

**Zgłoszenie zagadnienia badawczego realizowanego  
w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej  
w dyscyplinie nauki chemiczne  
w Jednostce: Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN**

1	Nazwisko i imię promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN, dorota.rutkowska-zbik@ikiifp.edu.pl
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	
3	Temat zagadnienia badawczego+ krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	<p>Aktywacja i transformacje małych cząsteczek na układach metal przejściowy/nośnik</p> <p>Transformacje małych cząsteczek, takich jak CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> oraz innych węglowodorów nasyconych, stanowią duże wyzwanie dla współczesnej chemii, mimo iż w układach biologicznych zachodzą w łagodnych warunkach. Proponowane badania mają na celu badanie efektów strukturalnych i wpływu charakteru nośnika na aktywność katalizatorów, w których fazę aktywną stanowią jony lub małe klastry metali przejściowych (głównie Cu, Mn, Fe, Ni, Co) osadzone na nośnikach tlenkowych jako modeli enzymów. Postuluje się, że na aktywność jonów metali przejściowych mają wpływ następujące czynniki strukturalne: obecność i oddziaływanie z nośnikiem, jego tekstura, stopień dyspersji fazy metalicznej, redukowalność, właściwości kwasowe, a także tzw. efekt uwięzienia (ang. <i>confinement effect</i>) obserwowany, gdy faza aktywna znajduje się w przestrzeni o ograniczeniach przestrzennych. W ramach pracy doktorskiej planowane jest otrzymanie układów, w których jony metali przejściowych zlokalizowane są w układach o zmiennym otoczeniu przestrzennym i określenie jak struktura katalizatorów moduluje ich aktywność w reakcjach aktywacji małych cząsteczek w fazie gazowej.</p>
4	Wymagania w stosunku do kandydata (wykształcenie, umiejętności/kursy)	Ukończone studia mgr w zakresie chemii / inżynierii chemicznej / fizyki lub dyscypliny pokrewnej
5	Wskazanie możliwych źródeł i zakresu finansowania spoza	Środki statutowe IKiFP PAN

	subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	
--	---	--

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry PAS, dorota.rutkowska-zbik@ikifp.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	na
3	Research subject Title Short description, up to 250 words	Activation and transformations of small molecules on transition metal/support systems  Transformations of small molecules, such as CO <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> and other saturated hydrocarbons, are still challenging for the contemporary chemistry despite being mastered in biological systems. The proposed project aims at elucidation of structural effects and the influence of the support on the activity of catalysts composed of transition metal ions or small clusters (mostly Cu, Mn, Fe, Ni, Co) supported on oxide-based matrices as artificial enzymes. It is postulated that the transition metal ions activity is determined by the following structural factors: the presence and interactions with solid support, its texture, dispersion of metal ions, reducibility, acid-base properties, as well as confinement effects. It is proposed to synthesize catalysts in which transition metal ions are located in various surroundings in order to determine how the local structure impacts their catalytic activity in small molecules activation studied in the gas phase.
4	Additional requirements to the candidate (education, skills / courses)	MSc in chemistry / chemical engineering / physics or related discipline
5	Possible sources of financing, other than subsidy, e.g., scientific scholarship, research and travel costs, etc.	Statutory funds of ICSC PAS