



KONWERSATORIUM INSTYTUTU FIZYKI UMCS

05.01.2012 r., godz. 11¹⁵, Aula IF im. St. Ziemeckiego

Mgr Maciej Czarnacki
(Studia Doktoranckie IF UMCS)

„Badanie frakcjonowania izotopowego między fazą ciekłą i gazową wybranych związków nieorganicznych”

Badania procesów wymiany izotopowej pierwiastków w warunkach równowagi termodynamicznej mają zastosowanie w wielu gałęziach nauki: fizyce, chemii, biologii, geologii, paleoklimatologii jak również kryminalistyce. Głównym problemem w stosowaniu tego narzędzia jest znajomość dokładnych wartości współczynników frakcjonowania izotopowego w funkcji temperatury i pH środowiska, w którym następuje wymiana izotopów.

Celem moich badań jest stworzenie teoretycznego opisu zjawisk wymiany izotopowej oraz metody wyznaczania współczynników frakcjonowania izotopowego pomiędzy fazą ciekłą a gazową w układach $\text{H}_2\text{O}_{\text{ciecz}}-\text{H}_2\text{O}_{\text{para}}$, $\text{H}_2\text{S}_{\text{aq}}-\text{H}_2\text{S}_{\text{gaz}}$ oraz $\text{SO}_{2\text{aq}}-\text{SO}_{2\text{gaz}}$. W niniejszym referacie przedstawię wyniki wyznaczania współczynników frakcjonowania izotopowego tlenu i siarki z wykorzystaniem modelowania molekularnego - teorii funkcjonału gęstości (DFT), w połączeniu z analizą populacji klastrów molekularnych $(\text{H}_2\text{O})_n$, $\text{H}_2\text{S}\cdot(\text{H}_2\text{O})_n$, $\text{SO}_2\cdot(\text{H}_2\text{O})_n$ dla $n=1,2,\dots,6$. W przypadku siarkowodoru oraz dwutlenku siarki uwzględnione zostały procesy dysocjacji tych molekuł w środowisku wodnym. Otrzymane wyniki dają pełen obraz procesów jakie zachodzą w reakcjach wymiany izotopowej na poziomie molekularnym. Uzyskane przeze mnie wyniki teoretyczne będą porównane z wartościami doświadczalnymi.

Uprzejmie zapraszam wszystkich pracowników, doktorantów i studentów Instytutu Fizyki.

Zbigniew Korczak