

Nazwa jednostki

Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej
al. Piastów 42 71-065 Szczecin

Kierownik projektu

dr inż. Piotr Tomasz Tabero

Wniosek badawczy własny pt.: "Synteza i właściwości faz o strukturze blokowej tworzących się w wieloskładnikowych układach tlenków metali zawierających Nb_2O_5 lub V_2O_5 - potencjalnych materiałów o aplikacyjnych właściwościach"

Niniejszym oświadczam, że dane zawarte na załączonym wydruku wniosku są całkowicie zgodne z danymi wprowadzonymi do bazy danych systemu Obsługi Strumieni Finansowania, gdzie posiadają numer identyfikacyjny 85521.

Pieczęć jednostki

Kierownik projektu

Data

Podpis

WNIOSEKo finansowanie projektu badawczego własnego/habilitacyjnego¹⁾**A. DANE WNIOSKODAWCY**

<p>1. Kierownik projektu (imię, nazwisko, tytuł lub stopień naukowy, adres do korespondencji, tel., e-mail) Piotr Tomasz Tabero, dr inż. al. Piastów 42, 71-065 Szczecin tel.: (091) 4494563 e-mail: ptab@zut.edu.pl</p> <p>2. Nazwa i adres jednostki naukowej, telefon, faks, e-mail, www */ Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie Adres: al. Piastów 17 70-310 Szczecin Telefon: (0-91) 449-40-15 Faks: (091) 449-40-14 E-mail: rektor@zut.edu.pl WWW: www.zut.edu.pl Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej Adres: al. Piastów 42 71-065 Szczecin Telefon: (0-91) 449-41-05, (0-91) 449-49-64 Faks: (0-91) 449-46-36 E-mail: wtiic@zut.edu.pl WWW: www.wtiich.zut.edu.pl</p> <p>3. Kierownik jednostki Rektor prof. dr hab. inż. Włodzimierz Kiernożycki</p> <p>4. NIP, REGON 8522545056, 320588161</p> <p>5. Nazwa banku, numer rachunku Bank Zachodni WBK S.A. 3.Oddział w Szczecinie, 02 1090 1492 0000 0000 4903 0242</p>	<p>Wypełnia Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyzszego</p> <p><i>Nr rejestracyjny wniosku:</i></p> <p><i>Data wpłynięcia wniosku:</i></p>
---	--

*/ Szkoły wyższe podają informacje określone w pkt. 1 w odniesieniu do całej szkoły oraz jednostki podstawowej (zgodnie ze statutem szkoły) planowanej jako miejsce realizacji projektu.

B. INFORMACJE OGÓLNE

Tytuł projektu <small>(tytuł powinien w pełni charakteryzować zawartość wniosku - maks. liczba znaków ze spacjami - 250)</small>	Synteza i właściwości faz o strukturze blokowej tworzących się w wieloskładnikowych układach tlenków metali zawierających Nb ₂ O ₅ lub V ₂ O ₅ - potencjalnych materiałów o aplikacyjnych właściwościach		
Dyscyplina naukowa (zgodnie z wykazem dziedzin i dyscyplin)	N204 - Chemia		
Planowany okres realizacji projektu (w miesiącach)	36	Liczba wykonawców projektu	6 (5 pracowników naukowych)
Słowa kluczowe:	fazy o strukturze blokowej, wieloskładnikowe układy tlenków metali, roztwory stałe, reaktywność w fazie stałej, metoda wytrącania z roztworów wodnych, ekspansja termiczna, litowanie, przewodnictwo elektryczne, XRD, DTA, TG, SEM, IR, EPR,, spektroskopia Mössbauera		
Planowane nakłady w zł:	Ogółem		Pierwszy rok realizacji projektu
	200000		85800

Streszczenie projektu

Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie: Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej

Synteza i właściwości faz o strukturze blokowej tworzących się w wieloskładnikowych układach tlenków metali zawierających Nb₂O₅ bądź V₂O₅ – potencjalnych materiałów o aplikacyjnych właściwościach

Przedmiotem projektu będzie zbadanie wpływu metody otrzymywania na właściwości fizykochemiczne faz o strukturze blokowej, potencjalnych składników katalizatorów, elektrod w akumulatorach litowych oraz materiałów o właściwościach fotochromowych. Porównane zostaną właściwości faz otrzymanych w wyniku ogrzewania stałych substratów oraz otrzymanych w wyniku reakcji przebiegających z wykorzystaniem wodnych roztworów odpowiednich jonów. Planuje się także podjęcie prób syntezy wybranych faz metodą mechanochemiczną.

W ramach projektu zbadane zostaną właściwości termiczne, elektryczne i magnetyczne Al₈V₁₀W₁₆O₈₅ i roztworu stałego Al_{8-x}FexV₁₀W₁₆O₈₅, faz o strukturze blokowej niedawno odkrytych przez kierownika projektu. Z uwagi na to, że fazy te są izostrukuralne z M-Nb₂O₅ podjęte zostaną prace zmierzające do udokładnienia ich struktury metodą Rietvelda. Podjęte zostaną także badania, których celem będzie otrzymanie roztworów stałych typu Al_{8-x}MxV₁₀W₁₆-yMoyO₈₅, gdzie M= Cr³⁺ i Ga³⁺. W przypadku nowych faz otrzymanych w ramach projektu, które nie będą izostrukuralne ze znanymi fazami o strukturze blokowej, podjęte zostaną prace zmierzające do rozwiązania ich struktury metodą ab initio na podstawie dyfraktogramów proszkowych.

Obecność żelaza w sieci krystalicznej niektórych faz o strukturze blokowej stwarza możliwość wykorzystania spektroskopii Mössbauera do badania lokalnego otoczenia jonów żelaza. W ramach projektu planuje się przeprowadzenie badań metodą spektroskopii Mössbauera faz o strukturze blokowej zawierających w sieci krystalicznej żelazo.

Fazy o strukturze blokowej są potencjalnymi materiałami do produkcji elektrod w akumulatorach litowych. W ramach projektu przeprowadzone zostaną próby litowania wybranych faz o strukturze blokowej. Wytypowane do badań fazy oraz produkty ich litowania zostaną poddane badaniu metodami XRD, IR, EPR, DTA, TG i SEM.

Przeprowadzone przez kierownika projektu badania wykazały, że fazy o strukturze blokowej Nb₁₄Mo₃O₄₄, Nb₁₂MoO₃₃, Nb₁₂WO₃₃ GaNbO₄ i AlNbO₄ charakteryzują się bardzo silnie zaznaczoną anizotropią ekspansji termicznej. W przypadku faz Nb₁₄Mo₃O₄₄ i Nb₁₂MoO₃₃ wyznaczone średnie liniowe współczynniki ekspansji termicznej w kierunku osi krystalograficznej prostopadłej do płaszczyzny bloków posiadały rzadko spotykane ujemne wartości. W ramach projektu podjęte zostaną badania ekspansji termicznej kolejnych fazy o strukturze blokowej, których celem będzie określenie prawidłowości związanych ekspansją termiczną w tej grupy związków chemicznych.

Prace rozpoznawcze przeprowadzone przez kierownika projektu wykazały, że niektóre z faz tworzących się w układzie Al-Cr-Ga-Fe-Nb-V-W-Mo-O wykazują właściwości fotochromowe. Właściwości fotochromowe otrzymanych faz zależą od metody syntezy oraz struktury i ich składu. W ramach projektu zostaną przeprowadzone badania metodami XRD, IR i EPR zmierzające do określenia korelacji pomiędzy metodą otrzymywania, strukturą i składem a właściwościami fotochromowymi badanych próbek.

Planuje się także przeprowadzenie testów katalitycznych wybranych faz o strukturze blokowej w procesie dwucząsteczkowej kondensacji n-butanolu do symetrycznych ketonów.

C. ANKIETA DOROBKU NAUKOWEGO KIEROWNIKA PROJEKTU I NAJWAŻNIEJSZYCH WYKONAWCÓW PROJEKTU

(na odrębnych stronach dla każdego z wykonawców)

1. Imienny wykaz pracowników naukowych.

(tytuł naukowy, stopień naukowy, imię, nazwisko, planowany procentowy udział w wykonaniu zadań, charakter udziału w realizacji projektu - kierownik, wykonawca)

Tytuł i stopień naukowy	Imię i nazwisko	Udział procentowy	Charakter udziału
dr inż.	Piotr Tomasz Tabero	35	Kierownik projektu
dr	Hubert Fuks	15	Wykonawca
dr hab. inż.	Sławomir Maksymilian Kaczmarek	15	Wykonawca
dr hab. inż.	Zbigniew Rozwadowski	15	Wykonawca
dr hab.	Roman Klimkiewicz	15	Wykonawca

2. Ankieta dorobku pracownika naukowego

(na odrębnych stronach, obowiązkowa dla każdej z osób wymienionych w imiennym wykazie)

1) Imię i nazwisko, PESEL

Piotr Tomasz Tabero 59092403518

2) Adres do korespondencji, numer telefonu, numer faksu, e-mail

Adres do korespondencji: Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie; Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej; Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej, al. Piastów 42, 71-065 Szczecin

Telefon: (091) 4494563

Faks: (091)4494014

E-mail: ptab@zut.edu.pl

3) Miejsca zatrudnienia i zajmowane stanowiska

Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie; Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej; Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej; stanowisko: adiunkt

Adres:

al. Piastów 42, 71-065 Szczecin

4) Planowany charakter udziału w realizacji projektu (wymienić zadania)

Kierownik.

Badania porównawcze dotyczące syntezy faz o strukturze blokowej, synteza roztworów stałych, badania litowanych próbek, badania: ekspansji termicznej, udukladnianie struktury metodą Rietvelde, wykonanie badań metodami XRD, DTA, TG; IR, przygotowanie katalizatorów do testów oraz wykonanie ich badań po testach katalitycznych, redagowanie publikacji

Współdział w interpretacji wyników badań i redagowaniu publikacji dotyczących:

- właściwości elektrycznych, katalitycznych, magnetycznych, spektroskopowych
- wyników uzyskanych z pomocą spektroskopii Mössbauera i mikroskopii elektronowej SEM
- litowania próbek,

5) Przebieg pracy naukowej: nazwa szkoły wyższej, instytutu lub innej jednostki organizacyjnej, specjalność, data uzyskania tytułu zawodowego, stopnia naukowego lub tytułu naukowego:

-magister inżynier- 1983r.

Politechnika Szczecińska, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej,
Technologia Chemiczna

-doktor – 1995r.

Uniwersytet im. A. Mickiewicza, Wydział Chemii, chemia, 21.02.1995 r.

6) Informacje o pracach wykonanych w okresie ostatnich 4 lat ²⁾ przed zgłoszeniem wniosku (maksimum 10 pozycji, podać miejsce i datę publikacji; opracowane nowe technologie; najważniejsze osiągnięcia poznawcze i zastosowania praktyczne)

1. P.Tabero, E.Filipek, M.Piz, Reactivity of T-Nb₂O₅ or H-Nb₂O₅ towards V₂O₅. Synthesis in the solid state and properties of V₄Nb₁₈O₅₅, Cent. Eur. J. Chem., 7(2) (2009) 222
2. G. Dąbrowska, P.Tabero, M.Kurzawa, Phase relations in the Al₂O₃-V₂O₅-MoO₃ system in the solid state. The crystal structure of AlVO₄., J. Phase Equilib. Diffusion, 30(3) (2009) 220
3. A. Błońska-Tabero, M.Bosacka, G.Dąbrowska, E.Filipek, M.Piz, I.Rychłowska-Himmel, P.Tabero and E.Tomaszewicz, The synthesis and properties of the phases obtained by solid-solid reactions, J. Mining and Metallurgy, 44B (2008) 19
4. B.Michalkiewicz, J. Sreńscek-Nazzal, P.Tabero, B. Grzmił, U. Narkiewicz, Selective methane oxidation to formaldehyde using polymorphic T-, M-, and H-forms of niobium (V) oxide as catalysts, Chem. Pap., 62(1) (2008) 106
 5. P.Tabero, A.Błońska-Tabero, P.A. Szilagyi and Z.Homonnay, The investigations of phases with general formula M₂FeV₃O₁₁, where M=Mg, Co, Ni, Zn by IR and Mössbauer spectroscopy, J. Phys. Chem. Solids, 68 (2007) 1087
 - 6 P.Tabero, Thermal expansion of MNbO₄ phases where M=Al,Cr,Fe,Ga, J. Therm. Anal. Calorim., 88 (2007) 269
 7. P.Tabero, Formation and properties of the Fe₈V₁₀W_{16-x}Mo_xO₈₅ type solid solution, J. Therm. Anal. Calorim., 88 (2007) 37
 8. P.Tabero, The crystal structure of Nb₂O₅ polymorphs, 6-th International Symposium on Group Five Elements, 7-10 May 2008, Poznań, Abstrakt P-41, str.165
 9. P.Tabero, The comparison of the IR spectra of vanadates, niobates and tantalates, 6-th International Symposium on Group Five Elements, 7-10 May 2008, Poznań, Abstrakt P-42, str.167

10. P. Tabero , Formation and properties of the $Al_8V_{10}W_{16}O_{85}$ and $Fe_{8-x}Al_xV_{10}W_{16}O_{85}$ type solid solutions, 10-th Conference on Calorimetry and Thermal Analysis join with 2-nd Czech-Hungarian-Polish-Slovakian Thermoanalytical Conference, 30 August-3 September 2009, Zakopane, Poland, Book of Abstracts, page 63, abstract I-P-29

7) Wykonane w okresie ostatnich 4 lat ²⁾ przed zgłoszeniem wniosku i aktualnie realizowane projekty badawcze, rozwojowe i celowe finansowane ze środków finansowych na naukę - numery projektów, miejsce realizacji oraz charakter udziału przy realizacji projektu

Brak

8) Doświadczenia naukowe zdobyte w Polsce i za granicą (państwo, instytucja, rodzaj pobytu, okres pobytu, jednostka delegująca)

- Niemcy, Technische Universitaet Osnabruck, staż naukowy, 1.09.-30.10.1992 r.
- Kraków, Letnia Szkoła Rozwiązywania Struktur Materiałów Polikrystalicznych, 2003r. (4 dni)
- Niemcy, Leibniz Institute for Solid State and Materials Research, współpraca, 2005r. (12 dni),
Pobyt finansowany przez Leibniz Institute for Solid State and Materials Research
- kierownik projektów badawczych przyznawanych w ramach Rektorskiej Kadry Habilitantów PS w latach 2002-2006 oraz Dziekańskiej Kadry Habilitacyjnej Wydziału Technologii i Inżynierii Chemicznej ZUT w 2009r.

9) Najważniejsze międzynarodowe i polskie wyróżnienia wynikające z prowadzenia badań naukowych lub prac rozwojowych (rodzaj wyróżnienia, miejsce i data)

- Nagroda JM Rektora Politechniki Szczecińskiej za osiągnięcia w pracy naukowej a w szczególności za pracę doktorską pt:” Studia nad mechanizmem i kinetyka reakcji przebiegających w fazie stałej w trójskładnikowych układach tlenków metali” w 1995 r.
- Indywidualna nagroda JM Rektora PS II stopnia za osiągnięcia naukowe w 1999 r.
- Indywidualna nagroda Rektora PS II stopnia za twórcze osiągnięcia naukowe w roku 2001
- Srebrny Krzyż Zasługi przyznany przez Prezydenta RP w roku 2002
- Indywidualna nagroda Rektora PS III stopnia za twórcze osiągnięcia naukowe w roku 2007

Oświadczenie - Piotr Tomasz Tabero

Zapoznałem się z opisem projektu badawczego pt.: Synteza i właściwości faz o strukturze blokowej tworzących się w wieloskładnikowych układach tlenków metali zawierających Nb_2O_5 lub V_2O_5 - potencjalnych materiałów o aplikacyjnych właściwościach .

W przypadku zakwalifikowania projektu do realizacji zgadzam się uczestniczyć w wykonaniu projektu na warunkach określonych przez jednostkę naukową. Oświadczam, że zadania badawcze, które planuję wykonać, objęte niniejszym wnioskiem, nie są finansowane i nie planuje się ich finansowania z innego źródła oraz, według mojej wiedzy, zadania badawcze nie naruszają praw osób trzecich. Wyrażam zgodę na zamieszczenie moich danych osobowych zawartych we wniosku w zbiorze danych Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz na przetwarzanie tych danych zgodnie z przepisami ustawy z dnia 29 sierpnia 1997 r. o ochronie danych osobowych (Dz. U. z 2002 r. Nr 101, poz. 926, z późn. zm.³⁾).

Miejscowość i data

Podpis osoby, której dotyczy ankieta

1) Imię i nazwisko, PESEL

Hubert Fuks 68083009356

2) Adres do korespondencji, numer telefonu, numer faksu, e-mail

Adres do korespondencji: Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie; Instytut Fizyki, al. Piastów 48, 70-311 Szczecin
Telefon: (091) 449-42-32
Faks: (091) 449-41-81
E-mail: fux@zut.edu.pl

3) Miejsca zatrudnienia i zajmowane stanowiska

Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie; Instytut Fizyki; stanowisko: adiunkt
Adres:
al. Piastów 48, 70-311 Szczecin

4) Planowany charakter udziału w realizacji projektu (wymienić zadania)

Wykonanie badań związków metodą EPR oraz opis i interpretacja uzyskanych wyników.

5) Przebieg pracy naukowej: nazwa szkoły wyższej, instytutu lub innej jednostki organizacyjnej, specjalność, data uzyskania tytułu zawodowego, stopnia naukowego lub tytułu naukowego:

-magister- 1993r.

Uniwersytet Szczeciński, Fizyka

-doktor- 2002r.

Wydział Elektryczny, Politechnika Szczecińska

6) Informacje o pracach wykonanych w okresie ostatnich 4 lat²⁾ przed zgłoszeniem wniosku (maksimum 10 pozycji, podać miejsce i datę publikacji; opracowane nowe technologie; najważniejsze osiągnięcia poznawcze i zastosowania praktyczne)

1. H. Fuks, S.M. Kaczmarek, M. Berkowski, Site Symmetries of vanadium Ions in $\text{La}_3\text{Ga}_{5.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_{14}$ Single Crystals, Phys. Stat. Sol. A **203** (15), 3640-3650 (2006).

2. H. Fuks, S.M. Kaczmarek, T. Bodziony, M. Berkowski, EPR Measurements of Highly Doped SrLaGa₃O₇:Co, V Single Crystals, Appl. Magn. Res. **34**, 27-36 (2008).
3. H. Fuks, S.M. Kaczmarek, L. Macalik, B. Macalik, J. Hanuza, EPR and Vibrational Studies of YVO₄:Tm, Yb Single Crystal, Opt. Mat. **31** (12), 1883-1887 (2009).
4. E. Tomaszewicz, S.M. Kaczmarek, H. Fuks, New cadmium and RE Metal Tungstates with Scheelite Type Structure, J. of Rare-Earth **27** (4), 569-573 (2009).

7) Wykonane w okresie ostatnich 4 lat ²⁾ przed zgłoszeniem wniosku i aktualnie realizowane projekty badawcze, rozwojowe i celowe finansowane ze środków finansowych na naukę - numery projektów, miejsce realizacji oraz charakter udziału przy realizacji projektu

projekt badawczy numer rejestracyjny: N N209 336937, numer umowy: 3369/BH03/2009/39, termin rozpoczęcia 22.10.2009, termin zakończenia 21.10.2012, Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej i Instytut Fizyki ZUT w Szczecinie; Wykonawca

8) Doświadczenia naukowe zdobyte w Polsce i za granicą (państwo, instytucja, rodzaj pobytu, okres pobytu, jednostka delegująca)

1995,1996,1997- Trzymiesięczne staże naukowe na Uniwersytecie Ateńskim, Grecja. Temat: Analiza krystalograficzna związków polikrystalicznych metodą Rietvelda. Wyjazd w ramach programu TEMPUS, jednostka kierująca Politechnika Szczecińska.

9) Najważniejsze międzynarodowe i polskie wyróżnienia wynikające z prowadzenia badań naukowych lub prac rozwojowych (rodzaj wyróżnienia, miejsce i data)

Brak

Oświadczenie - Hubert Fuks

Zapoznałem się z opisem projektu badawczego pt.: Synteza i właściwości faz o strukturze blokowej tworzących się w wieloskładnikowych układach tlenków metali zawierających Nb_2O_5 lub V_2O_5 - potencjalnych materiałów o aplikacyjnych właściwościach .

W przypadku zakwalifikowania projektu do realizacji zgadzam się uczestniczyć w wykonaniu projektu na warunkach określonych przez jednostkę naukową. Oświadczam, że zadania badawcze, które planuję wykonać, objęte niniejszym wnioskiem, nie są finansowane i nie planuje się ich finansowania z innego źródła oraz, według mojej wiedzy, zadania badawcze nie naruszają praw osób trzecich. Wyrażam zgodę na zamieszczenie moich danych osobowych zawartych we wniosku w zbiorze danych Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz na przetwarzanie tych danych zgodnie z przepisami ustawy z dnia 29 sierpnia 1997 r. o ochronie danych osobowych (Dz. U. z 2002 r. Nr 101, poz. 926, z późn. zm.³⁾).

Miejscowość i data

Podpis osoby, której dotyczy ankieta

1) Imię i nazwisko, PESEL

Sławomir Maksymilian Kaczmarek

2) Adres do korespondencji, numer telefonu, numer faksu, e-mail

Adres do korespondencji: Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie, Instytut Fizyki, Piastów 48, 70-311 Szczecin, poczta: Szczecin
Telefon: (091) 449-48-87
Faks: (091) 449-41-81
E-mail: skaczmarek@zut.edu.pl

3) Miejsca zatrudnienia i zajmowane stanowiska

Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie, Instytut Fizyki; stanowisko: profesor nadzwyczajny ZUT
Adres:
Piastów 48, 70-311 Szczecin

4) Planowany charakter udziału w realizacji projektu (wymienić zadania)

Wykonanie badań związków metodą EPR oraz opis i interpretacja uzyskanych wyników.

5) Przebieg pracy naukowej: nazwa szkoły wyższej, instytutu lub innej jednostki organizacyjnej, specjalność, data uzyskania tytułu zawodowego, stopnia naukowego lub tytułu naukowego:

- magister-1974
Wojskowa Akademia Techniczna, Elektronika Kwantowa i Fizyka Ciała Stałego,
- doktor 1984
Wojskowa Akademia Techniczna,
- doktor habilitowany: 2003r.
Instytut Technologii Elektronowej, Elektronika.

6) Informacje o pracach wykonanych w okresie ostatnich 4 lat ²⁾ przed zgłoszeniem wniosku (maksimum 10 pozycji, podać miejsce i datę publikacji; opracowane nowe technologie; najważniejsze osiągnięcia poznawcze i zastosowania praktyczne)

1. K. Matyjasek, K. Wolska, S.M. Kaczmarek, R.Z. Rogowski, "Domain nucleation and growth in relaxor-ferroelectric $\text{Sr}_{0.58}\text{Ba}_{0.42}\text{Nb}_2\text{O}_6$ doped with chromium and ytterbium", J. Phys. Cond. Matter, 20 (2008) 295218

(6pp)

2. T. Bodziony, S.M. Kaczmarek, "Temperature dependence of the EPR spectra and optical measurements of LiNbO_3 : Er, Tm single crystal", J. of All. & Comp. 468(1/2) (2009) 581-585
3. E. Tomaszewicz, S.M. Kaczmarek, H. Fuks, "New cadmium and rare-earth metal tungstates with the sheelite type structure", J. of Rare-Earths, 27(4) (2009) 569-573
4. G. Leniec, B. Kołodziej, P. Przybylski, S.M. Kaczmarek, J. Typek, B. Brzeziński, E. Grech, "FIR, ESI and EPR studies of a Dy(III) Schiff base podand complex", J. of Non-Cryst. Sol. 355 (2009) 1355-1359
5. S.M. Kaczmarek, G. Leniec, "Spectral and magnetic properties of macroacyclic and macrobicyclic Schiff base RE complexes", J. of Non-Cryst. Sol. 355 (2009) 1325-1332
6. S.M. Kaczmarek, D. Piwowarska, K. Matyjasek, M. Orłowski, I.L. Ivleva, "Optical and dielectric properties of SBN61 single crystals doped with Co, Cr, Ni and Ce", Opt. Mat. 31 (12) (2009) 1794-1797
7. D. Piwowarska, S.M. Kaczmarek, P. Potera, P. Sagan, M. Berkowski, "Structural and lattice defects studies of PbMoO_4 single crystals doped with Co^{2+} ions", Opt. Mat. 31 (12) (2009) 1798-1801
8. H. Fuks, S.M. Kaczmarek, L. Macalik, B. Macalik, J. Hanuza, "EPR and vibrational studies of YVO_4 : Tm^{3+} , Yb^{3+} single crystal", Opt. Mat. 31 (12) (2009) 1883-1887
9. S.M. Kaczmarek, G. Leniec, J. Typek, G. Boulon, A. Bensalah, "Optical and EPR study of BaY_2F_8 single crystals doped with Yb", J. of Luminescence 129 (2009) 1568-1574
10. E. Tomaszewicz, J. Typek, S.M. Kaczmarek, "Synthesis and some properties of new copper and rare-earth metal tungstates", J. of Therm. Anal. & Cal, 98 (2009) 409-421

7) Wykonane w okresie ostatnich 4 lat ²⁾ przed zgłoszeniem wniosku i aktualnie realizowane projekty badawcze, rozwojowe i celowe finansowane ze środków finansowych na naukę - numery projektów, miejsce realizacji oraz charakter udziału przy realizacji projektu

1. Zadanie 11-072-0120/17-88-00, grant profesorski w latach 2005-2007- Otrzymanie metodą Czochralskiego i zbadanie właściwości spektralnych oraz nieliniowych monokryształu $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{Nb}_2\text{O}_6$ domieszkowanego chromem oraz innymi domieszkami w celu obniżenia wartości temperatury Curie. Wykonawca: dr hab. inż. S.M. Kaczmarek
2. Projekt numer rejestracyjny: N N209 336937, numer umowy: 3369/BH03/2009/39, termin rozpoczęcia 22.10.2009, termin zakończenia 21.10.2012, Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej i Instytut Fizyki ZUT w Szczecinie, Wykonawca

8) Doświadczenia naukowe zdobyte w Polsce i za granicą (państwo, instytucja, rodzaj pobytu, okres pobytu, jednostka delegująca)

Krótkie wizyty w krajach byłego ZSRR, Francji (2002-2003) i w USA (Huston 2005).

9) Najważniejsze międzynarodowe i polskie wyróżnienia wynikające z prowadzenia badań naukowych lub prac rozwojowych (rodzaj wyróżnienia, miejsce i data)

1. Nagroda Rektorska za opis laserowego nagrzewania plazmy, Warszawa, 1974

2. Nagroda Rektorska za opracowanie metod analiz struktur ,Warszawa ,1980
3. Nagroda Rektorska za opracowanie technologii i składu chemicznego monokryształów związków AIBVI i krystalizacji molibdenianu(VI) ołowiu(II), Warszawa, 1984
4. Nagroda Dziekańska za opracowanie technologii wykonania dzielnika wiązki światła i metody określenia jakości prętów laserowych, Warszawa, 1985
5. Nagroda Rektorska za opis oddziaływania promieniowania laserowego z materia, Warszawa, 1995
6. Nagroda Dziekańska za opracowanie stanowiska do pomiaru oddziaływania jonizującego z materia, Warszawa, 1996
7. Nagroda Rektora Politechniki Szczecińskiej za prace nad wpływem protonów na właściwości optyczne monokryształów tlenkowych, Szczecin, 2004
8. Nagroda Rektora Politechniki Szczecińskiej za prace nad wpływem kwantów gamma na właściwości fluorków, Szczecin, 2005
9. Nagroda Rektora Politechniki Szczecińskiej za prace nad domieszkowaniem czteroboranu litu kobaltem i manganem, Szczecin, 2006
10. Nagroda Rektora Politechniki Szczecińskiej II st. za działalność naukową w 2006 r. Szczecin 2007
11. Nagroda Rektora Politechniki Szczecińskiej I st. za działalność naukową w 2007 r. Szczecin 2008
12. Nagroda Rektora Politechniki Szczecińskiej I st. za działalność naukową w 2008 r. Szczecin 2009
13. Nagroda Zachodniopomorski Nobel 2008 za działalność naukową w 2008 r.

Oświadczenie - Sławomir Maksymilian Kaczmarek

Zapoznałem się z opisem projektu badawczego pt.: Synteza i właściwości faz o strukturze blokowej tworzących się w wieloskładnikowych układach tlenków metali zawierających Nb_2O_5 lub V_2O_5 - potencjalnych materiałów o aplikacyjnych właściwościach .

W przypadku zakwalifikowania projektu do realizacji zgadzam się uczestniczyć w wykonaniu projektu na warunkach określonych przez jednostkę naukową. Oświadczam, że zadania badawcze, które planuję wykonać, objęte niniejszym wnioskiem, nie są finansowane i nie planuje się ich finansowania z innego źródła oraz, według mojej wiedzy, zadania badawcze nie naruszają praw osób trzecich. Wyrażam zgodę na zamieszczenie moich danych osobowych zawartych we wniosku w zbiorze danych Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz na przetwarzanie tych danych zgodnie z przepisami ustawy z dnia 29 sierpnia 1997 r. o ochronie danych osobowych (Dz. U. z 2002 r. Nr 101, poz. 926, z późn. zm.³⁾).

Miejscowość i data

Podpis osoby, której dotyczy ankieta

1) Imię i nazwisko, PESEL

Zbigniew Rozwadowski 69042900699

2) Adres do korespondencji, numer telefonu, numer faksu, e-mail

Adres do korespondencji: Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie; Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej; Instytut Chemii i Podstaw Ochrony Środowiska, al. Piastów 42, 71-065 Szczecin
Telefon: ---
Faks: (091) 449-46-39
E-mail: zroz@zut.edu.pl

3) Miejsca zatrudnienia i zajmowane stanowiska

Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie; Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej; Instytut Chemii i Podstaw Ochrony Środowiska; stanowisko: ---
Adres:
al. Piastów 42, 71-065 Szczecin

4) Planowany charakter udziału w realizacji projektu (wymienić zadania)

Wykonanie badań związków metodą EPR oraz opis i interpretacja uzyskanych wyników.

5) Przebieg pracy naukowej: nazwa szkoły wyższej, instytutu lub innej jednostki organizacyjnej, specjalność, data uzyskania tytułu zawodowego, stopnia naukowego lub tytułu naukowego:

-magister inżynier – 1993r.
Politechnika Szczecińska, technologia chemiczna organiczna

-doktor- 2000r.
Uniwersytet A. Mickiewicza w Poznaniu, chemia organiczna

-doktor habilitowany- 2009r.
Uniwersytet A. Mickiewicza w Poznaniu, 2009, chemia

6) Informacje o pracach wykonanych w okresie ostatnich 4 lat ²⁾ przed zgłoszeniem wniosku (maksimum 10 pozycji, podać miejsce i datę publikacji; opracowane nowe technologie; najważniejsze osiągnięcia poznawcze i zastosowania praktyczne)

1. Z. Rozwadowski, Deuterium isotope effect on ^{13}C chemical shifts of tetrabutylammonium salts of Schiff bases amino acids, *Mag. Reson. Chem.*, (2006), **44**, 881-886

2. T. Kokubun, Z. Rozwadowski, H. Duddeck, Benzaldehyde derivatives from *Sacrodonia Crocea*”, *J. Nat. Prod.*, (2007), **70**, 1539-1541
3. B. Kołodziej, E. Grech, W. Schilf, B. Kamiński, M. Makowski, Z. Rozwadowski, T. Dziembowska, Anomeric and tautomeric equilibria in D-2-glucosamine Schiff bases., *J. Mol. Struct.*, (2007), **844-845**, 32-37
4. Z. Rozwadowski, “Chiral recognition of the Schiff bases by NMR spectroscopy in the presence of a chiral dirhodium complex. Deuterium isotope effect on ¹³C chemical shift of the optically active Schiff bases and their dirhodium adducts, *Mag. Reson. Chem.*, (2007), **45**, 605-610
5. Z. Rozwadowski, B. Nowak-Wydra, Chiral recognition of the Schiff bases by ¹⁵N NMR spectroscopy in the presence of a dirhodium complexes. Deuterium isotope effect on ¹⁵N chemical shift of the optically active Schiff bases and their dirhodium tetracarboxylate adducts, *Mag. Reson. Chem.*, (2008), **46**, 974-978
6. M. Szypa, M. Urbala, Z. Rozwadowski, T. Dziembowska, New Schiff base complexes of ruthenium (III) and their use as catalyst for O-allyl systems isomerization, *Transition Met. Chem.*, (2008), **33**, 855-860
7. P.E.Hansen, Z. Rozwadowski, T. Dziembowska, MR studies of Hydroxy Schiff Bases, *Curr. Org. Chem.*, (2009), **13**, 194-215
8. T. Dziembowska, M. Szafran, A. Katrusiak, Z. Rozwadowski, Crystal structure of and solvent effect on tautomeric equilibrium in Schiff base derived from 2-hydroxy-1-naphthaldehyde and methylamine studied by X-ray diffraction, DFT, NMR and IR methods, *J. Mol. Struct.*, (2009), **929**, 32-42
9. B. Kukawska-Tarnawska, A. Leś, T. Dziembowska, Z. Rozwadowski, Tautomeric forms of N-(5-nitrosalicylidene)-2-butylamine: Experimental and theoretical DFT study, *J. Mol. Struct.*, (2009), **928**, 25-31.

7) Wykonane w okresie ostatnich 4 lat ²⁾ przed zgłoszeniem wniosku i aktualnie realizowane projekty badawcze, rozwojowe i celowe finansowane ze środków finansowych na naukę - numery projektów, miejsce realizacji oraz charakter udziału przy realizacji projektu

Projekt badawczy MNiSW numer N205 055 31/2491 (zakończony), ZUT w Szczecinie, wykonawca
 Prrojekt badawczy MNiSW numer N N 204 338237, UAM Poznań, wykonawca

8) Doświadczenia naukowe zdobyte w Polsce i za granicą (państwo, instytucja, rodzaj pobytu, okres pobytu, jednostka delegująca)

Uniwersytet w Roskilde (2-tygodnie, 1999) – staż naukowy

Uniwersytet w Hanowerze (6 miesięcy, 2002) – stypendium NATO

Uniwersytet Leibniza w Hanowerze (3 miesięcy, 2006) – staż naukowy

9) Najważniejsze międzynarodowe i polskie wyróżnienia wynikające z prowadzenia badań naukowych lub prac rozwojowych (rodzaj wyróżnienia, miejsce i data)

Stypendium Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej dla Młodych Naukowców 1999
Nagroda Rektora Politechniki Szczecińskiej za badania naukowe 1998, 2001, 2005

Zespołowa Nagroda Rektora Politechniki Szczecińskiej II-go stopnia za działalność naukowo-dydaktyczną 1999

Oświadczenie - Zbigniew Rozwadowski

Zapoznałem się z opisem projektu badawczego pt.: Synteza i właściwości faz o strukturze blokowej tworzących się w wieloskładnikowych układach tlenków metali zawierających Nb_2O_5 lub V_2O_5 - potencjalnych materiałów o aplikacyjnych właściwościach .

W przypadku zakwalifikowania projektu do realizacji zgadzam się uczestniczyć w wykonaniu projektu na warunkach określonych przez jednostkę naukową. Oświadczam, że zadania badawcze, które planuję wykonać, objęte niniejszym wnioskiem, nie są finansowane i nie planuje się ich finansowania z innego źródła oraz, według mojej wiedzy, zadania badawcze nie naruszają praw osób trzecich. Wyrażam zgodę na zamieszczenie moich danych osobowych zawartych we wniosku w zbiorze danych Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz na przetwarzanie tych danych zgodnie z przepisami ustawy z dnia 29 sierpnia 1997 r. o ochronie danych osobowych (Dz. U. z 2002 r. Nr 101, poz. 926, z późn. zm.³⁾).

Miejscowość i data

Podpis osoby, której dotyczy ankieta

1) Imię i nazwisko, PESEL

Roman Klimkiewicz 48020704373

2) Adres do korespondencji, numer telefonu, numer faksu, e-mail

Adres do korespondencji:

Telefon: (71) 34-350-21 w 221

Faks: (71) 34-410-29

E-mail: R.Klimkiewicz@int.pan.wroc.pl

3) Miejsca zatrudnienia i zajmowane stanowiska

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN; stanowisko: adiunkt

Adresy:

1. ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław

2. Okólna 2, 50-950 Wrocław

**4) Planowany charakter udziału w realizacji projektu
(wymieniść zadania)**

Wykonanie badań związków metodą EPR oraz opis i interpretacja uzyskanych wyników.

5) Przebieg pracy naukowej: nazwa szkoły wyższej, instytutu lub innej jednostki organizacyjnej, specjalność, data uzyskania tytułu zawodowego, stopnia naukowego lub tytułu naukowego:

-magister –1971r.

:Uniwersytet Wrocławski, Wydział Mat. Fiz. Chem. specjalność: chemia organiczna

-doktor- 1988r.

Politechnika Wrocławska, Wydz. Chem. i Techn. Nafty i Węgla, specjalność: kataliza heterogeniczna,

doktor habilitowany: 2006r.

Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny ,doktor hab. nauk chemicznych w dyscyplinie

chemia

6) Informacje o pracach wykonanych w okresie ostatnich 4 lat ²⁾ przed zgłoszeniem wniosku (maksimum 10 pozycji, podać miejsce i datę publikacji; opracowane nowe technologie; najważniejsze osiągnięcia poznawcze i zastosowania praktyczne)

1. A. Cyganiuk, R. Klimkiewicz, A. Olejniczak, J.P. Lukaszewicz, Biotechnological fabrication of LaMnO₃-carbon catalyst for n-butanol conversion to ketones. *Carbon*, 48/1 (2010) 99-106.
2. R. Klimkiewicz, K. Przybylski, J. Baran, W. Miśta, Mg-Zn and Mn-Zn Ferrites Derived from Coil Core Materials as New Differential Catalysts of Primary Alcohols Transformations. *Ind. Eng. Chem. Res.* 48/13 (2009) 6291-6295.
3. R. Klimkiewicz, J. Trawczyński, Secondary ketonization of primary alcohol over LaMn-based mixed oxides with perovskite-like structure. *Appl. Catal. A: Gen.* 360/2 (2009) 199-204.
4. R. Horyń, R. Klimkiewicz, Double perovskite Pr_{2-x}Bi_xSr₂O₆ (x=0.533) in ketonization of 1-butanol: Effect of water vapor addition. *Appl. Catal. A: Gen.* 370/1-2 (2009) 72-77.
5. R. Horyń, R. Klimkiewicz, High thermodynamic stability of La-deficient rhombohedral form of lanthanum manganite phase as decisive factor in effective ketonization reaction of 1-butanol. *Appl. Catal. A: Gen.* 351/2 (2008) 184-188.
6. R. Klimkiewicz, J. Wolska, A. Przepiera, K. Przepiera, M. Jabłoński, S. Lenart, The zinc ferrite obtained by oxidative precipitation method as a catalyst in n-butanol conversion. *Mat. Res. Bull.* 44/1 (2009) 15-20.
7. J. Wolska, K. Przepiera, H. Grabowska, A. Przepiera, M. Jabłoński, R. Klimkiewicz, ZnFe₂O₄ as a new catalyst in the C-methylation of phenol. *Res. Chem. Intermed.* 34/1 (2008) 43-51.
8. R. Klimkiewicz, Primary alcohols, aldehydes and esters transformations into ketones over oxide catalysts. *Pol. J. Environ. Stud.* 17/5 (2008) 727-731.
9. R. Klimkiewicz, H. Teterycz, E. Sikora, G.S. Szymański, J. Trawczyński, Catalytic Properties of Sn-Ce-Rh-O in Dehydrogenation and Oxidative Dehydrogenation Reactions. *Kinet. Catal.* 48/1 (2007) 67-73.
10. W. Turek, M. Lapkowski, A. Krowiak, H. Teterycz, R. Klimkiewicz, Evaluation of semiconducting sensor materials on the basis of catalytic test reaction. *Appl. Surf. Sci.* 253/13 (2007) 5920-5924.

7) Wykonane w okresie ostatnich 4 lat ²⁾ przed zgłoszeniem wniosku i aktualnie realizowane projekty badawcze, rozwojowe i celowe finansowane ze środków finansowych na naukę - numery projektów, miejsce realizacji oraz charakter udziału przy realizacji projektu

Brak

8) Doświadczenia naukowe zdobyte w Polsce i za granicą (państwo, instytucja, rodzaj pobytu, okres pobytu, jednostka delegująca)

- Szwajcaria, Instytut Inżynierii Chemicznej - Politechnika, Lozanna, staż naukowy, 3 mies., 1976;
-
- ZSRR, Instytut Fizyki Chemicznej Akademii Nauk, Moskwa, staż naukowy, 2 tyg., 1979;
- Hiszpania, Instytut Katalizy i Petrochemii CSIC, Madryt, praca badawcza, 1 tydz., 1994.

9) Najważniejsze międzynarodowe i polskie wyróżnienia wynikające z prowadzenia badań naukowych lub prac rozwojowych (rodzaj wyróżnienia, miejsce i data)

Brak

Oświadczenie - Roman Klimkiewicz

Zapoznałem się z opisem projektu badawczego pt.: Synteza i właściwości faz o strukturze blokowej tworzących się w wieloskładnikowych układach tlenków metali zawierających Nb_2O_5 lub V_2O_5 - potencjalnych materiałów o aplikacyjnych właściwościach .

W przypadku zakwalifikowania projektu do realizacji zgadzam się uczestniczyć w wykonaniu projektu na warunkach określonych przez jednostkę naukową. Oświadczam, że zadania badawcze, które planuję wykonać, objęte niniejszym wnioskiem, nie są finansowane i nie planuje się ich finansowania z innego źródła oraz, według mojej wiedzy, zadania badawcze nie naruszają praw osób trzecich. Wyrażam zgodę na zamieszczenie moich danych osobowych zawartych we wniosku w zbiorze danych Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz na przetwarzanie tych danych zgodnie z przepisami ustawy z dnia 29 sierpnia 1997 r. o ochronie danych osobowych (Dz. U. z 2002 r. Nr 101, poz. 926, z późn. zm.³⁾).

Miejscowość i data

Podpis osoby, której dotyczy ankieta

D. OPIS PROJEKTU BADAWCZEGO, METODYKA BADAŃ ORAZ CHARAKTERYSTYKA OCZEKIWANYCH WYNIKÓW

(maks. do 10 stron standardowego maszynopisu)

1. Cel naukowy projektu.

(jaki problem wnioskodawca podejmuje się rozwiązać, co jest jego istotą, dokładna charakterystyka efektu końcowego)

Pomimo upływu 60 lat od odkrycia pierwszej fazy o strukturze blokowej, V_6O_{13} właściwości tej grupy związków chemicznych zostały poznane tylko fragmentarycznie. Celem naukowym projektu jest zbadanie wpływu metody otrzymywania na właściwości fizykochemiczne faz o strukturze blokowej. Przegląd literatury wykazał, że większość opisanych w literaturze faz o strukturze blokowej, które zawierały niob, otrzymano albo prażąc odpowiednie tlenki w zakresie temperatur 1100-1500°C albo hodując monokryształy metodą transportu chemicznego. Otrzymywane w takich warunkach produkty zawierały kryształity o rozmiarach rzędu mikrometrów, które są zbyt duże zarówno z punktu widzenia zastosowań w katalizie jak i produkcji elektrod w akumulatorach litowych. Fakt ten powoduje zainteresowanie alternatywnymi metodami syntezy, które pozwalają na otrzymanie produktów zawierających kryształity o rozmiarach nie przekraczających 100 nm. Najprostsza z metod polega na zastosowaniu młynków planetarnych. Można w nich rozdrabniać produkty reakcji zawierające duże kryształity a, otrzymywane tradycyjną metodą polegającą na ogrzewaniu odpowiednich tlenków w wysokich temperaturach lub poddawać mechanochemicznej aktywacji substraty, co pozwala na prowadzenie syntezy w znacznie niższych temperaturach. Inna grupa metod wykorzystuje do syntezy wodne roztwory rozpuszczalnych związków odpowiednich jonów. Otrzymywane takimi metodami produkt w początkowym stadium syntezy bardzo często są amorficzne co utrudnia ich badanie metoda XRD. Natomiast zastosowanie niezbyt wysokich temperatur kalcynacji w dalszych etapach kalcynacji pozwala na otrzymanie produktów o bardzo małych kryształitach. Pomimo bogatego polimorfizmu Nb_2O_5 , tylko nieliczni badacze zwracali uwagę na rodzaj odmiany polimorficznej użytego do syntez tlenku niobu(V). Prowadząc syntezę w temperaturach wyższych niż 1000°C, powyżej której wszystkie znane odmiany Nb_2O_5 ulegają przemianie fazowej do H- Nb_2O_5 , w rzeczywistości badacze ci używali właśnie tej odmiany tlenku niobu(V). Z tego powodu wydaje się, że prowadząc syntezę faz o strukturze blokowej warto zwrócić szczególną uwagę na zakres temperatur 600-1100°C, w którym reaktywność żadnej z odmian polimorficznych Nb_2O_5 nie została wystarczająco dobrze zbadana. Z uwagi na to, że dotychczas najczęściej wykorzystywana podczas prowadzenia syntez odmiana polimorficzna tlenku niobu(V), H- Nb_2O_5 , ma strukturę blokową, natomiast dostępny w handlu T- Nb_2O_5 swoją budową przypomina fazy o strukturze tunelowej, interesującym wydało się podjęcie systematycznych badań, których celem było stwierdzenie czy typ struktury użytego do syntez tlenku niobu(V) wpływa na szybkość reakcji oraz rodzaj produktów pośrednich i finalnych badanych reakcji. Przegląd literatury wykazał, że takie badania porównawcze prowadzono tylko w nielicznych przypadkach. Przeprowadzone przez kierownika projektu badania wykazały, że fazę $FeNb_{11}O_{29}$ można otrzymać zarówno z użyciem T- Nb_2O_5 jak i H- Nb_2O_5 oraz metodą wykorzystującą wodne roztwory $Fe(NO_3)_3$ i szczawianu amonu i niobu(V). Jednofazowe preparaty $FeNb_{11}O_{29}$ otrzymano po etapie prażenia w 950°C podczas syntezy z użyciem wodnych roztworów, po etapie w temperaturze 1000°C w przypadku zastosowania T- Nb_2O_5 i po etapie prażenia w temperaturze 1100°C, gdy substratem był H- Nb_2O_5 . Uzyskane wyniki badań wskazują więc, że metoda syntezy z użyciem T- Nb_2O_5 stanowi realną alternatywę w stosunku do metody wykorzystującej wodne roztwory odpowiednich jonów. Aby zweryfikować czy obserwowana w przypadku syntezy $FeNb_{11}O_{29}$ tendencja jest szerszą prawidłowością, planuje się podjęcie syntezy kolejnych faz o strukturze blokowej z wykorzystaniem T- Nb_2O_5 jak i H- Nb_2O_5 oraz dla porównania metodą roztworową. Z uwagi na to, że w początkowym etapie syntezy fazy $FeNb_{11}O_{29}$ metodą roztworową otrzymano produkt amorficzny a następnie o małej krystaliczności, produkty otrzymane po poszczególnych etapach syntezy tej fazy zostaną poddane badaniom metodami DTA, TG oraz z wykorzystaniem spektroskopii IR i Mossbauera. Ważnym poszerzeniem problematyki badawczej tego projektu będzie także podjęcie badań mających na celu stwierdzenie czy syntezę faz o strukturze blokowej można przeprowadzić w wyniku intensywnego ucierania odpowiednich substratów w młynku planetarnym. Przeprowadzone przez kierownika projektu badania wykazały, że takie fazy o strukturze blokowej jak $Nb_{14}Mo_3O_{44}$, $Nb_{12}MoO_3$, $Nb_{12}WO_3$, $GaNbO_4$ i $AlNbO_4$ charakteryzują się bardzo silnie zaznaczoną anizotropią ekspansji termicznej. W przypadku faz $Nb_{14}Mo_3O_{44}$ i $Nb_{12}MoO_3$ wyznaczone średnie liniowe współczynniki ekspansji termicznej posiadały rzadko spotykane ujemne wartości. Planuje się więc podjęcie badań ekspansji termicznej kolejnych faz o strukturze blokowej celem odkrycia prawidłowości dotyczących ich ekspansji termicznej. Obecność żelaza w sieci krystalicznej niektórych faz o strukturze blokowej stwarza możliwość wykorzystania spektroskopii Mössbauera do badania lokalnego otoczenia jonów żelaza. Przegląd literatury wykazał jednak, że oprócz publikacji, której współautorem jest kierownik projektu, a poświęconej badaniu rombowej odmiany $FeNb_{11}O_{29}$, znana

jest tylko jedna praca dotycząca faz o strukturze blokowej. Prezentuje ona widma Mössbauera litowanej matrycy FeV_3O_8 , $\text{Li}_x\text{FeV}_3\text{O}_8$. W ramach projektu planuje się więc przeprowadzenie badań metodą spektroskopii Mössbauera faz o strukturze blokowej zawierających w sieci krystalicznej żelazo.

Fazy o strukturze blokowej są potencjalnymi materiałami do produkcji elektrod w akumulatorach litowych. Dlatego też w ramach projektu przeprowadzone zostaną próby litowania wybranych faz o strukturze blokowej. Fazy o strukturze blokowej oraz produkty ich litowania zostaną poddane badaniu metodami XRD, IR, EPR, DTA, TG i SEM.

Przeprowadzone będą także badania ich przewodnictwa.

Prace rozpoznawcze przeprowadzone przez kierownika projektu wykazały, że niektóre z faz tworzących się w układzie Al-Cr-Ga-Fe-Nb-V-W-Mo-O wykazują właściwości fotochromowe. Właściwości fotochromowe otrzymanych faz zależą od metody syntezy i ich składu. W ramach projektu zostaną przeprowadzone badania metodami XRD, IR i EPR zmierzające do określenia korelacji pomiędzy metodą otrzymywania, strukturą i składem a właściwościami fotochromowymi badanych próbek.

Układy typu $\text{Nb}_2\text{O}_5\text{-M}_x\text{O}_y$, gdzie $M = \text{Al, V, P, Mo}$ i WO_3 a także układ $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-V}_2\text{O}_5\text{-WO}_3$ są także przedmiotem badań ze względu na obiecujące właściwości katalityczne tworzących się w nich faz w procesie utleniającego odwodornienia lekkich węglowodorów czy selektywnej redukcji tlenków azotu amoniakiem. Celowym więc wydało się podjęcie badań z użyciem faz o strukturze blokowej także w przypadku innych, ważnych reakcji katalizowanych przez złożone układy tlenkowe. Z przeglądu literatury wynika, że cecha charakterystyczna faz o strukturze blokowej zawierających niob jest występowanie kwasowych centrów aktywnych Lewisa. Z tego powodu do testów katalitycznych wybrano proces dwucząsteczkowej kondensacji n-butanolu do symetrycznych ketonów, gdyż procesowi temu sprzyja obecność kwasowych centrów Lewisa.

2. Znaczenie projektu.

(co uzasadnia podjęcie tego problemu w Polsce, jakie przesłanki skłaniają wnioskodawcę do podjęcia proponowanego tematu, znaczenie wyników projektu dla rozwoju danej dziedziny i dyscypliny naukowej oraz rozwoju cywilizacyjnego, czy w przypadku pozytywnych wyników będą one mogły znaleźć praktyczne zastosowanie)

Pierwsza faza o strukturze blokowej, V_6O_{13} została odkryta w 1948 roku. Od tego czasu otrzymano wiele innych faz należących do tej grupy natomiast i zbadano ich strukturę. Jednakże tylko nieliczne fazy były przedmiotem gruntownych badań dotyczących ich właściwości fizycznych i chemicznych. Przeprowadzenie wszechstronnych badań reprezentatywnej grupy faz o strukturze blokowej pozwoli na poszerzenie stanu wiedzy na ich temat i przyczyni się do poszerzenia potencjalnych obszarów ich praktycznego wykorzystania. Bardzo szybki postęp w dziedzinie elektroniki użytkowej między innymi w takich obszarach jak telefonia komórkowa czy fotografia cyfrowa powoduje duże zapotrzebowanie na miniaturowe akumulatory o dużej pojemności. Współcześnie wykorzystuje się w tym celu różnego typu akumulatory litowe. Materiały elektrodowe użyte do produkcji akumulatorów powinny zawierać w sieci krystalicznej tunele, przez które podczas ładowania i rozładowywania akumulatora będzie się odbywał transport litu bez wywoływania istotnych zmian w strukturze matrycy. Z tego powodu zwrócono uwagę na fazy o strukturze blokowej. W ich strukturze występują dwa zespoły prostopadłych do siebie płaszczyzn ścinania, które dzielą strukturę typu ReO_3 zbudowaną z połączonych tylko narożami oktaedrów MO_6 na bloki o szerokości n oktaedrów, wysokości m oktaedrów, a długość ich może być nieskończenie duża ($n \times m \times \infty$). W obrębie bloków występują tunele o przekroju kwadratowym rozciągające się w kierunku prostopadłym do płaszczyzny bloków ($n \times m$). Obecność w strukturze płaszczyzn ścinania zapobiega skręcaniu się tuneli podczas wprowadzania do nich litu, a tym samym stabilizuje strukturę matrycy. Aktualnie prowadzone są prace zmierzające z jednej strony do dokładnego poznania mechanizmu transportu litu w elektrodach, a z drugiej strony do zwiększenia pojemności akumulatorów i wydłużenia ich żywotności. Cały czas poszukuje się nowych materiałów do produkcji elektrod. Synteza nowych faz o strukturze blokowej może przyczynić się do otrzymania materiałów o znacznie lepszych właściwościach niż te dotychczas odkryte. Wprowadzaniu litu do tuneli towarzyszy redukcja odpowiedniej ilości jonów występujących w sieci krystalicznej matrycy. Otrzymywanie materiałów elektrodowych będących roztworami stałymi zawierającymi jony o różnej redukowalności, gdzie w szerokich granicach wolfram będzie zastępowany molibdenem, a żelazo glinem, chromem czy galem stwarza szansę na otrzymanie elektrod o modyfikowanych w szerokim zakresie właściwościach. Warunki takie spełnia między innymi roztwór stały typu $\text{Al}_8\text{-xM}_x\text{V}_{10}\text{W}_{16}\text{-yMo}_y\text{O}_{85}$, gdzie $M = \text{Cr, Ga, Fe}$.

Poprawę efektywności pracy kompozytowych elektrod w akumulatorach litowych można osiągnąć zmniejszając rozmiary ziaren ich składników. Jednakże rozdrobnienie ziaren poniżej 100 nm powoduje silne nagrzewanie się akumulatorów

podczas pracy, prowadzące nawet do ich uszkodzenia. Z tego powodu poszukuje się metod syntezy, które umożliwią otrzymanie materiałów do produkcji elektrod o optymalnych wielkościach krystalitów. Ponieważ podczas pracy akumulatory nagrzewają się znacznie, istotną rolę odgrywają także badania właściwości termicznych materiałów używanych do produkcji elektrod. Wyniki badań takich właściwości termicznych jak temperatura topnienia, temperatura przemian fazowych czy poznanie prawidłowości związanych z ekspansją termiczną takich materiałów przyczynić się może do otrzymania elektrod o bardzo dobrych właściwościach użytkowych.

Wśród potencjalnych obszarów zastosowania faz o strukturze blokowej uwagę zwraca także kataliza heterogeniczna. Wieloskładnikowe katalizatory, zawierające związki takich pierwiastków jak wanad, molibden i niob, charakteryzują się dobrą aktywnością i selektywnością w procesach utleniania lekkich węglowodorów. W pracach poświęconych katalizie sygnalizowano, że redukcja V_2O_5 i MoO_3 , znanych katalizatorów utleniania węglowodorów, prowadzi do powstania nowych faz zawierających w swoich strukturach płaszczyzny ścinania. Występowanie zjawiska krystalograficznego ścinania stwarza z kolei dogodną energetycznie drogę dla wbudowania tlenu do cząsteczki węglowodoru. Fazy tlenkowe, w których stosunkowo łatwo dochodzi do tworzenia się płaszczyzn ścinania, mogą się więc okazać aktywnymi i selektywnymi katalizatorami procesu utleniania. Znane są publikacje poświęcone katalizie heterogenicznej, których autorzy identyfikowali w katalizatorach takie fazy jak β' -(Nb,V) $2O_5$, $TiO_2(B)$ czy $AlNbO_4$ należące do grupy faz o strukturze blokowej. Istotne jest także przeprowadzenie badań w przypadku innych procesów katalitycznych, w których w roli katalizatorów nie testowano jeszcze faz o strukturze blokowej.

Materiały o właściwościach elektrochromowych i fotochromowych zmieniają swoje właściwości optyczne pod wpływem przyłożonego napięcia lub działania promieniowania elektromagnetycznego. Jeżeli takie właściwości są odwracalne, wtedy materiały te znajdują zastosowanie do produkcji różnego typu przetworników optycznych. Poszukiwanie nowych materiałów foto- i elektrochromowych oraz badanie ich właściwości jest ważnym celem dla nauki i techniki. Przegląd literatury wykazał, że wiele faz tworzących się w układach tlenków metali zawierających WO_3 wykazuje takie właściwości. Dlatego też interesującym wydają się otrzymanie grupy faz o strukturze blokowej zawierających wolfram i przeprowadzenie wszechstronnych badań ich właściwości.

3. Istniejący stan wiedzy w zakresie tematu badań.

(jaki oryginalny wkład wniesie rozwiązanie postawionego problemu do dorobku danej dyscypliny naukowej w Polsce i na świecie, czy w Polsce i na świecie jest to problem nowy czy kontynuowany i w jakim zakresie weryfikuje utarte poglądy i dotychczasowy stan wiedzy)

Od szeregu lat w Katedrze Chemii Nieorganicznej i Analitycznej Politechniki Szczecińskiej (obecnie ZUT) prowadzone są badania wieloskładnikowych układów tlenków metali zawierających takie tlenki jak V_2O_5 , MoO_3 , WO_3 , M_2O_3 ($M=Fe, Cr, Al$) i MO ($M= Mg, Zn, Co, Ni$). W ich wyniku odkryto szereg nowych faz i podjęto badania ich właściwości termicznych, elektrycznych i magnetycznych. Do tej grupy należała krystalizująca w układzie tetragonalnym faza $Fe_8V_{10}W_{16}O_{85}$, o nieznannej strukturze [1-3]. Zainicjowane przez kierownika projektu prace pozwoliły na poszerzenie obszaru badań w $KChNiA$ o tlenek niobu(V) [4-9].

Przegląd literatury wykazał, że w wielu dwuskładnikowych układach tlenków metali Nb_2O_5-MxOy , gdzie $M = Al, Cr, Ga, Fe, V, P, Mo$ i W oraz w trójskładnikowym układzie $V_2O_3-V_2O_5-WO_3$ tworzą się fazy podwójnego krystalograficznego ścinania (double CS) zwane także fazami o strukturze blokowej (block structure) [10-12]. W swojej strukturze zawierają one bloki typu ReO_3 o wymiarach $n \times m \times \infty$. W obrębie bloków typu ReO_3 występują tunele o przekroju kwadratowym rozciągające się w kierunku prostym do płaszczyzny bloków ($n \times m$). Współcześnie na fazy o strukturze blokowej zwrócono uwagę w związku z poszukiwaniem nowych materiałów do produkcji elektrod w akumulatorach litowych [13-15]. Materiały elektrodowe powinny bowiem zawierać w sieci krystalicznej tunele, przez które podczas ładowania i rozładowywania akumulatora będzie się odbywał transport litu bez wywoływania istotnych zmian w strukturze matrycy. Układy typu Nb_2O_5-MxOy , gdzie $M = Al, V, P, Mo$ i W oraz układ $Al_2O_3-V_2O_5-WO_3$ są także przedmiotem badań ze względu na obiecujące właściwości katalityczne tworzących się w nich faz w procesie utleniającego odwodornienia lekkich węglowodorów i selektywnej redukcji tlenków azotu amoniakiem [16-18]. W wieloskładnikowych układach tlenków metali zawierających WO_3 tworzą się także fazy, które mogą być wykorzystywane jako materiały elektrochromowe i fotochromowe [19]. Przedstawione powyżej fakty wskazują, że nowe fazy tworzące się w wieloskładnikowych układach tlenków metali zawierających Nb_2O_5 bądź V_2O_5 mogą także posiadać interesujące właściwości aplikacyjne.

Przeprowadzone przez kierownika projektu badania doprowadziły do otrzymania nowych faz: $Al_8V_{10}W_{16}O_{85}$, roztworu stałego ciągłego $Al_{18-x}Fe_xV_{10}W_{16}O_{85}$ oraz roztworu stałego typu $Fe_8V_{10}W_{16-x}MoxO_{85}$, ($x \leq 4$) [20,21]. W ramach tych prac wykazano, że wszystkie te fazy są izostrukuralne z wcześniej odkrytą fazą $Fe_8V_{10}W_{16}O_{85}$ i jednocześnie izostrukuralne z $M-Nb_2O_5$ i $(V_0.7W_0.3)_2O_5$ [11,22]. Należą więc do faz o strukturze blokowej i zawierają bloki typu

ReO₃ o wymiarach 4x4x∞. Z kolei badania ekspansji termicznej prowadzone przez kierownika projektu wykazały, że fazy o strukturze blokowej Nb₁₄Mo₃O₄₄, Nb₁₂MoO₃₃, Nb₁₂WO₃₃, GaNbO₄ i AlNbO₄ charakteryzują się bardzo silnie zaznaczoną anizotropią ekspansji termicznej [4,6]. W przypadku Nb₁₄Mo₃O₄₄ i Nb₁₂MoO₃₃ wyznaczone średnie liniowe współczynniki ekspansji termicznej posiadały rzadko spotykane ujemne wartości. Przegląd literatury wykazał natomiast, że przed badaniami przeprowadzonymi w KChNiA tylko jedna faza o strukturze blokowej, a mianowicie H-Nb₂O₅, była przedmiotem podobnych badań [23,24]. Przedstawione przez różnych autorów wyniki nie były jednak spójne. Interesujące własności termiczne dotychczas przebadanych faz o strukturze blokowej skłaniają do podjęcia badań kolejnych faz, których celem będzie określenie prawidłowości związanych z ekspansją termiczną w tej grupie związków chemicznych.

W KChNiA podjęto także badania zawierających żelazo faz o strukturze blokowej metodą spektroskopii Mössbauera.. Przegląd literatury wykazał jednak, że oprócz publikacji, której współautorem jest kierownik projektu, a poświęconej badaniu rombowej odmiany FeNb₁₁O₂₉ [7], znana jest tylko jedna praca dotycząca faz o strukturze blokowej. Prezentuje ona widma Mössbauera litowanej matrycy FeV₃O₈, Li_xFeV₃O₈ [25]. Przeprowadzenie badań metodą spektroskopii Mössbauera większej grupy faz o strukturze blokowej przyczyni się do poznania lokalnego otoczenia jonów żelaza w ich sieci krystalicznej i pozwoli na lepsze scharakteryzowanie ich właściwości.

Z przeglądu literatury wynika, że pomimo bardzo bogatego polimorfizmu tlenku niobu(V), nie prowadzono dotychczas szeroko zakrojonych badań, których celem było porównanie reaktywności różnych odmian polimorficznych Nb₂O₅ względem wybranych tlenków M_xO_y. Przeprowadzone w KChNiA badania wykazały, że fazę V₄Nb₁₈O₅₅ o nieznaną strukturze, którą wcześniej otrzymywano tylko metodami z wykorzystaniem organicznych prekursorów niobu i wanadu można otrzymać prowadząc syntezę z użyciem T-Nb₂O₅, gdy wykorzystanie w tym celu odmiany H-Nb₂O₅ prowadzi do otrzymania mieszaniny V₄Nb₁₈O₅₅ i VNb₉O₂₅ [9]. Z kolei fazę o strukturze blokowej FeNb₁₁O₂₉ otrzymano zarówno z użyciem T-Nb₂O₅ jak i H-Nb₂O₅ oraz metodą wykorzystującą wodne roztwory Fe(NO₃)₃ i szczawianu amonu i niobu(V) [5]. Wykazano, że czystą fazę FeNb₁₁O₂₉ otrzymano po etapie prażenia w 950°C podczas syntezy z użyciem wodnych roztworów, po etapie w temperaturze 1000°C w przypadku zastosowania T-Nb₂O₅ i po etapie prażenia w temperaturze 1100°C, gdy substratem był H-Nb₂O₅. Uzyskane wyniki badań wskazują więc, że metoda syntezy z użyciem T-Nb₂O₅ stanowi realną alternatywę w stosunku do metody wykorzystującej wodne roztwory odpowiednich jonów. Aby zweryfikować czy obserwowana w przypadku syntezy FeNb₁₁O₂₉ tendencja jest szerszą prawidłowością, konieczne wydaje się podjęcie syntezy kolejnych faz o strukturze blokowej metodą roztworową oraz przy wykorzystaniu T i H-Nb₂O₅.

We współpracy z Instytutem Technologii Chemicznej Nieorganicznej i Inżynierii Środowiska ZUT kierownik projektu podjął badania procesu utleniania metanu do formaldehydu, w których w roli katalizatorów wykorzystano T-Nb₂O₅, H-Nb₂O₅ oraz mieszaninę M-Nb₂O₅ i H-Nb₂O₅ [8]. W przypadku H-Nb₂O₅ oraz mieszaniny M-Nb₂O₅ i H-Nb₂O₅, faz o strukturze blokowej, uzyskano wysoką selektywność do formaldehydu, ale na razie przy niskim stopniu przereagowania. Wskazuje to na konieczność kontynuowania prac w tym kierunku. Przeprowadzone badania pozwalają jednak przypuszczać, że wykorzystanie katalizatorów zawierających fazy o strukturze blokowej jest obiecującą drogą nie tylko w przypadku procesu katalizycznego utleniania metanu.

4. Metodyka badań.

(co stanowi podstawę naukowego warsztatu i jak zamierza się rozwiązać postawiony problem, na czym będzie polegać analiza i opracowanie wyników badań, jakie urządzenia - aparatura zostaną wykorzystane w badaniach, czy jednostka naukowa ma do nich bezpośredni dostęp)

Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej Wydziału Technologii i Inżynierii Chemicznej Zachodniopomorskiego Uniwersytetu Technologicznego w Szczecinie posiada niezbędne wyposażenie do przeprowadzenia syntezy faz o strukturze blokowej oraz zbadania ich właściwości metodami: XRD, IR, DTA i TG. Inna aparatura potrzebna do wykonania zaplanowanych zadań znajduje się na wyposażeniu jednostek badawczych, w których pracują współwykonawcy projektu. Oddział Chemii Nanomateriałów i Katalizy Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN dysponuje stanowiskiem do przeprowadzania testów katalizatorów, natomiast Instytut Fizyki ZUT spektrometrem EPR. Uzupełniające badania będą wykonane w ramach współpracy z ośrodkami naukowymi, z którymi KChNiA prowadzi współpracę już od wielu lat. Badania właściwości elektrycznych zostaną przeprowadzone w Zakładzie Fizyki Kryształów Instytutu Fizyki Uniwersytetu Śląskiego, badania metodą SEM w Instytucie Inżynierii Materiałowej Wydziału Inżynierii Mechanicznej i Mechatroniki ZUT, a badania z wykorzystaniem spektroskopii Mössbauera ⁵⁷Fe w Department of Nuclear Chemistry and MTA-ELTE Research Group for Nuclear Methods In Structural Chemistry, Eötvös Lorand University w Budapeszcie.

Odważone w odpowiednich proporcjach mieszaniny reagentów będą ogrzewane cyklicznie w wybranych temperaturach.

Ogrzewanie prowadzone będzie w atmosferze powietrza w piecach, oporowych pozwalających na utrzymanie żądanej temperatury z dokładnością $\pm 1^\circ\text{C}$. Wybrane fazy zostaną otrzymane także metodą wytrącania z roztworów z wykorzystaniem dobrze rozpuszczalnych w wodzie soli metali. Skład fazowy otrzymanych po kolejnych etapach syntezy próbek będzie określany na podstawie wyników badań metodą XRD. Dyfraktogramy proszkowe będą rejestrowane przy pomocy dyfraktometru HZG 4/A2 (Carl Zeiss, Niemcy). Zarejestrowane dyfraktogramy proszkowe zostaną poddane wskaźnikowaniu, co umożliwi określenie układu krystalograficznego, w którym krystalizują otrzymane fazy i wyznaczenie parametrów komórek elementarnych. Wskaźnikowanie dyfraktogramów będzie prowadzone przy pomocy programów DICVOL, POWDER i REFINEMENT, natomiast udokładnianie struktur metodą Rietvela przy pomocy programu FULLPROF. KChNiA posiada wszystkie wymienione programy. Planuje się także podjęcie badań zmierzających do rozwiązania struktury nowych faz otrzymanych w ramach projektu metodą ab initio. Kierownik projektu uczestniczył w zajęciach Letniej Szkoły Rozwiązywania Struktur Materiałów Polikrystalicznych. Badania ekspansji termicznej przeprowadzone zostaną w rentgenowskiej przystawce wysokotemperaturowej UVD-2000 (Bouevestnik, Rosja) sprzężonej z dyfraktometrem HZG 4A/2. Po osiągnięciu zadanej dla danego pomiaru temperatury, próbki będą termostatowane przez 30 minut. Następnie stosując technikę krokowa zarejestrowane zostaną dyfraktogramy w założonym zakresie kątowym 2θ . Celem wyznaczenia dokładnego położenia refleksów dyfrakcyjnych zastosowany zostanie $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ jako wzorzec wewnętrzny.

Dyfraktogramy proszkowe zarejestrowane w wysokotemperaturowej przystawce rentgenowskiej poddane zostaną wskaźnikowaniu, co umożliwi wyznaczenie parametrów komórek elementarnych w różnych temperaturach a następnie obliczenie średnich liniowych współczynników ekspansji termicznej. Analiza wartości liniowych współczynników ekspansji termicznej przy znajomości struktury krystalicznej pozwala na poznanie prawidłowości związanych z ekspansją termiczną badanych faz.

Pomiary metodą spektroskopii EPR będą prowadzone za pomocą spektrometru E500 (Bruker, Niemcy) pracującego w stałych polach magnetycznych o indukcji do 1.4 T, który umożliwia pracę w zakresie temperatur 3.3-400K.

Badania metodą spektroskopii IR zostaną przeprowadzone przy pomocy spektrometru SPECORD M80 (Carl Zeiss, Niemcy). Spektroskopia w podczerwieni (IR) umożliwi identyfikację poliedrów koordynacyjnych takich jak oktaedry MO6, tetraedry MO4 czy bipyramidy pentagonalne MO7, które budują strukturę badanych faz. Szczególnie interesujące jest porównanie położenia pasm absorpcji w przypadku izostrukuralnych związków i roztworów stałych, w których lżejszy i mniejszy jon zostanie zastąpiony większym i cięższym (roztwory stałe typu $\text{Al}_8\text{-xMxV}_{10}\text{W}_{16}\text{-xMoxO}_{85}$). Analiza porównawcza położenia pasm absorpcji w widmach IR takich faz pozwala na podjęcie próby przypisania poszczególnych pasm absorpcji odpowiednim drganiom w obrębie budujących ich strukturę poliedrów.

Pomiary metodą DTA i TG zostaną wykonane w atmosferze powietrza w zakresie temperatur 20-1000°C w derywatografie typu Paulik-Paulik-Erdey (MOM, Budapeszt, Węgry). Badania w zakresie temperatur 20-1500°C będą prowadzone w analizatorze TA Instruments SDT 2960 (USA).

Badania prowadzone z pomocą metod DTA i TG pozwalają na scharakteryzowanie badanych fazy przez wyznaczenie charakterystycznych dla nich temperatur topnienia, rozkładu lub polimorficznych przemian fazowych.

Badania metodą SEM będą wykonywane za pomocą skaningowego mikroskopu elektronowego JSM-1600 (Jeol, Japonia). Obrazy mikroskopowe zarejestrowane metodą SEM będą przydatne przy określaniu wielkości kryształitów używanych substratów oraz otrzymanych faz.

Litowanie otrzymanych faz o strukturze blokowej będzie prowadzone metodą chemiczną. Drobnosproszkowany materiał matrycy zostanie wprowadzony do roztworu n-butylo-litu w n-heksanie w atmosferze argonu i przy stałym mieszaniu ogrzewany w lekko podwyższonej temperaturze przez kilka dni. Następnie w atmosferze gazu inertnego zostanie przefiltrowany, przemyty n-heksanem i wysuszony pod próżnią.

5. Wymierny, udokumentowany efekt podjętego problemu.

(zakładany sposób przekazu i upowszechnienia wyników - publikacje naukowe oraz referaty na konferencjach w Polsce i za granicą, monografie naukowe, rozprawy doktorskie i habilitacyjne, nowe metody i urządzenia badawcze)

Wyniki badań przedstawione będą w formie artykułów naukowych w czasopismach o międzynarodowej cyrkulacji (w większości znajdujących się na liście filadelfijskiej). Ponadto przewidziana jest prezentacja części wyników badań na konferencjach naukowych krajowych i międzynarodowych. W przypadku otrzymania nowych faz, ich metody syntezy oraz właściwości zostaną zgłoszone do ochrony patentowej w kraju.

6. Wykaz najważniejszej literatury dotyczącej problematyki wniosku.

(maksimum 25 pozycji)

1. J. Walczak, I. Rychłowska-Himmel, P. Tabero, J. Therm. Anal. Cal., 56 (1999) 419
2. I. Rychłowska-Himmel, J. Therm. Anal. Cal., 60 (2000) 173
3. I. Rychłowska-Himmel, P. Tabero, J. Therm. Anal. Cal., 65 (2001) 537
4. P. Tabero, J. Therm. Anal. Cal., 74 (2003) 491
5. P. Tabero, Ceramics-Silikaty, 49(2005) 34-40
6. P. Tabero, J. Therm. Anal. Calorim., 88 (2007) 269
7. P. Tabero, A. Błońska-Tabero, P.A. Szilagyí and Z. Homonnay, J. Phys. Chem. Solids, 68 (2007) 1087
8. B. Michalkiewicz, J. Sreńscek-Nazzal, P. Tabero, B. Grzmil, U. Narkiewicz, Chem. Pap., 62(1) (2008) 106
9. P. Tabero, E. Filipek, M. Piz, Cent. Eur. J. Chem., 7(2) (2009) 222
10. A.D. Wadsley, S. Andersson, in: Perspectives in Structural Chemistry, vol. 3, ed. J. D. Dunitz & J. A. Ibers, New York-London-Sydney-Toronto, J. Wiley & Sons, 1970, s. 1.
11. M. Israelsson, L. Kihlberg, Ark. Kemi, 30 (1968) 129
12. S. Mrowec, Teoria Dyfuzji W Stanie Stałym, PWN, Warszawa 1989, 99-131
13. D.W. Murphy, P.A. Christian, Science, 205, (1979). 651
14. R.J. Cava, D.W. Murphy, S.M. Zahurak, J. Electrochem. Soc., 130 (1983). 2345.
15. S. Patoux, M. Dolle, G. Rousse, C. Masquelier, J. Electrochem. Soc., 149 (2002) A391.
16. M. Ziółek, Catal. Today, 78 (2003) 47
17. B. Mitra, I. E. Wachs, G. Deo, J. Catal., 240 (2006) 151
18. Guerrero-Perez M O, Herrera M C, Malpartida I, Larrubia M A, Alemany L J,.. Catal Today. 2006;118:360-5
19. K.R. Dey, C.H. Ruscher, Th.M. Gesing, A. Hussain, Mater. Res. Bull., 42 (2007) 591
20. P. Tabero, J. Therm. Anal. Calorim., 88 (2007) 37
21. P. Tabero, 10-th Conference on Calorimetry and Thermal Analysis join with 2-nd Czech-Hungarian-Polish-Slovakian Thermoanalytical Conference, 30 August-3 September 2009, Zakopane, Poland, Book of Abstracts, page 63
22. W. Mertin, S. Andersson, R. Gruehn, J. Solid State Chem., 1 (1970) 419
23. W.R. Manning, O. Hunter, F.W. Calderwood, D.W. Stacy, J. Am. Ceram. Soc., 55 (1972) 342
24. G.L. Dwivedi, E.C. Subbarao, J. Am. Ceram. Soc., 56 (1973) 443
25. M. Eibschutz, D.W. Murphy, S.M. Zahurak, P.A. Christian, Solid State Ionics, 5 (1981) 339

E. HARMONOGRAM WYKONANIA PROJEKTU BADAWCZEGO - PLAN ZADAŃ

Lp.	Nazwa zadania badawczego	Planowany czas trwania (miesiące)	Przewidywane koszty zadania (zł)
1	2	3	4
1	Otrzymanie T-Nb ₂ O ₅ i H-Nb ₂ O ₅ w wyniku termicznego rozkładu szczawianu amonu i niobu(V). Otrzymanie H-Nb ₂ O ₅ z handlowego T-Nb ₂ O ₅ . Badania efektywności rozdrabniania krystalitów H-Nb ₂ O ₅ i T-Nb ₂ O ₅ w młynku planetarnym. Porównanie reaktywności T-Nb ₂ O ₅ i H-Nb ₂ O ₅ względem WO ₃ , MoO ₃ oraz WO ₃ i MoO ₃ . Synteza wybranych faz tworzących się w układzie Nb ₂ O ₅ -WO ₃ -MoO ₃ metodą roztworową. Próba syntezy faz tworzących się w układzie Nb ₂ O ₅ -WO ₃ i Nb ₂ O ₅ -MoO ₃ po mechanochemicznej aktywacji substratów. Badania otrzymanych faz z pomocą metod XRD, DTA/TG, IR i SEM. Przeprowadzenie testów katalitycznych faz tworzących się w układzie Nb ₂ O ₅ -WO ₃ w procesie dwucząsteczkowej kondensacji n-butanolu do ketonów.	12	85 800
2	Porównanie reaktywności T-Nb ₂ O ₅ i H-Nb ₂ O ₅ względem P ₂ O ₅ na przykładzie syntezy fazy PNb ₉ O ₂₅ . Synteza PNb ₉ O ₂₅ metodą roztworową. Porównanie reaktywności T-Nb ₂ O ₅ i H-Nb ₂ O ₅ względem Al ₂ O ₃ i Ga ₂ O ₃ na przykładzie reakcji syntezy AlNbO ₄ i GaNbO ₄ . Synteza AlNbO ₄ i GaNbO ₄ metodą roztworową. Badania produktów otrzymanych po poszczególnych etapach procesu syntezy fazy FeNb ₁₁ O ₂₉ otrzymanej metodą roztworową z wykorzystaniem metod XRD, TG, DTA, SEM oraz spektroskopii IR i Mössbauera. Przeprowadzenie testów katalitycznych wybranych faz tworzących się w układzie Nb ₂ O ₅ -Fe ₂ O ₃ w procesie dwucząsteczkowej kondensacji n-butanolu do ketonów.	8	44 200
3	Otrzymywanie faz Al ₈ V ₁₀ W ₁₆ O ₈₅ i Fe ₈ V ₁₀ W ₁₆ O ₈₅ metodą roztworową. Próba syntezy roztworów stałych typu Al _{8-x} M _x V ₁₀ W _{16-y} MoyO ₈₅ , gdzie M = Cr, Ga. Udokładnienie struktury Al ₈ V ₁₀ W ₁₆ O ₈₅ i Fe ₈ V ₁₀ W ₁₆ O ₈₅ metodą Rietvelda. Badania faz typu Al _{8-x} M _x V ₁₀ W _{16-y} MoyO ₈₅ , gdzie M = Cr, Ga, z wykorzystaniem spektroskopii IR i Mössbauera. Badanie ekspansji termicznej otrzymanych faz o strukturze blokowej. Badania metodami XRD, IR i EPR wpływu metody syntezy i składu na właściwości fotochromowe otrzymanych faz o strukturze blokowej. Przeprowadzenie testów katalitycznych z wykorzystaniem Al ₈ V ₁₀ W ₁₆ O ₈₅ i Fe ₈ V ₁₀ W ₁₆ O ₈₅ w procesie dwucząsteczkowej kondensacji n-butanolu do ketonów	9	44 200
4	Zbadanie możliwości litowania otrzymanych faz o strukturze blokowej. Badanie produktów litowania metodami XRD, IR, DTA, TG i EPR. Badanie przewodnictwa faz o strukturze blokowej oraz produktów ich litowania. Podjęcie próby rozwiązania struktury metodą ab initio nowych faz o strukturze blokowej otrzymanych w ramach projektu badawczego.	7	25 800
RAZEM:			200 000

F. KOSZTORYS PROJEKTU BADAWCZEGO

1. Poszczególne pozycje kosztorysu w cenach bieżących (zł)

Pozycja	Rok 2010	Rok 2011	Rok 2012	Rok 2013	Razem
1	2	3	4	5	6
Koszty bezpośrednie realizacji projektu, w tym:	81 000,00	34 000,00	34 000,00	19 846,00	168 846,00
- wynagrodzenia wraz z pochodnymi	11 000,00	24 000,00	24 000,00	11 000,00	70 000,00
- inne koszty bezpośrednie	70 000,00	10 000,00	10 000,00	8 846,00	98 846,00
Koszty pośrednie	4 800,00	10 200,00	10 200,00	5 954,00	31 154,00
Koszty ogółem	85 800,00	44 200,00	44 200,00	25 800,00	200 000,00

2. Kalkulacja poszczególnych pozycji kosztorysu

1) Wynagrodzenia z pochodnymi

- a. liczba osób przewidzianych do udziału w realizacji projektu: 6
w tym pracowników naukowych: 5
- b. ogółem liczba osobomiesięcy: 180

2) Opis planowanej do zakupu lub wytworzenia aparatury naukowo-badawczej

(podać nazwę zakupu, planowany przewidywany koszt, planowany miesiąc zakupu lub wytworzenia liczony od rozpoczęcia realizacji projektu oraz merytoryczne uzasadnienie)

1- Młynek planetarny wraz z zestawem kul mielących

- planowany koszt zakupu (z VAT) - 55000zł

- planowany termin zakupu – 2. miesiąc

- uzasadnienie

Przeprowadzone studia literaturowe wykazały, że synteza faz o strukturze blokowej prowadzona jest najczęściej metodą polegającą na ogrzewaniu mieszaniny odpowiednich tlenków w zakresie temperatur 1000-1400°C.

Otrzymywane w taki sposób fazy zawierają kryształy o rozmiarach przekraczających 1µm. Przegląd literatury wykazał natomiast, że materiały używane do produkcji elektrod w akumulatorach litowych oraz składniki katalizatorów powinny zawierać kryształy o znacznie mniejszych rozmiarach. Z przeglądu literatury wynika także, że ucieranie substratów reakcji przed rozpoczęciem syntezy przy pomocy młynka planetarnego umożliwia rozdrobnienie krysztalitów do rozmiarów rzędu 0.1 µm, a często mniejszych. Pozwala to na prowadzenie syntez w znacznie niższych temperaturach, dzięki czemu kryształy otrzymywanych produktów mają znacznie mniejsze rozmiary niż w przypadku syntezy w wyższych temperaturach. W niektórych przypadkach samo intensywne ucieranie substratów w młynku planetarnym prowadzi do otrzymania finalnych produktów reakcji. Dlatego też dokonanie zakupu nowoczesnego młynka planetarnego, umożliwi otrzymywanie produktów o pożądanych rozmiarach krysztalitów a tym samym ułatwi wykonywanie badań objętych projektem i przyczyni się do istotnego ich zintensyfikowania.

2. Baza danych struktur związków nieorganicznych

- planowany koszt zakupu (z VAT) –3000 zł

- planowany termin zakupu –2. miesiąc

- uzasadnienie

- W ramach projektu planowane jest dokonanie syntezy szeregu faz o strukturze blokowej. Z uwagi na to, że struktura wielu faz jest znana, możliwe będzie udokładnienie struktury izostrukturalnych faz metodą Rietvelda. Przy realizacji takiego celu niezbędne jest posiadanie wiarygodnych, zweryfikowanych przez specjalistów z dziedziny krystalografii danych strukturalnych. Dokonanie zakupu bazy danych struktur związków nieorganicznych umożliwi dostęp do wiarygodnych danych strukturalnych a tym samym umożliwi przeprowadzenie zaplanowanych badań.

3.- Program do rozwiązywania struktur ab initio na podstawie dyfraktogramów proszkowych

- planowany koszt zakupu (z VAT) –7000 zł

- planowany termin zakupu – 2 miesiąc

- uzasadnienie

Od kilku dekad do udokładniania struktur substancji izostrukturalnych wykorzystuje się metodę Rietvelda. Znacznie trudniejszy problem występuje, gdy struktura badanego związku nie jest znana. Do rozwiązywania takich problemów służą programy przeznaczone do rozwiązywania struktur ab initio na podstawie dyfraktogramów proszkowych. W 2003 roku kierownik projektu uczestniczył w zajęciach Letniej Szkoły Rozwiązywania Struktur Materiałów Polikrystalicznych i jest przygotowany do rozwiązywania tego typu problemów. Dokonanie zakupu programu do rozwiązywania struktur metoda ab initio umożliwi przeprowadzenie zaplanowanych badań.

3) Uzasadnienie wysokości planowanych innych kosztów realizacji projektu

(wymienić rodzaj kosztów, wysokość oraz ich powiązanie z planem zadań projektu)

1. Przewidywane zakupy materiałów i przedmiotów nietrwałych (koszt ogółem 16846 zł)

- odczynniki chemiczne potrzebne do syntez i wykonywania analizy chemicznej otrzymanych faz

- ciekły azot i ciekły hel do badań EPR

- tygle korundowe i porcelanowe do przeprowadzania syntez

- tygle kwarcowe do pomiarów DTA/TG

- części zamienne do aparatów do pomiarów metodą DTA/TG, IR, XRD oraz pieców

- akcesoria komputerowe i materiały biurowe

2. Koszty uczestnictwa w konferencjach zagranicznych i krajowych oraz delegacji zagranicznych i krajowych, w trakcie których będą prezentowane wyniki badań realizowanych w ramach projektu – planowany koszt 17000 zł

G. OŚWIADCZENIA KIEROWNIKA JEDNOSTKI NAUKOWEJ

1. Oświadczam, że zapoznałem się z wnioskiem o finansowanie projektu badawczego.
2. W przypadku przyjęcia projektu badawczego pt.: Synteza i właściwości faz o strukturze blokowej tworzących się w wieloskładnikowych układach tlenków metali zawierających Nb_2O_5 lub V_2O_5 - potencjalnych materiałów o aplikacyjnych właściwościach do finansowania jednostka naukowa zobowiązuje się do:
 1. włączenia projektu do planu zadaniowo-finansowego jednostki,
 2. udostępnienia pomieszczeń, aparatury i obsługi administracyjno-finansowej,
 3. zatrudnienia pracowników niezbędnych do realizacji projektu na podstawie uzgodnionej z wykonawcami projektu formy zatrudnienia (mianowanie, umowa o pracę, umowa o dzieło, umowa zlecenia),
 4. sprawowania nadzoru nad realizacją projektu i prawidłowością wydatkowania środków finansowych.
3. Oświadczam, że jednostka nie może zapewnić dostępu do urządzeń wymienionych w wykazie aparatury w części F ust. 2 pkt 2.
4. Oświadczam, że projekt obejmuje badania⁴⁾:
 1. ~~wymagające zgody właściwej komisji bioetycznej~~
 2. ~~wymagające doświadczeń na zwierzętach~~
 3. ~~nad gatunkami chronionymi lub na obszarach objętych ochroną~~
 4. ~~nad organizmami genetycznie modyfikowanymi lub z zastosowaniem takich organizmów~~
5. Oświadczam, że zgodnie z moją wiedzą przygotowany wniosek o finansowanie projektu badawczego nie narusza praw osób trzecich.
6. Oświadczam, że projekt własny obejmuje wyłącznie badania podstawowe zgodnie z definicją określoną w art. 2 pkt 2 lit. a ustawy z dnia 8 października 2004 r. o zasadach finansowania nauki (Dz. U. Nr 238, poz. 2390 z późn. zm.⁵⁾).
7. Informacje o osobie odpowiedzialnej za sporządzenie wniosku:
 1. imię i nazwisko:
Piotr Tabero
 2. numer telefonu, numer faksu, e-mail:
telefon: (091) 4494563
faks: (091) 449-46-36
e-mail: ptab@zut.edu.pl

Wniosek sporządzono (miejsce, data):

Pieczęć jednostki

Kierownik jednostki
(Rektor/Dyrektor)

Główny księgowy/Kwestor

Kierownik projektu

Data

Podpis i pieczęć

Podpis i pieczęć

Podpis

¹⁾ Niepotrzebne skreślić.

²⁾ W przypadku projektu habilitacyjnego podać informacje od daty uzyskania stopnia naukowego doktora.

³⁾ Zmiany tekstu jednolitego wymienionej ustawy zostały ogłoszone w Dz. U. z 2002 r. Nr 153, poz. 1271, z 2004 r. Nr 25, poz. 219 i Nr 33, poz. 285, z 2006 r. Nr 104, poz. 708 i 711 oraz z 2007 r. Nr 165, poz. 1170 i Nr. 176, poz. 1238.

⁴⁾ Niepotrzebne skreślić.

⁵⁾ Zmiany wymienionej ustawy zostały ogłoszone w Dz. U. z 2004 r. Nr 273 poz. 2703, 2005 r. Nr 85, poz. 727 i Nr 179, poz. 1484 oraz z 2007 r. Nr 115, poz. 795.