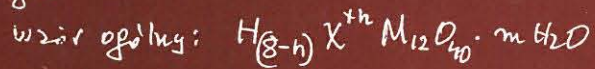


Z punktu widzenia katalizy, a zwłaszcza katalizy hetero-  
genicznej jedyną ważną serią HPK jest seria domieszek  
heteropolitlenków o charakterystycznej strukturze cewanu  
zwanej redukcją Keggin. Aniony tego typu są rów-  
nież uważane za najbardziej trwałe pod względem ter-  
micznym



Struktura pierwiastkowa: anion

Struktura drugorzędowa: ułożenie anionów w  
w przestrzeni razem z cząsteczkami wody lub tej bez nich.

Opis redukcji Keggin:

4 podzestawy  $MO_3 O_3$  oktaedry związane krawe-  
dnicami wewnętrznie pod respekt  
tęż się nawzajem ze sobą

4 atomy tlenu w podrespekcie są wspólne dla 3  
oktaedrow, 4 inne atomy są skojarzone  
wymiarem atomu centralnego

Recueil podrespektu (powyższe dane)  
z Jensen i wsp. Recueil Review

4 rodzaje atomów tlenu

$O_a$  atom heteroatom ( $LK=4$ )

$O_b$  tęż podzestawy ( $LK=2$ )

$O_c$  leżą na wspólnej krawędzi w podrespekcie ( $LK=$

$O_d$  na trójkątnej wienczołach wiszące  
z udziałem elektronów na najkrótsze

Symetria  $T_d$ .

## **INSTYTUT CHEMII FIZYCZNEJ I TEORETYCZNEJ (I-30)**

Wybrzeże Stanisława Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław  
tel. +48(71)202415, fax +48(71)203364

---

### **ZAKŁADY**

Zakład Chemii Fizycznej  
Zakład Chemii Kwantowej  
Zakład Fizyki Chemicznej  
Zakład Fizyki i Chemii Materiałów Molekularnych  
Zakład Fizykochemicznych Metod Analizy  
Zakład Fototechniki

### **PRACOWNIE NAUKOWE**

Pracownia Chemii i Technologii Procesu Fotograficznego  
Pracownia Cienkich Warstw Molekularnych  
Pracownia Kryształów Molekularnych  
Pracownia Modelowania Molekularnego  
Pracownia Obliczeń Kwantowochemicznych  
Pracownia Optyki Nieliniowej  
Pracownia Rentgenograficzna  
Pracownia Spektroskopii  
Sieć Komputerowa

### **PRACOWNIE DYDAKTYCZNE**

Pracownia Analizy Instrumentalnej  
Pracownia Chemii Fizycznej  
Pracownia Chemii i Technologii Procesów Fotograficznych  
- Pracownia Informacji Obrazowej  
Pracownia Komputerowa

## **POSTĘPY FIZYKOCHEMII**

Materiały konferencyjne

**Biuletyn Instytutu Chemii Fizycznej i Teoretycznej  
Politechniki Wrocławskiej**

numer 2

**POSTĘPY FIZYKOCHEMII**  
**Materiały konferencyjne**

pod redakcją Aleksandry Lewanowicz

Zeszyt zawiera

SUPLEMENT  
do numeru 1 Biuletynu IChFiT

Oficina Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej

---

Wrocław 1996

Biuletyn Instytutu Chemii Fizycznej i Teoretycznej Politechniki Wrocławskiej jest wydawnictwem ciągłym, zawierającym prace o charakterze monograficznym i przeglądowym. Korespondencję prosimy przysyłać na adres redaktora wydawnictw Instytutu.

Korekta  
Aleksandra Wawrzynkowska

Skład komputerowy  
Paweł Misiak

Fotografie  
Piotr Nowak

Na okładce: rękopis prof. Adama Bialeńskiego  
Ilustracja wewnątrz numeru: Zaproszenie na sesję naukową „Postępy Fizykochemii”

© Copyright by Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 1996

OFICYNA WYDAWNICZA POLITECHNIKI WROCLAWSKIEJ  
Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław

ISSN 1426-36-96

Drukarnia Oficyny Wydawniczej Politechniki Wrocławskiej. Zam. nr 204/96

*Cudze wiedzieć rzeczy ciekawość jest, a swoje potrzeba*

Andrzej M. Fredro  
*Prysłowia mów potocznych, 1658*

## SPIS TREŚCI

Słowo wstępne .....	9
Przedmowa .....	11
Profesor Adam Bielański	
<i>Nota biograficzna</i> .....	15
Heteropolikwasy, nowy rozdział katalizy heterogenicznej .....	17
<i>Dyskusja</i> .....	30
Profesor Bogdan Baranowski	
<i>Nota biograficzna</i> .....	31
Wodór i układy metal-wodór w obszarze wysokich ciśnień .....	33
<i>Dyskusja</i> .....	42
Profesor Zbigniew R. Grabowski	
<i>Nota biograficzna</i> .....	45
Molekularne stany wzbudzone. Od osobliwości struktur i reaktywności po poznawanie pojedynczych cząsteczek .....	47
<i>Dyskusja</i> .....	64
Profesor Jerzy Janik	
<i>Nota biograficzna</i> .....	65
Problem istnienia w fizyce i metafizyce .....	67
<i>Dyskusja</i> .....	71
Profesor Marian Kryszewski	
<i>Nota biograficzna</i> .....	73
Dlaczego zorganizowane cienkie warstwy różnych materiałów są fascynujące? .....	75
<i>Dyskusja</i> .....	88
Profesor Lucjan Sobczyk	
<i>Nota biograficzna</i> .....	89
Badania NMR wiązań wodorowych w zasadach Mannicha .....	91
<i>Dyskusja</i> .....	105
Suplement do „Archiwum Chemii Fizycznej” .....	105
VII Seminaria ( <i>Aleksandra Lewanowicz</i> ) .....	107
<i>Skorowidz nazwisk</i> .....	116
IX Konferencje .....	117
ERPOS ( <i>Juliusz Sworakowski</i> ) .....	118
Seminarium polsko-francuskie ( <i>Tadeusz Luty</i> ) .....	123

## Słowo wstępne

Niniejszy numer Biuletynu zawiera teksty sześciu wykładów wygłoszonych podczas sesji naukowej „Postępy fizykochemii”, która odbyła się 30 września 1995 roku we Wrocławiu. Sesję podzielono na trzy dwugodzinne posiedzenia, którym przewodniczyli kolejno: prof. dr hab. Henryk Chojnacki, prof. dr hab. Tadeusz Luty i prof. dr hab. Juliusz Sworakowski. Kolejność wykładów jest zgodna z programem sesji. Przed każdym tekstem zamieszczono fotografię, faksymile podpisu i notę biograficzną wykładającego, a po wykładzie dyskusję, której treść została odtworzona na podstawie zapisu magnetofonowego.

Na końcu zeszytu dołączono *Suplement* do pierwszego numerem Biuletynu, który ukazał się we wrześniu 1995 roku. Tom zatytułowany „Archiwum Chemii Fizycznej. Bibliografia specjalna 1945–1995” zawierał materiały dokumentujące działalność pracowników politechnicznej chemii fizycznej. Jeden z obszernych rozdziałów noszący tytuł „Seminaria”, choć obejmujący informację dotyczącą blisko 600 spotkań z lat 1959–1995, nie jest jednak kompletny (zaginięła część danych z końca lat sześćdziesiątych i znaczna część z lat siedemdziesiątych). Istniejące braki stały się dla Czytelników bodźcem do poszukiwań brakujących zapisów, które – miło mi donieść – zakończyły się sukcesem. Bardzo serdecznie dziękuję Pani dr inż. Hannie Suchardzie-Sobczykowej za ofiarowanie mi zeszytu seminaryjnego, który stał się podstawą uzupełnienia wspomnianego rozdziału VII. Odnalezione zapisy dotyczą spotkań, które odbyły się w latach 1966–1971.

Nie tracę nadziei na odnalezienie ostatniego z zeszytów, zawierającego systematyczną informację seminaryjną z okresu od 1970/1971 (semestr letni) do 1975/1976 (semestr zimowy).

W minionych latach, z inicjatywy pracowników Zakładu Chemii Fizycznej, Zakładu Fizyki Chemicznej i Zakładu Chemii Kwantowej zorganizowane zostały konferencje naukowe i seminarium, które bardzo szybko przekształciły się w międzynarodowe spotkania badaczy zainteresowanych szeroko rozumianą chemią fizyczną i chemią teoretyczną. Zachowała się jedynie fragmentaryczna dokumentacja tych spotkań, która w *Suplemencie* jest zamieszczona jako nowy, IX rozdział „Archiwum Chemii Fizycznej”. W rozdziale tym, zatytułowanym „Konferencje”, twórcy i wieloletni organizatorzy tych spotkań przedstawiają kolejno: *Electrical and Related Properties of Organic Solids* – prof. Juliusz Sworakowski, *Seminarium Polsko-Francuskie* – prof. Tadeusz Luty.

Aleksandra Lewanowicz

## PRZEDMOWA

Niniejszy tom Biuletynu, drugi który wydaje Instytut Chemii Fizycznej i Teoretycznej Politechniki Wrocławskiej, zawiera teksty sześciu referatów plenarnych wygłoszonych podczas Sesji Naukowej POSTĘPY FIZYKOCHEMII, która odbyła się we Wrocławiu 30 września 1995 r. Sesja była wydarzeniem wyjątkowym. Okazją do jej zorganizowania stał się wspólny jubileusz siedemdziesięciolecia trzech profesorów Instytutu: Krzysztofa Pigonia, Józefa W. Rohledera i Zdzisława Ruziewicza. Z okazji tej uroczystości, obchodzonej w roku jubileuszu pięćdziesięciolecia środowiska naukowego w polskim Wrocławiu, Instytut postanowił zaprosić czynnych fizykochemików wrocławskich i gości z innych ośrodków na obrady szczególnej sesji naukowej POSTĘPY FIZYKOCHEMII.

Uczestnicy sesji otrzymali pierwszy tom Biuletynu, zawierający „Archiwum Chemii Fizycznej”, bibliograficzny opis działalności grupy fizykochemików czynnych na Politechnice Wrocławskiej od jej pierwszych dni. Archiwum przypomniało genealogię Wrocławskiej Szkoły Chemii Fizycznej, wywodzącej się od profesora Kazimierza Gumińskiego i obejmującej dziś znaczną część Instytutu Chemii Fizycznej i Teoretycznej Politechniki, Zakład Chemii Fizycznej Wydziału Chemii Uniwersytetu oraz profesorów-fizykochemików, pracujących dziś nominalnie w innych gałęziach chemii.

Trzej Jubilaci należeli do pierwszego pokolenia uczniów profesora Gumińskiego. Młodych doktorów dziś kreowanych w chemii fizycznej we Wrocławiu należy uznać za naukowych „prawników” Profesora. Duchowe dziedzictwo widoczne jest w tematyce twórczości naukowej, w fizykalnej metodologii pracy naukowej oraz w przywiązaniu do akademickiej misji szerzenia wiedzy poprzez tworzenie literatury chemicznej.

W Instytucie Chemii Fizycznej i Teoretycznej Politechniki Wrocławskiej uprawiane są dziś, oprócz klasycznych dziedzin chemii fizycznej, jak elektrochemia i termochemia przemian fazowych, również te jej gałęzie, które Profesor z upodobaniem nazywał fizyką chemiczną, a które dziś częściej klasyfikuje się jako fizykochemię – spektroskopia, badania fizycznych własności ciała stałego (wraz z jego strukturą) oraz teoretyczne modelowanie jego własności. W Instytucie prowadzone są badania dotyczące chemii kwantowej i teoretycznej, tj. w dziedzinach, które Profesor jako pierwszy w Polsce propagował organizując na Uniwersytecie Jagiellońskim pierwszą Katedrę Chemii Teoretycznej – dziś znany w świecie ośrodek.

Ciągłość rozwoju środowiska fizykochemicznego we Wrocławiu widać również w książkowym piśmiennictwie chemicznym. Młodzi wówczas fizykochemicy wrocławscy byli współautorami monumentalnej „Chemii fizycznej”, wielokrotnie wydawanej przez PWN. Redaktorem tego dzieła był m.in. profesor Gumiński, wcześniej autor doskonałego podręcznika

*Termodynamika* oraz pionierskich *Elementów chemii teoretycznej*. Z Wrocławskiej Szkoły Chemii Fizycznej wyszły kolejne podstawowe podręczniki: na Politechnice – *Chemia fizyczna* K. Pigionia i Z. Ruziewiczza, *Fizyka chemiczna kryształów molekularnych* J. W. Rohledera, *Obliczenia fizykochemiczne* J. Demichowicz-Pigoniowej; na Uniwersytecie *Chemia fizyczna dla przyrodników* L. Sobczyka oraz *Eksperymentalna chemia fizyczna* L. Sobczyka i A. Kiszy. Powstawały we Wrocławiu liczne tłumaczenia dzieł z zakresu fizykochemii, skrypty studenckie i liczne opracowania historyczne. Bez obawy można stwierdzić, że Wrocławska Szkoła Chemii Fizycznej stała się najbardziej dynamicznym ośrodkiem chemii fizycznej w kraju. Wrocław wydał się stosownym miejscem do zorganizowania przeglądu wiodących badań fizykochemicznych w Polsce – Sesji Naukowej POSTĘPY FIZYKOCHEMII.

Dobór sześciu wykładowców, zaproszonych do wygłoszenia referatów podczas sesji, odzwierciedla związki naukowe oraz historyczne obecnego Instytutu Chemii Fizycznej i Teoretycznej. Wszyscy zaproszeni profesorowie są niekwestionowanymi autorytetami w Polsce, ich nazwiska i osiągnięcia są znane także poza granicami kraju. Referaty ukazały szczegółowo zakresy fizykochemii uprawiane w Polsce z wielkim powodzeniem w kilku ośrodkach. Pokazały również najwyższy poziom metodologii w przedstawianiu zarówno samych zagadnień naukowych, jak ich pozanaukowego kontekstu.

Organizacja podobnych spotkań w przyszłości pozostaje sprawą otwartą. Fizykochemia jest dziś dziedziną działań wszystkich dyscyplin chemii i wielu działów fizyki – wszystkie bowiem wykorzystują w badaniach doświadczalnych fizykochemiczne metody oraz narzędzia badawcze. Niekiedy rodzi się pytanie, czy chemia fizyczna może być jeszcze postrzegana jako wyodrębniona dyscyplina naukowa? Czy istnieje jej kanon, podobny do ukształtowanego klasycznego zestawu zagadnień w trzech siostrzanych dyscyplinach chemicznych: chemii nieorganicznej, chemii analitycznej i chemii organicznej? Nowoczesne piśmiennictwo podręcznikowe w chemii fizycznej, które w Polsce jest w poważnej mierze dziełem wrocławskim, pozwala udzielić odpowiedzi twierdzącej na pierwsze z postawionych pytań. Odpowiedź na drugie musi być wypracowana przez całe środowisko fizykochemiczne, szczególnie przez czynnych wykładowców chemii fizycznej. Organizacja sesji podobnych do POSTĘPÓW FIZYKOCHEMII może być w tym pomocna. W przyszłości spotkania takie mogłyby stymulować twórczość czynnych fizykochemików, których dziełem powinny być nowe, oryginalne podręczniki przedmiotu „chemia fizyczna”, zarówno w jego szerokim przekroju, jak w jego obszarach specjalistycznych.

Piśmiennictwo światowe dowodzi, że literatura naukowa jest nieodłącznym składnikiem postępu w nauce, być może nieodzownym warunkiem jej rozwoju przez otwarcie i zdjęcie z niej pozorowanej zasłony wiedzy tajemnej. Fizykochemia często bywa tak postrzegana, gdy wysublimowane narzędzia i metody fizykochemiczne są w powszechnym, rutynowym użyciu. Brak przygotowania w zakresie podstaw metody badawczej sprowadza personel do roli technicznej, a same narzędzia – czy będzie to spektrometr NMR, chromatograf czy polarograf – pozbawia twórczego potencjału, który w rękach profana pozostanie nie wykorzystany. Rolą przedstawicieli chemii fizycznej jest bez wątpienia szerzenie wiedzy fizykochemicznej. Tradycja i osiągnięcia środowiska fizykochemicznego w Polsce, w pełni widoczne przez pryzmat obrad sesji POSTĘPY FIZYKOCHEMII, pozwala oczekiwać tu znaczących i trwałych osiągnięć.

Dr hab. Ludwik Komorowski, prof. PWr.  
Dyrektor Instytutu

POLITECHNIKA WROCLAWSKA  
INSTYTUT CHEMII FIZYCZNEJ I TEORETYCZNEJ

zaprasza

do wzięcia udziału w Ogólnopolskiej Sesji Naukowej

## Postępy Fizykochemii

w sobotę, 30 września 1995

w Sali Wałbrzyskiej (220 A-3) gmachu Starej Chemii  
przy ul. M. Smoluchowskiego 23 we Wrocławiu.

Teksty referatów zostaną wydane drukiem po konferencji. Zamówienia na bezpłatny tom materiałów konferencyjnych można składać w czasie sesji, nabywając okolicznościowy Biuletyn Instytutu „Archiwum Chemii Fizycznej”

Informacje oraz rezerwacje miejsc hotelowych: **dr Antoni Chyla**  
tel. (071) 20 39 86  
fax. (071) 20 33 64  
e-mail: chyla@kchf.ch.pwr.wroc.pl



## PROGRAM SESJI

### 9<sup>00</sup> Posiedzenie 1.

Przewodniczący: prof. dr hab. Henryk Chojnacki

Prof. dr hab. **Adam BIELAŃSKI**, czł. rzecz. PAN  
Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie

**Heteropolikwasy, nowy rozdział katalizy heterogenicznej**

Prof. dr hab. **Bogdan BARANOWSKI**, czł. rzecz. PAN  
Instytut Chemii Fizycznej PAN w Warszawie

**Wodór i układy metal-wodór w obszarze wysokich ciśnień**

P r z e r w a

### 11<sup>15</sup> Posiedzenie 2.

Przewodniczący: prof. dr hab. inż. Tadeusz Luty

Prof. dr hab. **Zbigniew R. GRABOWSKI**, czł. koresp. PAN  
Instytut Chemii Fizycznej PAN w Warszawie

**Molekularne stany wzbudzone: osobliwości struktury  
i reaktywności; poznawanie pojedynczych cząsteczek**

Prof. dr hab. **Jerzy JANIK**, czł. rzecz. PAN  
Instytut Fizyki Jądrowej w Krakowie

**Problem istnienia w fizyce i metafizyce**

P r z e r w a o b i a d o w a

### 15<sup>15</sup> Posiedzenie 3.

Przewodniczący: prof. dr hab. Juliusz Sworakowski

Prof. dr hab. **Marian KRYSZEWSKI**, czł. rzecz. PAN  
Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN w Łodzi

**Dlaczego zorganizowane cienkie warstwy różnych materiałów  
są fascynujące?**

Prof. dr hab. **Lucjan SOBCZYK**, czł. rzecz. PAN  
Instytut Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

**Widma NMR układów z silnym wiązaniem wodorowym**