

**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	Rutkowska-Żbik Dorota, dr hab., Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN, dorota.rutkowska-zbik@ikifp.edu.pl
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	Tabor Edyta, dr hab., Instytut Chemii Fizycznej im. J. Heyrovskiego CAS, Czechy, edyta.tabor@jh-inst.cas.cz
3	Temat zagadnienia badawczego+ krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	Badania mechanizmów aktywacji CO₂ w matrycach zeolitowych Celem pracy doktorskiej będzie określenie, czy i w jaki sposób dwutlenek węgla może być aktywowany na zeolitach modyfikowanych metalami oraz poznanie fundamentalnych mechanizmów rządzących tym procesem. Chociaż konwersja CO₂ była szeroko badana, pierwszy etap – jego aktywacja, szczególnie w przypadku katalizatorów zeolitowych – pozostaje słabo poznany. Zrozumienie, które miejsca w metalach mogą aktywować CO₂ i ułatwić jego selektywną transformację w produkty o wartości dodanej, ma kluczowe znaczenie dla projektowania zrównoważonych katalizatorów i rozwoju technologii wykorzystania węgla. Zakładana metodologia badań będzie połączy modelowanie teoretyczne z zaawansowanymi technikami eksperymentalnymi. Obliczenia z wykorzystaniem teorii funkcjonalów gęstości (DFT) dostarczą molekularnego obrazu adsorpcji, aktywacji i transformacji CO₂ w układach metal-zeolit (gdzie metal = Fe, Zn, Cu). Eksperymentalna część pracy obejmie spektroskopię FTIR in situ do monitorowania

		pośrednich produktów powierzchniowych, spektroskopię Mössbauera do śledzenia zmian stopnia utleniania i koordynacji Fe, spektroskopię UV–Vis do śledzenia przejść elektronowych oraz synchrotronową spektroskopię absorpcji rentgenowskiej (XAS), aby uzyskać informacje strukturalne i elektronowe o wysokiej rozdzielczości w realistycznych warunkach reakcji.
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 subwencji, np. stypendium naukowego, kosztów badań, wyjazdów itp.	środki statutowe IKiFP PAN, projekt pokrywający dodatkowe wydatki jest w ocenie

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	Rutkowska-Żbik Dorota, dr hab., Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry PAS, dorota.rutkowska-zbik@ikifp.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation,e-mail address	Tabor Edyta, dr hab., J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, v. v. i., Czech Rep., edyta.tabor@jh-inst.cas.cz
3	Research subject title Short description, up to 250 words	Studies on the mechanisms of CO₂ activation in zeolite matrices The objective of the doctoral dissertation is to determine whether and how carbon dioxide can be activated on metal-modified zeolites and to reveal the fundamental mechanisms that govern this process. While CO₂ conversion has been widely studied, the very first step — its activation, particularly on zeolite-based catalysts — remains poorly understood. Understanding which metal sites can activate CO₂ and facilitating its selective transformation into value-added oxygenated products is critical for designing sustainable catalysts and advancing carbon utilization technologies. Within the PhD project, a comprehensive, multi-scale methodology that integrates theoretical modeling with advanced experimental techniques

		will be adopted to study metal-zeolite systems (where metal = Fe, Zn, Cu). Density functional theory (DFT) calculations will provide atomistic insight into CO ₂ adsorption, activation, and transformation. Experimentally, we will combine in situ FTIR spectroscopy to monitor surface intermediates, Mössbauer spectroscopy to follow oxidation and coordination changes in iron species, UV–Vis spectroscopy to track electronic transitions, and synchrotron-based X-ray absorption spectroscopy (XAS) to obtain high-resolution structural and electronic information under realistic reaction conditions.
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, project covering additional costs under consideration