

JESIENNE WARSZTATY NAUKOWE
Centrum Studiów Zaawansowanych PW

Radziejowice
18-19 października 2014

X Warsztaty Naukowe Centrum Studiów Zaawansowanych PW

18-19 października 2014 r., Dom Pracy Twórczej, Pałac w Radziejowicach

Opieka merytoryczna: Stanisław Janeczko

Zespół: Aleksandra Burzyńska, Joanna Jaszurńska, Ewa Stefaniak,
Ilona Sadowska, Grażyna Wojewoda, Małgorzata Zielińska,
Anna Żubrowska-Zembrzaska

Projekt graficzny i skład: Małgorzata Zielińska



Centrum Studiów Zaawansowanych
Politechniki Warszawskiej

Pl. Politechniki 1, p. 152-154
00-661, Warszawa
www.csz.pw.edu.pl

Warsztaty Naukowe Centrum Studiów Zaawansowanych są uzupełnieniem oferty dydaktycznej i stypendialnej Centrum. Ich podstawowym celem jest przełamanie barier utrudniających integrację ludzi nauki, wynikających z podziałów strukturalnych i pokoleniowych. Organizowane dwa razy do roku spotkania stypendystów Centrum z wybitnymi uczonymi umożliwiają wymianę doświadczeń i nawiązanie współpracy naukowo-badawczej między uczestnikami reprezentującymi różne dziedziny nauki i etapy kariery naukowej. Inspirujące dyskusje, które towarzyszą warsztatom, przyczyniają się natomiast do poszerzenia horyzontów naukowych specjalistów biorących udział w spotkaniu.

W programie Jesiennych Warsztatów Naukowych przewidziano wystąpienia Profesorów i stypendystów CSZ oraz sesję posterową. Doktoranci i młodzi pracownicy naukowci PW zaprezentują wyniki badań prowadzonych w ramach przyznanych im stypendiów współfinansowanych ze środków Europejskiego Funduszu Społecznego.

Mamy nadzieję, że tegoroczne spotkanie spełni zakładane cele.

*Zespół Centrum Studiów Zaawansowanych
Politechniki Warszawskiej*

Harmonogram

Sobota / 18 października

8¹⁵ Wyjazd - Pl. Politechniki 1 (parking przed Gmachem Głównym PW)

I

- 10¹⁵ - 10³⁰ Oficjalne rozpoczęcie warsztatów przez profesora Stanisława Janeczko, Dyrektora Centrum Studiów Zaawansowanych Politechniki Warszawskiej
- 10³⁰ - 11¹⁰ *Material w świecie informacji. Budulec architektury XXI wieku* | wykład **profesora Jana Styka** z Wydziału Architektury PW
- 11¹⁰ - 11³⁰ *Ocena stanu powierzchni masywnej konstrukcji betonowej wykonana na podstawie wyników skanowania laserowego różnymi skanerami (TLS)* | **Janina Zaczek-Peplinska** z Wydziału Geodezji i Kartografii PW
- 11³⁰ - 11⁵⁰ *Deformacje filtracyjne gruntów niespoistych w przetworzeniach o małej miąższości* | **Agnieszka Dąbska** z Wydziału Inżynierii Środowiska PW
- 12⁰⁰ - 13³⁰ Obiad

II

- 13³⁰ - 13⁵⁰ *Label-free electrochemical detection of urokinase plasminogen activator (uPA) by RNA aptasensor* | **Marta Jarczewska** z Wydziału Chemicznego PW
- 13⁵⁰ - 14¹⁰ *Reakcje sprzęgania estrów aryloboronowych ze związkami arylolitowymi* | **Krzysztof Borys** z Wydziału Chemicznego PW
- 14¹⁰ - 14³⁰ *Aktywne tłumienie drgań z wykorzystaniem magnetoreologicznych elastomerów* | **Anna Boczkowska** z Wydziału Inżynierii Materiałowej PW
- 14³⁰ - 14⁵⁰ Przerwa kawowa

III

- 14⁵⁰ - 15¹⁰ *Modelowanie rozkładu temperatury w pakiecie baterijnym* | **Marcin Koniak** z Wydziału Transportu PW
- 15¹⁰ - 15³⁰ *Kinetyka i termodynamika estryfikacji akrylanu butylu. Badania laboratoryjne i modelowanie reakcji* | **Anna Ostaniewicz-Cydzik** z Wydziału Inżynierii Chemicznej i Procesowej PW
- 15³⁰ - 15⁵⁰ *Filtracja węglębna cieczy* | **Ewa Sztuk** z Wydziału Inżynierii Chemicznej i Procesowej PW
- 15⁵⁰ - 16¹⁰ *Barwny holograficzny wyświetlacz 3D z podziałem apertury pojedynczego SLM* | **Weronika Zaperty** z Wydziału Mechatroniki PW

IV

- 16³⁰ - 18⁰⁰ Sesja posterowa
- Symulacje i modelowanie struktur mikrokomponentów optyki światłowodowej* | **Michał Dudek** z Wydziału Mechatroniki PW
- O metastabilnym charakterze defektu GaCu w CuGaSe₂* | **Marek Maciaszek** z Wydziału Fizyki PW
- Opto-numeryczne metody badań obiektów inżynierskich* | **Krzysztof Malowany** z Wydziału Mechatroniki PW
- Wpływ czynników strukturalnych na oddziaływanie ferromagnetyczne w oligoaryloaminach* | **Łukasz Skórka** z Wydziału Chemicznego PW
- Światłowodowe zwielokrotnienie MIMO* | **Grzegorz Stępnik** z Wydziału Elektroniki i Technik Informacyjnych PW
- Room temperature magnetocaloric effect and magneto-transport properties in monovalent doped Pr_{0.6}Sr_{0.35}R_{0.05}MnO₃ (R = Na, K and Ag) manganites* | **Rachid Thaljaoui** z Wydziału Fizyki PW
- Przewidywanie równowag fazowych za pomocą modelu COSMO-RS* | **Michał Wlazło** z Wydziału Chemicznego PW
- Monokryształy ze stopów Ni-Mn-X wykazujących efekt magnetokaloryczny* | **Rafał Wróblewski** z Wydziału Inżynierii Materiałowej PW
- 18³⁰ Koncert (sala koncertowa w Pałacu, I piętro)
- 19³⁰ Uroczysta kolacja

Niedziela / 19 października

8³⁰ - 10⁰⁰ Śniadanie

V

10⁰⁰ - 10⁴⁰ **Profesor Stanisław Janeczko** Dyrektor Centrum Studiów Zaawansowanych PW - wykład specjalny

10⁴⁰ - 11⁰⁰ *Dozymetria komórkowa a nowe terapie celowane w medycynie nuklearnej* | **Dariusz Aksamit** z Wydziału Fizyki PW

11⁰⁰ - 11²⁰ *Wykorzystania systemów THz-TDS (Terahertz Time Domain Spectroscopy) do badania subfalowych struktur dyfrakcyjnych* | **Jarostaw Bomba** z Wydziału Fizyki PW

11²⁰ - 11⁴⁰ *Od dynamiki wiru kwantowego do zjawiska kwantowej turbulencji w ultra-zimnych gazach atomowych* | **Gabriel Wlazłowski** z Wydziału Fizyki PW

12⁰⁰ - 13⁰⁰ Obiad

13³⁰ Wyjazd do Warszawy

Abstrakty

prezentacje ustne

Spis treści

[1] Janina Zaczek-Peplinska, Wydział Geodezji i Kartografii PW <i>Ocena stanu powierzchni masywnej konstrukcji betonowej wykonana na podstawie wyników skanowania laserowego różnymi skanerami (TLS)</i>	strona 13
[2] Agnieszka Dąbska, Wydział Inżynierii Środowiska PW <i>Deformacje filtracyjne gruntów niespoistych w przewarstwieniach o małej miąższości</i>	strona 15
[3] Marta Jarczewska, Wydział Chemiczny PW <i>Label - free electrochemical detection of urokinase plasminogen activator (uPA) by RNA aptasensor</i>	strona 17
[4] Krzysztof Borys, Wydziału Chemiczny PW <i>Reakcje sprzęgania estrów aryloboronowych ze związkami arylolitowymi</i>	strona 19
[5] Anna Boczkowska, Wydział Inżynierii Materiałowej PW <i>Aktywne tłumienie drgań z wykorzystaniem magnetoreologicznych elastomerów</i>	strona 20
[6] Marcin Koniak, Wydział Transportu PW <i>Modelowanie rozkładu temperatury w pakiecie baterijnym</i>	strona 22
[7] Anna Ostaniewicz-Cydzik, Wydział Inżynierii Chemicznej i Procesowej PW <i>Kinetyka i termodynamika estryfikacji akrylanu butylu. Badania laboratoryjne i modelowanie reakcji</i>	strona 24
[8] Ewa Sztuk, Wydział Inżynierii Chemicznej i Procesowej PW <i>Filtracja węglębna cieczy</i>	strona 26
[9] Weronika Zaperty, Wydział Mechatroniki PW <i>Barwny holograficzny wyświetlacz 3D z podziałem apertury pojedynczego SLM</i>	strona 27
[10] Dariusz Aksamit, Wydział Fizyki PW <i>Dozymetria komórkowa a nowe terapie celowane w medycynie nuklearnej</i>	strona 29
[11] Jarosław Bomba, Wydział Fizyki PW <i>Wykorzystania systemów THz-TDS (Terahertz Time Domain Spectroscopy) do badania subfaloowych struktur dyfrakcyjnych</i>	strona 31
[12] Gabriel Wlaztowski, Wydział Fizyki PW <i>Od dynamiki wiru kwantowego do zjawiska kwantowej turbulencji w ultra-zimnych gazach atomowych</i>	strona 32

Janina Zaczek-Peplinska
Wydział Geodezji i Kartografii

Laureatka konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla nauczycieli akademickich CAS/32/POKL

Ocena stanu powierzchni masywnej konstrukcji betonowej wykonana na podstawie wyników skanowania laserowego różnymi skanerami (TLS)

W referacie przedstawiono przykład zastosowania wyników naziemnego skanowania laserowego do oceny stanu powierzchni zewnętrznych konstrukcji betonowej zapory wodnej. Przeanalizowano wyniki pomiarów doświadczalnych - skanowanie powierzchni odpowietrznej wybranych zapór betonowych skanerami laserowymi o różnych parametrach technicznych, tj. długość wykorzystywanej fali (kolor lasera), zasięg, możliwa do zdefiniowania gęstość punktów, sposób pomiaru odległości - skanery: Leica C10, Riegl VZ-400, Z+F Imager 5006h. Pomiary wykonywano w tych samych warunkach atmosferycznych, z tych samych stanowisk bazy testowej. Wyniki pomiarów opracowano m.in. metodami statystycznymi, definiując proste pola wzorcowe oraz metodami klasyfikacji nienadzorowanej i nadzorowanej w odniesieniu do wybranych fragmentów powierzchni o znanych właściwościach powierzchniowych betonu. Otrzymane wyniki pozwalają ocenić przydatność każdego z zastosowanych instrumentów do tego typu zadań oraz opracować zasady doboru instrumentu do praktycznego zastosowania.

Wynikiem praktycznym prezentowanego opracowania jest wskazanie na badanej powierzchni obszarów betonu, które należy np. uzupełnić, oczyścić lub zabezpieczyć w celu uniknięcia lub zatrzymania erozji powierzchni. Selekcja została wykonana na podstawie wyników klasyfikacji nadzorowanej wykonanej metodą największego prawdopodobieństwa w odniesieniu do integrowanych obrazów intensywności pozyskanych z różnych skanerów, materiał przygotowany według metody opisanej w [1]. Dodatkowo analizowano zdjęcia optyczne, termal-

ne i wyniki pomiarów wytrzymałości (twardości) powierzchniowej betonu za pomocą testów młotkiem Schmidta wykonanych w tym samym czasie co skanowanie laserowe.

[1] Zaczek-Peplinska J., Osińska-Skotak K., Kołakowska M., Wujanz D. (2014): Analysis of the possibility for using the results of terrestrial laser scanning (TLS) measurements and classification algorithms of images for the engineering structure surface condition assessment, in: Humair F., Matasci B., et al. (eds) Vertical Geology, from remote sensing to 3D geological modeling. Proceedings of the first Vertical Geology Conference, 5-7 February 2014, University of Lausanne, Switzerland, ss. 227-232

Agnieszka Dąbska

Wydział Inżynierii Środowiska

Laureatka konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla nauczycieli akademickich CAS/34/POKL*Deformacje filtracyjne gruntów niespoistych
w przewarstwieniach o małej miąższości*

Problem deformacji filtracyjnych w podłożu niejednorodnym (uwarstwionym) jest szczególnie aktualny przy realizacji posadowień fundamentów w wykopach oraz posadowień budowli hydrotechnicznych. Deformacje filtracyjne obserwowane w wykopach mogą doprowadzić do katastrofy budowlanej. Przyczyny powstawania deformacji filtracyjnych są bardzo złożone i zależą od wielu czynników. Dla deformacji spowodowanych przez suozję mechaniczną w przewarstwieniach gruntów niespoistych brak jest jednoznacznie sformułowanych warunków występowania tego zjawiska.

W laboratorium zostały wykonane modelowe badania filtracyjnej odporności gruntów niespoistych występujących w przewarstwieniach o niewielkiej miąższości. Badania wykonano na stanowisku badawczym wyposażonym w specjalnie do tego celu skonstruowany model. Metodyka i warunki wykonania laboratoryjnych badań deformacji filtracyjnych były zbliżone do warunków rzeczywistych - badania wykonano na przewarstwieniach piasku drobnego o miąższości od 4 do 8 mm, a stanowisko badawcze umożliwiało osiągnięcie gradientów hydraulicznych $i = 2 \div 3$. Przeprowadzone badania pozwoliły na:

- rozpoznanie deformacji filtracyjnych przewarstwień piasku drobnego o małej miąższości;
- ustalenie wartości gradientów krytycznych odporności filtracyjnej (ogólnej i miejscowej);
- określenie charakteru zniszczenia przewarstwień piasku drobnego o małej miąższości;
- ustalenie zależności między wartością krytyczną gradientu powo-

dującego zniszczenie warstwy a miąższością warstw piasku drobnego;

- ustalenie zależności pomiędzy czasem potrzebnym na wzrost wartości gradientu do wartości krytycznej, przy której nastąpiło zniszczenie warstwy w wyniku wystąpienia deformacji filtracyjnej a miąższością warstwy piasku drobnego.

Marta Jarczewska**Wydział Chemiczny**Laureatka konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla doktorantów CAS/33/POKLoraz **Rui Campos, Jesper S. Nielsen, Jørgen Kjems,**
Elżbieta Malinowska, Elena E. Ferapontova*Label – free electrochemical detection of urokinase
plasminogen activator (uPA) by RNA aptasensor*

Early cancer diagnosis is crucial for successful treatment of cancer, prognosis of tumour progression and individual response to treatment. Among the cancer diagnosis methods the detection of protein cancer biomarkers is advantageous to traditionally used techniques, as it enables the non-invasive analysis of cancer development. So far, there has been a number of proteins which are considered as reliable cancer biomarkers such as prostate-specific antigen (PSA), HER-2/neu, CA125 and CD30 [1]. Recent studies have revealed that urokinase plasminogen activator (uPA) can also serve as a biomarker of several types of cancer including ovarian, squamous cell carcinoma and breast cancer. uPA was successfully detected with the use of immunochemistry and immunoassays such as ELISA. The aptamer-based assays could be used alternatively to antibody-based immunoassays [2], especially in the form of inexpensive and instrumentally simple electrochemical devices. High specificity of aptamers towards different types of ligands with the possibility of modulation of aptamer binding properties makes aptamers exclusive biorecognition elements for the analysis of protein cancer biomarkers, even at low concentrations and with other interferents present in the real sample.

Herein, we present a label-free aptasensor for the analysis of urokinase plasminogen activator (uPA) [3]. The uPA-specific fluorinated RNA aptamer was tethered to the gold electrode via the phosphorothioate adenosine tag. The binding properties were modulated by the change of the electrode surface charge and type of the chosen redox indicator - ferricyanide and methylene blue. Under optimized conditions, the RNA-based assay allowed the detection of 1 pM uPA, within the

10^{-12} - 10^{-9} M linear range, which makes it useful for clinical applications and also important for designing the protein-binding aptasensors in general.

[1] Stamey, T. A.; Yang, N.; Hay, A. R. *New England Journal of Medicine* 1987, 317, 909-916

[2] Cho, E. J.; Lee, J. W.; Ellington, A. D. *Ann. Rev. Anal. Chem.* 2009, 2, 241-264

[3] Dupont, D. M.; Madsen, J. B.; Hartmann, R. K.; Tavitian, B.; Ducongé, F.; Kjems, J.; Andreasen, P. A. *RNA* 2010, 16, 2360-2369

Krzysztof Borys

Wydział Chemiczny

Laureat konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla doktorantów CAS/33/POKL

Reakcje sprzęgania estrów aryloboronowych ze związkami arylolitowymi

Estry boronowe stanowią bardzo istotną grupę związków boroorganicznych przede wszystkim z punktu widzenia aplikacyjności w syntezie organicznej [1]. Stosowane są one najczęściej jako bloki budulcowe do otrzymywania sfunkcjonalizowanych układów organicznych na drodze reakcji krzyżowego sprzęgania Suzuki-Miyaura [2,3]. Do takich układów należy m.in. zdecydowana większość związków wykazujących aktywność biologiczną, a stosowanych jako substancje czynne leków czy środków ochrony roślin. Z punktu widzenia gospodarki, estry boronowe stanowią więc cenny materiał do otrzymywania szeregu kluczowych związków w przemyśle farmaceutycznym oraz pestycydowym, umożliwiając selektywne i wydajne otrzymanie pożądaných produktów

Ze względu na chiralność biomolekuł w organizmach żywych, aktywność biologiczna może być uzależniona od czynności optycznej związku chemicznego. Istotna jest więc możliwość otrzymywania związków bioaktywnych w sposób stereoselektywny - synteza asymetryczna. Temat projektu stanowił połączenie powyższych zagadnień, skupiając się na zastosowaniu reakcji sprzęgania estrów aryloboronowych ze związkami arylolitowymi do syntezy ligandów użytecznych w syntezie asymetrycznej. Proces przeprowadzany jest bez użycia katalizatorów opartych na metalach przejściowych, co jest korzystne ze względu na obniżony koszt syntezy i brak uciążliwych do całkowitego usunięcia pozostałości katalizatora. Zoptymalizowany proces stanowi cenną alternatywę dla tradycyjnych metod otrzymywania chiralnych ligandów biarylowych.

[1] D. G. Hall, „Boronic Acids: Preparation and Applications in Organic Synthesis, Medicine and Materials”, Second Edition, Wiley-VCH, Weinheim, 2011

[2] N. Miyaura, A. Suzuki, „Palladium-catalyzed cross-coupling reactions of organoboron compounds”, Chem. Rev. 1995, 95, 2457-2483

[3] S. Kotha, K. Lahiri, D. Kashinath, „Recent applications of the Suzuki-Miyaura cross-coupling reaction in organic synthesis”, Tetrahedron 2002, 58, 9633-9695

Aktywne tłumienie drgań z wykorzystaniem magnetoreologicznych elastomerów

Magnetoreologiczne elastomery (MRE) należą do grupy materiałów inteligentnych, których właściwości zmieniają się pod wpływem pola magnetycznego, a zmiany te są w pełni odwracalne. MRE składają się z ferromagnetycznych cząstek rozmieszczonych w elastomerowej osnowie. O ich atrakcyjności decyduje odwracalna zmiana właściwości i wymiarów pod wpływem pola magnetycznego, dzięki czemu mogą one znaleźć zastosowanie jako elementy tłumiące drgania, czujniki lub aktuatory. Odpowiedź MRE na zmieniające się pole magnetyczne zachodzi w czasie rzeczywistym w sposób ciągły, natychmiastowy i odwracalny. Kształtowanie struktury MRE zachodzi podczas utwardzania w polu magnetycznym, powodując tworzenie tzw. struktury kolumnowej z cząstek ferromagnetycznych. Zmiana właściwości MRE pod wpływem działania pola magnetycznego silnie zależy od ich struktury ukształtowanej podczas utwardzania elastomeru. Opracowane na Wydziale Inżynierii Materiałowej MRE o znaczącym względnym efekcie magnetoreologicznym zostały wykorzystane do wytworzenia demonstratorów aktywnych tłumików drgań w Instytucie Konstrukcji Lekkich i Technologii Polimerowych (ILK) Uniwersytetu w Dreźnie. Do wytworzenia demonstratorów, na podstawie badań reologicznych, wybrano elastomery zawierające odpowiednio 11 i 33% obj. cząstek żelaza karbonylnkowego o średniej średnicy cząstek 9 μm . Przeprowadzone badania eksperymentalne miały na celu wykazanie, iż zastosowanie elementów wykonanych z elastomerów magnetoreologicznych w budowie aktywnych tłumików pozwoli w sposób prosty wyprowadzić konstrukcję z drgań rezonansowych poprzez zwiększenie sztywności elementów MRE wskutek czasowego działania pola magnetycznego.

Demonstrator składał się z:

- belki o przekroju prostokątnym (długość/szerokość/wysokość: 1080/80/10mm) wykonanej ze stopu aluminium PA6 z dodatkową masą na jej końcu swobodnym
- aktywnego układu tłumiącego drgania składającego się z cewki magnetycznej oraz walcowych elementów MRE
- systemu wzbudzającego drgania TV 50018 firmy TIRA ze wzbudnikiem drgań i wzmacniaczem.

Uzyskane wyniki pozwoliły stwierdzić, że zastosowanie aktywnych elementów tłumiących z MRE, w których można uzyskać zmienną sztywność zależnie od natężenia działającego pola magnetycznego, prowadzi do wytłumienia drgań i wyprowadzenia konstrukcji z rezonansu.

Laureat konkursów na: naukowe stypendia wyjazdowe dla doktorantów CAS/3/POKL, naukowe stypendia dla doktorantów CAS/22/POKL oraz naukowe stypendia wyjazdowe dla nauczycieli akademickich CAS/34/POKL

Modelowanie rozkładu temperatury w pakiecie bateryjnym

Duże i złożone akumulatory zwane pakietami bateryjnymi znajdują obecnie coraz szersze zastosowanie w energetyce i transporcie. Stanowią źródła zasilania elektrycznych i hybrydowych samochodów, autobusów oraz łodzi. Stanowią także rezerwę energii m.in. w samolotach. O awariach występujących w czasie ich eksploatacji można dowiedzieć się z mediów, jak to miało miejsce z akumulatorami zainstalowanymi w Boeingu 787. Widać więc wyraźnie jak istotnym elementem jest pakiet bateryjny zarówno ze względu na pełnioną funkcję, jak i bezpieczeństwo.

Projektowanie pakietu bateryjnego składającego się z wielu ogniw elektrochemicznych, układów połączeń między nimi, czujników i elementów elektronicznych to proces złożony i czasochłonny. Wykonanie pakietu bateryjnego wymaga określenia następujących parametrów:

- elektrycznych: pojemność wraz z napięciem i prądami;
- mechanicznych: wymiary, sposób montażu;
- komunikacyjnych: protokoły komunikacji z innymi elementami systemu zasilania;
- bezpieczeństwa: układ chłodzenia i grzania, obudowa.

Przedmiotem mojej pracy podczas wyjazdu naukowego w ramach stypendium CSZ PW, było właśnie analizowanie i modelowanie rozkładów temperatury dla różnych konstrukcji pakietów bateryjnych. Do wykonania prac wykorzystałem oprogramowanie COMSOL Multiphysics. Umożliwia ono symulację procesów fizycznych metodą elementów skończonych. Dzięki temu miałem możliwość zaobserwowania

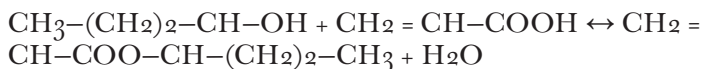
m.in. wpływu grzania rezystancyjnego na rozptyw temperatury w urządzeniu.

Otrzymane wyniki pozwalają na wybór konstrukcji mechanicznej, elektrycznej, jak i układu grzania/chłodzenia, spełniających wymagania zawarte w specyfikacji i stanowią podstawę dla dalszych prac związanych z fizycznym prototypowaniem.

Kinetyka i termodynamika estryfikacji akrylanu butylu. Badania laboratoryjne i modelowanie reakcji

Związki akrylowe mają niezwykle ważne znaczenie w wielu gałęziach przemysłu. Akrylan butylu stosowany jest do produkcji farb, lakierów, polimerów, a także w przemyśle tekstylnym. Światowe zapotrzebowanie na akrylan butylu rośnie od kilku lat. Również normy czystości dla akrylanu butylu stają się coraz wyższe [1].

Reakcja estryfikacji akrylanu butylu jest limitowana przez ustalającą się równowagę chemiczną pomiędzy reagującym kwasem akrylowym oraz n-butanolem.



Produktem tej reakcji jest akrylan butylu oraz woda. Ponadto reakcja przebiega przy użyciu katalizatora oraz niesie ze sobą wysokie ryzyko polimeryzacji. W przemyśle stosuje się kilka rodzajów katalizatorów zarówno w formie ciekłej, jak i katalizatorów stałych [2].

Podczas odbytego stażu zostały przeprowadzone badania związane z określeniem kinetyki i termodynamiki reakcji tworzenia akrylanu butylu. Jako katalizator w badaniach eksperymentalnych zastosowano żywicę jonowymienną Amberlyst 15 - wet. Reakcje prowadzono dla kilku temperatur w zakresie od 50°C do 90°C. Badano wpływ początkowego stosunku substratów reakcji (stosunek butanolu do kwasu akrylowego 1:1, 2:1 oraz 3:1) oraz zbadano reakcję dla trzech różnych udziałów katalizatora w reakcji [3].

Kolejną fazą prowadzonych badań było stworzenie modelu matematycznego, który odwzorowałby otrzymane wyniki badań laboratoryjnych. Po analizie modeli proponowanych w literaturze i implementacji ich w środowisku gPROMS, jako najlepszy model badanej reakcji wybrany został uproszczony model matematyczny Langmuir-Hinshel-

wood-Hougen-Watson [4]. Przy użyciu wybranego modelu matematycznego dokonano estymacji parametrów kinetycznych i termodynamicznych estryfikacji akrylanu butylu. Porównanie wyników symulacji i wyników eksperymentalnych pokazuje dobre odwzorowanie procesu z użyciem modelu matematycznego. Względne odchylenie standardowe otrzymanych wyników wynosiło 4,48% [3].

[1] ICIS Chem. Bus. (2006), 1 (43), 31

[2] Sert, E.; Buluklu, A. D.; Karakuş, S.; Atalay, F. S., Chem. Eng. Process. (2013), in press.

[3] Ostaniewicz-Cydzik A. M., Pereira C. S. M., Molga E., Rodrigues A. E., Ind. Eng. Chem. Res. (2014), 53, 6647–6654

[4] Darge, O.; Thyron, F. C. , J. Chem. Technol. Biotechnol. (1993), 58, 351–355

Filtracja wgłębna cieczy

Prawidłowo zaprojektowany filtr powinien charakteryzować się wysoką skutecznością zatrzymywania zanieczyszczeń, niskimi oporami przepływu oraz długą żywotnością. Dzisiejsze filtry nie spełniają wszystkich założeń filtracji wgłębnej. Większość z nich pracuje krótko i nie zatrzymuje cząstek w całej swej objętości. Wiedza na temat tego procesu jest znana głównie dla początkowego stadium. Proces nieustalanej filtracji wgłębnej nie został jeszcze w pełni poznany. Przeprowadzono badania standardowych i powierzchniowo zmodyfikowanych tlenkiem cynku filtrów włókninowych podczas całego cyklu pracy, pod kątem usuwania bakterii i cząstek stałych.

Wyniki pokazują, jak prawidłowo projektować strukturę filtrów włókninowych, aby w pełni wykorzystać założenia procesu filtracji wgłębnej, i tym samym polepszyć ich jakość.

Weronika Zaperty
Wydział Mechatroniki

Laureatka konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla doktorantów CAS/33/POKL

Barwny holograficzny wyświetlacz 3D z podziałem apertury pojedynczego SLM

Od momentu wynalezienia holografii w 1962 roku, w technice tej pokładano wielkie nadzieje, jako przyszłej technologii obrazowania 3D. Spektakularne możliwości, takie jak: rozmiary obrazów rzędu kilkudziesięciu centymetrów, kątowne pole widzenia dochodzące do 180°, kilkumetrowa głębia ostrości, rozdzielczość znacznie przewyższająca możliwości ludzkiego oka wyróżniały holografię konwencjonalną spośród innych technik 3D[1].

Rozpoczęta w latach 90. cyfryzacja, dała holografii szansę na zastosowanie w multimediami poprzez rozdzielenie procesów rejestracji od rekonstrukcji w czasie i przestrzeni. Jednak dostępne detektory (CCD) oraz wyświetlacze (SLM), charakteryzują się niskimi rozdzielczościami i dużymi wymiarami piksela, ograniczając powierzchnię hologramu (aperturę) do kilkunastu milimetrów, a kątowne pole widzenia do kilku stopni. Ponadto, urządzenia te ograniczyły wykorzystanie holografii cyfrowej do pracy z promieniowaniem laserowym (monochromatycznym).

W związku z ograniczeniami technologicznymi powstały inicjatywy poświęcone zwiększeniu powierzchni i kątownego pola widzenia hologramów przez zastosowanie apertury syntetycznej (wykorzystanie kilku urządzeń jednocześnie) [2]. Ponieważ pojedynczy SLM w danej chwili może rekonstruować poprawnie tylko jedną barwę, wprowadzenie do holografii koloru, podobnie jak w fotografii, związane jest z mieszaniem trzech komponentów - czerwonego, zielonego i niebieskiego. Popularne metody, takie jak: multipleksing czasowy (synchronizacja oświetlenia i danych) lub multipleksing przestrzenny (wykorzystanie trzech SLM), powodują spadek częstotliwości odświeżania obrazu lub wzrost skomplikowania konstrukcji. Parametry te są szczególnie istotne

w przypadku układów z aperturą syntetyczną, dlatego wciąż trwają badania nad kolejnymi rozwiązaniami [3].

Podczas warsztatów przedstawię metodę multipleksingu przestrzennego, opartą na podziale apertury pojedynczego SLM na trzy komponenty barwne z wykorzystaniem maski filtrów RGB. Technika ta nie powoduje spadku częstotliwości odświeżania obrazu ani nadmiernej komplikacji konstrukcji układu. W tym przypadku, kosztem jest trzykrotne zmniejszenie powierzchni każdego z trzech komponentów. W prezentacji przedstawię szczegółową analizę tego rozwiązania w kontekście zastosowania w układzie holograficznego wyświetlacza wideo, a także przedstawię wyniki eksperymentalne dla pojedynczego SLM.

[1] M. Pluta, „Holografia optyczna: Podstawy fizyczne”, PWN (1980)

[2] M.Kujawska et al., „Multiwavefront digital holographic television”, Opt. Express 20, pp. 2324-36 (2014)

[3] M.Makowski et al., „Simple holographic projection in color”, Opt. Express 20, 25130-25136 (2012)

Dariusz Aksamit

Wydział Fizyki

Laureat konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla doktorantów CAS/33/POKL*Dozymetria komórkowa a nowe terapie celowane
w medycynie nuklearnej*

Odkąd Maria Skłodowska-Curie rozpoczęła pracę nad leczeniem nowotworów przy pomocy promieniowania jonizującego minęło całe stulecie. Od tego czasu nastąpił niebywały postęp w naszej wiedzy o promieniowaniu oraz w technikach jego wytwarzania. Obecnie dysponujemy niezwykle wyrafinowanymi urządzeniami do napromienienia pacjentów onkologicznych zewnętrznymi wiązkami fotonów, elektronów i ciężkich jonów. Rozwinęła się również gałąź przemysłu produkcji izotopów promieniotwórczych, wymagająca budowy reaktorów jądrowych lub akceleratorów (w tym cyklotronów). Niestety, mimo wspaniałych osiągnięć i milionów wyleczonych ludzi, wciąż do końca nie rozumiemy, jak promieniowanie oddziałuje na organizm. Odpowiedź na powyższy problem próbuje znaleźć radiobiologia, czyli nauka łącząca fizykę promieniowania z biologią i biochemią komórki (a w dalszej perspektywie – tkanek, narządów i organizmu). Jednym z jej zagadnień jest ilościowe określenie czynników związanych z promieniowaniem wpływającym na śmierć komórki.

W trakcie stażu w Centrum Nauk Radiofarmaceutycznych, będącego częścią ETH Zurich i Instytutu Paula Scherrera, zajmowałem się dozymetrią komórkową. Polega ona na szacowaniu dawek, jakie dany radiofarmaceutyk deponuje w obrębie jądra komórkowego, w zależności od czynników takich jak: rodzaj izotopu (determinujący rodzaj promieniowania: jego typ, zasięg, energię, efektywność biologiczną) i rodzaj markera biologicznego (wpływającego na to, czy radiofarmaceutyk lokalizuje się na błonie komórkowej, wnika do cytoplazmy, czy wbudowuje się w jądro).

Podczas prezentacji przedstawię założenia, główne cele i problemy medycyny nuklearnej i radiofarmacji, nakreślę współczesne kierunki

badań w celowanej terapii radioizotopowej (*Targeted Radionuclide Therapy, TRT*) i przedstawię wyniki otrzymane podczas pracy w Instytucie nad izotopami będącymi w fazie testów na zwierzętach.

Jarosław Bomba

Wydział Fizyki

Laureat konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla doktorantów CAS/33/POKL

*Wykorzystania systemów THZ-TDS
(Terahertz Time Domain Spectroscopy)
do badania subfalowych struktur dyfrakcyjnych*

Promieniowanie terahercowe ma długości fali od 3mm (0,1 THz) do 30 μm (10THz). Dzięki jego właściwościom nie jonizuje, przechodzi przez plastik, drewno, papier, kości, suche jedzenie, ubrania. Może zostać wykorzystane w medycynie np. do badania ran bez zdejmowania opatrunków. Dzięki właściwości penetracji przez ubranie, znalazło szerokie zastosowanie przy budowie skanerów, które pozwalają wykryć materiały niebezpieczne (np. broń palną, broń białą). Wiele materiałów oświetlonych promieniowaniem terahercowym daje charakterystyczne widmo, dzięki któremu możemy z łatwością określić jego skład.

Prowadzone są zaawansowane prace badawcze nad skanerem poczty, który pozwoli na analizowanie zawartości kopert bez ich otwierania, dzięki czemu przemyt narkotyków stanie się prawie niemożliwy. Promieniowanie terahercowe możemy także wykorzystać do przesyłania informacji. Dzięki jego dużej pojemności, możemy przesłać informację bez modulacji z szybkością ok. 100 Gbit/s (1THz).

Wykorzystując technikę druku 3D oraz precyzyjnych wycinarek laserowych, zyskaliśmy możliwość łatwego i taniego wytwarzania elementów dyfrakcyjnych dla promieniowania terahercowego. W ostatnich latach wiele materiałów zostało przebadanych pod tym kątem. Do budowy struktur został wykorzystany nawet papier [1].

W czasie prezentacji będę chciał przedstawić podstawy działania układu THZ-TDS oraz wyniki uzyskane podczas pobytu na stypendium finansowanym ze środków Centrum Studium Zawansowanych Politechniki Warszawskiej.

[1] Agnieszka Siemion, Andrzej Siemion, Michał Makowski, Jarosław Suszek, Jarosław Bomba, Adam Czerwiński, Frédéric Garet, Jean-Louis Coutaz, Maciej Sypek, „Diffractive Paper Lens for Terahertz Optics”, Optics Letters, Vol. 37 Issue 20, pp. 4320-4322 (2012)

*Od dynamiki wiru kwantowego do zjawiska kwantowej
turbulencji w ultra-zimnych gazach atomowych*

Wiry kwantowe są najbardziej charakterystyczną manifestacją zjawiska nadciekłości. Ich generacja, dynamika i mechanizmy rozpadu odsześciu dekad są przedmiotem intensywnych badań naukowych. Otrzymanie pod koniec lat 90-tych kondensatu Bosego-Einsteina w ultra-zimnych gazach atomowych typu bozonowego, a następnie stanu nadciekłego w gazach typu fermionowego, otworzyło nowy rozdział w badaniach nad fizyką wirów kwantowych. Obecnie ultra-zimne gazy atomowe pozwalają na wykonanie bardzo precyzyjnych badań zarówno eksperymentalnych jak i teoretycznych, w niemal wszystkich aspektach związanych z dynamiką wirów nadciekłych. W trakcie prezentacji przedstawię wkład kolaboracji Politechnika Warszawska - Uniwersytet Stanu Waszyngton (USA) w zrozumienie natury tych subtelnych tworów. W szczególności, pokażę, w jaki sposób największe superkomputery świata odkrywają przed nami niezwykle złożoną dynamikę wirów kwantowych, poczynając od pojedynczego wiru aż po układ wielu oddziałujących ze sobą wirów. W tym ostatnim przypadku dynamika układu posiada wszystkie cechy spodziewane dla niezwykle subtelnego zjawiska kwantowej turbulencji [1].

[1] A. Bulgac, M.M. Forbes, M.M. Kelley, K.J. Roche, G. Włazłowski, Phys. Rev. Lett. 112, 025301 (2014); G. Włazłowski, A. Bulgac, M.M. Forbes, K.J. Roche, arXiv:1404.1038 (2014)

Abstrakty

sesja posterowa

Spis treści

- [1] Michał Dudek, Wydział Mechatroniki PW | *Symulacje i modelowanie struktur mikrokomponentów optyki światłowodowej* | strona 37
- [2] Marek Maciaszek, Wydział Fizyki PW | *O metastabilnym charakterze defektu GaCu w CuGaSe₂* strona 39
- [3] Krzysztof Malowany, Wydział Mechatroniki PW | *Opto-numeryczne metody badań obiektów inżynierskich* strona 41
- [4] Łukasz Skórka, Wydział Chemiczny PW | *Wpływ czynników strukturalnych na oddziaływanie ferromagnetyczne w oligoaryloaminach* strona 43
- [5] Grzegorz Stępnik, Wydział Elektroniki i Technik Informacyjnych PW | *Światłowodowe zwiłokrotnienie MIMO* strona 45
- [6] Rachid Thaljaoui, Wydział Fizyki PW | *Room temperature magnetocaloric effect and magneto-transport properties in monovalent doped Pr_{0.6}Sr_{0.35}R_{0.05}MnO₃ (R = Na, K and Ag) manganites* strona 46
- [7] Michał Wlazło z Wydziału Chemicznego PW | *Przewidywanie równowag fazowych za pomocą modelu COSMO-RS* strona 47
- [8] Rafał Wróblewski, Wydział Inżynierii Materiałowej PW | *Mono-kryształy ze stopów Ni-Mn-X wykazujących efekt magnetokaloryczny* strona 49

Michał Dudek

Wydział Mechatroniki

Laureat konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla doktorantów CAS/33/POKL

Symulacje i modelowanie struktur mikrokomponentów optyki światłowodowej

Kilka lat temu zaproponowana została uproszczona metoda wytwarzania polimerowych elementów optycznych o wielkościach rzędu mikrometrów na zakończeniach światłowodów [1]. Polega ona na osadzeniu kropli mieszanki polimerowej na czole światłowodu, a następnie wykorzystaniu wiązki wychodzącej do zainicjowania procesu fotopolimeryzacji. Pozwala uzyskiwać krótkie odcinki (rzędu kilkudziesięciu mikrometrów, a nawet do kilkudziesięciu milimetrów) polimerowych światłowodów, zwanych mikrotipami, tworzonych jako przedłużenie rdzenia światłowodu bazowego. Tego typu struktury są wykorzystywane, przede wszystkim, do zastosowań w obrazowaniu bliskiego pola (mikroskopia SNOM/NSOM) oraz jako czujniki. Elementy te mogą być również użyte do poprawienia efektywności sprzęgania światłowodów optycznych z innymi światłowodami (różnych typów) lub diodami laserowymi.

Z zastosowań mikrotipów w prosty sposób wyniknęła możliwość łączenia dwóch światłowodów przy pomocy tzw. polimerowych mostków optycznych. Umożliwia to wytworzenie stałych połączeń zarówno pomiędzy światłowodami, jedno-, jak i wielomodowymi. Złącza takie są stosunkowo tanie i łatwe do wykonania, co sprawia że mają szansę znaleźć zastosowanie w sieciach telekomunikacyjnych typu FTTH (*fiber to the home*). Ze względu na ich właściwości mechaniczne oraz optyczne, mogą być wykorzystywane również jako czujniki, a także do mechanicznego łączenia światłowodów jednomodowych z wielomodowymi, fotonicznymi, a nawet plastikowymi.

Pomimo szeregu zastosowań i nowych możliwości, metoda wytwarzania polimerowych mikrotipów oraz mostków ciągle wymaga dopracowania pod względem stabilności oraz powtarzalności wytwarzanych komponentów. Do udoskonalenia technologii wytwarzania

niezbędne jest połączenie technik produkcyjnych z symulacjami numerycznymi (metoda różnic skończonych w dziedzinie czasu - FDTD) oraz wynikami eksperymentalnymi [2], w szczególności dostarczającymi informacji o: trójwymiarowym rozkładzie współczynnika załamania mikrokomponentów, rozkładzie wiązki propagującej się w bliskim i dalekim polu (mikrotipy) oraz stratach transmisyjnych i odbiciowych (mostki).

[1] M. Hocine et al., *Synthetic Metals* 127 (2002) 313-318

[2] M. Dudek et al., *Opt. Eng.* 53(1) (2014) 016113

Marek Maciaszek

Wydział Fizyki

Laureat konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla doktorantów CAS/29/POKL

O metastabilnym charakterze defektu GaCu w CuGaSe₂

Cu(In,Ga)Se₂ to jeden z najbardziej obiecujących materiałów fotowoltaicznych. Maksymalna sprawność opartego na nim ogniwa słonecznego osiągnęła w warunkach laboratoryjnych 21%. Wysoka sprawność, względna prostota procesu produkcyjnego, odporność na odchylenia stechiometryczne i stabilność materiału to główne atuty technologii opartej na Cu(In,Ga)Se₂. Wysoki współczynnik absorpcji umożliwia wytwarzanie wydajnych ogniw o grubości tylko paru mikrometrów. Jednak rozumienie zjawisk odpowiadających za akcję fotowoltaiczną pozostaje w tyle za sukcesami technologicznymi. Przypuszcza się, że bez głębszego zrozumienia zjawisk elektronowych zachodzących w Cu(In,Ga)Se₂, możliwości dalszego rozwoju opartej na nim technologii pozostaną ograniczone.

Za główny czynnik ograniczający wydajność ogniw opartych na Cu(In,Ga)Se₂ uważa się głębokie defekty strukturalne. Spośród nich najliczniejsze są defekty podstawieniowe In/GaCu. Ze względu na położenie energetyczne, mogą one odgrywać rolę centrum rekombinacyjnego, i dlatego istotnie wpływać na wydajność akcji fotowoltaicznej. Z danych literaturowych wiadomo, że defekt GaCu (w odróżnieniu od InCu) może wykazywać własności metastabilne. Znaczy to, że przejścia do niektórych stanów ładunkowych są związane ze znaczną reorganizacją sieci krystalicznej w otoczeniu defektu. Takie przejścia wymagają aktywowania bariery energetycznej, związanej z ruchem jonu w nowe położenie. Do tej pory nie określono wysokości barier ani charakteru możliwych przejść. W ramach wyjazdu zagranicznego zbadano poprzez obliczenia *ab-initio* oddziaływanie defektów GaCu, GaCu-VCu i GaCu-2VCu z nośnikami i opracowano diagramy konfiguracyjne możliwych przejść. Otrzymane wyniki mogą stać się podstawą do eksperymentów weryfikujących opracowany model, i w efekcie pomóc w określeniu wpływu tych defektów na wydajność ogniwa słonecznego.

W ramach wystąpienia omówione zostanie działanie ogniwa cienkowarstwowego, proces rekombinacji nośników przez defekty oraz zastosowane metody obliczeniowe. Następnie przedstawione zostaną wyniki obliczeń. Szczególna uwaga zostanie zwrócona na związek otrzymanych danych z wydajnością ogniw słonecznych.

Krzysztof Malowany
Wydział Mechatroniki

Laureat konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla doktorantów CAS/29/POKL

Opto-numeryczne metody badań obiektów inżynierskich

Konstrukcja, optymalizacja i eksploatacja wysoko odpowiedzialnych elementów konstrukcji inżynierskich wymagają połączenia numerycznych metod modelowania z badaniami eksperymentalnymi modeli fizycznych oraz samych konstrukcji. Tematem pracy naukowej jest opracowanie metody opto-numerycznych badań konstrukcji inżynierskich oraz elementów konstrukcyjnych z wykorzystaniem metody elementów skończonych (MES) oraz metody Cyfrowej Korelacji Obrazu (CKO). Podejście to efektywnie zaimplementowane, zwłaszcza z wykorzystaniem danych eksperymentalnych pozyskanych metodą CKO ma szansę zmodernizować optymalizację projektowania nowych struktur inżynierskich (np. struktur kompozytowych, cienkościennych wielkogabarytowych konstrukcji blaszanych), jak i zmodyfikować podejście nadzoru budowlanego do spraw monitorowania konstrukcji budowlanych.

Obecnie prace naukowe realizowane są w ramach projektu OPT-4BLACH (Opto-numeryczne metody badań i monitorowania niskokosztowych obiektów użyteczności publicznej z cienkościennych blach profilowanych: PBS₁/A2/9/2012), we współpracy z Instytutem Techniki Budowlanej w Warszawie. Planowane jest opracowanie iteracyjnego algorytmu, który na podstawie porównania map przemieszczeń i odkształceń (z modelu numerycznego i otrzymanych metodą CKO) będzie zmieniał dane wejściowe modelu numerycznego (np. parametry materiału, macierzy ortotropii) w celu uzyskania jak najlepszej zbieżności danych doświadczalnych i numerycznych. Obecnie zakończony został pierwszy etap prac, w ramach którego wykonano pomiary wycinków blachy łukowej. Kolejne dwa etapy prac obejmują pomiary segmentów blach łukowych (wstępne pomiary zostały wykonane w 2012 roku[1]) oraz pomiary *in-situ* pełno gabarytowej konstrukcji.

W okresie wyjazdu stypendialnego w ramach projektu „Program Rozwojowy Politechniki Warszawskiej” planowane są prace związane z eksperymentalno-numerycznymi metodami analizy i optymalizacji

konstrukcji skrzydeł samolotów, w której szczególnie ważną rolę odgrywa wiedza pozyskana na drodze doświadczeń przeprowadzonych na pełnogabarytowych konstrukcjach w warunkach kontrolowanego obciążania (pomiary laboratoryjne na pełnowymiarowym modelu, z wykorzystaniem metody 3D CKO). Wiedza ta wykorzystana zostanie do modyfikacji i kalibracji modelu numerycznego.

[1] Piekarczyk A, Malesa M, Kujawska, Malowany K, Application of hybrid FEM-DIC method for assessment of low cost building structures, *Experimental Mechanics*, 52(9) pp. 1297-1311, Springer, 2012

Łukasz Skórka
Wydział Chemiczny

Laureat konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla doktorantów CAS/31/POKL

Wpływ czynników strukturalnych na oddziaływanie ferromagnetyczne w oligoaryloaminach

W historii nauki, oddziaływania ferromagnetyczne stanowiły od zawsze domenę związków nieorganicznych. Jednakże, naśladując trend wyznaczony przez organiczną elektronikę w drugiej połowie XX w., kiedy rolę półprzewodników pełnią związki zbudowane w oparciu o szkielet węglowy, można pomyśleć o analogicznym transferze właściwości magnetycznych [1].

W przeciwieństwie do kompleksów metali przejściowych dla związków organicznych istnieje konieczność generowania niesparowanych elektronów, co można zrealizować na dwa sposoby: poprzez wytwarzanie rodników lub kationorodników, przy czym indywidualnie te muszą być stabilne termicznie. Kolejnym kluczowym kryterium jest efektywne sprzężenie spinów elektronowych w celu uzyskania uporządkowania ferromagnetycznego. Realizacja tego celu stanowi główny przedmiot badań wpływu czynników strukturalnych na zasięg i siłę sprzężenia ferromagnetycznego. W praktyce można je podzielić na trzy równoważne części: projektowanie właściwości w oparciu o metody obliczeniowe (DFT), synteza oraz pomiary spektroskopowe i fizykochemiczne (impulsowy EPR oraz SQUID). Ukoronowaniem całości jest porównanie uzyskanych wyników eksperymentalnych z tymi wyznaczonymi teoretycznie.

Poszukując odpowiedzi na pytanie, jakie elementy strukturalne mają wpływ na obserwowane zależności, wykorzystuje się związki o charakterze modelowym, które w swojej topologii zawierają naprzemian ułożone jednostki generujące spin (SBU) i jednostki sprzęgające spin (SCU). Do grupy jednostek sprzęgających można zaliczyć niesymetrycznie podstawione pochodne benzenu jak np.: 1,3-fenylen, 3,4'-bifenylen itp., natomiast jednostki generujące spin stanowią skoniungowane układy aryloaminowe [1]. Istotną rolę pełnią również

czynniki drugiego rzędu, które stanowią dodatkowe mostki węglowe (C-C) lub metylenowe (-CH₂-) i są odpowiedzialne za dodatkowe usztywnienie struktury.

[1]. P. Bujak, I. Kulszewicz-Bajer, M. Zagórska, V. Maurel, I. Wielgus, A. Proń, Chem. Soc. Rev., 42 (2013) 8895-8999

Grzegorz Stępnia**Wydział Elektroniki i Technik Informacyjnych**Laureat konkursu na naukowe stypendia wyjazdowe
dla nauczycieli akademickich CAS/34/POKL

Światłowodowe zwielokrotnienie MIMO

Telekomunikacja optyczna stanowi rdzeń współczesnej gospodarki opartej na wiedzy i jest filarem rozwoju społeczeństwa informacyjnego. Usługi takie jak HDTV czy coraz powszechniejsze przetwarzanie w chmurze wymagają coraz wyższych przepływności oferowanych przez włókna optyczne. W ostatnich latach ten wzrost był umożliwiony przez technikę WDM oraz wykorzystanie efektywnych widmowo modulacji. Teoretycznie maksymalna przepływność światłowodu jednomodowego, została przy użyciu tych technik osiągnięta. Nadzieję na dalszy wzrost przepływności oferowanych przez włókna optyczne daje zwielokrotnienie przestrzenne, w którym do światłowodu wprowadzanych jest wiele sygnałów o tej samej długości fali. Jednak światłowód transmisyjny nie może być klasycznie wykorzystywanym światłowodem jednomodowym, ale kilku- lub wielomodowym. W pracy zaprezentowane zostaną dwa podejścia do realizacji takiego systemu w światłowodzie wielomodowym. W pierwszym przypadku nie będzie stosowane selektywne pobudzenie modów światłowodu na wejściu, a dywersyfikacja systemu osiągnięta zostanie (paradoksalnie) przez dużą szybkość modulacji danych. Wadą tego systemu jest to, że wymaga on złożonego przetwarzania cyfrowego sygnału w odbiorniku. W drugim podejściu, na wejściu światłowodu zastosowany zostanie modulator przestrzenny światła, którego zadaniem będzie selektywne pobudzenie wybranego modu światłowodu w danym kanale. Ten układ, choć bardziej skomplikowany w nadajniku, umożliwiwa prostszy odbiór sygnału na wyjściu systemu.

Room temperature magnetocaloric effect and magneto-transport properties in monovalent doped $\text{Pr}_{0.6}\text{Sr}_{0.35}\text{R}_{0.05}\text{MnO}_3$ ($\text{R} = \text{Na}, \text{K}$ and Ag) manganites

A systematic investigation on magnetocaloric and magneto-transport properties of monovalent metal doping $\text{Pr}_{0.6}\text{Sr}_{0.35}\text{R}_{0.05}\text{MnO}_3$ ($\text{R} = \text{Na}, \text{K}$ and Ag) manganites is reported. Samples have been synthesized using the conventional solid state reaction. The Rietveld refinements of the X-ray diffraction patterns at room temperature confirm that all our powder samples are single phase and crystallize in the orthorhombic structure with Pnma space group. Magnetic measurements in a magnetic applied field of 0.01 T show that samples display a paramagnetic-ferromagnetic transition at their Curie temperature T_C which keep close room temperature. A magnetic entropy change under an applied magnetic field of 2 T is found to be depending on monovalent doping and values are 1.84, 3.09 and 1.87 $\text{Jkg}^{-1} \text{K}^{-1}$, respectively, for Na^- , K^- and Ag^- doped samples. This results in a large relative cooling power around 100 J/kg . The electrical measurements in the temperature range 20-280 K show distinct metal-insulator transitions at T_0 temperature corresponding to the maximum value of resistivity for Na and K samples. However, only a metallic-like behavior was observed for Ag-sample. The room temperature magnetocaloric effect in present monovalent metal doped manganite, enables to consider the studied manganites as potential candidates as working material in magnetic refrigeration systems.

Acknowledgements: This work was supported in part by the Tunisian Ministry of Higher Education and Scientific Research, by the scientific exchange agreement of Polish Government and WBI (Belgium) and by the European Union in the framework of European Social Fund through the Warsaw University of Technology Development Programme.

Michał Wlazło
Wydział Chemiczny

Laureat konkursów na: naukowe stypendia dla doktorantów CAS/22/POKL
oraz naukowe stypendia wyjazdowe dla doktorantów CAS/33/POKL

Przewidywanie równowag fazowych za pomocą modelu COSMO-RS

Projektowanie i optymalizacja procesów rozdzielania wymaga posiadania dokładnej wiedzy na temat różnego rodzaju równowag fazowych w funkcji ciśnienia, temperatury i składu. Ze względu na ogromną liczbę istniejących mieszanin, niemożliwe jest wykonanie dla nich badań eksperymentalnych w szerokim zakresie ciśnień i temperatur. W tym celu zostały opracowane liczne modele termodynamiczne umożliwiające przewidywanie równowag fazowych. Klasyczne modele takie jak UNIFAC są oparte na parametrach otrzymanych z dopasowania wielu danych doświadczalnych [1]. Stosunkowo nowym modelem powstałym w ostatnich latach jest metoda COSMO-RS (*CONductor-like Screening MOdel for Real Solvents*). Jej ogromną zaletą jest niezależność od badań eksperymentalnych, a jedynymi informacjami potrzebnymi do przewidywania są struktury cząsteczkowe składników mieszaniny [2].

W niniejszej pracy zastosowano model COSMO-RS do przewidywania równowag fazowych układów trójskładnikowych oraz współczynników aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim, w układach z cieczeniami jonowymi zbadanymi wcześniej eksperymentalnie w naszym laboratorium. Ciecze jonowe są to związki jonowe o temperaturze topnienia poniżej 100°C, których liczbę możliwych istniejących struktur szacuje się na ok. 1018. Posiadają one szczególne właściwości, takie jak praktycznie niemierzalna prężność par, dzięki czemu mogą zostać wykorzystane w procesach rozdzielania np. w ekstrakcji. W sumie przeprowadzono modelowanie współczynników aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim dla 12 cieczy jonowych w układach z ok. 60 różnymi związkami organicznymi i wodą oraz 13 układów trójskładnikowych ciecz-ciecz: (ciecz jonowa + metanol + heptan), (ciecz jonowa + tiofen + heptan) i (ciecz jonowa + benzotiofen + heptan). Otrzymane

rezultaty porównano z wynikami doświadczalnymi w celu sprawdzenia przydatności modelu COSMO-RS do przewidywania wymienionych układów z cieciami jonowymi.

[1] S. I. Sandler, *Chemical and Engineering Thermodynamics*, 3rd edn., Wiley, 1998

[2] A. Klamt, F. Eckert, *Fluid Phase Equilib.* 172 (2000) 43-72

Rafał Wróblewski

Wydział Inżynierii Materiałowej

Laureat konkursu na naukowe stypendium wyjazdowe
dla nauczycieli akademickich CAS/34/POKL

Monokryształy ze stopów Ni-Mn-X wykazujących efekt magnetokaloryczny

Stopy Ni-Mn-X w postaci monokryształów mają zastosowanie do wytwarzania elementów z magnetyczną pamięcią kształtu. Na ich bazie budowane są aktuatory uruchamiane polem magnetycznym, tłumiki drgań czy też mikropompy podające dokładnie odmierzone ilości płynów.

Stopy te mogą być też wykorzystane jako aktywne regeneratory ciepła w urządzeniach do chłodzenia bazujących na efekcie magnetokalorycznym. Zjawisko to jest od kilkunastu lat bardzo intensywnie badane, gdyż potencjalne korzyści są ogromne – wyeliminowanie gazów, cyklu sprężania rozprężania oraz podniesienie sprawności procesu grzania-chłodzenia mogłyby doprowadzić do znaczących oszczędności zużycia energii w skali globalnej, sięgających nawet 6%. Ponadto w ciągu ostatnich kilku lat pojawiły się publikacje dowodzące, że monokryształy wykazujące anizotropię magnetostrukturalną mogą się charakteryzować również anizotropią właściwości magnetokalorycznych, którą można wykorzystać do uproszczenia konstrukcji chłodziarek magnetycznych.

Głównym celem stażu było wytworzenie 3-, 4- i 5-składnikowych monokryształów, na bazie fazy Heuslera Ni₂YZ, przy użyciu metody Bridgmana-Stockbargera. Wytworzone zostały kryształy o następujących składach nominalnych:

- Ni₅₀ Mn_{18,75} Cu_{6,25} Ga₂₅;
- Ni₄₁ Mn₃₂ Co₉ Ga₁₈;
- Ni₄₃ Mn₃₉ Co₇ Sn₁₁;
- Ni₄₃ Mn₄₀ Cu₁₀ Sn₇;
- Ni₄₁ Mn₄₀ Co₄ Cu₄ Sn₁₁.

Badaniom podlegały: skład chemiczny i segregacja składu chemicznego na długości kryształu, stopień jednorodności struktury oraz orientacja krystalograficzna. Przeprowadzono również badania efektu magnetokalorycznego, jego anizotropii oraz wpływu rodzaju martenzytu na wielkość efektu magnetokalorycznego w kryształach o składzie $\text{Ni}_{51,6}\text{Mn}_{26,4}\text{Ga}_{22}$.

