



# Small water clusters in liquid alkaline chloride matrices.

Saramak J., Kozanecki M., Halagan K.

*Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka,*

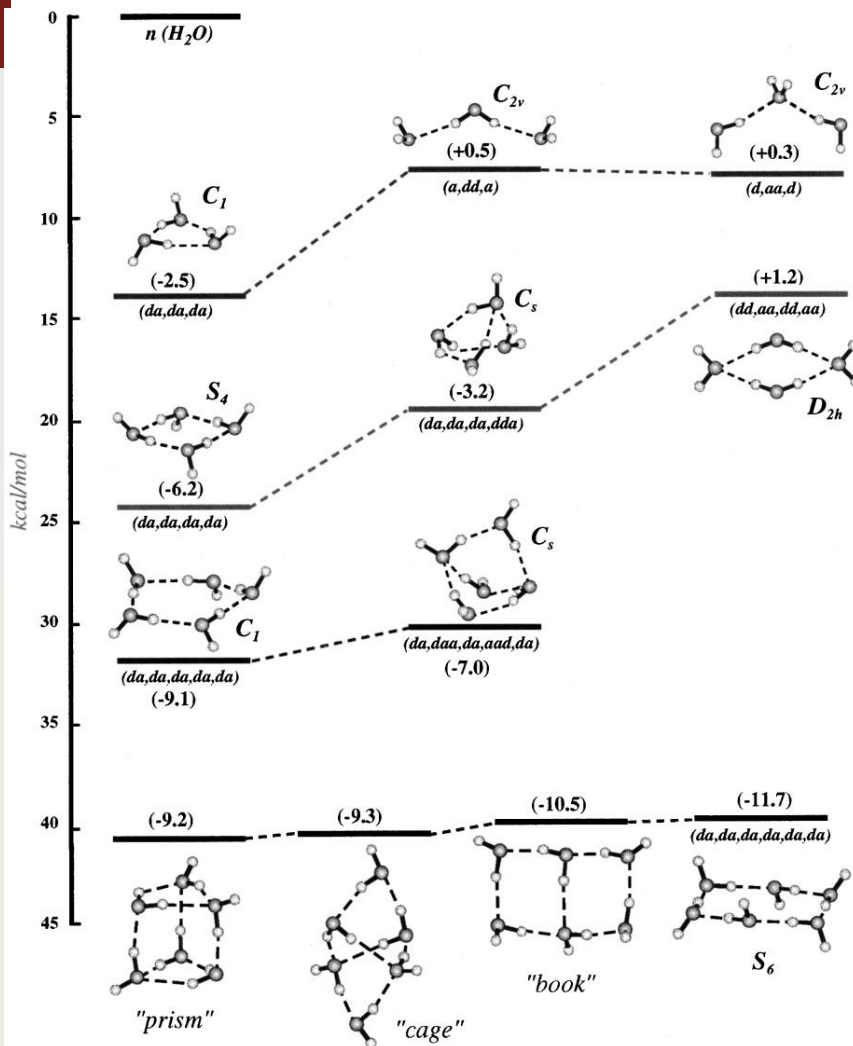
*Żeromskiego 116, 90-924 Łódź, Polska*

*E-mail:155617@edu.p.lodz.pl*

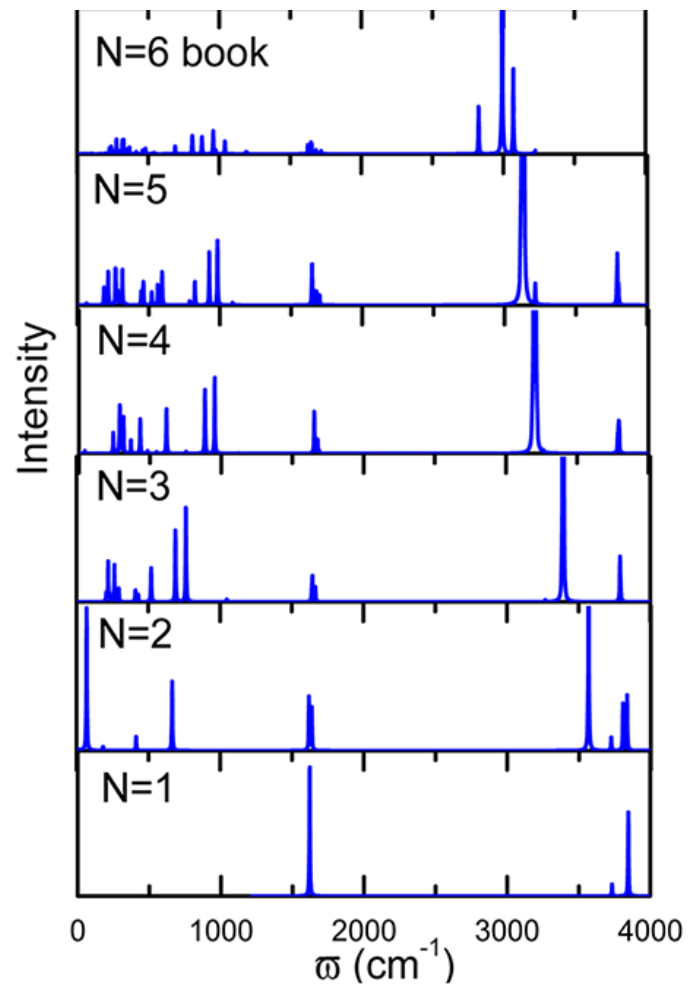




# Motywacje



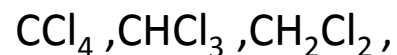
Rys. 1 Wykres zależności energii wiązania wodorowego w podanych strukturach [1]



Rys. 2 Intensywności i pozycje pasm dla różnej wielkości klasterów wody otrzymane metodami DFT [2].

# Dane eksperymentalne

Przygotowywanie 1% roztworu wodnego w rozpuszczalnikach chloropochodnych:



5x

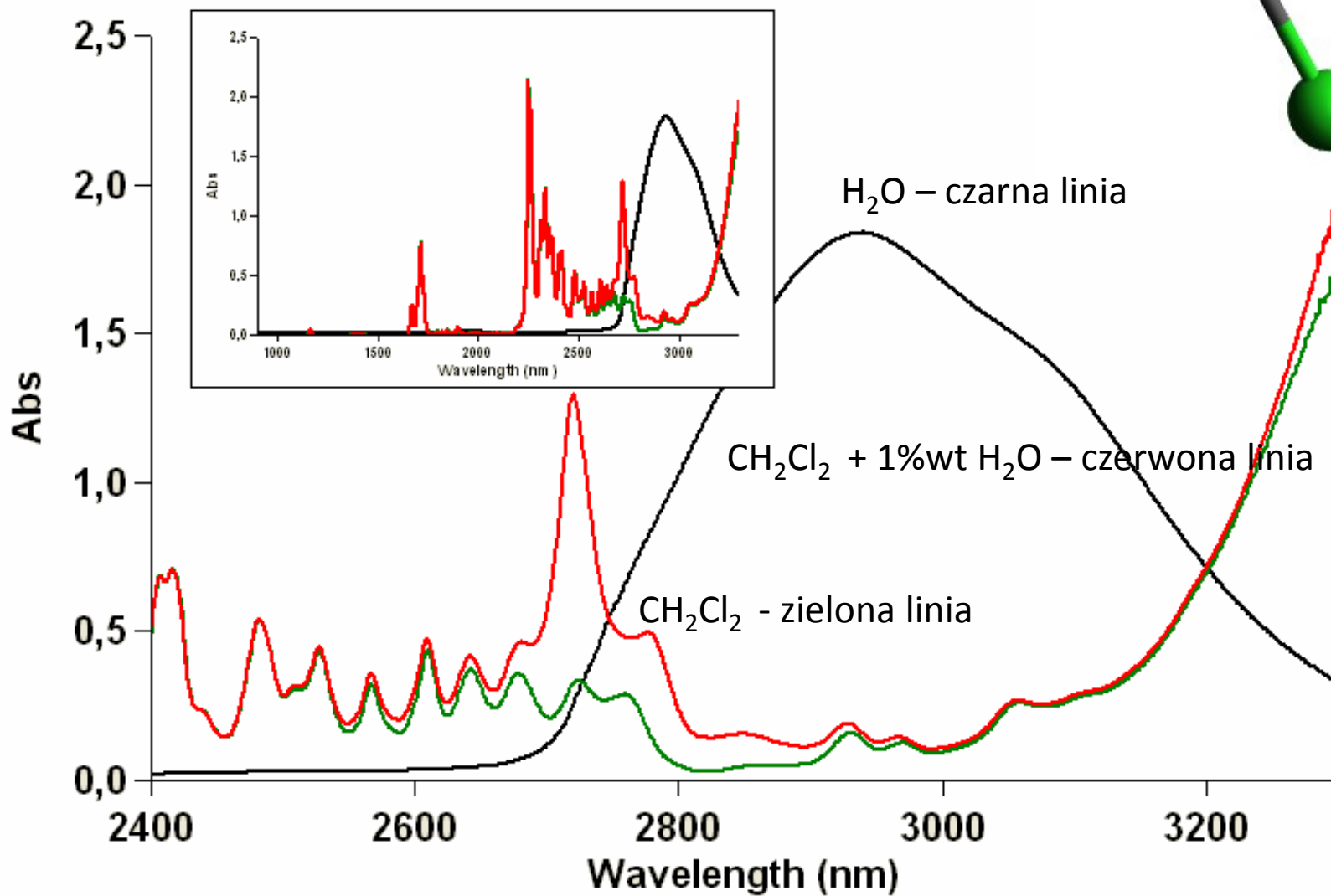
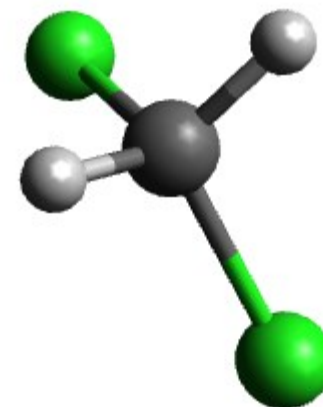
15 min: Roztwory w fiolkach zostały poddane działaniu ultradźwięków.

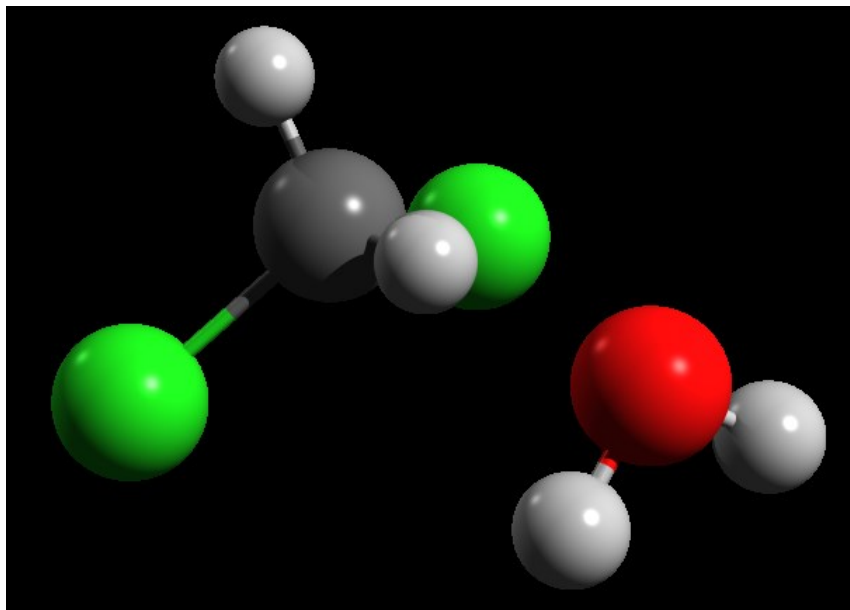
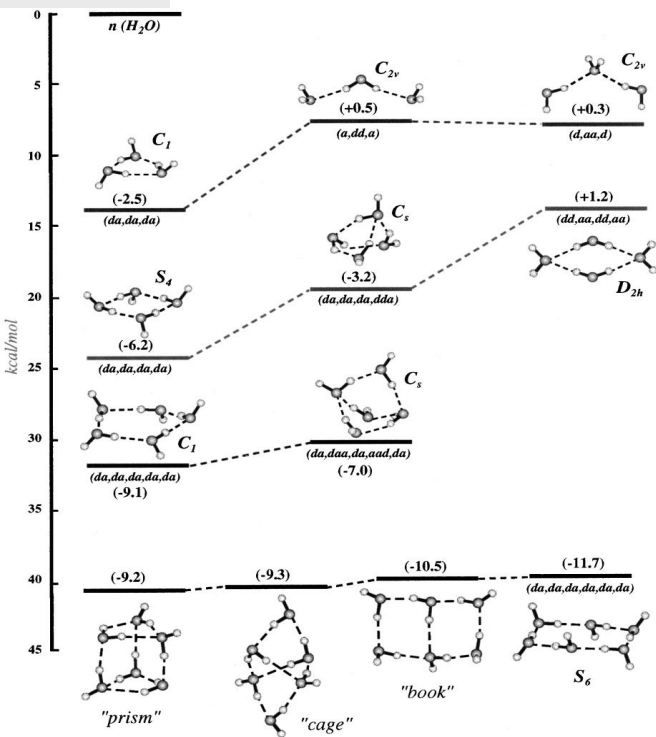
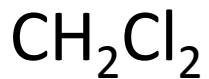
5 min: Wymagana przerwa by nie dopuścić do przegrzania się wody w myjce ultradźwiękowej



Po 24 godzinach próbkę mierzono na spektrofotometrze UV-VIS-NIR (Varian Inc. Carry 5000) w zakresie 175-3300 nm

# Dane eksperymentalne: CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>





Gaussian09

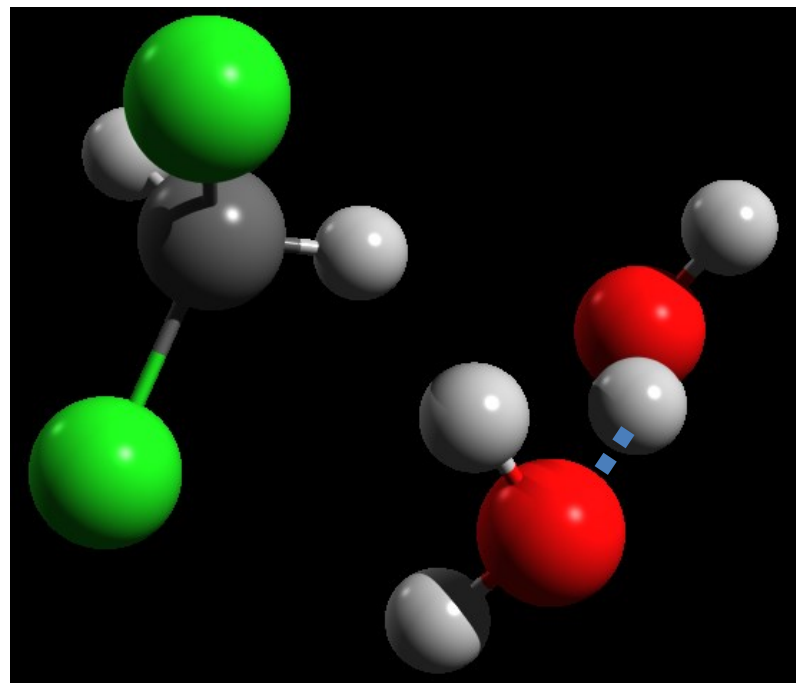
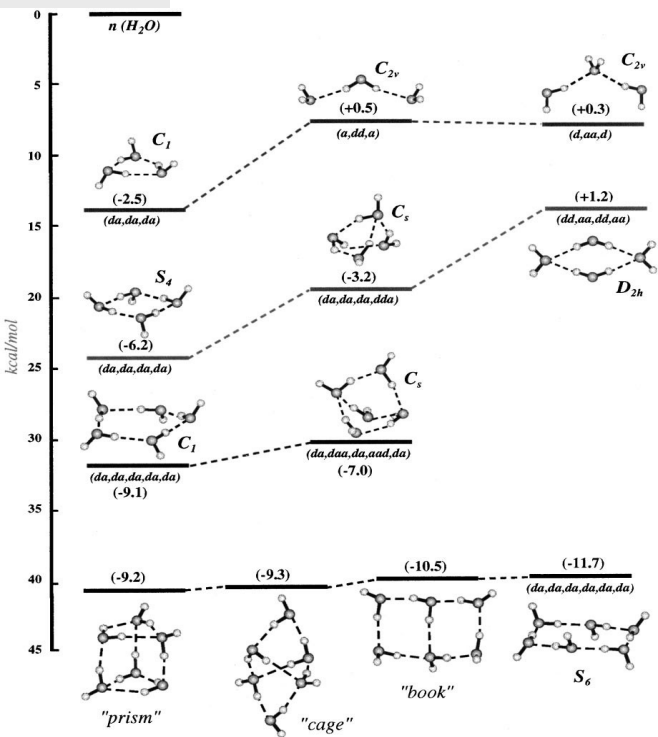
B3LYP/6-31G(d,p) IEFPCM

The Polarizable Continuum Model (PCM)  
the Integral Equation Formalism (IEF)



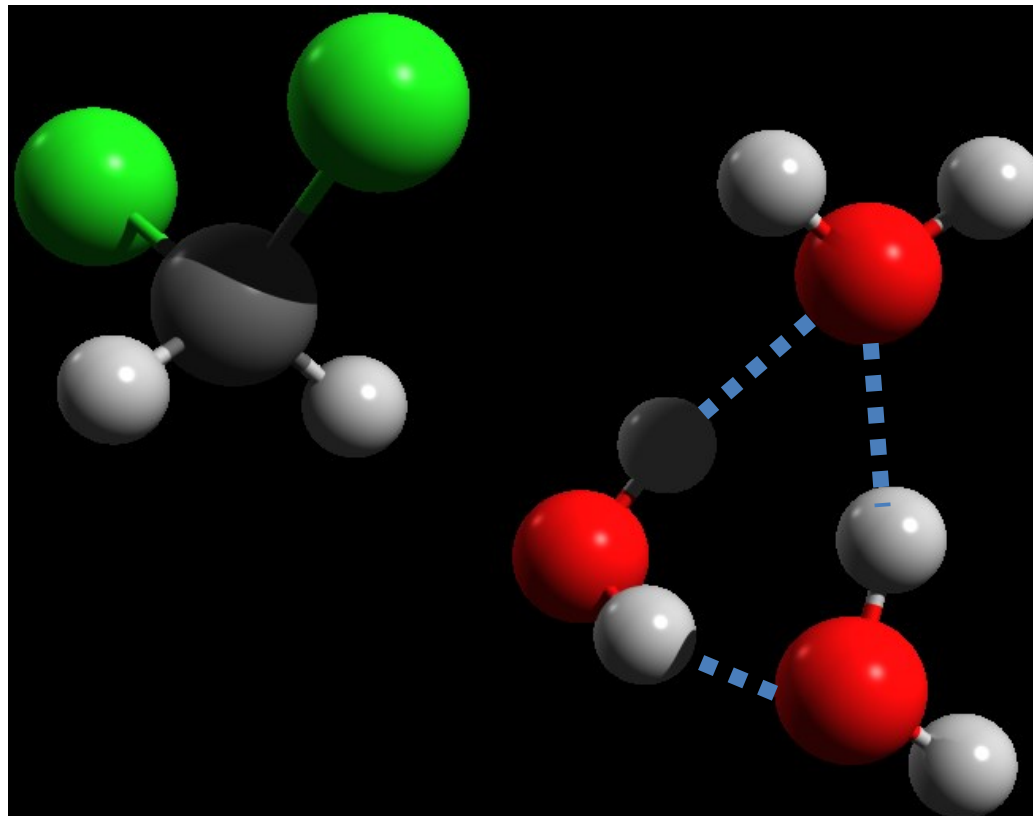
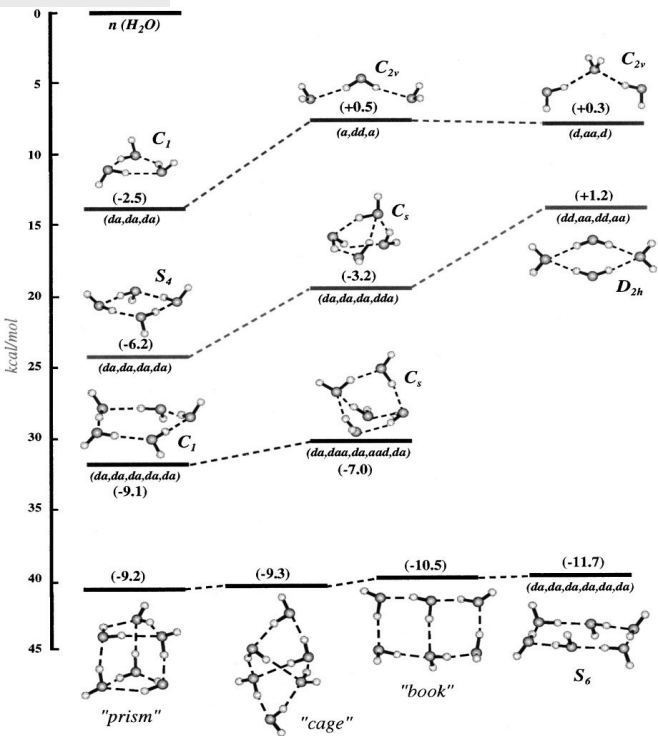
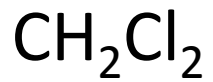


# CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>



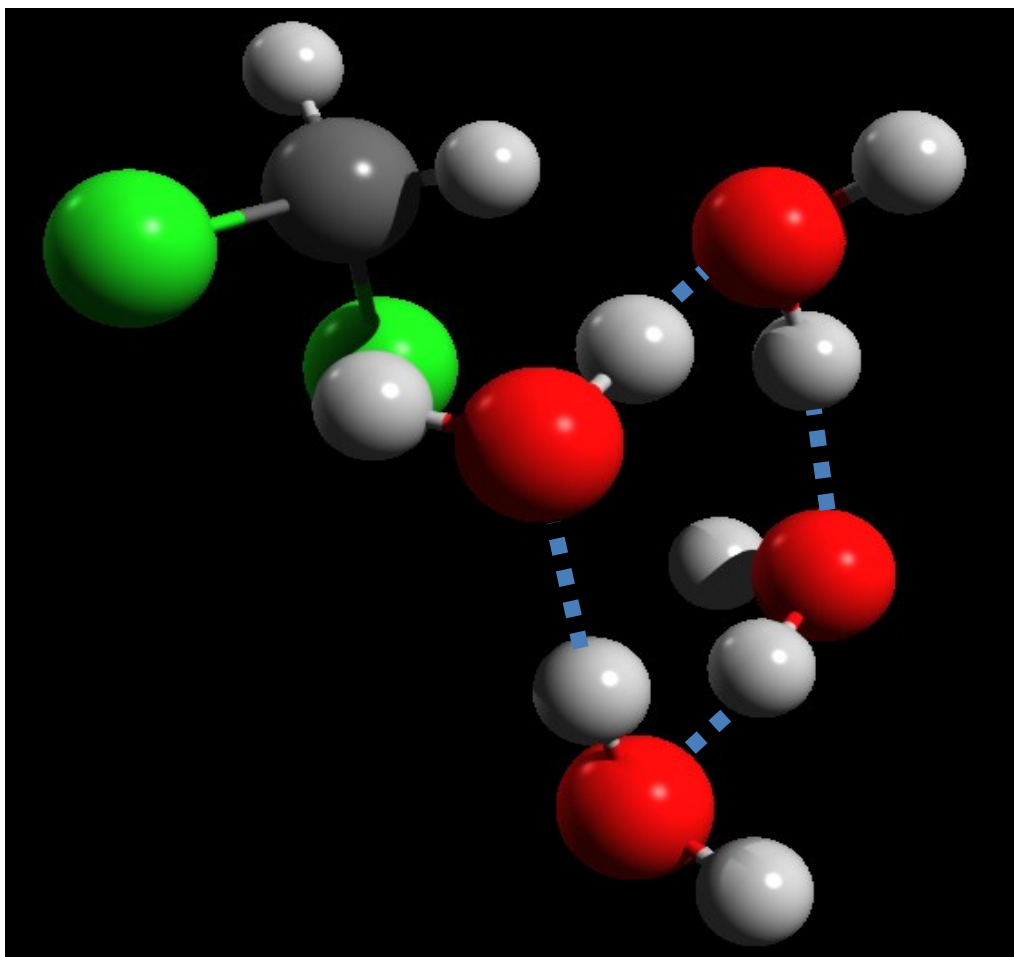
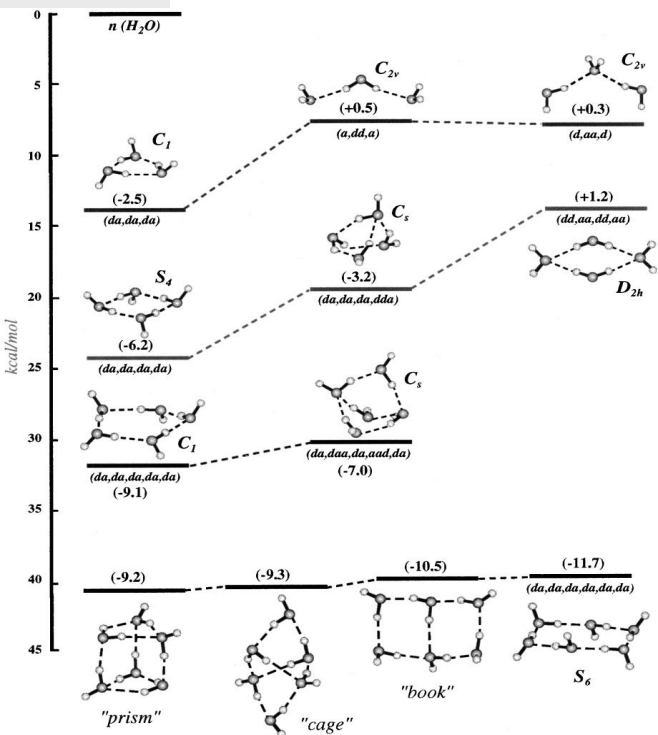
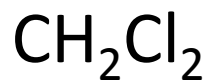
Gaussian09  
B3LYP/6-31G(d,p) IEFPCM





Gaussian09  
B3LYP/6-31G(d,p) IEFPCM

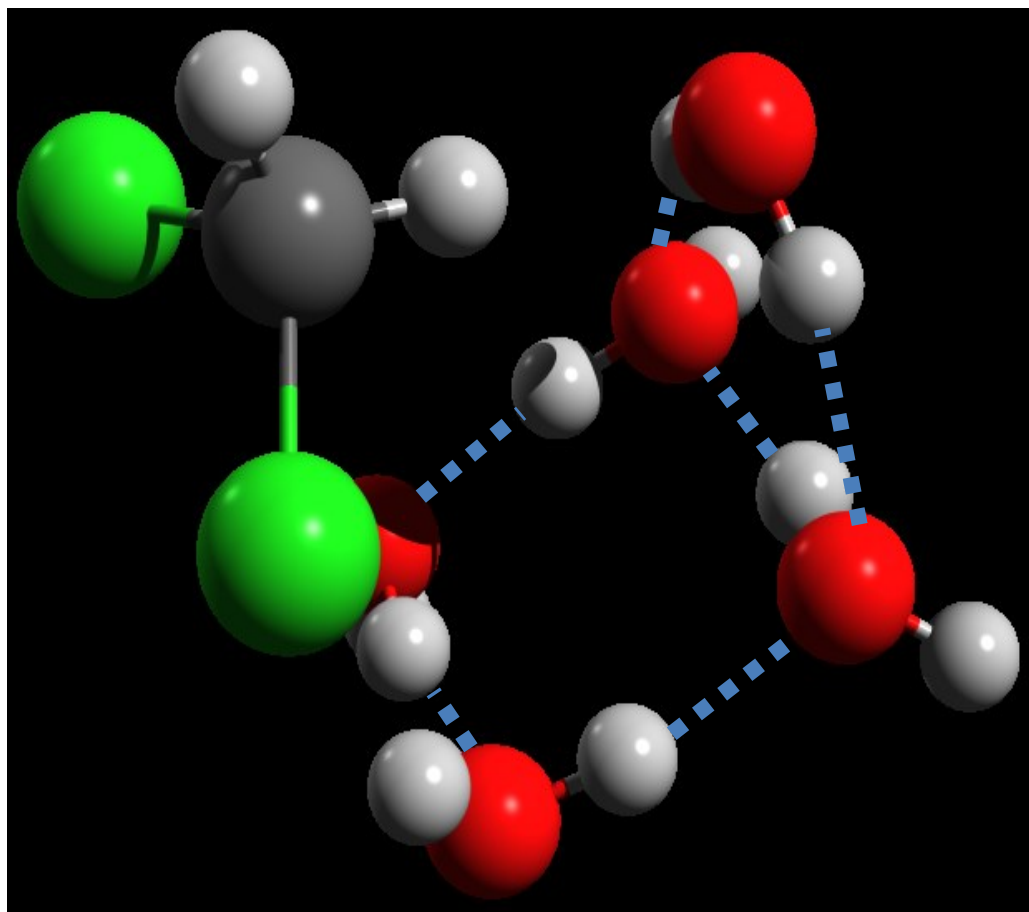
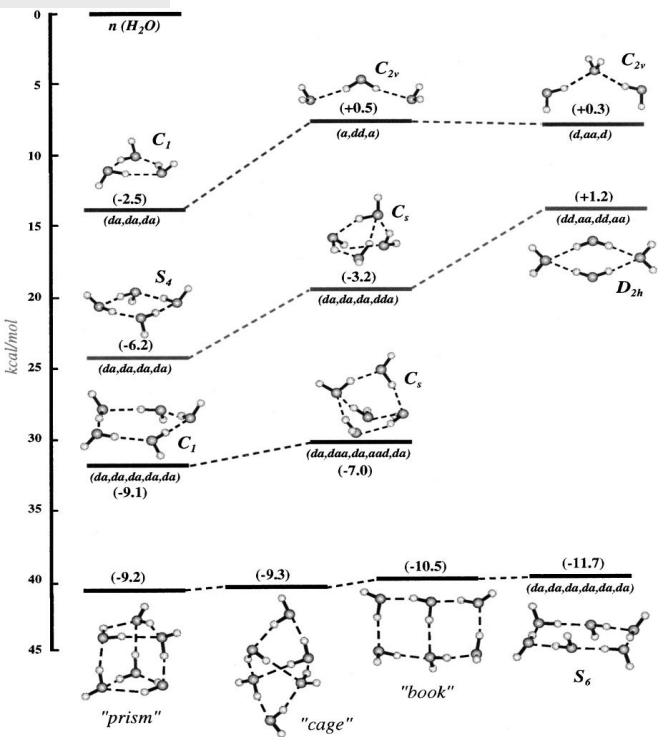
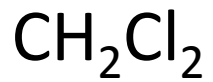




Gaussian09  
B3LYP/6-31G(d,p) IEFPCM

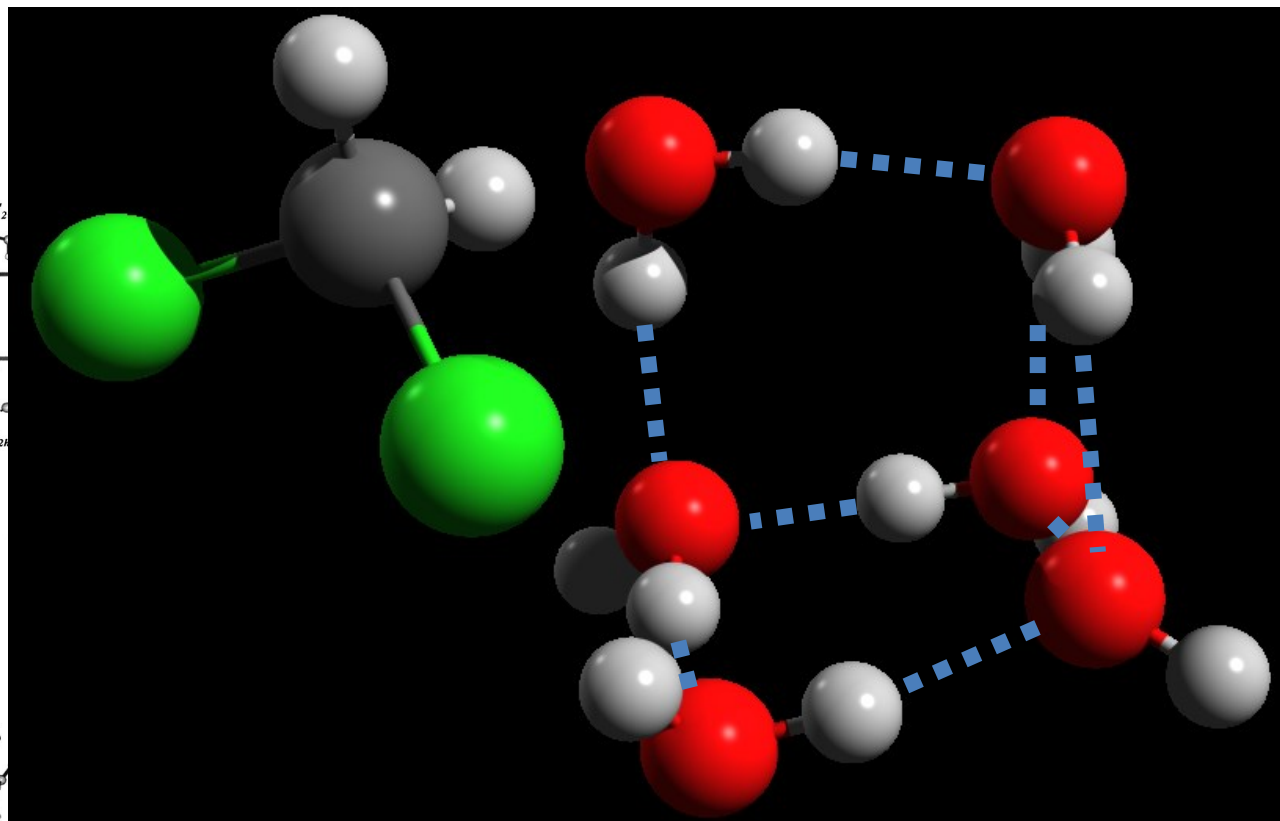
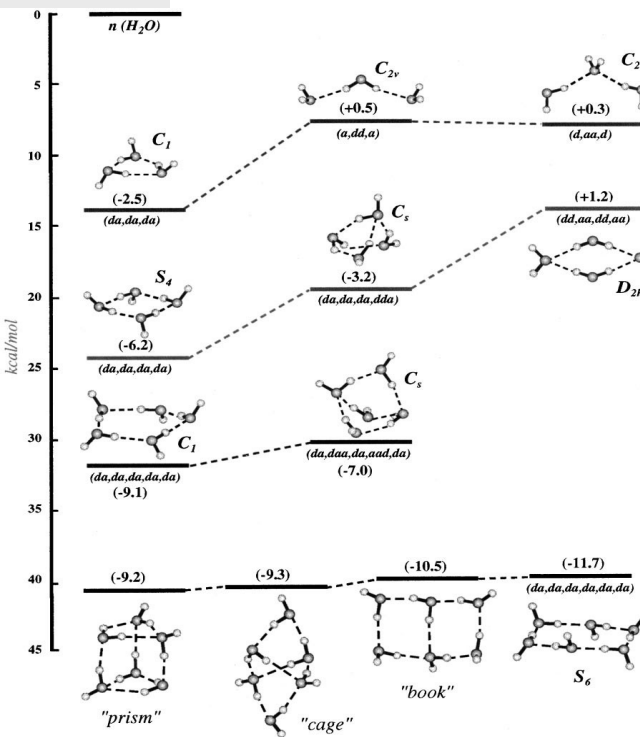
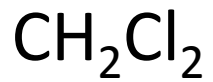






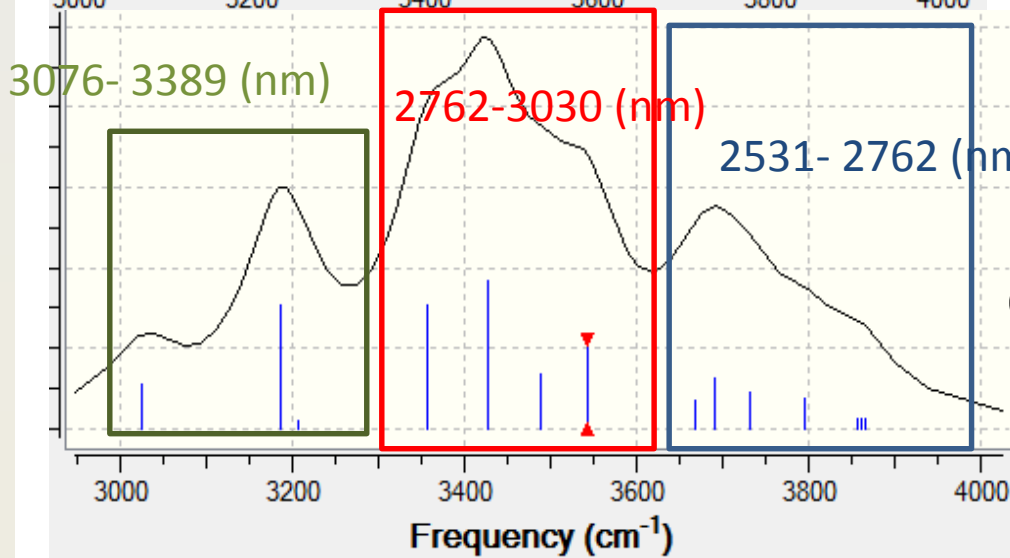
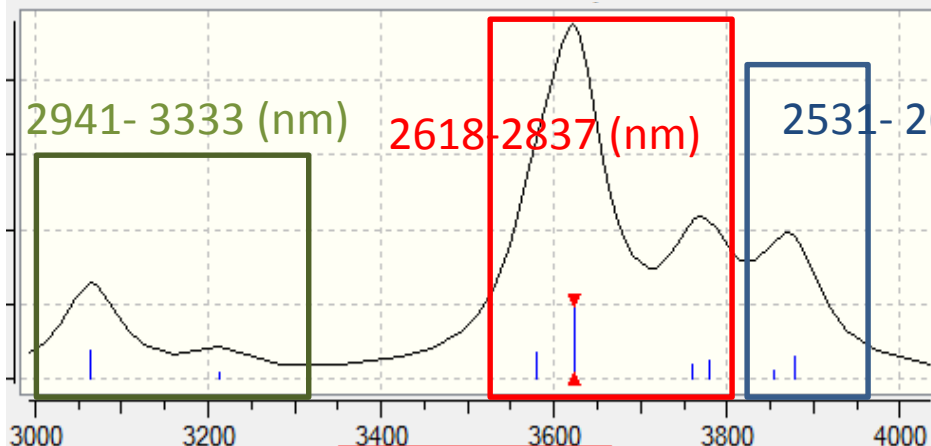
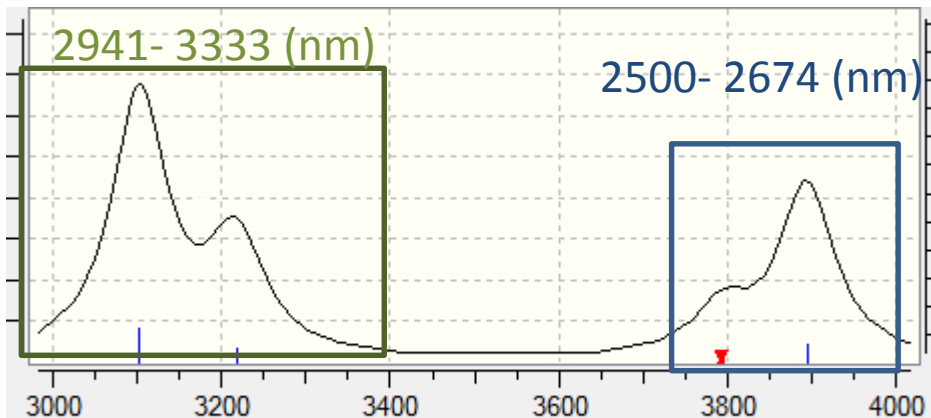
Gaussian09  
B3LYP/6-31G(d,p) IEFPCM



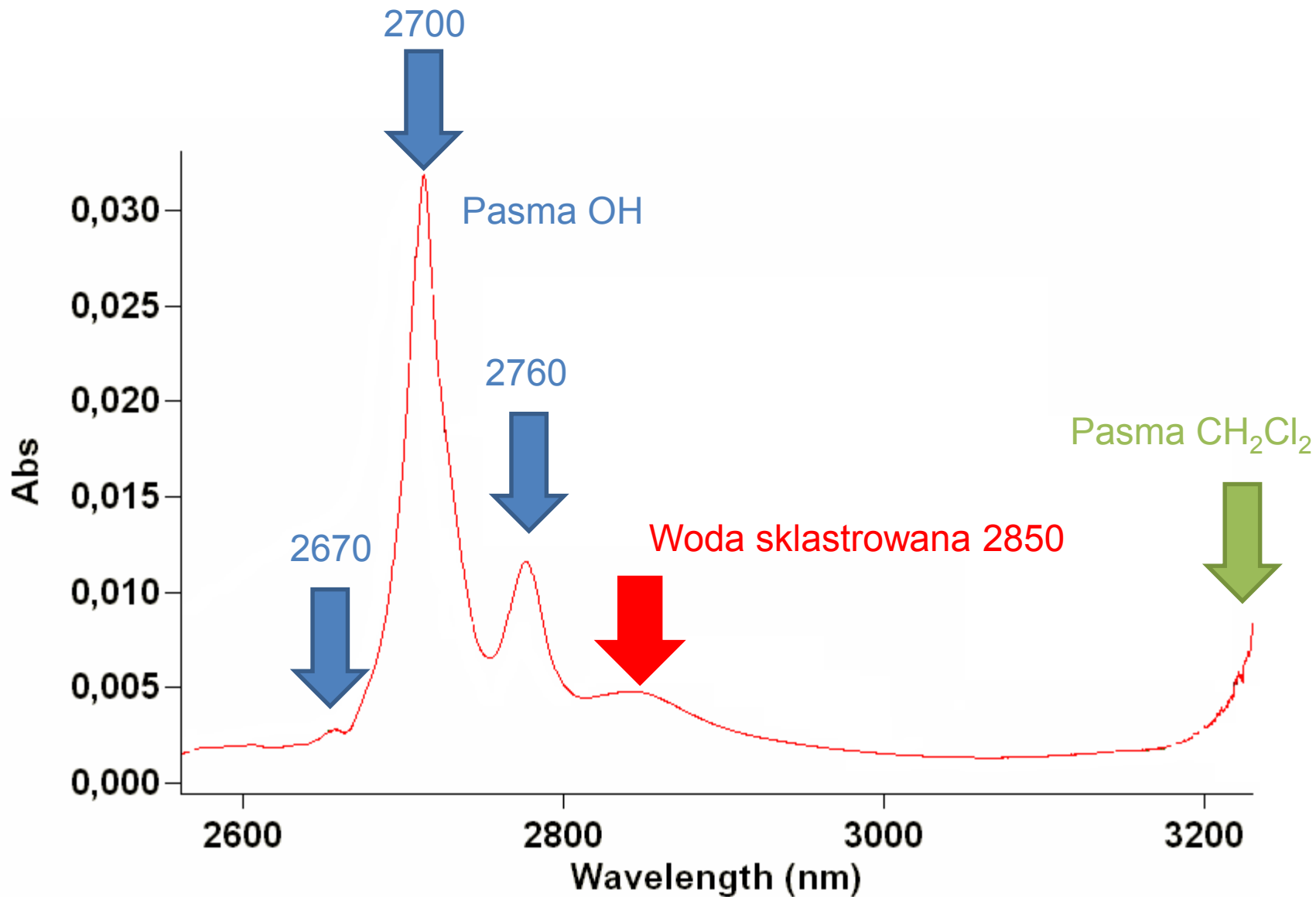


Gaussian09  
B3LYP/6-31G(d,p) IEFPCM





# Widmo różnicowe IR- 1%wt H<sub>2</sub>O+CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>





# Podsumowanie:

W przypadku 1% roztworu wody w dichlorometanie:

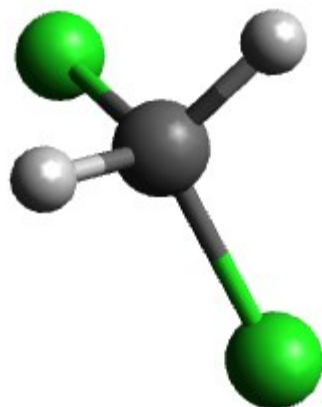
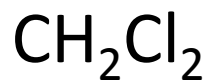
- użycie tej metody daje dobre wyniki w porównaniu z eksperymentem
- woda formuje minimum 6 członowe klastry, co zgadza się z badaniami chemii teoretycznej, która wskazuje iż są one bardziej korzystne energetycznie
- widzimy także wodę zdyspergowaną molekularnie
- liczba i pozycja pasm w widmach IR zmienia się wraz z liczbą i wielkością klasterów wody. Po porównaniu widm doświadczalnych i eksperymentalnych stwierdzono iż pozycje pasm od wiązań OH i sklastrowanej wody, a także dichlorometanu odpowiadają minimum 6- członowym klastrom.

**Podziękownia** dla grantu NCN 2013/09/B/ST4/03010, oraz infrastruktury PIGrid.



# References:

- [1] Xantheas, S.S.: „Cooperativity and hydrogen bonding network in water clusters.” Chemical Physics, Vol. 258, 2000, pp. 225 - 231
- [2] Chang Q Sun,\* , Xi Zhang, Ji Zhou,|| Yongli Huang,Yichun Zhou and Weitao Zheng.: „Density, elasticity, and stability anomalies of water molecules with fewer than four neighbors” J. Phys. Chem. Lett. 2013, 4, 2565–2570



Widmo IR dla klastrów wody w dichlorometanie

