource for model training, addressing the pressing need for an ImageNet-like dataset in molecular chemistry.

4.5 Platforma do benchmarkingu metod ligand-based virtual screening

Autorzy: Maciej Nowakowski, Kacper Szot
Koło naukowe: Bit
Opiekun projektu: Wojciech Czech
Typ projektu: Aplikacyjny

Wprowadzenie. Odkrywanie leków jest kosztowne, dlatego związki odsiewa się najpierw komputerowo. Jedną z kluczowych metod jest ligand-based virtual screening (LBVS). Stosuje się go, gdy struktura białka docelowego jest nieznana, ale dostępne są znane ligandy. Cząsteczkę opisuje się wektorem cech (fingerprint), a model uczenia maszynowego szereguje kandydatów według przewidywanej aktywności. Do badań laboratoryjnych trafia tylko początek tego rankingu.

Dlaczego to trudne? Typowa ewaluacja metod LBVS zawyża ich skuteczność z trzech powodów. Po pierwsze, wiele publicznych benchmarków jest zbyt łatwych: nawet klasyfikator 1-NN osiąga na nich AUROC bliskie 1. Po drugie, losowy podział danych często umieszcza w zbiorze testowym bliskie analogi cząsteczek treningowych, co zawyża wynik i nie sprawdza, czy model znajduje nowe klasy związków. Po trzecie, AUROC ocenia cały ranking, choć w praktyce liczą się tylko pierwsze pozycje.

Cel. Stworzenie otwartej platformy w Pythonie, która ujednolica benchmarking metod LBVS, oraz weryfikacja hipotezy, że trudniejsze podziały danych wyraźnie obniżają ich wyniki.

Materiały i metody. Platformę zbudowano na bibliotece scikit-fingerprints, z API zgodnym ze scikit-learn. Zebrano pięć publicznych benchmarków (DUD-AD, DEKOIS, LIT-PCBA, MUV, WelQrate). Z DUD-AD i DEKOIS odrzucono targety, dla których 1-NN osiąga AUROC $\geqslant 0{,}9$. Zaimplementowano dwa podziały: MaxMin, który maksymalizuje różnorodność zbioru testowego, oraz AVE, który minimalizuje część wyniku pochodzącą z samego podobieństwa do zbioru treningowego. Dodano też metryki wczesnego rozpoznania: BEDROC i Enrichment Factor. Wpływ podziału zbadano, porównując podział losowy, MaxMin i AVE dla dziesięciu fingerprintów

i różnych algorytmów, od wyszukiwania podobieństwa po gradient boosting.

Wyniki. Powstała platforma LBVSLitmus, dostępna na PyPI na licencji MIT. Dowolny model zgodny ze scikit-learn można w niej ocenić w kilku linijkach kodu, na gotowych zbiorach hostowanych na HuggingFace. W DUD-AD i DEKOIS filtrowanie odrzuciło od 30% do prawie połowy targetów: zostało odpowiednio 53 ze 102 i 57 z 81. Porównanie podziałów pokazało, że na wszystkich pięciu benchmarkach podział losowy daje najwyższe wyniki, a AVE najniższe. Na DEKOIS średni AUROC spada z 0,94 do 0,74, a BEDROC z 0,80 do 0,35. Różnica między podziałami jest więc największa tam, gdzie liczy się w praktyce, czyli na początku rankingu.

Wnioski. Ocena na niefiltrowanych zbiorach, z podziałem losowym i samym AUROC, daje zbyt optymistyczny obraz metod LBVS. LBVSLitmus pozwala porównywać nowe metody w jednakowych warunkach: na przefiltrowanych zbiorach, z podziałem AVE lub MaxMin i metryką wczesnego rozpoznania.

4.6 Zastosowanie metod informatycznych w analizie danych z obrazowania spektrometrią mas (MSI)

Autor: Marta Haratyk
Koło naukowe: Artificial Intelligence in Medicine
Opiekun projektu: Zbisław Tabor
Typ projektu: Aplikacyjny

Celem projektu jest opracowanie pipeline'u informatycznego wspierającego analizę danych MALDI-MSI tkanki mózgowej szczura we współpracy z jednym z laboratoriów AGH. Dane są eksportowane jako para plików imzML i ibd: pierwszy zawiera metadane oraz współrzędne pikseli, drugi przechowuje widma. Pipeline przetwarza widma z użyciem korekcji tła Top-Hat i normalizacji TIC oraz algorytmu Orthogonal Matching Pursuit (OMP), wykorzystywanego do selekcji pików m/z. Następnie metodą K-means grupuje piksele na podstawie cech widmowych, umożliwiając wyodrębnienie zróżnicowanych przestrzennie obszarów. Algorytm Demons rejestruje tkanki względem obszaru referencyjnego. Po dopasowaniu analizowane są zgodność masek oraz różnice intensywności i sygnałów m/z. Wyniki segmentacji i porównań prezentowane są w interaktywnym interfejsie Streamlit. Pipeline wspiera eksploracyjną analizę MSI, a uzyskane zależności wymagają dalszej walidacji biologicznej. Projekt pokazuje jak połączyć selekcję pików, klasteryzację i rejestrację obrazów w praktycznym narzędziu do eksploracyjnej analizy danych MALDI-MSI.

4.7 Automated structural classification of molecules with ChEBI ontology using deep learning

Autorzy: Jakub Adamczyk, Adam Staniszewski
Koło naukowe: Bit
Opiekun projektu: Aleksander Byrski
Typ projektu: Aplikacyjny

Introduction. ChEBI (Chemical Entities of Biological Interest) [1, 2] is a curated chemical ontology that places molecules in a hierarchy of structural classes, from broad ones such as *organic heterocyclic compound* or *carbocyclic compound* to specific ones such as *monocarboxylic acid*, *dipeptide*, *lactam*, *sulfonamide* or *purine alkaloid*. For example, caffeine is a purine alkaloid, and the drug ethoxzolamide is both a sulfonamide and a benzothiazole. Such annotations let chemists query collections by chemistry rather than by exact structure ("all dipeptides", "all organic salts"). They are used to, e.g., organize compound libraries, annotate metabolites and natural products, and perform class enrichment analysis of compound sets. However, manual annotation of modern compound databases like PubChem (¿100 million compounds) is impossible.

Why is this difficult? ChEBI classes are defined as chemists understand them, not by exact substructures. Many definitions are partly conventional: the border between *peptide* and *protein*, or the scope of *lipid*, is arguable and not exact. Classes overlap, a molecule usually belongs to dozens of them at different levels of the hierarchy, and similar molecules are sometimes annotated at different levels of detail. As such, an expert system based on deterministic structural checks is not sufficient for ChEBI, sufficing only for minority of classes (e.g. a *salt* must consist of at least two separate components). We therefore rely on AI and deep neural networks to learn from examples annotated by chemists in ChEBI database.

Aim. To build an automated system that assigns ChEBI structural classes to any molecule, with chemically valid and hierarchy-consistent output, and to make it substantially more accurate than Chebifier [3], the current state-of-the-art ChEBI classifier.

Materials and methods. Molecules are given to the system as SMILES [6], a standard text notation for small molecules. For example, CC(C)Cc1ccc(cc1)C(C)C(=O)O represents ibuprofen, which belongs to the ChEBI classes monocarboxylic acid and organic molecule, among others. We extracted all ChEBI structural classes with at least 50 member molecules (961 classes, about 180,000 molecules) and split them into training (85%), validation (5%) and test (10%) sets with similar class proportions. Test molecules are never seen in training, mimicking new compounds. The system has three modules. (1) A **deep learning classifier** extracts features from SMILES using chemical language models (CDDD, ChemBERTa, Chemformer, MolBERT, MoLFormer, ChemFM) pretrained on millions of unlabelled molecules. Because most classes are rare, we used loss functions that give more weight to rare classes and the hierarchy (hinge, focal [7], asymmetric [8], MCLoss [9]). (2) A **calibration module** makes predicted probabilities consistent with the hierarchy: a molecule assigned to organic heterocyclic compound also receives heterocyclic compound and cyclic compound. (3) A **chemistry expert module** applies deterministic rules; for example, a single connected structure cannot be a salt, which also excludes organic salt and all its subclasses. Quality was measured by macro F1-score, which combines how many assigned labels are correct and how many true labels are found, averaged over all classes so that rare, specific classes count as much as common ones.

Results. The full system reached 78.7% macro F1, compared with 61.5% for Chebifier, i.e. +17.2 p.p. Six of eight model variants surpassed Chebifier (Table 1). Training objectives suited to rare classes improved models by up to 27 points, and our system guarantees chemically valid results and predicted class hierarchy.

Table 1. Test macro F1 (%): language model alone (Base), full system with all three modules (Full) and difference from Chebifier.

Model	Base	Full	vs Chebifier	Model	Base	Full	vs Chebifier
Chebifier [3] (ref.)	61.5	61.5	-	Chemformer (base)	73.2	74.2	+12.7
ChemBERTa-77M-MLM	50.6	70.0	+8.5	MoLFormer	72.0	74.2	+12.7
ChemBERTa-77M-MTR	45.5	71.1	+9.6	Chemformer (large)	75.5	76.2	+14.7
MolBERT	70.2	72.9	+11.4	**ChemFM (1B)**	**78.7**	**78.7**	**+17.2**
CDDD	69.9	74.2	+12.7				

Conclusions. Combining a deep learning model with hierarchy-aware calibration and explicit chemical rules gives an accurate, chemically consistent ChEBI classifier that clearly outperforms Chebifier. It annotates entire compound collections automatically, allowing chemists to browse, filter and compare large libraries, metabolomics results or screening data by meaningful structural classes, and can support curators in extending ChEBI. Future work includes extending this system, e.g. for natural language queries with LLMs.

References

[1] K. Degtyarenko et al., Nucleic Acids Res. 2008, 36, D344-D350. [2] J. Hastings et al., Nucleic Acids Res. 2016, 44, D1214-D1219. [3] M. Glauer et al., Chebifier: automating semantic classification in ChEBI to accelerate data-driven discovery, Digital Discovery 2024, 3, 896-907. [4] S. Kim et al., Nucleic Acids Res. 2023, 51, D1373-D1380. [5] Y. Djoumbou Feunang et al., J. Cheminform. 2016, 8, 61. [6] D. Weininger, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 1988, 28, 31-36. [7] T.-Y. Lin et al., Proc. IEEE ICCV 2017, 2980-2988. [8] E. Ben-Baruch et al., Proc. IEEE/CVF ICCV 2021, 82-91. [9] E. Giunchiglia, T. Lukasiewicz, Adv. Neural Inf. Process. Syst. 2020, 33, 9662-9673.

4.8 Automatyczna segmentacja zębów w obrazach CBCT z wykorzystaniem lekkich modeli uczenia głębokiego i inferencji CPU

Autor: Paweł Fornagiel
Koło naukowe: Bit
Opiekun projektu: Andrzej Brodzicki
Typ projektu: Aplikacyjny

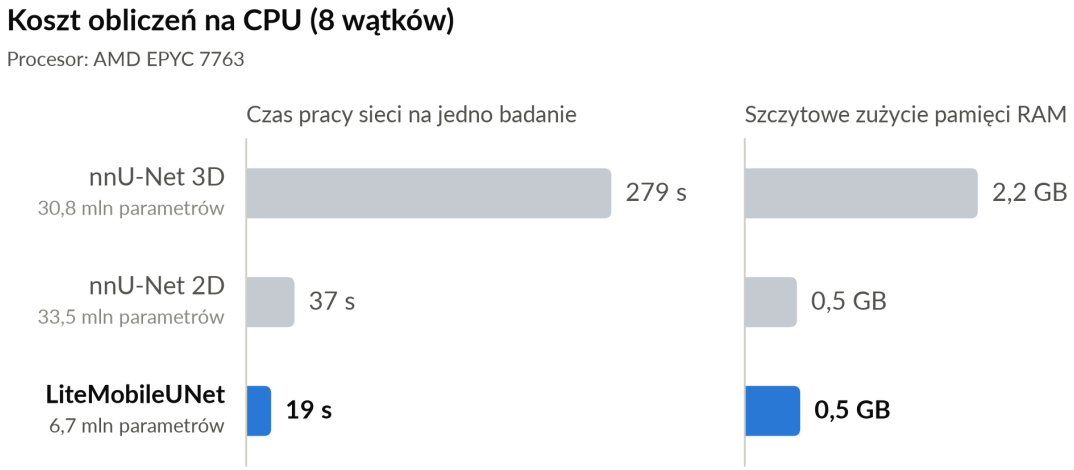
Jednym z wyzwań związanych z wdrażaniem w praktyce klinicznej metod automatycznej segmentacji poszczególnych zębów w obrazach tomografii stożkowej (CBCT) pozostaje ich zapotrzebowanie na zasoby obliczeniowe.

Celem pracy było opracowanie modelu głębokiego umożliwiającego segmentację 32 zębów na standardowej jednostce obliczeniowej, bez wykorzystania dedykowanego układu GPU i bez przesyłania danych pacjentów do zewnętrznych serwerów.

W ramach pracy przeanalizowano dostępne podejścia do segmentacji obrazów wolumetrycznych tomografii pod kątem jakości segmentacji oraz kosztu inferencji na CPU. Opracowany model wykorzystuje podejście 2.5D, w którym dwuwymiarowa sieć konwolucyjna oparta na lekkich blokach MobileNet wykorzystuje sąsiednie przekroje wolumenu jako dodatkową informację wejściową. Model trenowano i oceniano na publicznym zbiorze ToothFairy3.

Model osiągnął średni współczynnik Dice równy 0.83 na zbiorze testowym oraz 0.90 na niezależnym zbiorze DentVoxel. Czas pracy sieci dla pojedynczego badania wyniósł około 20 sekund przy wykorzystaniu ośmiu wątków CPU, w porównaniu z około 280 sekundami dla referencyjnej sieci 3D w tych samych warunkach. Model o rozmiarze 25 MB został zintegrowany z rozwijaną aplikacją ToothViz, w której cały proces analizy badania odbywa się lokalnie na komputerze użytkownika.

W referacie przedstawiony zostanie przegląd metod segmentacji obrazów medycznych, omówienie i uzasadnienie podejścia, architektura modelu oraz jego wdrożenie w aplikacji. Uzyskane wyniki wskazują, że podejście 2.5D pozwala uzyskać korzystny kompromis między jakością segmentacji a wydajnością obliczeniową, stanowiąc podstawę do integracji metod głębokiego uczenia z lokalnym oprogramowaniem stomatologicznym.



4.9 Wiedza o świecie zapisana w nazwach: analiza metod dla danych tabelarycznych, od ograniczeń modelu do embeddingów

Autor: Julia Rzymowska
Koło naukowe: Bit
Opiekun projektu: Szymon Rusiecki
Typ projektu: Teoretyczny

Wstęp. Dane tabelaryczne często zawierają kolumny tekstowe: nazwy produktów, modeli, osób czy miejsc. Najlepiej radzą sobie na nich drzewa gradientowe, np. XGBoost [1, 2], ale tekst traktują jak zbiór nic nieznaczących etykiet. Tymczasem nazwy niosą wiedzę o świecie: z samej nazwy*Lamborghini Huracán EVO* każdy wie, że jest to supersamochód, a*Fiat Panda*to auto miejskie. W pracy analizujemy trzy sposoby przekazania takiej wiedzy modelowi: (1) wiedzę ekspercką narzuconą modelowi jako ograniczenia treningu, (2) nowe cechy wyprowadzone z nazwy ręcznymi regułami oraz (3) cechy wyznaczane automatycznie z embeddingów modeli językowych. Wszystkie oceniamy tym samym protokołem eksperymentalnym.

Motywacja i cel pracy. Nie ma ustalonego schematu, jak wiedzę o świecie podać modelowi tabelarycznemu: czy ograniczać sposób, w jaki model korzysta z cech, czy dodawać nowe cechy, i czy da się to zrobić automatycznie. Ocena jest przy tym trudna. Poprawa wyników bywa pozorna, gdy w treningu są prawie identyczne wiersze, a kolejne podziały na trening i test współdzielą dane, więc zwykłe testy istotności są niewystarczające. Celem pracy jest systematyczne porównanie tych podejść w jednym, rygorystycznym protokole: co działa, co nie i dlaczego, oraz wskazanie kierunków dalszych badań.

Materiały i metody. Badamy zbiór ok. 1200 samochodów z zadaniem regresji prędkości maksymalnej. *Ograniczenia:*wiedzę ekspercką (które cechy są ważne i które mogą ze sobą współdziałać) wymuszaliśmy na

modelu w trakcie treningu, m.in. wagami cech, ograniczeniami interakcji i osobnymi modelami dla podzbiorów danych. Kontrolą był losowy „ekspert" o tej samej strukturze.*Ręczne cechy:*nowe cechy wyznaczone regułami na podstawie nazwy (np. typ nadwozia).*Cechy automatyczne*:model językowy wskazuje, które kolumny tekstowe niosą wiedzę; zamieniamy je na embeddingi, a z nich wyprowadzamy nowe cechy, np. przynależność do klastra.*Protokół:*warianty różnią się wyłącznie cechami lub ograniczeniami i oceniamy je na wielu podziałach grupowych, tak aby prawie identyczne wiersze nie trafiały jednocześnie do treningu i testu. Wariant musi wygrać z modelem bazowym i z kontrolą losową, a istotność liczymy testem uwzględniającym zależność między podziałami [3].

Wyniki. Żaden mechanizm ograniczający nie pobił modelu bazowego; najlepszy (osobne modele dla podzbiorów danych) był od niego statystycznie nierozróżnialny. Losowy „ekspert" o tej samej strukturze nie różnił się istotnie od przemyślanego: koszt zależał głównie od tego, ile interakcji blokowały ograniczenia, a nie od treści wiedzy. Wyraźną poprawę dała natomiast ręczna cecha z nazwy. Sam sposób podziału danych zmienia obraz: podział losowy zawyża jakość nawet modelu bazowego.

Wnioski. Wiedza pomaga, gdy dodaje modelowi informację, a nie gdy go ogranicza. Uwagę zwracają modele routujące, które kierują każdy obiekt do osobnego modelu dla jego grupy: przy grupach o znaczeniu dziedzinowym (typ nadwozia) wypadały znacznie lepiej niż przy losowych grupach tej samej wielkości, co wskazuje, że zależności między cechami różnią się między grupami. Automatyczne zastąpienie ręcznych reguł nie ma prostej odpowiedzi. Kolejnym etapem jest implementacja automatycznego pipeline'u (klasyfikacja kolumn → embedding → klastry → XGBoost) i jego ocena w tym samym protokole, z kontrolą losową od pierwszego przebiegu. Następnie rozszerzymy go o inne modele klasyfikujące kolumny, miękkie przypisania do klastrów, ciągłe składowe embeddingu oraz porównanie z kodowaniem samej pisowni, które oddzieli wiedzę od podobieństwa napisów.

Bibliografia.[1] T. Chen, C. Guestrin, XGBoost: A Scalable Tree Boosting System, Proc. KDD 2016, 785–794. [2] L. Grinsztajn, E. Oyallon, G. Varoquaux, Why do tree-based models still outperform deep learning on typical tabular data?, NeurIPS 2022. [3] C. Nadeau, Y. Bengio, Inference for the Generalization Error, Machine Learning 2003, 52, 239–281.

4.10 Analiza przyrostu szumu i jego wpływu na dokładność numeryczną w algorytmie szyfrowania homomorficznego CKKS

Autor: Mateusz Żelasko
Koło naukowe: Cipher
Opiekun projektu: Piotr Chołda
Typ projektu: Teoretyczny

Szyfrowanie homomorficzne umożliwia wykonywanie operacji matematycznych bezpośrednio na zaszyfrowanych danych, pozwalając na poufne przetwarzanie danych w chmurze. Kryptosystem CKKS, dedykowany dla liczb rzeczywistyc, opiera się na obliczeniach przybliżonych i zarządzaniu szumem. Każda dozwolona operacja arytmetyczna generuje szum, którego niekontrolowany przyrost prowadzi do spadku dokładności, braku stabilności numerycznej, a w skrajnych przypadkach uniemożliwia deszyfrowanie. Celem pracy jest przegląd oraz ewaluacja strategii estymacji przyrostu szumu w kryptosystemie CKKS pod kątem ich wpływu na precyzję i stabilność zdeszyfrowanego wyniku. W badaniu uwzględniono zróżnicowanie architektur obwodów oraz specyfikacji danych wejściowych. Przeprowadzono eksperymenty z wykorzystaniem biblioteki Microsoft SEAL, podczas których analizowano tempo degradacji precyzji w zależności od głębokości obwodu, typów operacji oraz danych i porównywano z literaturowymi podejściami do estymacji. Uzyskane wyniki wskazują na znaczną różnicę w doborze wymaganych parametrów kryptograficznych pod konkretne zastosowanie, niezależnie od wybranego podejścia do estymacji. Sformułowane wnioski stanowią bazę do tworzenia podstawowych systemów homomorficznych, ułatwiając dopasowanie architektury systemu.

4.11 Use of deep learning in CR39 detector readout for dosimetry

Autor: Szymon Rybski
Koło naukowe: Bit
Opiekun projektu: Leszek Grzanka, Jeppe Brage Christensen
Typ projektu: Aplikacyjny

CR39 plastic detectors are commonly used in passive dosimeters in various facilities. One of the key steps in reading those detectors, when used for neutron dosimetry, is counting the holes formed by recoil protons knocked out by neutrons. Aim of our research is to develop novel approach to track counting, that can handle edge cases created by track overlaps. In our work we focused on using U-Net-based architecture to create intermediate representation instead of relying on a model to directly build the final segmentation of the tracks. Resulting output from the networks heads is composed of three representations. Based on those we were able to apply postprocessing that separates overlaps and filters out the artifacts. New approach was benchmarked against standard computer vision approaches and other deep learning-based segmentation methods using pre-labeled datasets, comparing track detection and separation achieved by every algorithm.

Comparison shows great improvement in segmentation of overlapping tracks, while maintaining good artifact discrimination. This is particularly meaningful for detectors irradiated with high dose (over 10mSv), as the overlaps become more common there. Those results show that choosing a different architecture and an intermediate representation improved the segmentation, by allowing us to keep more information that we utilized during post-processing.

4.12 Półgrupy (C_0) operatorów liniowych - podstawowe własności i zastosowanie do równania transportu

Autor: Patryk Osika
Koło naukowe: Matematyków
Opiekun projektu: -
Typ projektu: Popularnonaukowy

Celem referatu jest przedstawienie podstawowych zagadnień teorii półgrup operatorów liniowych (C_0)-półgrup działających w przestrzeniach Banacha. Omówione zostaną definicja (C_0)-półgrupy, jej podstawowe własności oraz pojęcie generatora infinitesymalnego. Szczególna uwaga zostanie poświęcona twierdzeniu Lumera–Phillipsa, które podaje warunki konieczne i wystarczające, aby operator był generatorem półgrupy kontrakcji, stanowiąc tym samym istotne narzędzie w badaniu zagadnień ewolucyjnych.

W części poświęconej zastosowaniom przedstawione zostanie równanie transportu

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \qquad u(0,x) = f(x).$$

Szczegółowo omówiona zostanie konstrukcja odpowiadającej mu półgrupy operatorów przesunięcia, identyfikacja jej generatora infinitesymalnego oraz wykorzystanie aparatu teorii półgrup do uzyskania rozwiązania zagadnienia początkowego. Przykład ten posłuży do zilustrowania związku pomiędzy abstrakcyjną teorią operatorów a równaniami różniczkowymi cząstkowymi.

4.13 Od zapętleń do zbieżności stanu: Jak ConsensusBench definiuje nowe metryki ewaluacji w architekturach MAS

Autor: Wojciech Żmuda
Koło naukowe: Glider
Opiekun projektu: Paulina Gacek
Typ projektu: Aplikacyjny

Branża AI przeszła od pojedynczych modeli do rozproszonej agentowości. Dziś budujemy agenty masowo – zarówno w dedykowanych frameworkach, jak i w postaci niezależnych, oddolnych narzędzi. Problem pojawia się jednak przy próbie łączenia ich w większą całość.

Integracja w skali makro obnaża fundamentalne słabości architektur Multi-Agent Systems (MAS). Zamiast sprawnie współpracować, systemy te często wpadają w kosztowne pętle, generują szum informacyjny i ulegają zjawisku konformizmu (sycophancy). Niestety, tradycyjne benchmarki badają tylko pojedyncze wywołania modeli, całkowicie ignorując złożoną dynamikę dochodzenia do konsensusu.

Lukę tę wypełnia ConsensusBench – pionierskie środowisko do ewaluacji frameworków MAS. Wykorzystując scenariusze z asymetrią informacji, projekt wprowadza trzy czytelne metryki zbieżności: Token Waste Ratio

(nadmiarowość komunikacji), Deadlock Rate (paraliż decyzyjny) oraz Sycophancy Index (odporność na kaskadowe halucynacje). Dzięki temu inżynierowie zyskują obiektywne dane niezbędne do debugowania procesów, optymalizacji kosztów inferencji i projektowania naprawdę odpornych architektur.

4.14 Efficient algorithms for Maximum Diversity Picking problem

Autorzy: Maciej Kmąk, Jakub Adamczyk
Koło naukowe: Bit
Opiekun projektu: Wojciech Czech
Typ projektu: Teoretyczny

Data scarcity is a common problem in machine learning. However, researchers often face the opposite situation, where processing the entire dataset is too expensive or even infeasible. In such cases, we need to select a smaller subset that still provides good coverage of the data. Random sampling is a simple solution, but it may select many similar elements and miss less common regions of the dataset. Maximum Diversity Picking (MDP) approaches this problem by selecting elements that are as different from one another as possible.

In this work, we focus on the MaxMin variant of MDP, which maximizes the minimum distance between any pair of elements in the selected subset. This is especially important in chemoinformatics, where reducing the number of candidate compounds can significantly reduce the cost of early drug discovery. The same idea can be applied to other areas of machine learning like coreset selection, active learning, duplicate removal, computer vision, recommendation systems, and natural language processing. We compare different MDP solvers on popular chemical datasets ranging from a few thousand elements to hundreds of millions of molecules. Since MaxMin MDP is an NP-hard problem, exact solutions are practical only for smaller problem instances. Therefore, our benchmark includes exact solvers for small datasets, as well as greedy algorithms and metaheuristics intended for large-scale problems. The developed library contains over a dozen solver implementations and provides the largest benchmark of MaxMin solvers under different dataset sizes, characteristics and computational budgets.

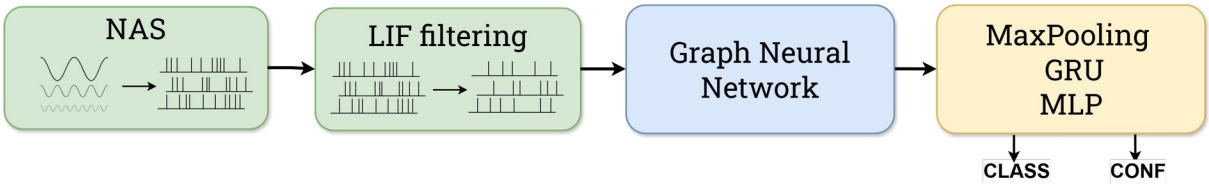
4.15 Kompletny system do wykrywania słów kluczowych w układzie FPGA z użyciem grafowych sieci konwolucyjnych i neuromorficznego sensora audio

Autor: Wiktor Matykiewicz
Koło naukowe: AGH Avader
Opiekun projektu: Tomasz Kryjak
Typ projektu: Aplikacyjny

Wstęp: Przetwarzanie dźwięku w czasie rzeczywistym w systemach wbudowanych stanowi wyzwanie, gdyż klasyczne metody ramkowe wprowadzają duże opóźnienia i narzut obliczeniowy. Alternatywą jest podejście zdarzeniowe, w którym neuromorficzny sensor audio (NAS) koduje zmiany akustyczne jako strumień zdarzeń, a grafowe sieci neuronowe (GNN) umożliwiają jego wydajną klasyfikację. **Cel pracy:** Celem pracy było zaprojektowanie oraz implementacja pierwszego kompletnego systemu wykrywania słów kluczowych (Keyword Spotting – KWS), integrującego sensor NAS oraz sieć GNN w pojedynczym układzie FPGA. **Materiały i metody:** System zaimplementowano w całości w logice programowalnej FPGA, bez udziału procesora (Rys. 1). Składa się on z trzech modułów: cyfrowego sensora NAS konwertującego nieprzetworzony sygnał audio na asynchroniczne zdarzenia, filtru LIF (Leaky Integrate-and-Fire) redukującego liczbę zdarzeń o 47% oraz akceleratora GNN. Akcelerator przetwarza dane zdarzenie po zdarzeniu (event- by-event) – każde nowe zdarzenie na bieżąco aktualizuje graf i jest od razu przetwarzane przez warstwy konwolucyjne, a klasyfikacja odbywa się co 10 ms.

Wyniki: Po 8-bitowej kwantyzacji układ osiągnął dokładność 87,43% na zbiorze Google Speech Commands v2, przy całkowitym opóźnieniu poniżej 35 μs oraz średnim poborze mocy 1,12 W.

Wnioski: Integracja sensora NAS z akceleratorem GNN w jednym układzie FPGA eliminuje klasyczne przetwarzanie wstępne sygnału, zapewniając wysoką skuteczność, minimalne opóźnienie i niskie zużycie energii w zastosowaniach robotyki mobilnej oraz IoT.



Rysunek 4.1: Schemat blokowy proponowanej architektury sprzętowej systemu.

4.16 Chaos Subjugator: A Neural Network for the Duffing Oscillator

Autor: Adam Franciszek Wojtowicz
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: -
Typ projektu: Aplikacyjny

The Duffing oscillator is a nonlinear differential equation modelling a driven and damped oscillator. Its solutions, which can exhibit deterministic chaos, are generally unobtainable analytically. In this work, a physics-informed neural network (PINN) is developed to approximate the solutions of the Duffing equation for a family of systems. Its inputs are the five oscillator parameters, the initial conditions (position and velocity) and time. The loss function combines a data term, based on numerical reference solutions, with the residual of the governing equation and a term enforcing the initial conditions. The network is evaluated with two metrics: the relative L2 error and the percentage of predicted positions within a given tolerance.

Sekcja tematyczna 5

Chemii, biofizyki i fizyki medycznej

5.1 Badanie wpływu modyfikacji składu na przełączalność w analogach błękitu pruskiego

Autor: Jan Malik
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: Magdalena Fitta
Typ projektu: Teoretyczny

interesowaniem badaczy. Analogi bł ekitu pruskiego stanowi a grup e materiałów mole- kularnych o unikalnych wła´sciwo´sciach magnetycznych i elektronowych. Szczególnie intere- suj ace s a układy RbMn[Fe(CN)6], które wykazuj a odwracalne zjawisko przeł aczania zwi azane z transferem elektronu pomi edzy centrami Fe i Mn. Efekt ten prowadzi do istotnych zmian wła´sciwo´sci magnetycznych materiału, czyni ac go obiecuj acym kandydatem do zastosowa´n w pami eciach molekularnych oraz materiałach funkcjonalnych.

W niniejszym projekcie zbadano wpływ cz e´sciowej substytucji kompleksów heksacyjano zela- zianowych przez kompleksy heksacyjanokobaltianowe oraz heksacyjanochromianowe w zwi az- kach o składzie RbMn[Fe(CN)6]1-x[M(CN)6]x, gdzie M = Co lub Cr, przy zachowaniu wyso- kiej zawarto´sci rubidu. Syntezowano serie próbek zawieraj acych domieszk e [Co(CN)6] oraz [Cr(CN)6] o st e zeniach 2,5%, 5% i 10% wzgl edem centrów [Fe(CN)6].

Głównym celem bada´n jest okre´slenie wpływu niewielkiej ilo´sci jonów kobaltu i chromu na zdolno´s´c materiałów do zachowania efektu przeł aczania oraz wyznaczenie granicy koncentracji domieszki, przy której wła´sciwo´sci te ulegaj a osłabieniu lub zanikaj a. Otrzymane próbki pod- dano charakterystyce strukturalnej oraz magnetycznej, a uzyskane wyniki porównano z mate- riałem niedomieszkowanym. Uzyskane rezultaty mog a przyczyni´c si e do lepszego zrozumienia mechanizmów odpowiedzialnych za przeł aczalno´s´c w analogach bł ekitu pruskiego oraz stano- wi´c podstaw e do projektowania nowych materiałów funkcjonalnych o kontrolowanych wła´sci- wo´sciach magnetycznych.

W trakcie bada´n zaobserwowano zjawisko przel aczalno´sci dla materiałów cz e´sciowo substy- towanych przez kompleksy heksacyjanochromianowe i heksacyjanokobaltianowe.

W projekcie wykorzystano nast epuj ace techniki pomiarowe: skaningow a mikroskopi e elektro- now a (SEM), magnetometri e z wykorzystaniem magnetometru typu MPMS XL7 oraz spektro- skopi e rentgenowsk a z dyspersj a energii (EDS).

5.2 Od nanomateriału do sensora: inteligentne nanoarchitektury do wykrywania cukrów

Autor: Jan Ciszek
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Anna Kusior
Typ projektu: Aplikacyjny

Monitorowanie stężenia cukrów, w szczególności glukozy, odgrywa kluczową rolę w diagnostyce i kontroli wielu schorzeń metabolicznych. W ostatnich latach rośnie zainteresowanie nieenzymatycznymi sensorami elektrochemicznymi, które dzięki wysokiej stabilności, prostocie konstrukcji oraz odporności na warunki środowiskowe stanowią atrakcyjną alternatywę dla klasycznych czujników enzymatycznych.

Celem pracy jest opracowanie nanostruktur opartych na tlenkach miedzi, modyfikowanych nanocząstkami złota i srebra, oraz ocena ich przydatności do wykrywania cukrów. Otrzymane materiały zostaną scharakteryzowane pod względem właściwości strukturalnych i morfologicznych, a następnie zastosowane jako aktywna warstwa nieenzymatycznego sensora elektrochemicznego.

Badania koncentrują się na określeniu kluczowych parametrów analitycznych czujnika, takich jak czułość, zakres liniowości odpowiedzi oraz selektywność wobec potencjalnych substancji interferujących. Dodatkowo przeprowadzona zostanie ocena stabilności i czasu pracy sensora w celu określenia jego długoterminowej użyteczności. Szczególną uwagę poświęcono wpływowi rodzaju metalu szlachetnego oraz właściwości powierzchniowych materiału na efektywność transportu ładunku i procesy elektrochemiczne zachodzące podczas detekcji glukozy.

Oczekuje się, że opracowane nanomateriały pozwolą uzyskać wysoką czułość, szeroki zakres liniowości oraz wysoką selektywność pomiarową. Uzyskane wyniki mogą przyczynić się do rozwoju nowej generacji stabilnych, szybkich i ekonomicznych nieenzymatycznych sensorów przeznaczonych do zastosowań biomedycznych oraz diagnostycznych.

5.3 Stymulacja polem elektrycznym jako metoda poprawy kiełkowania

Autor: Magdalena Sawczuk
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: Mikołaj Skowron
Typ projektu: Aplikacyjny

Starzenie się materiału siewnego prowadzi do stopniowego obniżenia jego żywotności i wigoru, co pogarsza proces kiełkowania. W poszukiwaniu metod przyjaznych środowisku coraz częściej bada się możliwość stymulowania procesów fizjologicznych roślin polem elektromagnetycznym. Celem pracy była ocena wpływu składowej elektrycznej tego pola na kiełkowanie ziarniaków pszenicy zwyczajnej (Triticum aestivum L.) z 2024 roku o obniżonej żywotności oraz wskazanie parametrów ekspozycji sprzyjających poprawie ich wigoru. Ziarniaki poddano działaniu pola o ujemnej polaryzacji i natężeniu ok. 4,5 kV/cm przez 15, 30 lub 60 minut. Zdolność kiełkowania oceniono według normy PN-R-65950:1994, a dynamikę procesu współczynnikiem Piepera i indeksem prędkości kiełkowania Maguire'a, porównując wyniki z próbą kontrolną. Stymulacja poprawiła wybrane parametry kiełkowania i wzrostu siewek, a najlepsze efekty uzyskano po 60 minutach ekspozycji. Uzyskane wyniki sugerują, że bezkontaktowa stymulacja polem elektrycznym może stanowić ekologiczną alternatywę dla chemicznych metod wspomagania nasion i wpisuje się w założenia rolnictwa precyzyjnego i zrównoważonego.

5.4 Inżynieria spineli kobaltowych: zależność pomiędzy rozmieszczeniem kationów, deformacją sieci krystalicznej a właściwościami powierzchniowymi

Autorzy: Victoria Groeger, Łukasz Cichoń
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Anna Kusior
Typ projektu: Aplikacyjny

Spinele kobaltowe należą do grupy materiałów funkcjonalnych o szerokim spektrum zastosowań, wynikającym z możliwości precyzyjnego kształtowania ich składu chemicznego, struktury krystalicznej oraz właściwości powierzchniowych. Szczególnie istotnym zagadnieniem jest wpływ rozmieszczenia kationów w sieci spinelowej na właściwości fizykochemiczne materiałów, co może determinować ich aktywność elektrochemiczną oraz przydatność w zastosowaniach sensorowych.

Celem niniejszych badań było zbadanie wpływu domieszkowania na strukturę i właściwości spineli kobaltowych ze szczególnym uwzględnieniem zmian w rozmieszczeniu kationów oraz deformacji sieci krystalicznej. Analizie poddane zostaną układy o strukturze spinelu normalnego, odwróconego oraz materiały wykazujące deformację Jahna-Tellera. Badania mają na celu określenie zależności pomiędzy składem chemicznym, stopniem uporządkowania kationów a właściwościami strukturalnymi i powierzchniowymi otrzymanych materiałów.

Dodatkowo przeprowadzono ocenę wpływu zastosowanego surfaktanta na przebieg procesu syntezy, kształtowanie morfologii oraz wielkość ziaren spineli kobaltowych. Szczególną uwagę poświęcono zależnościom pomiędzy

warunkami syntezy a rozwojem powierzchni właściwej oraz dostępnością centrów aktywnych, które odgrywają kluczową rolę w procesach elektrochemicznych.

Otrzymane materiały poddano charakterystyce jako warstwy receptorowe w elektrochemicznych sensorach kreatyniny. W ramach badań oceniono wpływ parametrów strukturalnych i powierzchniowych spineli na właściwości sensorowe, takie jak czułość, zakres liniowości, selektywność oraz stabilność odpowiedzi elektrochemicznej. Szczególne znaczenie będzie miało określenie relacji pomiędzy rozmieszczeniem kationów, deformacją sieci krystalicznej a efektywnością transferu ładunku podczas procesu detekcji analitu.

Uzyskane wyniki pozwolą na lepsze zrozumienie mechanizmów odpowiedzialnych za właściwości elektrochemiczne spineli kobaltowych oraz wskażą strategie projektowania materiałów o zoptymalizowanych parametrach sensorowych. Wiedza ta może przyczynić się do rozwoju nowoczesnych platform diagnostycznych przeznaczonych do oznaczania kreatyniny jako ważnego biomarkera funkcji nerek.

5.5 Inżynieria entropii na nanogranicy faz: heterozłącza nanorurek węglowych i wysokoentropowych tlenków do detekcji biomarkerów przewlekłej choroby nerek

Autor: Mateusz Czechowski
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Anna Kusior
Typ projektu: Aplikacyjny

Przewlekła choroba nerek (CKD, ang. Chronic Kidney Disease) stanowi istotny problem zdrowotny na świecie, a jej skuteczna diagnostyka wymaga opracowania czułych i selektywnych metod wykrywania biomarkerów. W ostatnich latach szczególne zainteresowanie wzbudzają nanomateriały o złożonym składzie chemicznym, które dzięki możliwości precyzyjnego kształtowania właściwości powierzchniowych mogą znaleźć zastosowanie w nowoczesnych biosensorach elektrochemicznych.

Celem pracy jest opracowanie i optymalizacja metody syntezy wysokoentropowych tlenków (HEO, High-Entropy Oxides) osadzanych na powierzchni nanorurek węglowych (CNT, Carbon Nanotubes) oraz ocena ich przydatności jako materiałów receptorowych do detekcji biomarkerów przewlekłej choroby nerek. Utworzenie heterozłącza CNT-HEO ma na celu połączenie wysokiej przewodności elektrycznej nanorurek węglowych z bogactwem centrów aktywnych oraz wyjątkową stabilnością charakterystyczną dla tlenków wysokoentropowych.

W ramach badań wykonano charakterystykę otrzymanych materiałów ze szczególnym uwzględnieniem morfologii, struktury krystalicznej oraz właściwości powierzchniowych. Następnie materiały wykorzystano jako warstwę aktywną elektrod przeznaczonych do elektrochemicznej detekcji wybranych biomarkerów CKD. Analizie poddano kluczowe parametry zastosowań sensorowych, takie jak czułość, zakres liniowości, granica wykrywalności, selektywność oraz stabilność sygnału.

Badania służą określeniu synergii wynikającej z połączenia nanorurek węglowych i wysokoentropowych tlenków, co umożliwi uzyskanie materiałów o korzystnym przewodnictwie elektrycznym oraz wysokiej aktywności elektrochemicznej. Uzyskane wyniki przyczynią się do lepszego zrozumienia wpływu struktury heterozłącza na właściwości sensorowe oraz mogą stanowić podstawę do rozwoju nowej generacji platform diagnostycznych przeznaczonych do szybkiego i czułego monitorowania biomarkerów przewlekłej choroby nerek.

5.6 Opracowanie i optymalizacja parametrów elektrochemicznej syntezy struktur metaloorganicznych (MOF)

Autor: Ewa Lewandowska
Koło naukowe: CarbON
Opiekun projektu: Jakub Szczurowski
Typ projektu: Teoretyczny

Struktury metaloorganiczne (MOF, Metal-Organic Frameworks) stanowią grupę krystalicznych materiałów porowatych charakteryzujących się rozwiniętą powierzchnią właściwą i kontrolowaną strukturą porów. Dzięki tym właściwościom znajdują zastosowanie m.in. w procesach adsorpcji i separacji gazów. Istotnym kierunkiem badań nad materiałami MOF jest rozwój alternatywnych metod ich syntezy, umożliwiających kontrolę procesu krystalizacji oraz właściwości fizykochemicznych otrzymywanych struktur. Celem pracy było opracowanie

i optymalizacja warunków elektrochemicznej syntezy materiału HKUST-1 poprzez określenie wpływu wybranych parametrów procesowych. Badania obejmowały ocenę wpływu rodzaju zastosowanego rozpuszczalnika, czasu syntezy oraz natężenia prądu elektrycznego na przebieg procesu i charakterystykę otrzymanego materiału. Syntezy przeprowadzono w różnych układach rozpuszczalników i przy zróżnicowanych wartościach natężenia prądu, a uzyskane próbki poddano analizie strukturalnej z wykorzystaniem dyfrakcji rentgenowskiej (XRD). Analiza wyników umożliwiła określenie wpływu zastosowanych parametrów syntezy na strukturę krystaliczną HKUST-1 oraz identyfikację warunków sprzyjających jego otrzymywaniu metodą elektrochemiczną.

5.7 Ilościowa ocena sygnału ROS w komórkach Sertolego eksponowanych na mikroplastiki z wykorzystaniem autorskiego narzędzia do analizy obrazów mikroskopowych

Autor: Zofia Bryłowska
Koło naukowe: Kerma
Opiekun projektu: Natalia Janik-Olchawa, Joanna Chwiej
Typ projektu: Aplikacyjny

Mikroplastiki stanowią powszechne zagrożenie środowiskowe, mogące wywoływać stres oksydacyjny oraz zaburzenia funkcjonowania komórek, takie jak uszkodzenia DNA czy zaburzenia integralności błon komórkowych. Szczególnie istotna z punktu widzenia zdrowia reprodukcyjnego jest ocena ich wpływu na komórki Sertolego, które odpowiadają za utrzymanie mikrośrodowiska jąder i prawidłowy przebieg spermatogenezy. Kluczowym wskaźnikiem stresu oksydacyjnego wywołanego ekspozycją na mikroplastiki jest poziom reaktywnych form tlenu (ROS), wykrywanych za pomocą barwienia fluorescencyjnego.

Celem pracy było opracowanie autorskiej aplikacji w środowisku MATLAB, służącej do ilościowej i półautomatycznej analizy sygnału ROS w komórkach Sertolego poddanych ekspozycji na mikroplastiki. Zastosowane narzędzie opiera się na regulowanych progach intensywności w wybranym kanale RGB, co umożliwia precyzyjną segmentację komórek. Program wspiera także jakościową ocenę przestrzennego rozkładu sygnału za pomocą map barwnych, wizualizację konturów oraz bezpośredni eksport danych do arkuszy MS Excel w celu przeprowadzenia dalszej analizy.

Dzięki intuicyjnemu interfejsowi aplikacja nie wymaga od użytkownika zaawansowanej znajomości programowania, znacznie usprawniając i standaryzując proces pomiarów fluorescencji oraz śledzenie zmian poziomu ROS w grupach eksperymentalnych. Opracowane narzędzie stanowi praktyczne, powtarzalne i wysoce użyteczne rozwiązanie w nowoczesnych badaniach nad toksycznym wpływem mikroplastików na komórki układu rozrodczego.

5.8 Elektroaktywne rusztowania hydrożelowe wspierające regenerację nerwów obwodowych

Autorzy: Urszula Klimczak, Maria Iwan
Koło naukowe: Nucleus
Opiekun projektu: Juliusz Leszczyński
Typ projektu: Aplikacyjny

Uszkodzenia nerwów obwodowych, wynikające m.in. z urazów komunikacyjnych, ran ciętych i powikłań chirurgicznych, prowadzą do utraty czucia i sprawności ruchowej. Przy większych ubytkach aksony rosną wolno i tracą kierunek wzrostu, a standardowe leczenie – autologiczny przeszczep nerwu – wymaga pobrania zdrowego nerwu z innego miejsca ciała i nie zawsze przywraca pełną funkcję. Alternatywą mogą zostać hydrożelowe rusztowania nerwowe, które kierują wzrost aksonów. Szczególnie obiecujące są hydrożele polisacharydowe: silnie uwodnione, o sztywności zbliżonej do tkanki nerwowej (0,1–10 kPa), które po dodaniu fazy przewodzącej mogą przenosić sygnały elektryczne i umożliwiać elektrostymulację przyspieszającą regenerację. Warunkiem ich zastosowania jest dobór sieciowania, które zachowa niską sztywność materiału, a jednocześnie zapewni stabilność w środowisku fizjologicznym przez okres wzrostu aksonów.

Celem pracy jest opracowanie i dostosowanie do warunków laboratorium procedur wytwarzania hydrożeli alginianowych, chitozanowych oraz ich hybryd z dodatkiem PEDOT:PSS oraz nanomateriałów węglowych

(CNT i rGO), dobór parametrów ich sieciowania oraz wstępna ocena stabilności w warunkach zbliżonych do fizjologicznych, jako podstawy do budowy przewodzącego rusztowania.

Hydrożele alginianowe (2-3% m/v) sieciowano jonowo roztworem $CaCl_2$, badając stabilność w zależności od użytych stężeń. Hydrożele chitozanowe (0,8-1,2% m/v) żelowano TPP lub NaOH rozc., dobierając stężenie środka sieciującego i pH. PEDOT:PSS i rGO wprowadzano w kilku seriach stężeniowych. Pęcznienie oceniano grawimetrycznie w PBS (pH 7,4) w punktach 0,5–8 h, a stabilność na podstawie utraty masy i zachowania kształtu. Wpływ dodatków na przewodność wstępnie oceniano porównawczo pomiarem dwuelektrodowym, a następnie opracowano metodę opartą o spersonalizowany układ pomiarowy.

Opracowano procedury wytwarzania i dobrano parametry sieciowania pozwalające uzyskać jednorodne hydrożele. Wstępne pomiary wykazały, że o przewodności decyduje bardziej rodzaj matrycy i dodatku niż jego ilość. W alginianie dodatki przewodzące praktycznie nie poprawiły przewodności, natomiast w chitozanie PEDOT:PSS wyraźnie ją zwiększył – do wartości około dolnej granicy zakresu uznawanego za korzystny dla tkanki nerwowej. W przypadku rGO przewodność malała wraz ze wzrostem jego stężenia, co wiążemy z agregacją płatków przerywającą ścieżki przewodzące; zawęziło to listę kandydatów na fazę przewodzącą.

Żadna z pojedynczych matryc nie łączy w pełni wymaganej stabilności i perlokacji fazy przewodzącej, dlatego kolejnym etapem są hydrożele hybrydowe alginian–PVA i alginian–chitozan z PEDOT:PSS. Zostaną one scharakteryzowane opracowaną metodą pomiaru przewodności przy użyciu galwanometru i potencjometru, a następnie zbadane w hodowlach komórkowych.

5.9 Zastosowanie spektrometrii całego ciała do wyznaczania zawartości potasu w organizmie człowieka

Autor: Sara Jóźwik
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Renata Kierepko
Typ projektu: Teoretyczny

Wstęp: Spektrometria całego ciała (spektrometria promieniowania gamma dedykowana człowiekowi) to nieinwazyjna metoda analityczna służąca do prowadzenia badań in vivo w zakresie identyfikacji izotopów promieniotwórczych będących emiterami promieniowania gamma. Znajduje zastosowanie w monitorowaniu skażeń promieniotwórczych, m.in. personelu związanego z przemysłem jądrowym i medycyną nuklearną, ale także naturalnych izotopów promieniotwórczych występujących w organizmie. Podstawowym wyzwaniem spektrometrii całego ciała jest opracowanie właściwej metody kalibracji wydajnościowej dedykowanej każdej osobie poddanej pomiarom. Metoda ta powinna uwzględniać geometryczny rozkład masy względem detektora promieniowania gamma.

Cel projektu: Celem projektu było przygotowanie kalibracji energetycznej i wydajnościowej Spektrometru Całego Ciała w IFJ PAN w Krakowie z wykorzystaniem antropometrycznego fantomu POLA o zmiennej geometrii. Przeprowadzone badania pomogły wyznaczyć aktywność K w organizmach badanych pacjentów oraz stanowiły punkt wyjścia do pomiarów pacjentek w ciąży (bardziej złożona geometria pomiarowa).

Metodologia: Pomiary były wykonywane w przy użyciu Spektrometru Całe Ciała w IFJ PAN (SCC) wyposażonego w detektor HPGe. Do odwzorowania odpowiedniej geometrii użyto fantomu POLA złożonego z bloków polietylenowych z kanałami, zawierające izotopy o znanych aktywnościach: ameryk-241, bar-133, cez-137, potas-40, kobalt-60. W ramach badań przeprowadzono pomiary trzech osób: kobiety, mężczyzny oraz kobiety w ciąży. Każdy pomiar trwał 60 minut i uwzględniał poprawkę o tło spektrometru oraz czas połowicznego rozpadu izotopów w źródełkach. Analizy uzyskanych widm promieniowania gamma wykonano w oparciu o trzy różne programy - Genie 200, PIMPEK i Spectrum (w fazie projektowej), a ich wyniki porównano ze sobą (badanie spójności).

Wyniki: Na podstawie przeprowadzonych pomiarów, w organizmach pacjentów jedynie oszacowana aktywność potas-40 wynosiła powyżej MDA (minimum detectable activity). Wykorzystując abundację potasu-40 w potasie (zał.: wartość stała na całej kuli ziemskiej) oszacowano zawartość potasu w organizmach badanych pacjentów.

Wnioski: SCC w IFJ PAN pozwala na identyfikację naturalnych i sztucznych izotopów będących emiterami promieniowania gamma. Fantom POLA umożliwia przygotowanie kalibracji wydajnościowej dedykowanej pacjentom różniącym się pod względem wzrostu, masy czy też rozkładu masy względem detektora promieniowania gamma. Przeprowadzone badania mogą stanowić wstęp do rozwoju metodyki pomiaru pacjentek w ciąży w SCC gdzie wyzwaniem staje się nie tylko kalibracja wydajnościowa, ale również komfort pacjentki w trakcie pomiaru.

5.10 Inteligentne opatrunki BNC w zaawansowanej terapii ran

Autorzy: Antonina Koim, Kinga Pyszny
Koło naukowe: Nucleus
Opiekun projektu: Juliusz Leszczyński
Typ projektu: Aplikacyjny

Rany przewlekłe oraz oparzeniowe są nadal istotnym wyzwaniem dla medycyny regeneracyjnej z uwagi na złożony proces gojenia oraz ryzyko infekcji. Tradycyjne opatrunki nie zawsze wykazują pożądaną skuteczność, ponieważ nie zapewniają optymalnych warunków do procesów gojenia, powodując, że tkanka jest niedotleniona oraz zmacerowana. Ponadto, ze względu na brak możliwości bieżącej kontroli stanu rany, konieczne jest każdorazowe mechaniczne usunięcie opatrunku, co prowadzi do przewlekłych stanów zapalnych i utrudnień w leczeniu.

Celem projektu jest opracowanie nowoczesnego, inteligentnego biomateriału na bazie nanocelulozy bakteryjnej funkcjonalizowanej chitozanem oraz antocyjanami z czerwonej kapusty. Nanoceluloza BNC jest materiałem wytrzymałym, biokompatybilnym oraz biodegradowalnym, pozyskiwanym z kultur SCOBY. Po obróbce stanowi czystą chemicznie matryce, zapewniającą optymalną wilgotność rany oraz prawidłową wymianę gazową, zapobiegając maceracji tkanek. Dodatek chitozanu zapewnia antybakteryjność, a antocyjany, dzięki zmianie barwy w zależności od pH, sygnalizują rozwój drobnoustrojów, co pozwoli na monitorowanie stanu rany bez zdejmowania opatrunku.

Proces wytwarzania inteligentnego opatrunku opiera się na biosyntezie bakteryjnej nanocelulozy z kultur SCOBY na podłożu herbacianym, po której matryca poddawana jest oczyszczaniu alkalicznemu. Równolegle przygotowywane są składniki aktywne: chitozan oraz bogaty w antocyjany ekstrakt z czerwonej kapusty. Kluczowym krokiem jest impregnacja oczyszczonych płatów BNC w otrzymanym roztworze przy pomocy sonikacji ultradźwiękowej. Biomateriał przechowywany jest w kontrolowanych warunkach, aby zachować pożądane właściwości, które są weryfikowane za pomocą testów kolorymetrycznych i badań mikrobiologicznych.

Wstępne testy potwierdziły wrażliwość otrzymanego biomateriału na zmiany pH, ukazując zmianę barwy w badanym zakresie. Otrzymane rezultaty wskazują na duży potencjał aplikacyjny opracowanego opatrunku w bezinwazyjnym monitorowaniu stanu rany. Etap ten stanowi podstawę do dalszej optymalizacji procesów, a w celu kompleksowej oceny właściwości przeciwbakteryjnych kompozytu zaplanowano testy dyfuzyjno-krążkowe z użyciem szczepów modelowych *Staphylococcus aureus* oraz *Escherichia coli*.

Otrzymany inteligentny opatrunek, łączący cechy terapeutyczne oraz diagnostyczne, stanowi innowacyjne podejście dla medycyny regeneracyjnej. Powiązanie biokompatybilności i cech wytrzymałościowych nanocelulozy BNC, antybakteryjności chitozanu oraz pH-responsywności antocyjanów może pozwolić na skuteczne wsparcie terapii ran oparzeniowych oraz przewlekłych.

5.11 Tlenek żelaza o geometrii płatków śniegu - od modyfikacji mikrostruktury do czujników metali ciężkich

Autor: Olga Waś
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Anna Kusior
Typ projektu: Aplikacyjny

Toksyczne jony metali ciężkich stanowią poważne zagrożenie dla zdrowia człowieka i środowiska naturalnego ze względu na swoją zdolność do bioakumulacji oraz wywoływania licznych zaburzeń metabolicznych. W związku z tym poszukiwane są nowe materiały umożliwiające ich skuteczne usuwanie oraz czułą detekcję. Szczególne zainteresowanie wzbudzają nanostrukturalne tlenki żelaza, których właściwości można kontrolować poprzez odpowiedni dobór parametrów syntezy.

Celem pracy było zbadanie wpływu parametrów syntezy hydrotermalnej na morfologię, strukturę oraz właściwości użytkowe tlenku żelaza o charakterystycznej geometrii przypominającej płatki śniegu. W ramach badań przeanalizowano wpływ czasu trwania procesu oraz temperatury reakcji na kształt, wielkość i stopień uporządkowania powstających mikrostruktur. Otrzymane materiały poddano szczegółowej charakterystyce fizykochemicznej z wykorzystaniem skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM), spektroskopii Ramana, dyfrakcji rentgenowskiej (XRD), oraz dynamicznego rozpraszania światła (DLS).

Przeprowadzone obserwacje wskazują, że zarówno temperatura, jak i czas syntezy w istotny sposób wpływają na rozwój mikrostruktur tlenku żelaza. Uzyskano charakterystyczne dendryty sześcioramienne o geometrii zbliżonej do płatków śniegu, przy czym wydłużenie czasu syntezy sprzyjało wzrostowi ich rozmiarów oraz pojawianiu się dodatkowych struktur o geometrii sześciennej. Zmiana temperatury procesu prowadziła natomiast

do znaczących modyfikacji morfologii materiału, wpływając na stopień rozwoju i uporządkowania tworzących się mikrostruktur.

Otrzymane tlenki żelaza oceniono również pod kątem właściwości sorpcyjnych oraz zastosowań elektroanalitycznych związanych z wykrywaniem jonów metali ciężkich, takich jak kadm, miedź i rtęć. Materiały wykorzystano do modyfikacji elektrod, a ich aktywność elektrochemiczną analizowano metodami woltamperometrycznymi. Szczególną uwagę poświęcono zależności pomiędzy morfologią materiału a efektywnością adsorpcji analitów oraz procesami transferu ładunku zachodzącymi na granicy elektroda-elektrolit.

Przyjmuje się, że otrzymane mikrostrukturalne tlenki żelaza o geometrii śnieżynek pozwolą uzyskać wysoką powierzchnię aktywną, korzystne właściwości sorpcyjne oraz zwiększoną czułość detekcji jonów metali ciężkich. Uzyskane wyniki mogą przyczynić się do rozwoju nowych materiałów przeznaczonych do monitorowania zanieczyszczeń środowiskowych oraz konstrukcji elektrochemicznych czujników stosowanych w analizie biomedycznej i środowiskowej.

5.12 Nanonośniki Fe_3O_4@Au z karboplatyną i koniugatem chitozanowo-folianowym w badaniach nad rakiem jajnika

Autor: Justyna Matysek
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Patrycja Domalik-Pyzik
Typ projektu: Aplikacyjny

Wstęp i cel pracy. Późne rozpoznanie raka jajnika, częste nawroty oraz rozwój oporności na chemioterapię uzasadniają poszukiwanie nowych sposobów dostarczania leków przeciwnowotworowych. Jednym z badanych rozwiązań są nanonośniki, których skład i modyfikacje powierzchni mogą wspomagać transport leku do komórek nowotworowych. Celem pracy było otrzymanie i scharakteryzowanie nanocząstek Fe_3O_4@Au funkcjonalizowanych chitozanem (CS) lub koniugatem chitozanowo-folianowym (CS-FA), zawierających karboplatynę (CBPT), oraz wstępna ocena ich oddziaływania z komórkami raka jajnika.

Materiały i metody. Rdzenie Fe_3O_4 otrzymano metodą współstrącania w dwóch wariantach: (1) rozpuszczenie soli żelaza w HCl i strącanie NaOH oraz (2) rozpuszczenie soli w wodzie i strącanie wodnym roztworem amoniaku. Rdzenie dekorowano złotem metodą redukcji cytrynianowej
i poddawano dalszej funkcjonalizacji. Charakterystykę fizykochemiczną przeprowadzono metodami FTIR, XRD, XPS, spektroskopii Ramana, magnetometrii wibracyjnej i TEM, uzupełniając ją o pomiary DLS i potencjału dzeta dla Fe_3O_4 oraz Fe_3O_4@Au. Oddziaływania Fe_3O_4@Au z komórkami NIH:OVCAR-3 obserwowano metodą holotomografii. W dodatkowych badaniach obrazowych porównano Fe_3O_4, Fe_3O_4@Au-CS-CBPT oraz Fe_3O_4@Au-CS-FA-CBPT w stężeniach 10 i 100 μg/ml
w 1. i 3. dniu hodowli, stosując barwienie Live/Dead.

Wyniki. Wariant syntezy rdzenia wyraźnie wpływał na właściwości otrzymanych nanocząstek. Wariant 2 pozwolił uzyskać magnetyt o większej czystości, wyższej krystaliczności i korzystniejszych właściwościach magnetycznych. Analizy fizykochemiczne potwierdziły otrzymanie koniugatu chitozanowo-folianowego i skuteczność kolejnych etapów modyfikacji. Obserwacje holotomograficzne sugerowały możliwość internalizacji Fe_3O_4@Au przez komórki OVCAR-3. W dodatkowych badaniach Live/Dead w pierwszym dniu dominowały komórki żywe, natomiast w trzecim dniu, w hodowlach
z układami zawierającymi karboplatynę, komórek żywych było mniej i pojawiał się sygnał czerwony (komórki martwe). Zmiany były najbardziej widoczne przy stężeniu 100 μg/ml dla Fe_3O_4@Au-CS-FA-CBPT, jednak wymagają potwierdzenia ilościowego.

Wnioski. Otrzymano i scharakteryzowano wieloskładnikowe nanonośniki łączące magnetyt, złoto, koniugat chitozanowo-folianowy i karboplatynę. Sposób syntezy rdzenia wpływa na czystość, krystaliczność i właściwości magnetyczne nośnika oraz na wydajność dekorowania złotem, a lepszą podstawą do budowy tych układów okazało się współstrącanie amoniakiem. Wstępne badania komórkowe sugerują, że układ z folianem i karboplatyną nasilniej oddziałuje na komórki raka jajnika przy wyższym stężeniu i dłuższym czasie ekspozycji.

Podziękowania. Projekt był realizowany w ramach działania naukowego Miniatura 8: 2024/08/X/ST11/01187 finansowanego ze środków Narodowego Centrum Nauki.

5.13 Zewnątrzkomórkowy transfer elektronów w biofilmach elektroaktywnych w warunkach zmiennej grawitacji – eksperyment BIOVOLT

Autorzy: Aleksandra Pocztorenko, Urszula Klimczak
Koło naukowe: Nucleus
Opiekun projektu: Juliusz Leszczyński
Typ projektu: Teoretyczny

Rozwój bioregeneracyjnych systemów podtrzymywania życia (LSS) w misjach kosmicznych wymaga niezawodnych technologii przetwarzania odpadów i generowania energii, których kluczowym elementem są mikrobiologiczne ogniwa paliwowe (MFC). Zachowanie zewnątrzkomórkowego transferu elektronów (EET) oraz spójności matrycy EPS w skali milisekund podczas dynamicznych zmian grawitacji (1g-1.8g-0g) nie zostało dotąd zbadane. Projekt BIOVOLT stawia pytanie o stabilność bioelektrochemiczną i fizjologiczną mikroorganizmów w warunkach lotu kosmicznego.

Cel badania

Głównym celem jest uchwycenie czasowo-przestrzennego obrazu kinetyki transferu elektronów oraz ocena odpowiedzi mechanobiologicznej biofilmu elektroaktywnego podczas nagłych przejść grawitacyjnych. Badania zweryfikują stabilność szlaków białkowych i matrycy hydrożelowej oraz hipotezę o występowaniu biologicznego efektu polegającego na poprzecznej separacji ładunków wywołanej różnicą bezwładności.

Metodologia

Badania odbędą się podczas kampanii lotów parabolicznych (Air Zero G, 90 cykli mikrograwitacji). Wykorzystane zostaną mikroogniwa MFC z anodami (*Shewanella oneidensis* lub *Rhodoferax ferrireducens*) na różnych materiałach (tkanina węglowa, grafen, nanorurki, tytan). Lokalne prądy i potencjały rejestrowane będą za pomocą macierzy mikroelektrod (μEA) z częstotliwością rzędu kHz, w parze z pomiarami impedancji (EIS) i danymi z modułu inercyjnego (IMU). Ogniwa zostaną zamontowane w różnych orientacjach, a dodatkowe elektrody pomogą wykryć poprzeczne gradienty potencjału. Próby kontrolne obejmą elektrody bez biofilmu, biofilm utrwalony przed lotem oraz ogniwa referencyjne 1g. Po locie wykonana zostanie analiza mikroskopowa (SEM) matrycy EPS.

Wyniki i wnioski

Eksperyment dostarczy danych o natychmiastowej odpowiedzi elektrycznej biofilmu na zmiany przyspieszenia oraz jego granicach stabilności mechanicznej i elektrycznej. Pomiar poprzecznych gradientów potencjału pozwoli potwierdzić hipotezę o grawitacyjnie indukowanej separacji ładunków lub wyznaczyć górną granicę tego efektu. Wyniki ocenią przydatność MFC w systemach podtrzymywania życia narażonych na zmienne przeciążenia.

5.14 Algorytmy NLP w warunkach ICE: Detekcja zmęczenia z raportów astronautów

Autor: Adam Bujak
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Agata Harasymczuk
Typ projektu: Aplikacyjny

Wraz z planowaniem długoterminowych misji kosmicznych na Księżyc i Marsa, kluczowym wyzwaniem staje się nieinwazyjne monitorowanie dobrostanu psychicznego i poziomu zmęczenia załogi. Tradycyjna telemetria opiera się głównie na fizjologicznych czujnikach biomedycznych (np. EKG, EEG), które są uciążliwe w codziennym użytkowaniu, wymagają aktywnego udziału operatora i rzadko wykrywają wczesne, subtelne przesunięcia w obciążeniu poznawczym. Niniejsza praca przedstawia innowacyjne, nieinwazyjne podejście diagnostyczne, polegające na ilościowej i algorytmicznej analizie codziennych raportów misji w celu automatycznej detekcji stanów zmęczenia.

Cel badania:

Celem projektu było zweryfikowanie, czy i w jaki sposób postępujące obciążenie psychofizyczne wynikające z długotrwałej izolacji manifestuje się w strukturze lingwistycznej tekstu pisanego oraz czy proces ten można poddać pełnej automatyzacji algorytmicznej.

Metodologia:
Badanie zrealizowano w oparciu o bazę danych zawierającą obowiązkowe raporty dzienne tworzone przez 51 analogowych astronautów podczas ośmiu 168-godzinnych misji izolacyjnych (AM-102 do AM-109) w habitacie Analog Astronaut Training Center. Zamiast subiektywnej analizy semantycznej, wdrożono podejście oparte na metodach ilościowych i Text Mining. Z tekstu wyekstrahowano 9 mierzalnych metryk językowych, przyporządkowanych do czterech głównych domen: złożoności składniowej, ekspresji afektywnej, degradacji poznawczej oraz adaptacji społecznej. Dane te zostały zestawione liniowo z czasem trwania misji oraz zróżnicowaniem demograficzno-funkcjonalnym załogi.

Wnioski:
Analiza statystyczna ujawniła wyraźne, powtarzalne trendy skorelowane z czasem trwania izolacji. Zaobserwowano m.in. 56,5-procentowy regres produktywności werbalnej (całkowitej liczby słów) od 1 do 7 dnia misji, stanowiący bezpośredni wskaźnik kumulacji zmęczenia poznawczego operatorów. Równolegle odnotowano wzrost precyzji strukturalnej - liczba błędów ortograficznych i gramatycznych spadła o 61%, wskazując na adaptacyjną optymalizację komunikatów w stanach znużenia. W domenie społecznej algorytmy wykazały ciągły spadek użycia imion własnych na rzecz zaimków zbiorowych (+15 instancji do 7. dnia), co może stanowić językowy mechanizm obronny przed konfliktami interpersonalnymi.

Manualne przetwarzanie takich danych jest nieefektywne, dlatego w pracy zaproponowano architekturę systemu automatycznego. Wykorzystanie algorytmów w języku Python (opartych o biblioteki przetwarzania języka naturalnego NLP, takie jak SpaCy lub NLTK) bądź zaimplementowanie modeli sztucznej inteligencji (LLM) pozwala na stworzenie nowoczesnego systemu diagnostycznego czasu rzeczywistego. Narzędzie to, monitorując wahania objętości raportów, gwałtowne zmiany w strukturze zdań złożonych czy stabilność ortograficzną, pozwala na pasywne i natychmiastowe alarmowanie o krytycznym obciążeniu personelu pracującego w środowiskach ekstremalnych.

Sekcja tematyczna 6

Fizyczno-astronomiczna

6.1 Zastosowanie metody szeregów potęgowych do badania własności spektralnych równania Schrödingera z potencjałami sekstycznymi

Autor: Ewelina Blicharz
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: Bartłomiej Spisak
Typ projektu: Teoretyczny

W pracy jest rozważane zagadnienie własne dla operatora samosprzężonego

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x),$$

działającego w przestrzeni $L^2(\mathbb{R})$, generowanego niezależnym od czasu jednowymiarowym równaniem Schrödingera w postaci

$$H\psi(x) = \epsilon\psi(x),$$

przy czym operator energii potencjalnej $U(x, \lambda)$ jest wyrażony jednorodnym wielomianem szóstego rzędu

$$U(x, \lambda) = U_0\big[x^6 + 2x^4 - 2x^2(1 + 2\lambda)\big],$$

gdzie U_0 oraz λ są rzeczywistymi dodatnio określonymi parametrami sterującymi kształtem energii uwięzienia. W szczególności rozpatrywany potencjał może zostać zdeformowany do postaci symetrycznej podwójnej studni potencjału, co czyni go bardzo interesującym modelem dla zastosowań teorii kwantowej do opisu zjawisk anharmonicznych w układach rzeczywistych. Ze względu na możliwość różnorodnych zastosowań tego potencjału w takich obszarach jak biologia i chemia kwantowa, czy fizyka fazy skondensowanej, zostały rozpoczęte badania nad własnościami spektralnymi rodziny hamiltonianów z potencjalnym sekstycznym przy użyciu metody wariacyjnej [**?**, **?**, **?**].

W odróżnieniu od dotychczasowych badań, prezentowane podejście jest oparte na zastosowaniu metody szeregów potęgowych kombinowanej z transformacją Liouville'a-Greena. W rezultacie wyprowadzono zależność rekurencyjną, a następnie uzyskano parzyste i nieparzyste rozwiązania:

$$\psi_1(x) = \left(1 - \frac{\epsilon}{2}x^2 + \frac{\epsilon^2 - 4(1+2\lambda)}{24}x^4 + \cdots\right) e^{-\frac{x^4}{4} - \frac{x^2}{2}},$$

$$\psi_2(x) = \left(x - \frac{\epsilon}{6}x^3 + \frac{\epsilon^2 - 12(1+2\lambda)}{120}x^5 + \cdots\right) e^{-\frac{x^4}{4} - \frac{x^2}{2}}.$$

Przeprowadzono także analizę zbieżności uzyskanych szeregów, w zależności od stopnia minora macierzy utworzonej ze współczynników w tych szeregach na podstawie relacji rekurencyjnych. To pozwoliło na wyznaczenie przybliżonych wartości własnych energii dla zadanego parametru λ.

Literatura

[1] N. Mukherjee, A. Roy, A. K. Roy, *Information entropy as a measure of tunneling and quantum confinement in a symmetric double-well potential*, Ann. Phys. (Berlin) 527, 825 (2015).

[2] A. N. Mendoza Tavera, A. M. Escobar Ruiz, R. P. Sagar, *Entropic Characterization of Tunneling and State Pairing in a Quasi-exactly Solvable Sextic Potential*, Int. J. Theor. Phys. 64, 322 (2025).
[3] A. Contreras-Astorga, A. M. Escobar-Ruiz, R. Linares, *The SUSY partners of the QES sextic potential revisited*, Phys. Scr. 99, 025223 (2024).

6.2 Regolit księżycowy jako osłona przed promieniowaniem rentgenowskim

Autorzy: Natalia Michalik, Jacek Ulrych
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: Czesław Kapusta
Typ projektu: Aplikacyjny

Poszukiwanie niedrogich i lekkich materiałów zapewniających skuteczną osłonę przed promieniowaniem stanowi kluczowe zagadnienie w eksploracji kosmosu. W przestrzeni kosmicznej, wobec braku naturalnej ochrony, jaką stanowi atmosfera ziemska, astronauci są szczególnie narażeni na promieniowanie. Z tego względu niezwykle istotne jest, aby zarówno statki kosmiczne, jak i skafandry były wykonane z materiałów blokujących promieniowanie.

W niniejszym artykule przedstawiono wyniki wstępnego etapu pomiarów dotyczących przenikania promieniowania przez kompozyt siarki i symulantu regolitu księżycowego. Pomiary przeprowadzono przy użyciu spektrodozymetru. Porównując częstość zliczeń – w sytuacji, gdy detektor był bezpośrednio wystawiony na promieniowanie z lampy rentgenowskiej urządzenia typu XRF, oraz w sytuacji, gdy między detektorem a lampą umieszczono próbkę – wyznaczono liniowy współczynnik osłabiania przez materiał w funkcji energii kwantów promieniowania. Przeanalizowano efektywność osłabiania w różnych zakresach energetycznych w zależności od składu kompozytu i przedyskutowano użyteczność takiego materiału do budowy osłon przed promieniowaniem.

6.3 Qutrit dolinowy w elektrycznie strojonej heterostrukturze TMD

Autor: Bartosz Liss
Koło naukowe: Koło Naukowe Fizyków NABLA
Opiekun projektu: Maciej Bieniek
Typ projektu: Teoretyczny

Wraz z rozwojem zaawansowanych metod wytwarzania heterostruktur dwuwymiarowych, urządzenia oparte na atomowo cienkich dichalkogenkach metali przejściowych (TMD) stają się obiecującą platformą do informatyki kwantowej. TMD zazwyczaj posiadają bezpośrednią przerwę energetyczną, a ich właściwości optyczne są zdominowane przez kompleksy wielociałowe. Dzięki zjawisku spinowo-dolinowego sprzężenia (spin-valley locking) materiały te dają możliwość realizacji kubitów o długich czasach koherencji. Te obiecujące właściwości motywują nasze ostatnie badania nad tymi materiałami.

W niniejszej pracy przedstawiamy teoretyczną propozycję realizacji qutritu dolinowego (trójstanowego odpowiednika qubitu) w elektrycznie strojonej heterostrukturze $MoSe_2$-WSe_2. Wykorzystując prostopadłe pole elektryczny do strojenia ekstremów dolinowych, przesuwamy minimum pasma przewodnictwa do trzykrotnie zdegenerowanej doliny Q. Następnie analizujemy elektrostatycznie zdefiniowaną kropkę kwantową, w której dyskretne elektronowe stany Focka–Darwina zachowują charakter dolinowy. Za pomocą pola magnetycznego izolujemy podprzestrzeń trzech stanów dolinowych, która jest następnie kontrolowana poprzez elipsoidalną deformację potencjału kropki. Dalej badamy ewolucję czasową układu pod wpływem oscylacji mikrofalowych, demonstrując protokół sterowania qutritem. W naszej pracy wykorzystujemy atomistyczny model ciasnego wiązania oraz rozwiązujemy problem zależny od czasu metodą predictor-corrector.

6.4 Wpływ modyfikacji jonowej oraz inżynierii warstwy aktywnej na przełączanie rezystancyjne w układach memrystorowych z TiO2

Autor: Mateusz Józefiak-Piróg
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: Juliusz Chojenka
Typ projektu: Aplikacyjny

Tlenki metali przejściowych (np. TiO2) stosowane w układach memrystorowych otwierają nowe możliwości rozwoju nowoczesnych architektur pamięciowych oraz sprzętowych realizacji sztucznych sieci neuronowych. Typowy stałotlenkowy memrystor składa się z aktywnej warstwy tlenkowej umieszczonej między dwiema elektrodami. Jednym z głównych wyzwań w rozwoju tej technologii jest precyzyjna kontrola mechanizmów transportu elektronowego, a tym samym parametrów przełączania układu pomiędzy stanem o wysokiej (HRS, ang. High Resistance State) i niskiej rezystancji (LRS, ang. Low Resistance State).

W niniejszej pracy zbadano wpływ modyfikacji wiązką jonów oraz inżynierii warstwy aktyw- nej na zjawisko przełączania rezystancyjnego. Badaniom poddano symetryczne układy Pt/TiO2/Pt oraz asymetryczne struktury Pt/TiO2/Ti/Au. Układy cienkowarstwowe wytworzono za pomocą technik próżniowych, a następnie wybrane próbki poddano implantacji jonami helu (He+). Para- metry naświetlania zoptymalizowano w oparciu o symulacje dynamiki zderzeń przeprowadzone w programie TRIDYN. Wprowadzenie dodatkowej warstwy tytanu miało na celu powiększenie warstwy aktywnej na interfejsie układu.

W celu określenia wpływu wprowadzonych modyfikacji na transport elektronowy, przepro- wadzono pomiary charakterystyk prądowo-napięciowych (I-V), obejmujące po 100 cykli prze- łączania dla układów referencyjnych, implantowanych oraz struktur z dodatkową warstwą Ti.

Pomiary zrealizowano z wykorzystaniem sond pomiarowych. Analiza zjawiska przełączania re- zystancyjnego wykazała znaczące różnice w parametrach pracy poszczególnych konfiguracji.

Wykazano m.in., że w próbkach poddanych implantacji helem różnica rezystancji pomiędzy stanami HRS i LRS jest kilkukrotnie wyższa w porównaniu do układów odniesienia, co dowodzi skuteczności zaproponowanej metody inżynierii defektów

6.5 Detekcja gwiazd bozonowych przy użyciu fal grawitacyjnych

Autor: Szymon Gozdowski
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: Syed Naqvi
Typ projektu: Teoretyczny

Od pierwszej bezpośredniej detekcji fal grawitacyjnych w 2015 roku astronomia dysponuje nowym narzędziem do badania obiektów silnie oddziałujących grawitacyjnie, takich jak czarne dziury. Dotychczasowe obserwacje są zgodne z modelem czarnej dziury Kerra, jednak część modeli teoretycznych dopuszcza istnienie egzotycznych obiektów zwartych, np. hipotetycznych gwiazd bozonowych. Ich istotną cechą jest indukowany spinem moment kwadrupolowy, który odbiega od wartości przewidywanej dla czarnych dziur Kerra.

Celem projektu było zbadanie, z jaką dokładnością można wyznaczyć ten moment na podstawie sygnałów z układów podwójnych obiektów zwartych. W pracy zaimplementowano dwie metody statystyczne: macierz informacji Fishera, służącą do szacowania precyzji pomiaru parametrów, oraz wnioskowanie bayesowskie oparte na twierdzeniu Bayesa. Obliczenia wykonano dla symulowanych sygnałów, z użyciem rzeczywistych krzywych czułości detektora aLIGO Porównano w ten sposób możliwości dwóch różnych metod statystycznych.

6.6 Adaptacyjna transformacja Hougha dla rekonstrukcji śladów cząstek: wydajne przeszukiwanie wysoko wymiarowych przestrzeni parametrów

Autor: Marcel Wojniewski
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Tomasz Bołd

Typ projektu: Aplikacyjny

Planowana modernizacja akceleratora LHC (High Luminosity LHC - HL-LHC) doprowadzi do znacznego wzrostu częstości zderzeń elementarnych podczas zbierania danych. W krzemowych detektorach śladów generuje to dziesiątki tysięcy trafień pomiarowych na jedno przecięcie wiązek. Takie warunki stawiają bezprecedensowe wymagania przed algorytmami wstępnego wyszukiwania kandydatów na ślady cząstek naładowanych. Jedną z metod wstępnego wyszukiwania trajektorii jest transformata Hougha mapująca pomiary detektora do przestrzeni parametrów helisy w różnych wariantach implementacyjnych. Adaptacyjna transformacja Hougha, polegająca na eliminacji akumulatora w przestrzeni parametrów (kosztownego z punktu widzenia zużycia pamięci), w odróżnieniu od tradycyjnej implementacji opiera się na drzewiastym podziale przestrzeni. Podejście adaptacyjne w warunkach HL-LHC wymaga wykonania wielu podziałów przestrzeni parametrów, kosztownych alokacji pamięci na stercie oraz narzutu rzędu $O(N^2)$ przy weryfikacji zliczeń, co w implementacji skutkowało długim czasem wykonania. W praktyce konieczne jest zbadanie milionów podsekcji akumulatora. Dodatkowy mankament stanowiło przeszukiwanie dwu- wymiarowej przestrzeni parametrów.

Celem pracy było zaprojektowanie i zaimplementowanie hybrydowej architektury algorytmu adaptacyjnej transformaty Hougha, eliminującej problemy istniejącej implementacji poprzez użycie dodatkowych dwóch parametrów (wymiarów przestrzeni parametrów) w procesie przeszukiwania. Przy niezmienionej liczbie rozwiązań dodatkowe dwa wymiary efektywnie zmniejszają gęstość rozwiązań i skutkują szybszą zbieżnością algorytmu. Czterowymiarową przestrzeń parametrów toru rozbito na sekwencyjne fazy dwuwymiarowe. Jednocześnie zachowana została wysoka efektywność odnajdywania cząstek i wysoka czystość.

Zaimplementowany algorytm został dodany do biblioteki ACTS (A Common Tracking Software). Ograniczono użycie rekurencyjnego drzewa podziału na rzecz jednowymiarowej heurystyki okna przesuwnego próbkującej przestrzeń wzdłuż dyskretnych osi kontrolnych, redukując złożoność operacji geometrycznych do $O(NlogN)$. Ponadto proces usuwania zduplikowanych nasion zrealizowano w czasie stałym za pomocą stabilizowanego haszowania. Walidację przeprowadzono na symulacjach zderzeń tt w geometrii Open Data Detector dla zagęszczeń PU [0; 250].

Wprowadzone zmiany pozwoliły na skrócenie czasu przetwarzania pojedynczego zdarzenia dla PU = 200 o 85%. Algorytm okazał się również szybszy od algorytmu referencyjnego: Orthogonal Triplet. Zmodernizowany AHT uzyskał przy tym wyższą efektywność rekonstrukcji na poziomie 97,08%.

6.7 Modelowanie powstawania chmur przy pomocy języka Python

Autor: Alicja Jagielska
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Sylwester Arabas
Typ projektu: Aplikacyjny

Celem wystąpienia jest pokazanie, w jaki sposób procesy powstawania chmur przekładane są na kod w Pythonie, na przykładzie pakietu ccnact do symulacji aktywacji jąder kondensacji, współtworzonego przez autorkę wystąpienia.

Zanim para wodna stanie się widoczną chmurą, musi przejść długą drogę: od przesycenia powietrza, przez aktywację jąder kondensacji, po wzrost kropel. Omówiony zostanie opis mikrofizyki chmur za pomocą układów równań różniczkowych oraz metody ich numerycznego rozwiązywania. Przedstawione zostaną rozwiązania wyróżniające ccnact na tle istniejących narzędzi, takich jak pyrcel i PySDM: obsługa jednostek fizycznych czy wysoka wydajność. Podkreślone zostanie, że nawet klasyczne modele fizyczne mogą zyskać na nowoczesnej, starannie zaprojektowanej implementacji.

6.8 Teoria ekscytonów w potencjałach moiré w dwuwymiarowych strukturach dichalkogenków metali przejściowych

Autor: Maja Walczak
Koło naukowe: Koło Naukowe Fizyków Nabla
Opiekun projektu: Maciej Bieniek
Typ projektu: Teoretyczny

W wystąpieniu przedstawiamy model teoretyczny pozwalający zrozumieć strukturę subtelną ekscytonów w potencjale moiré, powstającym przy skręceniu względem siebie dwóch warstw $MoTe_2$. Wraz z rozwojem zaawansowanych metod wytwarzania materiałów dwuwymiarowych urządzenia oparte na atomowo cienkich warstwach dichalkogenków metali przejściowych stają się obiecującą platformą w dziedzinie informacji kwantowej. Ekscytony w takich układach mogą tworzyć długożyjące stany optyczne [1], a periodyczny potencjał moiré umożliwia dodatkowe modyfikowanie tych stanów [2].

Punktem wyjścia są obliczenia struktury elektronowej $MoTe_2$ w ramach teorii funkcjonału gęstości (DFT). Na ich podstawie budujemy efektywny model ciasnego wiązania. Oddziaływanie spin–orbita wprowadzamy w postaci członu o symetrii Kane'a–Mele'a, który rozszczepia pasmo przewodnictwa i pasmo walencyjne o różne wartości. Prowadzi to do sprzężenia stopni swobody spinu i doliny, kluczowego dla struktury subtelnej ekscytonów, ponieważ pozwala rozróżnić przejścia optycznie jasne i ciemne. Model rozszerzamy następnie do superkomórki, co umożliwia uwzględnienie potencjału moiré pochodzącego od drugiej warstwy.

W kolejnym kroku numerycznie rozwiązujemy równanie Bethe–Salpetera i wyznaczamy widma ekscytonowe dla superkomórek o rosnącym rozmiarze. Analizujemy zbieżność energii ekscytonów względem gęstości siatki punktów k oraz liczby wektorów sieci odwrotnej G uwzględnionych w elementach macierzowych oddziaływania, a dla dużych superkomórek, w których pasma ulegają zawinięciu do zredukowanej strefy Brillouina, także względem liczby pasm włączonych do obliczeń. Pokazujemy również, jak potencjał moiré modyfikuje widmo ekscytonowe w porównaniu z pojedynczą warstwą. Otrzymane wyniki stanowią podstawę do ilościowego opisu ekscytonów w skręconych dwuwarstwach TMD i ich kontrolowania za pomocą kąta skręcenia.

[1] M. Bieniek, L. Szulakowska, and P. Hawrylak, „Band nesting and exciton spectrum in monolayer MoS2, Phys. Rev. B 101, 125423 (2020); M. Bieniek, K. Sadecka, L. Szulakowska, P. Hawrylak, "Theory of Excitons in Atomically Thin Semiconductors: Tight-Binding Approach", Nanomaterials 1582 (2022) [2] A. Wania Rodrigues, M. Bieniek et al., "Atomistic theory of moiré Hofstadter's butterfly in magic-angle graphene", Phys. Rev. B 109, 075166 (2024); "Magnetism and hidden quantum geometry in charge neutral twisted trilayer graphene" Sci. Rep. (2026), DOI: 10.1038/s41598-026-47245-8

6.9 Wpływ modyfikacji składu na właściwości transportowe chalkogenków srebra jako perspektywicznych materiałów termoelektrycznych typu n

Autor: Marta Krause
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Taras Parashchuk
Typ projektu: Aplikacyjny

W obliczu rosnącego zapotrzebowania na efektywne technologie chłodnicze oraz zagospodarowanie ciepła odpadowego, kluczowym zadaniem współczesnej inżynierii materiałowej staje się projektowanie jak najbardziej wydajnych materiałów termoelektrycznych. Materiały te muszą łączyć w sobie doskonałe przewodnictwo elektronowe z niską przewodnością cieplną w roboczym zakresie temperatur. Chalkogenki srebra stanowią obiecującą grupę materiałów termoelektrycznych typu n, charakteryzujących się wysokim potencjałem aplikacyjnym.
Celem niniejszej pracy było wykonanie syntezy oraz zbadanie właściwości transportowych chalkogenków srebra w kontekście ich zastosowania w chłodzeniu termoelektrycznym.
W ramach badań przygotowano i przeanalizowano serię próbek bazujących na Ag_2Se z kontrolowanym nadmiarem stechiometrycznym selenu, poddając je szczegółowym pomiarom właściwości cieplnych i elektrycznych.
Uzyskane wyniki potwierdzają duży potencjał badanych układów: $Ag_2Se_{1.1}$ osiągnął imponujący szczytowy współczynnik $zT \approx 1.2$ w zakresie temperatur 390-410K. Identyfikacja mechanizmów rządzących transportem ładunku i ciepła pozwoliła wskazać ograniczenia wydajności chłodniczej materiałów, co stanowi punkt wyjścia do projektowania zoptymalizowanych składów typu n.

6.10 Co w piwie piszczy? Fizykochemiczna analiza akustyczna piwa

Autorzy: Szymon Książek, Krzysztof Kryk
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: -

Typ projektu: Popularnonaukowy

Referat opisuje projekt „Co w piwie piszczy? Fizykochemiczna analiza akustyczna piwa", który skupia się na znalezieniu różnicy w wydobywanym dźwięku w zależności od gęstości i składu piwa (głównie bezalkoholowego) w szklance.

W ramach tych badań zostały przeprowadzone pomiary gęstości oraz dźwięku. Pomiary akustyczne wykonano dla objętości 20–90 ml (co 10 ml) w cienkościennym kieliszku, wykorzystując dwa mikrofony (które nagrywały w dwóch formatach) oraz program Friture (który służył do obserwacji w trakcie nagrywania).

Do przeanalizowania danych posłużono się własnoręcznie napisanym kodem w języku Python oraz bibliotekami w nim już dostępnych, oraz stworzony został pakiet umożliwiający analizę dźwięku szerszemu gronu osób.

Otrzymane wyniki zostały ze sobą porównane na wykresie maksymalnej częstotliwości w zależności od gęstości. Po porównaniu wyniki wykazały, że różnice pomiędzy danymi rodzajami piwa zachodzą, jednak są one subtelne i są wymagane dalsze pomiary.

Sekcja tematyczna 7

Sekcja posterowa

7.1 Autonomiczna stacja monitorowania środowiska i wzrostu roślin

Autor: Marta Komar
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Agata Harasymczuk
Typ projektu: Popularnonaukowy

W jaki sposób można autonomicznie monitorować wzrost roślin i warunki środowiskowe w habitacie analogowym, wykorzystując energooszczędny system offline o niskim stopniu złożoności? Aby odpowiedzieć na to pytanie, opracowano i przetestowano podczas analogowej misji kosmicznej stację monitorującą opartą na module ESP32-CAM, integrującą czujniki środowiskowe i lokalny zapis danych. Wykorzystując tryby niskiego poboru mocy, system zarejestrował ponad 3000 zdjęć w trakcie 200-godzinnego okresu działania, demonstrując wykonalność autonomicznego monitorowania w trybie offline.

7.2 Budowa aparatury oraz przeprowadzenie pomiarów terenowych stężenia pyłów zawieszonych na wyspie La Palma w archipelagu Wysp Kanaryjskich

Autor: Marcel Wojniewski
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: Paweł Jagoda
Typ projektu: Popularnonaukowy

La Palma, znana ze swoich unikalnych walorów przyrodniczych, stanowi interesujący obszar do badań nad jakością powietrza. Celem projektu było zaprojektowanie, budowa i przetestowanie w warunkach terenowych autorskiego, mobilnego systemu monitoringu środowiska ze szczególnym uwzględnieniem stężenia pyłów zawieszonych (PM2.5).

W ramach prac skonstruowano niezależne energetycznie urządzenie bazujące na mikrokontrolerze, laserowym mierniku cząstek *Sensirion SEN55* oraz module nawigacji satelitarnej GPS. Pozwoliło to na precyzyjne mapowanie zanieczyszczeń w dziewięciu zróżnicowanych topograficznie lokalizacjach wyspy – od wulkanicznych szczytów po nadmorskie porty.

Przeprowadzona analiza wykazała, że o ile tereny górskie charakteryzują się wzorową czystością powietrza, o tyle w rejonach portowych (m.in. Tazacorte) i na otwartym pokładzie promu pasażerskiego odnotowano skoki stężenia PM2.5, co powiązano z emisją zanieczyszczeń z silników zasilanych ciężkim paliwem morskim.

7.3 Co wspólnego ma kadłub łodzi z kością ptak i pszczołami?

Autor: Maria Czerwińska
Koło naukowe: AGH Solar Boat
Opiekun projektu: Krzysztof Sornek

Typ projektu: Popularnonaukowy

W budowie wyścigowych łodzi solarnych waga i opory są największym wrogiem prędkości i efektywności energetycznej. Wyzwanie polega na stworzeniu kadłuba o wysokiej sztywności i wytrzymałości mechanicznej, zachowując jednocześnie rygorystyczną lekkość. Jest to możliwe poprzez stosowanie materiałów kompozytowych o strukturze przekładkowej (tzw. sandwich structures).
Dlaczego rozdzielenie cienkich warstw włókna węglowego lekkim rdzeniem (np. o strukturze plastra miodu lub pianki) zwiększa sztywność elementu, mimo że w 90% składa się on z zamkniętego powietrza? Zjawisko to dobrze obrazują ptasie kości: aby umożliwić lot, nie są one lite, lecz ich wnętrze stanowi lekka, porowata struktura przenosząca obciążenia przy minimalnej masie. Z kolei geometria plastra miodu, podpatrzona u pszczół, zapewnia wytrzymałość przy użyciu minimalnej ilości materiału.

Abstrakt:
Włókna bazaltowe to, obok włókien lnianych, jedna z najciekawszych alternatyw dla tradycyjnego włókna szklanego i węglowego. W przeciwieństwie do lnu cechują się znacznie niższą podatnością na degradację pod wpływem warunków atmosferycznych, wody oraz promieniowania UV, zachowując przy tym w 100% naturalne pochodzenie. Powstają w procesie przetapiania skały bazaltowej (skała pochodzenia magmowego) w temperaturze około 1400°C.
W dobie dążenia współczesnego świata do stosowania materiałów naturalnych o niskim śladzie węglowym, bazalt stanowi obiecujący surowiec do produkcji laminatów o szerokim spektrum zastosowań, w tym w transporcie wodnym.
Celem pracy jest przedstawienie procesu wytwarzania oraz możliwych zastosowań włókien bazaltowych w kontekście kompozytów naturalnych na przykładzie zastosowania ich w konstrukcji łodzi.

7.4 Czy rzeżucha może rosnąć na Księżycu? Badania uprawy rzeżuchy na symulancie regolitu księżycowego

Autor: Krzysztof Kryk
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: -
Typ projektu: Popularnonaukowy

Długoterminowe, załogowe misje kosmiczne stawiają przed nami konieczność odpowiedzialnego zarządzania zasobami. Oprócz dostępu do tlenu i wody, kluczowe jest dostarczenie astronautom wszystkich niezbędnych składników odżywczych, aby zachować ich witalność oraz zdrowie. Rosnące koszty wynoszenia ładunków na orbitę sprawiają, że coraz ważniejszy staje się optymalny dobór ekwipunku zapewniającego załodze samowystarczalność.

Opisywane badania zostały przeprowadzone w izolowanym środowisku podczas 7-dniowej analogowej misji kosmicznej NAWA-4 AM114. Ich tematem była uprawa rzeżuchy na symulancie regolitu księżycowego zmieszanym z ziemską glebą w różnych proporcjach oraz przy różnym dawkowaniu wody (łącznie 27 próbek). Analizowano tempo wzrostu oraz liczbę wypuszczonych pędów. Jako próba kontrolna posłużyły nasiona wysiane na wacie.

Uzyskane wyniki okazały się inne niż zakładano: niektóre próbki rosnące na czystym symulancie regolitu wzrastały szybciej niż część z tych wysianych na ziemskiej glebie.

7.5 Do czterech razy sztuka. Nowe oblicze energetyki jądrowej

Autor: Piotr Musielak
Koło naukowe: Energetyków Jądrowych Uranium
Opiekun projektu: Filip Jędrzejek
Typ projektu: Popularnonaukowy

Celem pracy jest popularyzacja nowych technologii z dziedziny energetyki jądrowej. Krótko omawia okazje, jakie stwarza rozwój reaktorów jądrowych IV generacji, wyzwania, które się z nimi wiążą oraz obecny status tych technologii. Wśród okazji i zalet tych rozwiązań są omówione m.in. bardziej wydajne wykorzystanie paliwa,

praca pod stosunkowo niskim ciśnieniem (niektóre projekty) oraz pasywne systemy bezpieczeństwa. Do omówionych wyzwań należy chociażby dobór odpowiednich materiałów, mogących wytrzymać wysokie temperatury i nowe chłodziwa (takie jak ciekłe metale) czy możliwość skalowania mniejszych reaktorów do komercyjnych rozmiarów. Ostatnia część pracy jest poświęcona obecnej sytuacji reaktorów generacji IV – zarówno projektom już działającym, jak i tym będącym w fazie budowy czy planowania – w tym również konstrukcjom powstającym w Polsce lub przy jej udziale.

7.6 Fizyka od kuchni: Po co nam proszek do pieczenia i dlaczego jajko wybucha w mikrofalówce?

Autor: Adam Franciszek Wojtowicz
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: -
Typ projektu: Popularnonaukowy

Prezentowanie dzieciom i młodzieży zastosowań praw fizyki stanowi kluczowy element rozbudzania ich zainteresowania nauką oraz kształtowania kolejnego pokolenia badaczy. Świetną przestrzenią do wskazywania praktycznych przykładów wykorzystania tych praw jest domowa kuchnia, pełna dobrze widocznych przemian materii i ciekawych zjawisk. Niniejszy poster prezentuje propozycje zastosowań popularnych narzędzi - jak toster czy kuchenka mikrofalowa - oraz innych zjawisk związanych z gotowaniem, do wytłumaczenia prostych praw fizyki w angażujący sposób. W pracy omówiono m.in. mechanizmy dyfuzji w parzeniu herbaty, przepływ prądu w tosterze, zjawiska falowe w kuchence mikrofalowej oraz procesy fizykochemiczne zachodzące przy pieczeniu ciasta. Zaprezentowane przykłady dowodzą, że codzienna praktyka kulinarna stanowi doskonałe, intuicyjne i łatwo dostępne narzędzie dydaktyczne.

7.7 Kalendarium astronomiczne

Autorzy: Grzegorz Stanek, Justyna Wrońska
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: Beata Ostachowicz
Typ projektu: Popularnonaukowy

Celem projektu jest popularyzacja wiedzy astronomicznej oraz zachęcanie do samodzielnego poznawania i obserwowania zjawisk zachodzących na niebie. W ramach pracy opracowano kalendarium astronomiczne obejmujące semestr zimowy roku akademickiego 2026/2027, stanowiące przystępne kompendium wiedzy o najciekawszych wydarzeniach astronomicznych nadchodzących miesięcy. Zawiera ono daty i opisy wybranych zjawisk, takich jak fazy Księżyca, koniunkcje czy roje meteorów, a także informacje o obiektach niebieskich, warunkach obserwacji, wykorzystywanym sprzęcie i możliwościach wykonywania prostych pomiarów.

Projekt skierowany jest przede wszystkim do uczniów szkół ponadpodstawowych, studentów oraz osób rozpoczynających swoją przygodę z astronomią. Kalendarium przygotowano w formie przystosowanej do wydruku, dzięki czemu może pełnić funkcję podręcznego przewodnika i materiału edukacyjnego, wykorzystywanego indywidualnie oraz podczas wydarzeń popularyzujących naukę, takich jak Małopolska Noc Naukowców. Publikację uzupełnia sekcja poświęcona wybranym inicjatywom i aktualnościom z obszaru działalności kosmicznej AGH, obejmująca m.in. projekty studenckich kół naukowych, wydarzenia, zawody i misje analogowe.

Opracowanie łączy astronomię obserwacyjną z tematyką współczesnych badań i eksploracji przestrzeni kosmicznej, zachęcając do poszerzania wiedzy oraz aktywnego zainteresowania astronomią.



Rys. 1. Okładka kalendarium.

7.8 Obiad z żabki a przyjaźń, czyli optymalna strategia korzystania z mikrofalówki

Autor: Szymon Gozdowski
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: -
Typ projektu: Popularnonaukowy

Celem pracy było zbadanie dynamiki ogrzewania wody w kuchence mikrofalowej oraz określenie wpływu objętości próbki na przebieg zmian jej temperatury w czasie. Eksperyment stanowił uproszczony model procesu podgrzewania posiłków, pozwalający na analizę efektywności przekazywania energii w układzie o różnych ilościach ogrzewanej substancji.

Pomiary przeprowadzono dla kilku objętości wody, rejestrując zmiany temperatury w funkcji czasu ogrzewania. Do obserwacji rozkładu temperatury wykorzystano kamerę termowizyjną, umożliwiającą bezkontaktową rejestrację promieniowania podczerwonego emitowanego przez badaną próbkę. Uzyskane dane pozwoliły na porównanie krzywych ogrzewania dla poszczególnych objętości oraz ocenę zależności pomiędzy ilością ogrzewanej wody a tempem wzrostu jej temperatury.

Przeprowadzone badania pozwalają na jakościową i ilościową analizę procesu ogrzewania mikrofalowego oraz wskazują na możliwość wykorzystania termowizji jako narzędzia do badania zjawisk związanych z transferem energii cieplnej. Wyniki mogą stanowić punkt wyjścia do dalszych badań nad niejednorodnością ogrzewania i efektywnością energetyczną podgrzewania produktów spożywczych.

7.9 Od sygnału do diagnozy, czyli jak zbudować własne EKG za 100 zł?

Autor: Zofia Bryłowska
Koło naukowe: Kerma
Opiekun projektu: Joanna Chwiej
Typ projektu: Popularnonaukowy

Elektrokardiografia (EKG) jest jedną z podstawowych metod diagnostycznych wykorzystywanych w diagnostyce medycznej, umożliwiającą nieinwazyjną rejestrację aktywności elektrycznej serca. Analiza sygnału EKG pozwala na obserwację charakterystycznych zmian w pracy serca i stanowi przykład praktycznego zastosowania metod pomiarowych oraz przetwarzania sygnałów w medycynie. Zagadnienie to może być również punktem wyjścia do projektów edukacyjnych, przybliżających zasady działania aparatury medycznej.

Celem projektu było zaprojektowanie i wykonanie niskokosztowego systemu do rejestracji oraz wizualizacji sygnału EKG z wykorzystaniem mikrokontrolera Arduino Nano i środowiska MATLAB. Opracowany układ umożliwia rejestrację sygnału za pomocą elektrod umieszczonych na ciele badanego, jego próbkowanie oraz transmisję do komputera za pośrednictwem portu szeregowego. Po stronie komputera przygotowano aplikację w MATLAB-ie, która odbiera dane, prezentuje przebieg EKG w czasie rzeczywistym i umożliwia zapis zarejestrowanych pomiarów do dalszej analizy.

Rezultatem projektu jest demonstracyjny system łączący część sprzętową z oprogramowaniem do akwizycji i wizualizacji sygnałów bioelektrycznych. Jego modułowa konstrukcja ułatwia poznanie kolejnych etapów pracy z sygnałem — od pomiaru, przez transmisję danych, aż po ich graficzną prezentację. Rozwiązanie może być wykorzystywane podczas zajęć dydaktycznych i wydarzeń popularyzujących naukę jako przykład praktycznego zastosowania elektroniki, programowania i metod analizy sygnałów w fizyce medycznej. Projekt pokazuje, że podstawowy system demonstracyjny do rejestracji EKG można zbudować przy użyciu niedrogich, ogólnodostępnych komponentów.

7.10 Poszukiwania Kwarków Wektorowych w zderzeniach mu+ p z użyciem metod ML

Autorzy: Mikołaj Palazzo, Szymon Popiela
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: Mohammed Boukidi
Typ projektu: Teoretyczny

Wiele rozszerzeń Modelu Standardowego postuluje istnienie kwarków wektoropodobnych (VLQ). Celem badań była ocena potencjału odkrywczego hipotetycznego kwarku wektorowego T w kanale półleptonowym dla przyszłego zderzacza mionowo-protonowego (μ^+p).

Symulację sygnału oraz tła Modelu Standardowego przeprowadzono w programie MadGraph5, a selekcję kinematyczną wykonano przy użyciu MadAnalysis 5. Z uwagi na dominujące procesy tła, standardowe cięcia kinematyczne okazały się niewystarczające. Do separacji sygnału od tła zastosowano głębokie sieci neuronowe trenowane na zmiennych kinematycznych produktów zderzenia.

Wykorzystanie modeli uczenia maszynowego umożliwiło drastyczną redukcję tła, pozwalając na osiągnięcie istotności statystycznej przekraczającej próg odkrycia (¿5σ). Wyniki dowodzą, że zderzenia μ^+p połączone z analizą opartą na sieciach neuronowych stanowią wysoce czułe narzędzie w poszukiwaniach fizyki poza Modelem Standardowym.

7.11 Promieniotwórczość wód butelkowanych

Autor: Oliwia Glanowska, Marlena Machola
Koło naukowe: Energetyków Jądrowych Uranium
Opiekun projektu: Filip Jędrzejek
Typ projektu: Popularnonaukowy

Woda butelkowana, powszechnie uznawana za bezpieczną i naturalną, może zawierać śladowe ilości naturalnych radionuklidów. Jednym z nich jest rad-226, którego rozpadu promieniotwórczego produktem jest radon-222 – radioaktywny gaz szlachetny. Celem pracy jest zbadanie stężeń radonu-222 w wybranych wodach butelkowanych dostępnych na polskim rynku oraz przybliżenie konsumentom zjawiska naturalnej radioaktywności wód. Analiza pozwala spojrzeć na codziennie spożywaną wodę z perspektywy radiochemii i zwrócić uwagę na znaczenie monitorowania naturalnych źródeł promieniowania jonizującego w środowisku.

7.12 Razem w jednej sieci: SMR i OZE między szansą a wyzwaniem.

Autor: Dorota Podlewska
Koło naukowe: Energetyków Jądrowych Uranium
Opiekun projektu: Mikołaj Oettingen

Typ projektu: Popularnonaukowy

Małe reaktory modułowe (SMR, do 300 MW) są rozważane jako stabilne uzupełnienie systemów elektroenergetycznych z rosnącym udziałem odnawialnych źródeł energii (OZE). Cechuje je modułowa budowa, pasywne systemy bezpieczeństwa, prefabrykacja komponentów oraz zdolność do pracy w trybie nadążania za obciążeniem. Ich integracja w układach hybrydowych rodzi jednak istotne wyzwania techniczne i regulacyjne. Celem pracy jest wskazanie głównych barier tej integracji. Przyjęto tezę, że generator synchroniczny SMR może pełnić funkcję źródła odniesienia fazowego dla przekształtników OZE, ale ich współpraca wymaga rozwiązania problemów dynamicznych.

W przeglądzie literatury porównano generator synchroniczny SMR, o dużej inercji własnej i czasie reakcji rzędu kilku sekund, ze źródłami OZE przyłączonymi do systemu przez falowniki, które zmieniają moc w milisekundach i same nie posiadają naturalnej inercji. Wskazano kluczowe problemy: synchronizację fazową (w tym wpływ skoków mocy OZE na synchronizację SMR w punkcie wspólnego przyłączenia PCC), stabilność napięciową w sieciach o niskiej mocy zwarciowej, wpływ wyższych harmonicznych i interharmonicznych na generator, konflikty regulatorów napięcia oraz zakłócenia pracy zabezpieczeń.

Reaktory SMR mogą zwiększać inercję systemu, wspierać stabilną pracę OZE i dzięki zdolności do nadążania za obciążeniem przyczynić się do dekarbonizacji sektora elektroenergetycznego. Wymaga to jednak zintegrowanych strategii sterowania i algorytmów synchronizacji odpornych na zakłócenia sieciowe, aktywnego tłumienia oscylacji i harmonicznych oraz koordynacji systemów automatyki. O powodzeniu wdrożeń zadecydują także kwestie ekonomiczne, licencyjne i łańcuchy dostaw, a także dostępność paliwa jądrowego (w tym HALEU).

7.13 Selektywne odbicie światła w trójskładnikowych mieszaninach ciekłokrystalicznych tworzących szkło

Autor: Zuzanna Zając
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Aleksandra Deptuch
Typ projektu: Popularnonaukowy

Przygotowano dwie mieszaniny ciekłych kryształów, czyli materiałów pomiędzy cieczą a ciałem stałym, w których cząsteczki układają się w uporządkowane warstwy. Celem analizy było sprawdzenie, jak te materiały odbijają światło i jak zastygają w szkło. Badaliśmy je kilkoma metodami, m.in. pod mikroskopem przy zmiennej temperaturze i promieniami rentgenowskimi. Przy chłodzeniu materiał przechodzi przez trzy sposoby ułożenia cząsteczek, a w ostatnim z nich zastyga w szkło, zanim zdąży przejść do jeszcze bardziej uporządkowanej struktury. Najciekawsze są kolory. Warstwy tworzą spiralę, która odbija światło, bez użycia barwnika. Jedna z mieszanin silnie zmienia barwę wraz z temperaturą i po zastygnięciu odbija światło niebieskie. Obie świecą na zielono lub czerwono, zależnie od tego, czy były chłodzone, czy ogrzewane, i jak szybko.

7.14 Symulacja Monte Carlo możliwości odzysku energii neutronów w układzie warstwowym dla różnych źródeł

Autor: Marcin Momot
Koło naukowe: Bozon
Opiekun projektu: -
Typ projektu: Popularnonaukowy

Neutrony powstające w reakcjach jądrowych niosą duże ilości energii, która zwykle jest odbierana w postaci ciepła i zamieniana na energię elektryczną w klasycznym obiegu cieplnym. Jego sprawność jest jednak ograniczona prawami termodynamiki, więc znaczna część energii jest tracona jako ciepło odpadowe. Czy część energii neutronów da się ode- brać innym kanałem i czy zależy to od tego jakie jest źródło neutronów?

Celem projektu była symulacja takiej możliwości w warstwowym układzie Be-C-Li- CVD dla źródeł o różnych widmach energii. ^{9}Be powiela neutrony w reakcji (n,2n), ^{12}C je spowalnia, a ^{6}Li w reakcji (n,α)T wytwarza cząstki alfa, które deponują energię w cien- kiej warstwie diamentu CVD, mogącej pełnić rolę konwertera na ładunek elektryczny. W tym celu napisano własny kod Monte Carlo, korzystający z przekrojów czynnych i rozkła- dów kątowych z biblioteki ENDF/B-VIII.1 oraz z tablic strat energii NIST ASTAR. Dla każdego źródła

wyznaczono współczynnik mnożenia neutronów, efektywność dostarczania cząstek alfa do warstwy CVD oraz profil depozycji energii.

Należy podkreślić, że model jest celowo uproszczony, a jego wartość polega na szybkim sprawdzeniu, czy dana koncepcja ma sens fizyczny. Praca stanowi zalążek narzędzia do symulacji układów warstwowych.

7.15 Transformacja energetyczna w cieniu konfliktu: atom vs. węgiel jako podstawa systemu

Autor: Mikołaj Orłowski
Koło naukowe: Energetyków Jądrowych Uranium
Opiekun projektu: Filip Jędrzejek
Typ projektu: Popularnonaukowy

Wobec starzejącej się infrastruktury węglowej oraz wyzwań geopolitycznych, polski sektor elektroenergetyczny stoi przed koniecznością transformacji opartej na stabilnych podstawach. Poster prezentuje wieloaspektowe porównanie energetyki jądrowej i węglowej w obszarach: gęstości energetycznej paliwa, gospodarki odpadami, wpływu na zdrowie publiczne, środowisko oraz suwerenności energetycznej. Analiza wykazuje, że ekstremalnie wysoka gęstość energetyczna paliwa jądrowego radykalnie redukuje koszty i złożoność łańcucha dostaw względem paliw kopalnych. W przeciwieństwie do węgla, którego eksploatacja generuje ogromne koszty uprawnień ETS, zanieczyszczenia lokalne oraz zależność od importu, energetyka jądrowa zapewnia stabilność operacyjną. Umożliwia ona bezpieczne składowanie wieloletnich zapasów paliwa na terenie zakładu. Atom stanowi kluczowy filar uniezależnienia państwa od zewnętrznych szoków cenowych, gwarantując realizację celów klimatycznych przy jednoczesnej ochrony zdrowia obywateli i długoterminowego bezpieczeństwa strategicznego Polski.

7.16 Wpływ kontrolowanej morfologii i sensybilizacji powierzchniowej SnO2 nanostruktur α-Fe2O3 na właściwości elektrochemiczne w kontekście nieenzymatycznej detekcji H2O2

Autor: Justyna Król
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Anna Kusior
Typ projektu: Popularnonaukowy

Nadtlenek wodoru (H2O2) pełni istotną rolę jako biomarker w komórkowych procesach sygnałowych i diagnostyce medycznej. W kontekście rozwoju nieenzymatycznych sensorów elektrochemicznych perspektywicznym materiałem receptorowym jest hematyt (α-Fe2O3). W celu przełamania ograniczeń transportowych hematytu (niska ruchliwość nośników ładunku) stosuje się różne strategie modyfikacji. W niniejszej pracy zdecydowano się na utworzenie heterostruktury typu core-shell z tlenkiem cyny (IV) (SnO2) ze względu na korzystne dopasowanie pasm energetycznych i wysoką przewodność tego półprzewodnika, sprzyjające szybszemu odprowadzaniu ładunków z obszaru reakcji. Celem badania była ocena wpływu kontrolowanej morfologii nanostruktur hematytu oraz ich sensybilizacji powierzchniowej SnO2 na kinetykę procesów elektrochemicznych i detekcję H2O2. Nanostruktury α-Fe2O3 o trzech odmiennych geometriach (sześciany, dyski, gwiazdki) otrzymano metodą hydrotermalną z udziałem kationów metali (Al3+, Zn2+, Cu2+) modyfikujących wzrost krystaliczny, a ich formę oraz skład fazowy i strukturalny potwierdzono badaniami skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM), dyfrakcji rentgenowskiej (XRD) oraz spektroskopii Ramana. Badania elektrochemiczne metodą woltamperometrii cyklicznej (CV) z wykorzystaniem układu redoks [Fe(CN)6]3-/4- i równania Randlesa-Ševčíka wykazały znaczący wzrost powierzchni elektrochemicznie aktywnej (EASA) po modyfikacji SnO2. Największy względny przyrost EASA odnotowano dla dysków (+189%, do 0,581 mm2), natomiast najwyższe wartości osiągnęły próbki gwiazdkowe (1,098 mm2) oraz sześcienne (1,089 mm2) z powłoką SnO2. Pomiary elektrokatalizy w obecności H2O2 potwierdziły, że synergia rozwiniętej morfologii i obecności heterozłącza α-Fe2O3/SnO2 zwiększa czułość detekcji, zapewniając najniższy próg wykrywalności (2,71–2,72 mM) dla struktur gwiazdkowych i sześciennych. Uzyskane wyniki wskazują na kluczowe znaczenie inżynierii morfologii i sensybilizacji SnO2 w projektowaniu wydajnych nieenzymatycznych sensorów elektrochemicznych.

7.17 Wykorzystanie grywalizacji w popularyzacji wiedzy o transformacji energetycznej.

Autor: Wojciech Jopek
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: -
Typ projektu: Popularnonaukowy

Tworząc warsztaty edukacyjne istotne jest, aby przekazywane treści były prawdziwe, ale też atrakcyjne dla grupy docelowej. W ramach ścieżki edukacyjnej programu „Ambasadorzy Transformacji Energetycznej" zespół czterech ambasadorów przygotował i przeprowadził warsztaty o wykorzystaniu odpadów w energetyce łącząc konwencjonalne techniki przekazu wiedzy z interaktywnym warsztatem opartym o edukacyjną grę karcianą.

Program „Ambasadorzy Transformacji Energetycznej" to inicjatywa Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica. Celem programu jest wzmocnienie kompetencji studentów i doktorantów oraz ich aktywizacja w procesie realizowania projektów dotyczących transformacji energetycznej. W tym roku odbywa się już III edycja tego programu. W ramach programu Ambasadorzy podejmowali się działań w dwóch ścieżkach rozwoju - ścieżce projektowej oraz ścieżce edukacyjnej.

Nasz zespół realizujący warsztaty edukacyjne w szkołach przygotował warsztat zatytułowany „Śmietnik - Ukryte źródło energii" wyjaśniający zagadnienia wykorzystania odpadów na cele energetyczne. Warsztaty edukacyjne odbywały się w szkołach ponadpodstawowych w Krakowie we wrześniu i październiku bieżącego roku.

W ramach warsztatu uczestnicy mogli wcielić się w rolę zarządcy obszaru zbiórki odpadów w Krakowie. Zadaniem każdego zespołu uczniów była minimalizacja kosztów operacyjnych oraz utylizacja odpadów poprzez kierowanie ich do odpowiednich obiektów. Aby zaangażować uczestników zespół przygotował i wykonał edukacyjną grę karcianą.

Początkowo uczestnicy mieli do dyspozycji wyłącznie podstawowe technologie utylizacji, a wraz z postępem warsztatu edukacyjnego i poznawaniem nowych technologii każda z grup mogła ponownie podjąć się zadania pokierowania odpadów do odpowiednich obiektów. Tym samym w interaktywny sposób uczestnicy warsztatu mogli poznać zalety wykorzystania odpadów na cele energetyczne oraz zagadnienia gospodarki obiegu zamkniętego.

Odbiór warsztatów wśród uczestników był pozytywny. Jako mocne strony warsztatu uczestnicy wskazywali atrakcyjność wykorzystywanych form, interaktywność oraz wysoki poziom merytoryczny. Weryfikacja wiedzy uczestników po warsztacie również wskazywała na pozytywne rezultaty przeprowadzonych warsztatów.

Ze względu na pozytywny odbiór elementów grywalizacyjnych warsztatu część zespołu postanowiła kontynuować projekt celem stworzenia samodzielnej edukacyjnej gry karcianej o tematyce zarządzania systemami wykorzystania odpadów na cele energetyczne.

7.18 Zastosowania stopów wysokoentropowych w energetyce jądrowej

Autor: Aleksandra Mroczek, Julia Garus
Koło naukowe: Energetyków Jądrowych Uranium
Opiekun projektu: Filip Jędrzejek
Typ projektu: Popularnonaukowy

Stopy wysokoentropowe (ang. High Entropy Alloys – HEA) to materiały metaliczne charakteryzujące się występowaniem prostych struktur krystalograficznych, głównie regularnych przestrzennie centrowanych (ang. Body-Centered Cubic - BCC) lub ściennie centrowanych (ang. Face-Centered Cubic - FCC) będących wieloskładnikowymi roztworami stałymi. Zazwyczaj składają się z co najmniej pięciu pierwiastków głównych w zbliżonych udziałach molowych, co pozwala na uzyskanie wartości entropii konfiguracyjnej powyżej 1,5 R (gdzie R to uniwersalna stała gazowa). Złożoność ich składu chemicznego sprawia, że tradycyjne metody produkcji są problematyczne, dlatego w ich wytwarzaniu kluczową rolę odgrywa metalurgia proszków. Podejście to umożliwia precyzyjne sterowanie parametrami procesu i właściwościami funkcjonalnymi materiału. [1, 2]

Niniejsza praca stanowi przegląd literaturowy pod kątem zastosowania stopów HEA jako nowoczesnych materiałów konstrukcyjnych w energetyce jądrowej. Ze względu na ekstremalne warunki pracy w reaktorach jądrowych (w tym w systemach IV generacji), materiały te są intensywnie badane pod kątem stabilności fazowej w wysokich temperaturach, odporności na korozję oraz wytrzymałości na rozciąganie. Zastosowanie ogniotrwałych stopów wysokoentropowych (ang. Refractory High Entropy Alloys - RHEA) pozwala na znaczną poprawę

odporności na pełzanie wysokotemperaturowe oraz ograniczenie pęcznienia radiacyjnego spowodowanego kaskadami uszkodzeń neutronowych. Efekty te wynikają z unikalnych cech mikrostrukturalnych HEA, takich jak znaczne zniekształcenie sieci krystalicznej oraz spowolniona dyfuzja atomowa. [3-5]

Potencjalne obszary aplikacyjne obejmują koszulki prętów paliwowych, elementy rdzenia reaktora oraz komponenty układów chłodzenia. Przedstawione analizy wskazują, że stopy HEA stanowią obiecującą alternatywę dla tradycyjnych stopów stosowanych w elementach konstrukcji rektorów, a dalszy rozwój metod ich syntezy może znacząco wpłynąć na bezpieczeństwo i wydajność reaktorów nowej generacji.

[1] Cichocki, K. Badania wpływu składu fazowego na podatność do przeróbki plastycznej nierównowagowych stopów wysokoentropowych (2024)

[2] Kopeć-Surzyn, A., Madej, M. Wytwarzanie stopów wysokoentropowych przy użyciu metody SPS (2024)

[3] Chakraborty, P., Tewari, R. High-entropy alloys for nuclear applications. *J Mater Sci* **60**, 1439–1453 (2025)

[4] Kook, N. Y. [et al.] Bi-Continuous W-Rich Refractory High Entropy Alloy-Cu Composite: Toward Material Innovation of Nuclear Reactor Coolant System. *Small methods* **9** (2025)

[5] Wang, Ch. [et al.] A novel strategy for high entropy alloy coating of nuclear fuel cladding: Design, preparation, microstructure, and high-temperature steam oxidation. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials* **128** (2025)

7.19 Zastosowanie matrycy oleożelowej fortyfikowanej chitozanem z biomasy z kultur in vitro P. ostreatus w terapii ran przewlekłych

Autor: Martyna Sobczyk
Koło naukowe: -
Opiekun projektu: Agata Krakowska
Typ projektu: Popularnonaukowy

Niniejsza praca prezentuje wyniki badań nad wykorzystaniem biomasy grzyba Pleurotus ostreatus oraz chitozanu pochodzenia owadziego jako innowacyjnych, biokompatybilnych materiałów w opatrunkach nowej generacji. Celem badań była ocena zdolności boczniaka ostrygowatego do funkcjonalizacji nanocząstkami srebra (AgNPs), a także zbadanie potencjału chitozanu z owadów jako bioaktywnego składnika w matrycach. Analizy morfologiczne (STEM) wykazały, że P. ostreatus charakteryzuje się rozbudowaną siecią włókien i wysoką porowatością, co zapewnia optymalne właściwości sorpcyjne. Badania termiczne (TG/DSC) potwierdziły stabilność matrycy oraz zwiększoną retencję wody po wprowadzeniu AgNPs – zjawisko kluczowe dla utrzymania odpowiednio wilgotnego środowiska gojącej się rany. Ponadto wykazano, że dodatek soli nieorganicznych do kultur in vitro warunkuje skuteczną bioakumulację biopierwiastków. Istotnym odkryciem jest potwierdzenie efektu synergii między bioaktywnymi metabolitami grzybni a nanocząstkami srebra, co skutkuje silną aktywnością bakteriobójczą wobec patogennych szczepów Gram-dodatnich i Gram-ujemnych. Badania nad terapeutycznym potencjałem owadziego chitozanu oraz jego integracja w struktury biokompozytowe otwierają nowe możliwości w projektowaniu zaawansowanych, adhezyjnych materiałów medycznych. Opracowane biokompozyty łączą właściwości biomimetyczne ze stabilnością mechaniczną, stanowiąc wydajną i ekologiczną alternatywę dla syntetycznych opatrunków stosowanych w nowoczesnej medycynie i farmacji.