

Dr Katarzyna Łuczyńska,
Laboratorium Fizyki Neutronowej,
Instytut Chemii i Techniki Jądrowej w Warszawie
Kontakt: k.m.luczynska@gmail.com

Temat ćwiczenia:

Synteza i badania fizykochemiczne molekularnych kompleksów donorowo-akceptorowych

Opis ćwiczenia:

Celem projektu jest synteza i dogłębna charakterystyka fizykochemiczna wybranego kompleksu organicznego kwasu bromanilowego z pochodną aminy heterocyklicznej. Syntezowany układ należy do rodziny donorowo-akceptorowych kryształów molekularnych, atrakcyjnych z perspektywy ich możliwego zastosowania, stanowiąc przy tym interesujące układy modelowe w badaniach podstawowych o istotnym znaczeniu w inżynierii krystalograficznej i chemii supramolekularnej. Projekt jest ukierunkowany na badania podstawowe, mające na celu poszukiwanie wzajemnej relacji, pomiędzy strukturą, a odpowiedzią spektralną.

Przebieg ćwiczenia:

1. Synteza kompleksu
2. Zbadanie struktury przy użyciu dyfrakcji rentgenowskiej na otrzymanej próbce polikrystalicznej
3. Pomiary kompleksu przy użyciu spektroskopii Ramana
4. Zapoznanie się z budową i działaniem spektrometru NERA, a także opracowanie wyników z eksperymentu nieelastycznego rozproszenia neutronów INS
5. Modelowanie widm teoretycznych metodami chemii kwantowej w celu interpretacji wyników doświadczalnych
6. Przygotowanie prezentacji

Bibliografia:

1. K. Łuczyńska, K.Druźbicki, K.Łyczko, W.Starosta, "Complementary Optical and Neutron Vibrational Spectroscopy Study of Bromanilic Acid: 2,3,5,6-Tetramethylpyrazine (1:1) Cocrystal", *Vibrational Spectroscopy* 75 (2014) 26-38.
2. K. Łuczyńska, K.Druźbicki, K. Lyczko. J. Cz. Dobrowolski, "Experimental (X-ray, ¹³C CP/MAS NMR, IR, RS, INS, THz) and Solid-State DFT Study on (1:1) Co-Crystal of Bromanilic Acid and 2,6-Dimethylpyrazine", *J. Phys. Chem. B* 119 (2015) 6852.
3. K. Łuczyńska, K. Druźbicki, K. Lyczko, J.Cz. Dobrowolski, „Structure-Spectra Correlations in Anilate Complexes with Picolines”, *Crystal Growth & Design*, 2016, 16(10), pp. 6069–6083.

Wymagania wobec praktykanta:

Temat skierowany jest do studentów kierunków chemicznych lub mocno zainteresowanych chemia. Praktykant powinien mieć ukończony kurs podstawowy spektroskopii molekularnej.

Posiadanie własnego laptopa.

Ćwiczenie dla 1 studenta