

Prowadzący:

dr inż. Jakub Surmacki

Politechnika Łódzka, Międzyresortowy Instytut Techniki Radiacyjnej,

Laboratorium Laserowej Spektroskopii Molekularnej

ul. Wróblewskiego 15, p. 304

Strona www: www.mitr.p.lodz.pl/raman/jsurmacki

Zaliczenie ćwiczenia:

Pisemne kolokwium, 45 minut. Termin do uzgodnienia. Wyniki dostępne na stronie w kilka dni po kolokwium.

Sprawozdanie z ćwiczenia z dołączonymi notatkami z pracowni podpisanymi przez prowadzącego. Na oddanie sprawozdania jest 2 tygodnie od dnia wykonania ćwiczenia. W przypadku dni wolnych (świąt, długich weekendów) termin przedłużam o ilość wolnych dni. Za każdy tydzień zwłoki po dwóch tygodniach jest 0,5 oceny niżej ze sprawozdania.

Aby uniknąć plagiatów, prowadzący analizę instrumentalną ćw. 5 informują, że dwa egzemplarze sprawozdania z identycznie sformułowanymi wnioskami (lub różniącymi się kosmetyką) to nie zaliczone ćwiczenie dla obu osób bez możliwości poprawy. Sprawozdanie nie jest trudne, ani czasochłonne do napisania samemu.

Zawartość sprawozdania:

Wstęp teoretyczny (ok. 1-1,5 strony) z opisem tego, co robimy w ćwiczeniu, opisem rozpraszania Ramana (wystarczy mądry rysunek i krótki opis) i schematem spektrometru Ramana (również schemat i krótki opis).

Czytelne tabele z wynikami obliczeń w HyperChemie (kąty i długości wiązań, częstotliwości drgań wraz z przypisanymi im nazwami) oraz wyznaczoną energią protonowania.

Wydrukowane widmo wody. Znajdziesz je na: www.mitr.p.lodz.pl/raman → lectures → instrumental analysis → widmo-1-woda (plik Origin). Darmowa przeglądarka plików Origina dostępna na: <http://www.originlab.com/viewer>.

Najważniejsza część sprawozdania, czyli wnioski. Proszę porównać wyniki obliczeń teoretycznych (tego, co państwo liczyli) z eksperymentem (otrzymanym widmem Ramana wody, tablicami chemicznymi z długościami wiązań, kątami, energią protonowania, itp.), a następnie spróbować odpowiedzieć na następujące pytania:

- W której z baz struktura wody (kąty i długości wiązań) jest najbliższa prawdziwej wodzie?
- Czy najbliższa prawdziwej struktura przekłada się na najbliższe prawdziwym częstotliwości drgań normalnych? Dlaczego są odstępstwa w częstotliwościach drgań teoretycznych i eksperymentalnych – jakich oddziaływań nie braлиśmy pod uwagę modelując komputerowo nasze cząsteczki?
- W której bazie energia protonowania wychodzi najbliższa prawdziwej? Jakie są możliwe przyczyny odstępstwa energii policzonej teoretycznie od policzonej eksperymentalnie?

Gdzie znaleźć energię protonowania i uwagi o literaturze:

J. Kroh, „Chemia radiacyjna”, Warszawa 1970, str. 141 (dostępna w Bibliotece PŁ).

Kiedy cytują Państwo dane z jakichś książek, proszę zamieścić do nich odnośnik!

Halina Abramczyk, „Wstęp do spektroskopii laserowej”, PWN, Warszawa 2000.

Andrzej Cygański, „Metody spektroskopowe w chemii analitycznej”, WNT, Warszawa 2002.

Do kolokwium polecam uczyć się z książki:

Zbigniew Kęcki, „Podstawy spektroskopii molekularnej”, PWN, Warszawa 1998.

Oczywiście zaczynamy od dogłębnego przeczytania i zrozumienia części teoretycznej instrukcji.