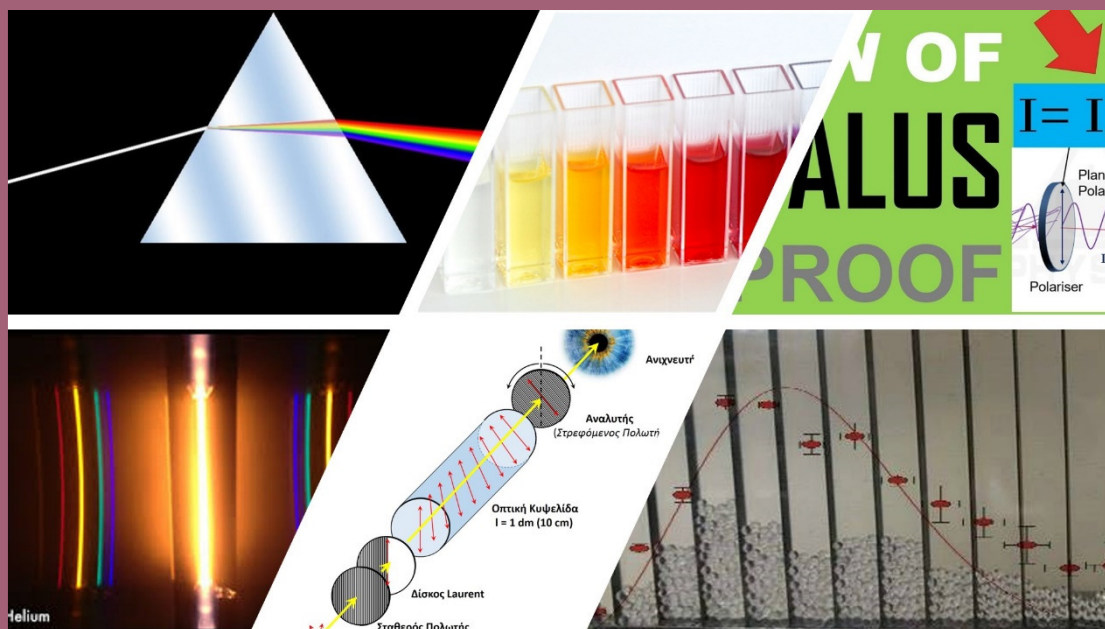


Συνοπτικός Εργαστηριακός Οδηγός

Εργαστήρια Φυσικοχημείας Ι (ΧΗΜ-311)



Νικόλαος Στρατηγάκης, Βασίλειος Παπαδημητρίου
Δημήτριος Άγγλος

Ηράκλειο, Ακαδ. Έτος: 2023-24

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Πριν το Εργαστήριο	
Περίγραμμα Μαθήματος	1
Προετοιμασία Εργαστηριακού Τετραδίου (Lab-Book)	3
Βασικές Αρχές Χρήσης Λογισμικών Προγραμμάτων Επεξεργασίας Πειραματικών Δεδομένων	8
Εργαστηριακές Ασκήσεις	
A05: Κατανομή Ταχυτήτων Αερίου Maxwell-Boltzmann	17
A06: Πολωσιμετρία	21
A07: Διαθλασιμετρία	24
B15: Ατομική Φασματοσκοπία	28
B16: Φασματοσκοπία Απορρόφησης Οργανικών Χρωστικών	32
B19: Αρχές Λειτουργίας LASER – Πόλωση Φωτός – Νόμος Malus	35
Μετά το Εργαστήριο	
Συνοπτικός Οδηγός Συγγραφής Εργαστηριακής Αναφοράς	39

Εργαστήριο Φυσικοχημείας Ι (ΧΗΜ-311)

Διδάσκοντες:

	Δημήτριος Άγγλος	Νικόλαος Στρατηγάκης	Βασίλειος Παπαδημητρίου
τηλ.	2810-545072	2810-545017, -545113	2810-545093
E-MAIL:	anglos@uoc.gr	stratign@uoc.gr	bpapadim@uoc.gr

Υπεύθυνοι Εργαστηρίου: Νικόλαος Στρατηγάκης και Βασίλειος Παπαδημητρίου

Βοηθοί εργαστηρίου: Ανδρουλιδάκης Μάνος (Α05/Α06), Ειρήνη Καλιτζάκη (Α05/Α06), Αντώνης Σαρκιάς (Α07), Άννα Γκογκιασβίλι (Α07), Ιωάννα Μυσιρή (Β15), Ιωάννης-Αριστείδης Φλουρής (Β16), Διονυσία Βαρβαρίγου (Β16)

Εργαστήρια: Δευτέρα, Τετάρτη, Παρασκευή 09:00 - 13:00

Διαλέξεις/Σεμινάρια: Τετάρτη 15:00 – 17:00 (Αίθουσα Σεμιναρίων)

1^η διάλεξη (Αμφ. 1)
27/09/2023, 14:00

URL: <http://www.chemistry.uoc.gr/eclass/courses/CHEM-UNDER125/>

Εργαστηριακές Ασκήσεις¹

Άσκηση 1 (Α05):	Κατανομή Ταχυτήτων κατά Maxwell
Άσκηση 2 (Α06):	Πολωσιμετρία
Άσκηση 3 (Α07):	Διαθλασιμετρία
Άσκηση 4 (Β15):	Ατομική Φασματοσκοπία
Άσκηση 5 (Β16):	Φάσμα Απορρόφησης Χρωστικής
Άσκηση 6 (Β19):	Αρχές Λειτουργίας Laser. Νόμος του Malus

Βοηθήματα

A. Εγχειρίδιο Εργαστηρίου

- [ΕργΦΧ] Θ. Κιτσόπουλος, Α. Ρίζος, Ν. Στρατηγάκης 'Εργαστηριακές Ασκήσεις Φυσικοχημείας' (Πανεπ. Κρήτης, Τμ. Χημείας, Ηράκλειο 2016-17)

B. Προτεινόμενη Βιβλιογραφία (Κλειστή Βιβλιοθήκη)

- [ΑΣ-ΜΟΠ] Δ. Ζευγώλης, 'Εφαρμοσμένη Οπτική' (Τζιόλας & Υιοί Α.Ε., 2018)
- [ΑτΦΧ] P.W. Atkins 'Φυσικοχημεία' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2014)

¹ Με την κατάρτιση των εργαστηριακών ομάδων θα οριστικοποιηθεί το ακριβές εβδομαδιαίο πρόγραμμα διεξαγωγής των εργαστηριακών ασκήσεων, το οποίο θα αναρτηθεί στον πίνακα ανακοινώσεων του Εργ. Φυσικοχημείας, το MSTeams και το e-class.

Γ. Ειδικά βοηθήματα

4. (MSTeams και e-class του μαθήματος)

- Συνοπτικό περίγραμμα ασκήσεων,
- Γνώσεις υποβάθρου,
- Στόχοι και περιεχόμενο άσκησης,
- Οδηγίες συγγραφής εργαστηριακού τετραδίου (Lab Book),
- Οδηγίες για τη δημιουργία γραφικών παραστάσεων δεδομένων και την προσαρμογή αυτών μέσω λογισμικού,
- Περίγραμμα εργαστηριακής αναφοράς και πρότυπη αναφορά [Overview]

5. Σύντομες βίντεο-παρουσιάσεις των ασκήσεων:

<https://opencourses.uoc.gr/courses/course/view.php?id=363>

Χρονοδιάγραμμα Διαλέξεων

27/09, 15:00 (Αμφ. Α1): *Εισαγωγικά*

Εργαστηριακή ασφάλεια, Μετρήσεις, Σφάλματα, Τετράδιο εργαστηρίου

Γραφικές παραστάσεις, Επεξεργασία δεδομένων, Αναφορά

28/09, 14:00 (Αμφ. Α1): *Συνοπτική περιγραφή θεωρητικού υποβάθρου πειραμάτων και ανάλυση δεδομένων*

Υπό ορισμό στις 27/09: *Απομακρυσμένη Εκπαίδευση Χρήσης Βιβλιοθήκης*

Εβδομάδα 1: *Φως (ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία) και Οπτική*

Εβδομάδα 2: *Οργανολογία φασματοσκοπίας (πηγές, φασματόμετρα, ανιχνευτές)*

Εβδομάδα 3: *Κινητική Θεωρία Αερίων, Κατανομή ταχυτήτων*

Εβδομάδα 4: *Ατομική φασματοσκοπία – Ατομική δομή*

Εβδομάδα 5: *Ατομική φασματοσκοπία – Φασματοσκοπικοί όροι*

Εβδομάδα 6: *Βασικά στοιχεία Χημικής Κινητικής*

Εβδομάδα 7: *Μοριακή φασματοσκοπία απορρόφησης-φθορισμού (ηλεκτρονική)*

Εβδομάδα 10 : *Αρχές λειτουργίας και τύποι Λέιζερ I*

Εβδομάδα 11 : *Αρχές λειτουργίας και τύποι Λέιζερ II*

Εβδομάδα 12: *Ανασκόπηση*

Υποχρεώσεις – Εργαστηριακές Απουσίες

Το σύνολο των φοιτητών οφείλουν να φορούν εργαστηριακή ποδιά, ειδικά προστατευτικά γυαλιά και γάντια καθ' όλη τη διάρκεια την οποία βρίσκονται στο εργαστήριο και να ακολουθούν τις οδηγίες των εργαστηριακών υπεύθυνων και των βοηθών. Στα εργαστήρια φυσικοχημείας η παρακολούθηση είναι υποχρεωτική και οι ασκούμενοι μπορούν να δικαιολογήσουν ΜΟΝΟ μία (1) απουσία, από το σύνολο των έξι (6) πειραμάτων, και μόνο εφόσον προσκομίσουν ιατρική βεβαίωση.

Τρόπος βαθμολόγησης

Συνέπεια στο εργαστήριο	10 %
Τετράδιο εργαστηρίου (Lab book)	10 %
Εργαστηριακές αναφορές ^{2,3}	40 %
Τελική γραπτή εξέταση	40 % (βαθμός > 4)

Σημείωση: Κατά την εξεταστική Σεπτεμβρίου λαμβάνεται υπόψη **ΜΟΝΟ** η γραπτή εξέταση, εκτός των περιπτώσεων στις οποίες η φοιτήτρια / ο φοιτητής έχει παρακολουθήσει το εργαστήριο το ίδιο ακαδημαϊκό έτος.

² Οδηγίες συγγραφής αναφοράς και οι υποχρεωτικές ασκήσεις κάθε πειράματος παρατίθενται στο “overview” (MSTeams και e-class του μαθήματος)

³ Παράδοση εργαστηριακής αναφοράς : Δεκαπέντε (15) ημέρες, μετά τη διεξαγωγή της άσκησης, για κάθε ομάδα.

Εργαστηριακό Τετράδιο (Laboratory Notebook, Lab-book)

Σημαντικότητα Εργαστηριακού Τετραδίου

Το εργαστηριακό τετράδιο θα πρέπει να αποτελεί την αμέσως επόμενη πιο σημαντική προτεραιότητα κάθε πειραματικού Χημικού, μετά από το ίδιο το πείραμα. Δεν πρόκειται απλά για ένα σημειωματάριο καταγραφής συνθηκών και δεδομένων, αλλά για το αλληλεπιδραστικό/ζωντανό μέσο αποτύπωσης κάθε ιδιαιτερότητας, παρατήρησης και συλλογισμού του αναλυτή, σε πραγματικό χρόνο εξέλιξης του πειράματος. Ο ρόλος και η χρησιμότητα του lab-book δεν περιορίζονται στην εντός εργαστηρίου χρήση του, την κατασκευή διαγραμμάτων από τα καταγεγραμμένα δεδομένα ή την απλή ανάκληση των πειραματικών συνθηκών στη μνήμη του αναλυτή. Ο πλούτος της πληροφορίας που περιέχει ένα οργανωμένο και λεπτομερειακά τηρηθέν lab-book δύναται να αξιοποιηθεί περαιτέρω στην ερμηνεία των παρατηρούμενων φαινομένων, την κατανόηση ενδεχόμενων απροσδόκητων συμπεριφορών, καθώς επίσης στην αντιμετώπιση προβλημάτων και τη στοχευμένη σχεδίαση πειραμάτων, για την εις βάθος και ακριβέστερη κατανόηση των προς μελέτη αντικειμένων. Συνεπώς, όπως γίνεται αντιληπτό, η ορθή τήρηση του lab-book είναι αναπόσπαστο και αδιαίρετο μέρος της ποιοτικής έρευνας και συνακόλουθα το ζητούμενο και ενδεχόμενα, ως ένα ορισμένο σημείο, το μέτρο για οποιονδήποτε **καλό** πειραματικό χημικό.

Δομή Εργαστηριακού Τετραδίου

Πριν το Εργαστήριο.

1. Τίτλος Πειράματος, Ημερομηνία, Εργαστηριακή Ομάδα

Παράδειγμα:

23 Σεπτεμβρίου 2015

Φασματοσκοπία Υπερύθρου

Ομάδα Δ1: Χριστόπουλος Μιχάλης (Α.Μ.: 1), Μαυροδήμου Ελένη (Α.Μ.: 2)
Κωνσταντίνου Νίκος (Α.Μ.: 3), Παπαδόπουλος Γιώργος (Α.Μ.: 4)

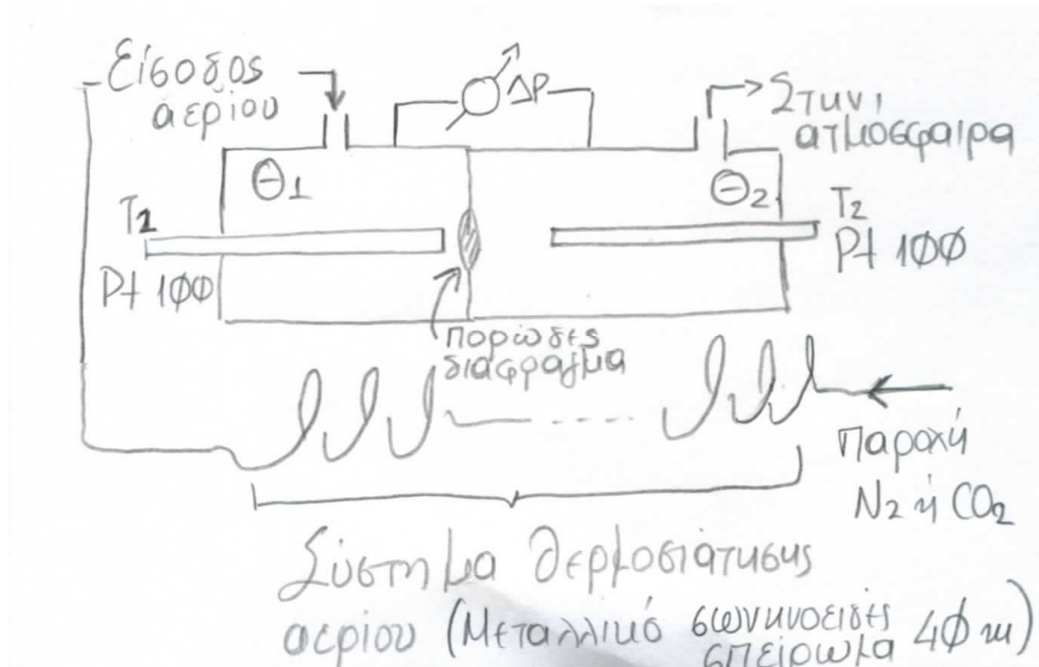
2. Αντικείμενο και Σκοπός Πειράματος

Σε έκταση 1-2 παραγράφων περιγράφεται συνοπτικά, αλλά με ακρίβεια, το αντικείμενο και ο σκοπός του πειράματος. Επίσης, αναφέρονται τα μεγέθη που θα

προσδιοριστούν, το εύρος των συνθηκών (π.χ. Πίεση και θερμοκρασία) και η μέθοδος/πειραματική διάταξη που θα χρησιμοποιηθεί.

3. Οργανολογία

Σχηματική Απεικόνιση Πειραματικής Διάταξης (block-diagram)



Ένα απλό περιγραμματικό σχέδιο των βασικών μερών από τα οποία απαρτίζεται η πειραματική διάταξη, με ένθετη αρίθμηση και χρήση κεφαλίδων για την περιγραφή τους, σημειώνοντας με ① το κεντρικό τμήμα της διάταξης, δηλαδή το χώρο που συμβαίνει το φαινόμενο που μελετάται, π.χ., αντιδραστήρας. Στη συνέχεια, περιγράφονται τα επιμέρους τμήματα, με λογική σειρά, βάσει της ροής του πειράματος, εξηγώντας το σκοπό που υπηρετούν.

Παράδειγμα:

① Θάλαμος αδιαβατικής εκτόνωσης αερίων, διαμεριζόμενος εσωτερικά, μέσω πορώδους διαφράγματος (ρόλο εμβόλου), σε δύο υποθαλάμους (Θ1 και Θ2). Ο θάλαμος είναι κατασκευασμένος από γυαλί, ώστε η παρατηρούμενη μεταβολή να συμβαίνει ισοενθαλπικά. Ο Θ2 εκτίθεται σε εργαστηριακή πίεση και θερμοκρασία, μέσω ανοικτής εξόδου και πρόκειται για το χώρο χαμηλής πίεσης, ενώ στον Θ1 ή χώρος υψηλής πίεσης εισάγεται ρυθμιζόμενη παροχή του εκάστοτε επιθυμητού αερίου (N_2 ή CO_2).

②

③

Σημείωση: Κατά την ώρα της εργαστηριακής άσκησης, οι εκπαιδευόμενοι φοιτητές θα πρέπει να διευκρινίσουν και να κατανοήσουν σε βάθος το ρόλο που υπηρετούν τα επιμέρους στοιχεία, από τα οποία απαρτίζεται η διάταξη και να βελτιστοποιήσουν την περιγραφή τους στην αναφορά που θα συγγραφεί μετά το πέρας του πειράματος. Ως εκ τούτου, είναι σημαντικό, τόσο να συζητηθεί με τους μεταπτυχιακούς, το εν λόγω σχήμα, όσο και να σημειώσουν εντός του εργαστηριακού τετραδίου, τα όποια κενά, ως προς τη μορφή ή την κατανόηση είχε η αρχική του έκδοση.

3. Πειραματική Διαδικασία

Στο τμήμα αυτό του εργαστηριακού οδηγού περιγράφεται με ακρίβεια και χωρίς πλατειασμούς η πειραματική διαδικασία που ακολουθείται. Επιπρόσθετα αυτού, εν τη ροή της περιγραφής, περιγράφονται επίσης τα μεγέθη που θα μετρηθούν, η φυσική τους σημασία και το όποιο θεωρητικό υπόβαθρο απαιτείται για την κατανόησή τους και τον προσδιορισμό τους.

Παράδειγμα: Στο πείραμα της Απορρόφησης υπεριώδους ορατού θα μετρηθεί η απορροφητικότητα A , για δεδομένες συγκεντρώσεις χρωστικών ουσιών. Το φυσικό φαινόμενο που περιγράφει τη διαδικασία είναι η απορρόφηση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, στο παρατηρούμενο εύρος μήκους κύματος, από τα προπαρασκευασμένα διαλύματα. Η ένταση της απορρόφησης (Απορροφητικότητα) περιγράφεται από το νόμο των Beer-Lambert:

$$A = \varepsilon(\lambda) \times l \times [M]$$

Όπου, A , η απορροφητικότητα και εκφράζεται μέσω του αρνητικού δεκαδικού λογαρίθμου της διαπερατότητας ($-\log(T)$, $T = I_0/I_f$ και I_0 , η ένταση της ακτινοβολίας που φτάνει στον ανιχνευτή απουσία της χρωστικής ουσίας και I_f , η ένταση που φτάνει στον ανιχνευτή για δεδομένη συγκέντρωση διαλύματος), $\varepsilon(\lambda)$, ο μοριακός συντελεστής απορροφητικότητας που αποτελεί το μέτρο ισχύος της αλληλεπίδρασης συγκεκριμένου μήκους κύματος, λ , της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας με τη χρωστική και αποτελεί εγγενή ιδιότητα της ύλης ($M^{-1} \text{ cm}^{-1}$), l , η οπτική διαδρομή που αφορά στο μήκος που διανύει το φως αλληλεπιδρώντας με την εκάστοτε χρωστική (cm) και $[M]$, η συγκέντρωση της χρωστικής στο διάλυμα (M).

Δόμηση Περιεχομένων Πίνακα:

Στο τελευταίο στάδιο της συγκεκριμένης ενότητας, οι φοιτητές θα πρέπει να αναφέρουν τα μεγέθη που θα προσδιοριστούν και πως αυτά προκύπτουν από τις αρχικά μετρούμενες ποσότητες (συναρτήσεις-εξάρτηση), ώστε στο επόμενο στάδιο και εντός της εργαστηριακής ώρας να είναι προετοιμασμένοι, κατά το δυνατόν, για

την κατασκευή των πινάκων και ακολούθως των διαγραμμάτων. Μέσω της κατασκευής γραφημάτων κατά την εξέλιξη της εργαστηριακής άσκησης γίνεται εφικτός ο έλεγχος του πειράματος και των συνθηκών του σε πραγματικό χρόνο, καθώς επίσης και η αξιολόγηση των μετρούμενων τιμών των φυσικών ποσοτήτων, που αποτελούν το αντικείμενο της εκάστοτε εργαστηριακής άσκησης.

Στο Εργαστήριο.

4. Αποτελέσματα και Καταγραφή τους

a. *Καταγραφή εργαστηριακών παραμέτρων.* Αρχικά και ενίοτε κατά τη διάρκεια των εργαστηριακών ασκήσεων καταγράφονται οι συνθήκες που επικρατούν στο χώρο εργασίας (ambient conditions ή laboratory conditions), όπως η εργαστηριακή πίεση, P_{lab} και θερμοκρασία, T_{lab} , καθώς και επιπρόσθετες εργαστηριακές συνθήκες που απαιτούνται στην κάθε άσκηση, π.χ., επίπεδο υγρασίας. Πέρα από τις συνθήκες καθεαυτές, καταγράφεται και το όριο εμπιστοσύνης (αβεβαιότητα) των μετρούμενων ενδείξεων, π.χ. $P_{lab} = 1013 \pm 2$ mbar. Σε ορισμένες εργαστηριακές ασκήσεις απαιτείται η συνεχής παρακολούθηση και καταγραφή των εργαστηριακών συνθηκών, οπότε θα πρέπει να καταγράφονται και αυτές σε κάποια από τις στήλες του πίνακα. Αν δεν μεταβάλλονται σημαντικά ή το πείραμα δεν είναι ιδιαίτερα ευαίσθητο σε αυτές, δύναται η καταγραφή τους να γίνει στην αρχή, τη μέση και το τέλος του πειράματος, οπότε σε αυτή την περίπτωση δεν περιέχονται σε στήλες στον πίνακα.

b. *Καταγραφή εργαστηριακών παραμέτρων/συνθηκών.* Στην πλειονότητα των εργαστηριακών ασκήσεων, οι συνθήκες του πειράματος ρυθμίζονται και καθορίζονται από τον αναλυτή. Συνεπώς, θα πρέπει να περιέχονται είτε στο εργαστηριακό τετράδιο, **πάντα** με τις αβεβαιότητές τους, ως απλή αναφορά, αν είναι σταθερές είτε να καταγράφονται σε στήλες πίνακα, αν μεταβάλλονται κατά τη διάρκεια της πειραματικής διαδικασίας. Βοηθητικό στάδιο για την κατασκευή πινάκων αποτελεί το τελευταίο σημείο της πειραματικής διαδικασίας (*Δόμηση Περιεχομένων Πίνακα*), κατά την προετοιμασία του εργαστηριακού τετραδίου, πριν τη διεξαγωγή του πειράματος. Στους πίνακες, αναγράφονται ως κεφαλίδες κολόνων τα φυσικά μεγέθη που μετρούνται, οι αβεβαιότητές τους, καθώς και οι μονάδες τους. Λόγω περιορισμού χώρου, οι μονάδες των ποσοτήτων μπορούν να μπου σαν υποσημείωση στο τέλος του πίνακα με την κατάλληλη επισήμανση της παραπομπής εντός του κελιού του πίνακα που αναφέρονται.

c. *Υποσημειώσεις Πίνακα.* Κατά τη διεξαγωγή του πειράματος, συχνά, ορισμένες μετρήσεις εμφανίζουν ιδιαιτερότητες ή περίεργη συμπεριφορά, εξαιτίας απρόσμενων φαινομένων που αποκλίνουν από τον αρχικό σχεδιασμό του πειράματος. Για παράδειγμα, κατά τη μέτρηση της θερμοκρασίας σε μία μέτρηση, ενδέχεται να ακούμπησε κάποιος το θερμοζεύγος ή να έπεσε η τάση του ρεύματος και η ένδειξη που αναγνώστηκε να οδήγησε σε περίεργη τιμή της. Σε αυτές τις περιπτώσεις, αλλά και εν γένει, σε περιπτώσεις όπου ο αναλυτής παρατηρεί κάτι

ιδιαίτερο σε κάποια μέτρηση ή δοκιμάζει κάτι διαφορετικό, οφείλει να το επισημάνει εντός του πίνακα με κωδικοποιημένο σύμβολο ή αρίθμηση και να προσθέσει υποσημείωση κάτω από τον πίνακα.

d. *Γενικές Παρατηρήσεις / Σημειώσεις / Σχόλια*. Το τελευταίο και μείζονος σημασίας περιεχόμενο του εργαστηριακού τετραδίου είναι οι γενικές παρατηρήσεις, απορίες και σχόλια του ίδιου του αναλυτή, που προκύπτουν κατά τη διάρκεια της εργαστηριακής άσκησης. Η συγκεκριμένη ενότητα είναι εξαιρετικά σημαντική, καθώς θα αποτελέσει το σημείο αναφοράς και διασύνδεσης για τον αναλυτή με το ίδιο το πείραμα, κατά τη συγγραφή της τελικής αναφοράς. Επίσης, θα βοηθήσουν τον αναλυτή να κατανοήσει και να ερμηνεύσει φαινόμενα που παρατηρούνται στο συγκεκριμένο πείραμα, τα οποία θα πρέπει να παρουσιαστούν στην εργαστηριακή αναφορά. Επισημαίνεται ότι το κάθε πείραμα είναι μοναδικό και συνεπώς οι παρατηρήσεις/σχόλια/συμπεράσματα του κάθε αναλυτή είναι επίσης μοναδικά και δεν είναι δυνατόν να προκύψουν κατόπιν της διεξαγωγής του πειράματος, παρά μόνο αν έχουν γίνει οι κατάλληλες επισημάνσεις.

OriginLab Γνωστικό Αντικείμενο

1. Δημιουργία κολόνων X-Y από πειραματικά δεδομένα

- i. Ονομασία κολόνων / Οργάνωση
- ii. Ορισμός κολόνων ως X, Y και Z και ορισμός κολόνων ως σφάλματα σε κάθε κολόνα.

2. Δημιουργία Γραφικής Παράστασης

- i. Είδη γραφικής αναπαράστασης όπως: Γραφική απεικόνιση σημείων (scatter plot), σημειακή αναπαράσταση με γραμμές που ενώνουν τα σημεία κατά αύξοντα αριθμό (line + symbol), ραβδόγραμμα (columns/Bars)
- ii. Συμπερίληψη ορίων σφάλματος

3. Αριθμητική Προσαρμογή Πειραματικών Σημείων με συγκεκριμένη/κατάλληλη συνάρτηση και ανάλυση και φυσική σημασία των παραμέτρων και των σφαλμάτων που παράγονται κατά την προσαρμογή

- i. Γραμμική προσαρμογή σημείων (Linear Fit, $Y = aX + b$, $SE_{\bar{x}} = \frac{s}{\sqrt{n}}$, $s = \sqrt{\frac{1}{n-1} [\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2]}$)

- ii. Η προσαρμογή των σημείων αποσκοπεί να παράγει τη βέλτιστη θεωρητική συνάρτηση που περιγράφει τα πειραματικά σημεία, $\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_i - f(x_i)}{\sigma_i} \right)^2$, $reduced \chi^2 = \frac{\chi^2}{n-p}$

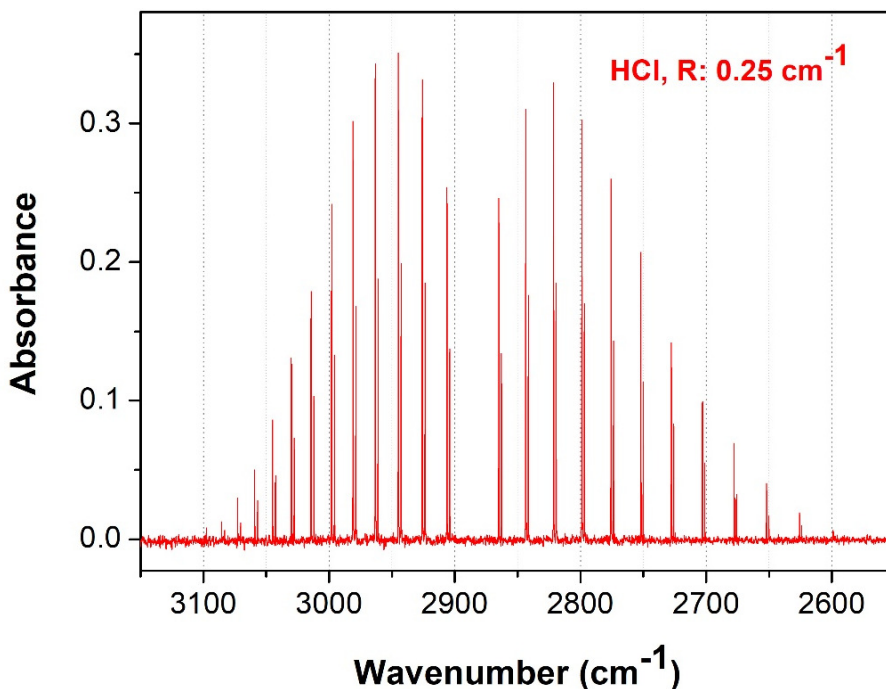
Σημείωση: Στην επεξεργασία των πειραματικών δεδομένων που παράγονται στο εργαστήριο ΦΧΙ, όταν συμπεριλαμβάνουμε τα σφάλματά μας ως συντελεστή βαρύτητας ΔΕΝ χρειάζεται να χρησιμοποιούμε τη μέθοδο reduced χ^2 . Linear Fit \rightarrow error as weight: Instrumental ($w_i=1/\sigma_i^2$) \rightarrow απενεργοποίηση του reduced chi-sqr

- iii. Διαθέσιμες μη γραμμικές συναρτήσεις (Non Linear Curve Fit)
- iv. Δημιουργία συνάρτησης από το χρήστη (Non Linear Curve Fit \rightarrow New)

Σημείωση: Ο ορισμός αρχικών τιμών κρίσιμος ειδικά όταν οι βαθμοί ελευθερίας της συνάρτησης ($n-p$) μειώνονται, n : αριθμός σημείων, p : παράμετροι συνάρτησης

4. Μορφοποίηση γραφικής παράστασης

- i. Συμπερίληψη άνω και δεξιού αξόνων στη γραφική παράσταση χωρίς ticks εκτός αν έχουν φυσική σημασία.
- ii. Τα ticks στους κάτω και αριστερό άξονες εκτός πλαισίου διαγράμματος (outside)
- iii. Ευανάγνωστοι τίτλοι αξόνων με επαρκές μέγεθος γραμματοσειράς, π.χ., Times New Roman, 28.
- iv. Μορφοποίηση τίτλου άξονα: Παράμετρος (<εκθετικό μέρος> μονάδες), π.χ.: [HCl] (10^{16} molecule cm^{-3})
- v. Αλλαγή αξόνων από γραμμικούς σε λογαριθμικούς αν χρειάζεται



5. Εισαγωγή δεδομένων από αρχείο κειμένου κατάλληλα μορφοποιημένου (Import Single ASCII).
Χρήσιμο σε περιπτώσεις λήψης φασμάτων ή μεγάλου όγκου δεδομένων που λαμβάνονται μέσω μια κάρτας πρόσκτησης δεδομένων και αποθηκεύονται σε αντίστοιχα ASCII αρχεία.

Σημεία προσοχής:

- i. Ποιος χαρακτήρας χρησιμοποιείται για τη διάκριση των κολόνων, π.χ., space, tab, comma
- ii. Συμβατότητα χαρακτήρα που χρησιμοποιείται ως υποδιαστολή με το Origin, π.χ., comma ή dot (, ή .)

6. Εργασία σε διαφορετικά layers (Εισαγωγή σφαλμάτων κατόπιν κατασκευής διαγράμματος, αλλαγή ανεξάρτητης και εξαρτημένης μεταβλητής, συμπερίληψη περαιτέρω διαγραμμάτων στη γραφική παράσταση από άλλες κολόνες για σύγκριση)

7. Προηγμένες ενέργειες χρηστών, όπως διαίρεση αξόνων για την καλύτερη απεικόνιση τμήματος φάσματος, χρωματικός κώδικας κ.α..

8. Residual Plot.

Το υπολειμματικό διάγραμμα, επί τοις %, περιγράφει την απόκλιση κάθε σημείου, ήτοι της κάθε πειραματικής μέτρησης, από τη βέλτιστη συνάρτηση προσαρμογής (Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων) του συνόλου των πειραματικών δεδομένων.

$$\mathbf{f(x) = a_f + b_f x}$$

Αντίστοιχα, για κάθε σημείο $i(x_i, y_i)$ θα ισχύει:

$$\mathbf{f(x_i) = a_i + b_i x}$$

Δεδομένου ότι από ένα σημείο διέρχονται άπειρες ευθείες και δεν είναι δυνατός ο ορισμός της τεταγμένης επί τον Y, στην πλειονότητα των περιπτώσεων που η τιμή της ιδιότητας με φυσική σημασία σχετίζεται με την κλίση της καμπύλης, το a_i ταυτίζεται με το a_f και το b_i προσδιορίζεται μέσω της έκφρασης:

$$b_i = \frac{(f(x_i) - a_f)}{x_i}$$

Στην περίπτωση αυτή, η απόκλιση που εμφανίζεται μεταξύ του μετρούμενου πειραματικού σημείου και της καμπύλης της συνάρτησης βέλτιστης προσαρμογής περιγράφεται από την έκφραση:

$$\frac{b_i - b_f}{|b_i|} \times 100 \%$$

Σημεία Προσοχής:

1. Το διάγραμμα προσδιορισμού της τιμής της φυσικής ιδιότητας και το υπολειμματικό διάγραμμα πρέπει να είναι σε στοίχιση και ενοποιημένα.
2. Ο άξονας της ανεξάρτητης μεταβλητής και στα δύο διαγράμματα πρέπει να έχει το ίδιο εύρος τιμών (min, max) και να φαίνεται πάντα το ελάχιστο του πεδίου τιμών στο οποίο ορίζεται.

3. Όταν η συνάρτηση αναπαριστά τη συμπεριφορά των πειραματικών σημείων, τότε στο υπολειμματικό διάγραμμα η απόκλιση εμφανίζεται σαν διασπορά περί της μηδενικής απόκλισης και δεν εμφανίζεται καμία συστηματική τάση.

4. Η όποια συστηματικότητα στο residual plot δηλώνει ότι η συνάρτηση δεν αναπαράγει τα πειραματικά δεδομένα και δεν έχει ουδεμία σχέση με συστηματικά σφάλματα των μετρήσεων.

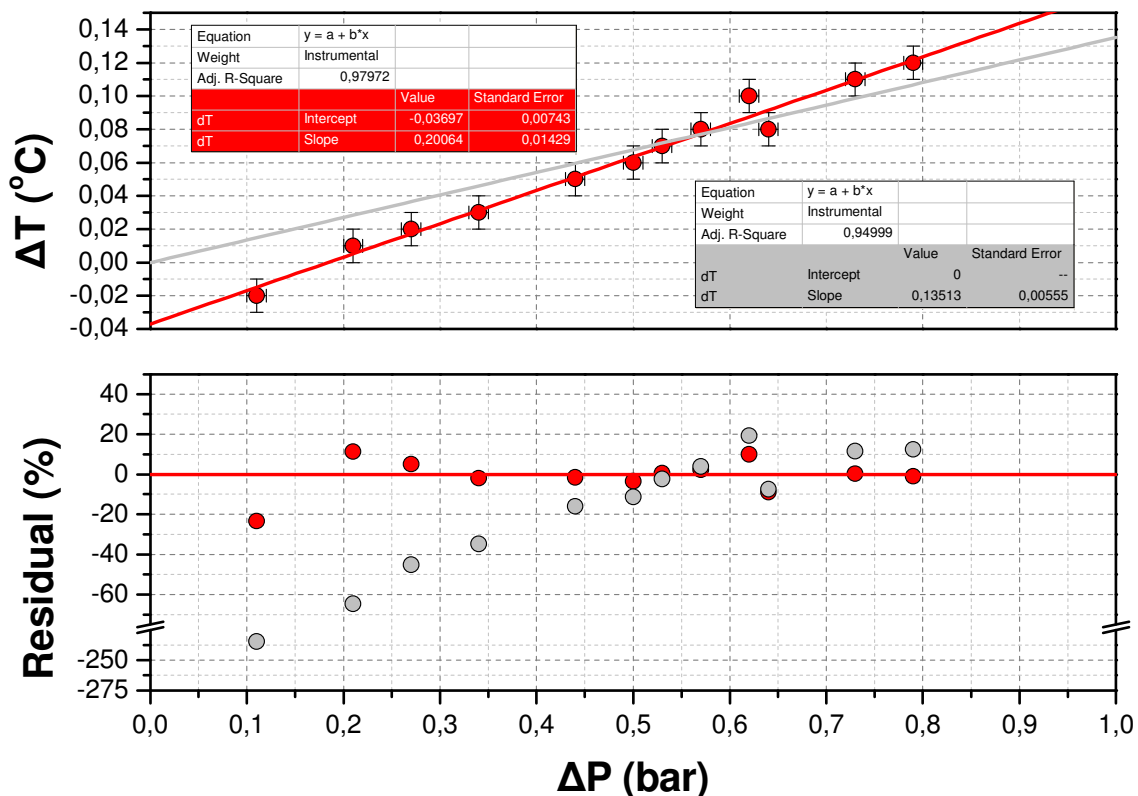


Table1. Summary of experimental conditions and rate coefficients, $k_1(T, M)$, determined for the $\text{Cl} + \text{CF}_3\text{CF}=\text{CH}_2$ reaction. (Πίνακας από δημοσιευμένη εργασία)

T (K)	Number Density (10^{18} cm^{-3})	Bath Gas (Torr of O_2)	$[\text{Cl}_2]_0$ (10^{16} cm^{-3})	$[\text{CF}_3\text{CF}=\text{CH}_2]_0$ (10^{16} cm^{-3})	$[\text{CH}_3\text{CH}_3]_0$ (10^{16} cm^{-3})	$k(T, M)^a$ ($10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$)
220	27.7	ZA	1.38	0.97	1.94	8.96 ± 0.06
247	1.95	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (20)	3.24	4.54	8.75	7.52 ± 0.09
247	3.91	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (20)	3.24	4.86	7.78	7.89 ± 0.07
247	7.82	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (20)	3.24	4.54	7.13	7.98 ± 0.09
247	15.6	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (20)	3.24	4.86	8.10	8.07 ± 0.07
247	24.6	ZA	1.30	1.07	1.94	8.27 ± 0.09
247	24.6	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (20)	3.24	4.54	7.45	8.20 ± 0.26
						$k(247 \text{ K}, 24.6 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}) = 8.22 \pm 0.08^c$
273	1.77	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (20)	3.24	4.86	6.48	6.76 ± 0.06
273	3.54	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (20)	3.24	4.54	7.45	6.95 ± 0.08
273	7.07	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (20)	4.05	6.16	7.45	7.44 ± 0.07
273	14.1	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (20)	3.24	5.51	6.80	7.54 ± 0.13
273	22.3	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (20)	3.24	5.18	6.48	7.67 ± 0.10
296	0.86	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (10)	2.43	3.89	4.21	5.04 ± 0.02
296	1.63	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (10)	2.43	3.89	4.21	5.64 ± 0.07
296	1.63	$\text{N}_2\text{-O}_2$ (20)	2.43	3.89	4.21	5.74 ± 0.04

						$k(296\text{ K}, 1.63 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}) = 5.70 \pm 0.04^c$
296	3.26	N ₂ -O ₂ (20)	2.43	3.89	4.21	6.54 ± 0.06
296	3.26	N ₂ -O ₂ (80)	2.43	4.21	4.54	6.47 ± 0.08
						$k(296\text{ K}, 3.26 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}) = 6.53 \pm 0.05^c$
296	6.52	N ₂ -O ₂ (20)	2.43	3.89	4.21	7.04 ± 0.05
296	20.6	N ₂	2.43	2.59	3.24	7.19 ± 0.10
296	20.6	N ₂	3.24	1.30	1.30	7.31 ± 0.08
296	20.6	ZA	1.94	2.07	3.56	7.23 ± 0.04
296	20.6	N ₂ -O ₂ (580)	4.05	3.24	4.86	7.38 ± 0.11
296	20.6	N ₂ -O ₂ (10)	2.43	3.89	4.21	7.36 ± 0.08
296	20.6	O ₂	3.24	3.24	5.18	7.50 ± 0.09
296	20.6	ZA	11.3	6.48	16.2 ^b	7.31 ± 0.30
296	20.6	ZA	11.3	16.2	35.6 ^b	7.41 ± 0.15
296	20.6	N ₂	17.8	16.2	32.4 ^b	7.70 ± 0.16
296	20.6	N ₂	27.5	32.4	32.4 ^b	7.70 ± 0.10
						$k(296\text{ K}, 20.6 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}) = 7.48 \pm 0.08^c$
338	1.43	N ₂ -O ₂ (20)	2.43	4.21	7.13	4.18 ± 0.05
338	2.86	N ₂ -O ₂ (20)	2.75	4.21	4.54	4.79 ± 0.06
338	5.71	N ₂ -O ₂ (20)	2.43	4.21	4.54	5.53 ± 0.04
338	11.4	N ₂ -O ₂ (20)	2.92	4.21	4.54	6.24 ± 0.06
338	18.0	N ₂ -O ₂ (20)	4.05	4.21	4.54	6.69 ± 0.07
380	1.31	N ₂ -O ₂ (20)	2.92	5.83	6.16	2.84 ± 0.07
380	1.31	N ₂ -O ₂ (20)	3.08	4.86	6.16	2.81 ± 0.02
380	1.31	N ₂ -O ₂ (10)	3.08	6.16	6.48	2.85 ± 0.01
						$k(380\text{ K}, 1.31 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}) = 2.81 \pm 0.02^c$
380	2.54	ZA	3.24	3.24	4.86	3.29 ± 0.05
380	2.54	N ₂ -O ₂ (20)	3.08	4.86	6.16	3.51 ± 0.02
						$k(380\text{ K}, 2.54 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}) = 3.42 \pm 0.04^c$
380	5.08	ZA	3.24	3.24	4.86	4.02 ± 0.02
380	10.2	N ₂ -O ₂ (20)	3.08	6.16	7.13	4.99 ± 0.03
380	10.2	ZA	3.24	3.24	5.51	4.96 ± 0.04
						$k(380\text{ K}, 10.2 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}) = 4.97 \pm 0.03^c$
380	16.0	ZA	4.05	3.24	6.48	5.44 ± 0.03
380	16.0	N ₂ -O ₂ (20)	3.08	5.51	6.48	5.45 ± 0.05
						$k(380\text{ K}, 16.0 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}) = 5.45 \pm 0.03^c$

^a Error limits are the 2σ precision of the linear least-squares fit of the experimental data to eqn. I.,
^b CH₂=CH₂ concentration and Cl + CH₂=CH₂ used for the reference reaction. ^c The rate coefficient was obtained from a linear least-squares fit of all data obtained at the given temperature and pressure to eqn. I. ZA: Zero air.

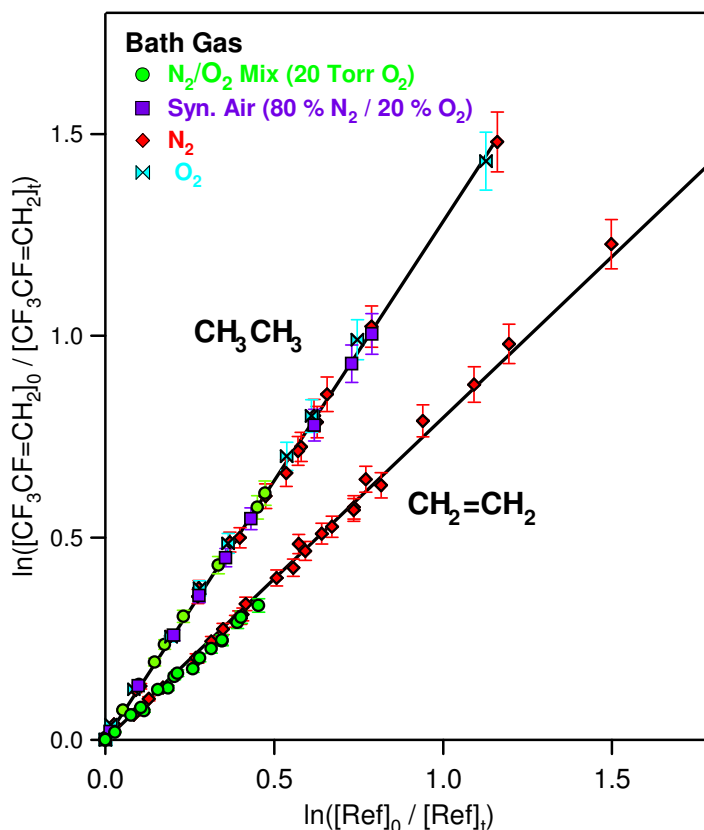


Figure 2. Relative rate data obtained at room temperature, 296 K, and 630 Torr for the reaction of Cl with $\text{CF}_3\text{CF}=\text{CH}_2$ using $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ and CH_3CH_3 reference compounds. The symbols indicate measurements made with different bath gas composition as indicated in the legend. The lines are linear least-squares fits of the data to eqn. 1 that yield rate coefficients for reaction 1. The error bars are from the precision of the measurement. (Διάγραμμα από δημοσιευμένη εργασία)

Οδηγίες Μη Γραμμικής Προσαρμογής Πειραματικών Αποτελεσμάτων

Οι συγκεκριμένη μεθοδολογία χρησιμοποιείται στα πειράματα α. Malus β. Κατανομή Ταχυτήτων Maxwell Boltzmann και οι οδηγίες αφορούν στο λογισμικό Origin 8. Για τις νεότερες εκδόσεις του Origin η μεθοδολογία είναι αντίστοιχη, με ορισμένες διαφορές στα menu των αναβαθμισμένων εκδόσεων.

Εισαγωγή

Πολλές φορές ο νόμος που εκφράζει τα πειραματικά αποτελέσματα δεν υπάρχει στις βασικές εξισώσεις του Origin ή η εξίσωση δεν είναι προσαρμοσμένη σε συγκεκριμένες απαιτήσεις κάποιου πειράματος. Στην περίπτωση αυτή, δομείται η συνάρτηση που περιγράφει το φυσικό φαινόμενο

και με διαδοχικούς κύκλους προσδιορισμού των βέλτιστων τιμών των παραμέτρων της συνάρτησης (iterations) προσαρμόζονται τα πειραματικά δεδομένων. Η μέθοδος στηρίζεται στην ελαχιστοποίηση των αθροισμάτων των τετραγώνων της διασποράς των πειραματικών σημείων επί της θεωρητικής καμπύλης. Η βέλτιστη προσαρμογή επιτυγχάνεται όταν οι παράμετροι συγκλίνουν, ώστε να ελαχιστοποιηθεί το εν λόγω άθροισμα.

A. Malus: Πείραμα φωτεινής πηγής Laser διόδου ($\lambda = 650 \text{ nm}$) με ένα πολωτή.

Βήμα 1. Μετά την αποτύπωση των πειραματικών δεδομένων των στηλών σε διάγραμμα ακολουθείται η κάτωθι διαδικασία:

Analysis \rightarrow Non linear curve fitting \rightarrow Open dialogue

Βήμα 2. Category New \rightarrow Ονομασία Κατηγορίας Συνάρτησης, π. χ., Malus

Βήμα 3. New function: Ονομασία Συγκεκριμένης Συνάρτησης π. χ., Malus_1pol



Βήμα 4. Εισαγωγή Συνάρτησης: $p1 * (\cos((2 * x) - a)) + P2$

Βήμα 5. Στο πεδίο Function form επιλέγεται: Expression

Βήμα 6. Ορισμός παραμέτρων βελτιστοποίησης: p1, a, P2

Βήμα 7. Αποθήκευση: save

Βήμα 8. Ορισμός αρχικών τιμών των παραμέτρων στον πίνακα που ανοίγει (Value).

Βήμα 9. Εκκίνηση διαδοχικών iterations μέσω επιλογής του εικονιδίου . Η εντολή εκτελείται σταδιακά εκκινώντας έναν κύκλο κάθε φορά που επιλέγεται το εικονίδιο. Εναλλακτικά μέσω επιλογής του εικονιδίου  εκτελούνται όλοι οι κύκλοι της βελτιστοποίησης της προσαρμογής, μέχρι ορίου Σύγκλισης.

Βήμα 10. Η βέλτιστη προσαρμογή των σημείων εμπεριέχεται στο διάγραμμα με συνεχή γραμμή. Η βέλτιστες τιμές των παραμέτρων προκύπτουν όταν το άθροισμα των ελαχίστων τετραγώνων συγκλίνει στην ελάχιστη τιμή και οι ζητούμενες τιμές αναφέρονται στο πινακάκι εντός του διαγράμματος, μαζί με το όριο εμπιστοσύνης (τυχαίο σφάλμα: Επαναληψιμότητα) σε επίπεδο 1σ , καθώς επίσης, χρήσιμα στατιστικά στοιχεία της προσαρμογής.

B. Malus: Πείραμα φωτεινής πηγής Laser διόδου ($\lambda = 650 \text{ nm}$), με δυο πολωτές και πλακίδιο καθυστέρησης $\lambda/4$.

Τα βήματα που διαφοροποιούνται σε σχέση με την άνωθι διαδικασία αναφέρονται ακολούθως:



Βήμα 3. New function: Ονομασία Συγκεκριμένης Συνάρτησης π. χ., Malus_2pol

Βήμα 4. Εισαγωγή Συνάρτησης: $P1*(\sin(x+a))^2*(\cos(x+a))^2$

Βήμα 6. Ορισμός παραμέτρων βελτιστοποίησης: P1, a

Βήμα 7. Αποθήκευση: save

Βήμα 8. Ορισμός αρχικών τιμών των παραμέτρων στον πίνακα που ανοίγει (Value).

Βήμα 9. Εκκίνηση διαδοχικών iterations μέσω επιλογής του εικονιδίου . Η εντολή εκτελείται σταδιακά εκκινώντας έναν κύκλο κάθε φορά που επιλέγεται το εικονίδιο. Εναλλακτικά μέσω επιλογής του εικονιδίου  εκτελούνται όλοι οι κύκλοι της βελτιστοποίησης της προσαρμογής, μέχρι ορίου Σύγκλισης.

Βήμα 10. Η βέλτιστη προσαρμογή των σημείων εμπεριέχεται στο διάγραμμα με συνεχή γραμμή. Η βέλτιστες τιμές των παραμέτρων προκύπτουν όταν το άθροισμα των ελαχίστων τετραγώνων συγκλίνει στην ελάχιστη τιμή και οι ζητούμενες τιμές αναφέρονται στο πινακάκι εντός του διαγράμματος, μαζί με το όριο εμπιστοσύνης (τυχαίο σφάλμα: Επαναληψιμότητα) σε επίπεδο 1σ, καθώς επίσης, χρήσιμα στατιστικά στοιχεία της προσαρμογής.

3. Κατανομή ταχυτήτων Maxwell-Boltzmann

Βήμα 1. Μετά την αποτύπωση των πειραματικών δεδομένων των στηλών σε διάγραμμα ακολουθείται η κάτωθι διαδικασία:

Analysis → Non linear curve fitting → Open dialogue

Βήμα 2. Category New → Ονομασία Κατηγορίας: Maxwell

Βήμα 3. New function: Ονομασία Συγκεκριμένης Συνάρτησης π. χ., Maxwell_1

Βήμα 4. Εισαγωγή Συνάρτησης: $4*\rho_i*\text{norm}*((7,647e-4/A)^{1,5})*(x^2)*\exp((-2,4024e-3/A)*(x^2))$

$$\text{Όπου } \Phi_1(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T} \right)$$

$M_{Ar} = 6.63368 \times 10^{-26}$ kg, μάζα ενός μορίου αργού.



Σταθερά Boltzmann: $k_B = 1.3806488(13) \times 10^{-23}$ J K⁻¹

Βήμα 5. Στο πεδίο Function form επιλέγεται: Expression

Βήμα 6. Ορισμός παραμέτρων βελτιστοποίησης: A, norm

Βήμα 7. Αποθήκευση: save

Βήμα 8. Ορισμός αρχικών τιμών των παραμέτρων στον πίνακα που ανοίγει (Value).

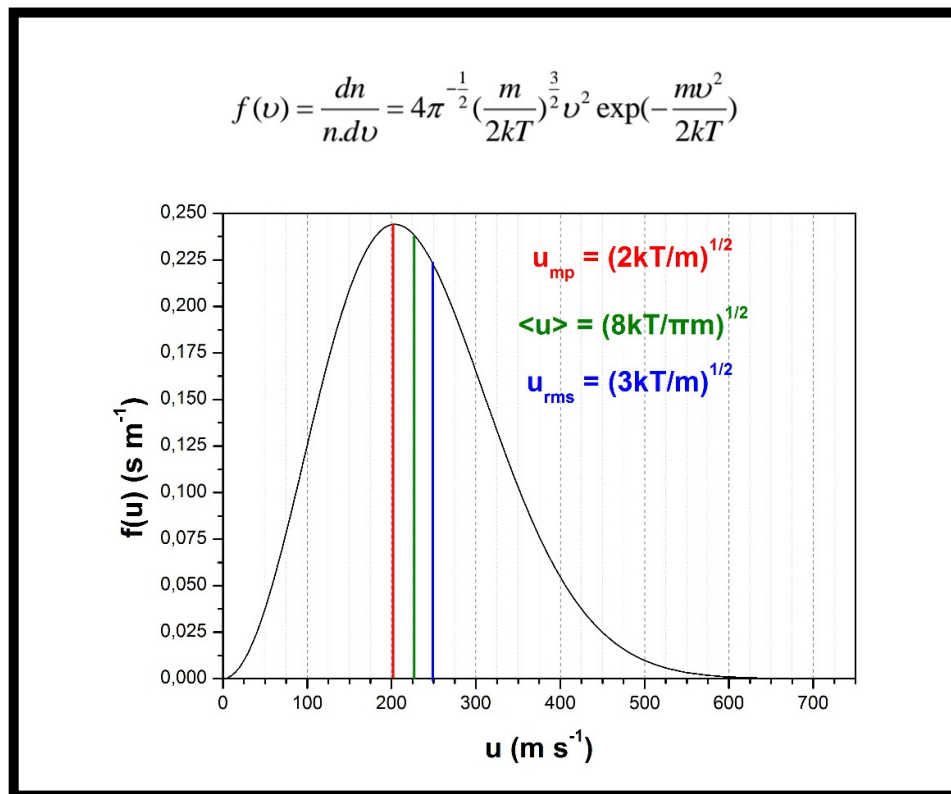
Βήμα 9. Εκκίνηση διαδοχικών iterations μέσω επιλογής του εικονιδίου . Η εντολή εκτελείται σταδιακά εκκινώντας έναν κύκλο κάθε φορά που επιλέγεται το εικονίδιο. Εναλλακτικά μέσω επιλογής του εικονιδίου  εκτελούνται όλοι οι κύκλοι της βελτιστοποίησης της προσαρμογής, μέχρι ορίου Σύγκλισης.

Βήμα 10. Η βέλτιστη προσαρμογή των σημείων εμπεριέχεται στο διάγραμμα με συνεχή γραμμή. Η βέλτιστες τιμές των παραμέτρων προκύπτουν όταν το άθροισμα των ελαχίστων τετραγώνων συγκλίνει στην ελάχιστη τιμή και οι ζητούμενες τιμές αναφέρονται στο πινακάκι εντός του διαγράμματος, μαζί με το όριο εμπιστοσύνης (τυχαίο σφάλμα: Επαναληψιμότητα) σε επίπεδο 1σ , καθώς επίσης, χρήσιμα στατιστικά στοιχεία της προσαρμογής.

Άσκηση A05: Κατανομή Ταχυτήτων αερίου Maxwell-Boltzmann

Αντικείμενο του πειράματος

Σκοπός του συγκεκριμένου πειράματος είναι η κατανόηση της συμπεριφοράς ενός αερίου, βάσει της κινητικής θεωρίας, μέσω προσομοίωσης των μορίων του με μηχανικά σφαιρίδια. Τα σωματίδια, που απαρτίζουν το δείγμα, βρίσκονται σε θάλαμο συγκεκριμένων διαστάσεων (V : σταθερό), υπό συνθήκες θερμικής ισορροπίας (T : σταθερή για όλα τα μέλη του συνόλου) και σταθερού συνόλου αριθμού σφαιριδίων (N : σταθερό), ορίζοντας την έννοια της κανονικής συλλογής (N, V, T : σταθερά). Στα συγκεκριμένα πλαίσια θα μετρηθεί η κατανομή των σφαιριδίων, ανά διαφορετικό διάζωμα ταχύτητας και εφόσον αναπαρασταθεί γραφικά η συνάρτηση κατανομής των ταχυτήτων $\rho_i = f(u)du$, θα προσδιοριστεί η θερμοκρασία της συλλογής, η πιθανότερη, η μέση και η ενεργός ταχύτητα της, καθώς και η μέση κινητική ενέργεια του δείγματος. Τέλος, θα συσχετιστεί το ενεργειακό περιεχόμενο των μορίων με τη χημική τους δραστικότητα και θα μελετηθεί η επίδραση της θερμοκρασίας και της μάζας των μορίων στη δυναμική χημικών αντιδράσεων.



Σχήμα 1. Σχηματική αναπαράσταση της συνάρτησης κατανομής ταχυτήτων Maxwell –Boltzmann για το Αργό (Ar). Ένθετα, παρατίθεται η έκφραση του Maxwell, καθώς επίσης οι τρεις χαρακτηριστικές ταχύτητες των μορίων.

Θεωρητικό υπόβαθρο

Βασικές έννοιες στατιστικής μηχανικής:

Η έννοια της συλλογής και τα είδη της (μικροκανονική, κανονική και μεγαλοκανονική).

Μέλη και ιδιότητες συλλογών.

Συνεχείς και διακριτές μεταβλητές.

Η έννοια της πιθανότητας και διάκρισή της για συνεχείς και διακριτές μεταβλητές. Μέση τιμή και τυπική απόκλιση ιδιοτήτων των συλλογών.

Κινητική Θεωρία Αερίων (ΚΘΑ):

Παραδοχές/προσεγγίσεις ΚΘΑ – Η απλούστερη μικροσκοπική περιγραφή του αερίου.

φυσική σημασία προσεγγίσεων και επίδρασή τους κατά τη μελέτη χημικών αντιδράσεων αέριας φάσης.

Πριν την άσκηση (προαπαιτούμενη γνώση)

Χαρακτηριστικά κανονικής συλλογής και κατανόηση των σημείων διάκρισής της από τη μικροκανονική και την κανονική συλλογή.

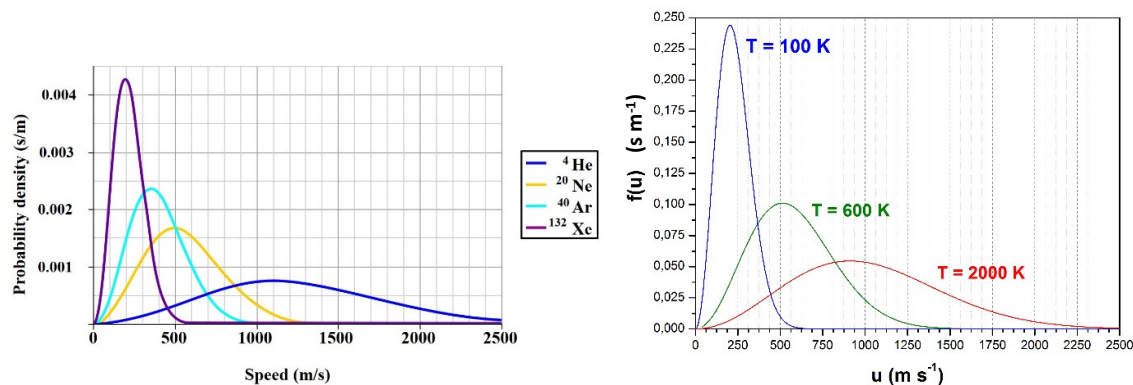
Έκφραση της πιθανότητα τιμής ιδιότητας για κανονική συλλογή.

Συνάρτηση επιμερισμού και φυσική της σημασία. Κατανόηση της έννοιας μέσω εφαρμογής της στους δονητικούς (Q_v) και μεταφορικούς βαθμούς ελευθερίας (Q_T) των μορίων. Τι δηλώνει η έκφραση $Q_v=1$, σε θερμοκρασία δωματίου και τι τιμή θα αναμενόταν για την Q_T ;

Κατανόηση της έννοιας της πίεσης και της κρούσης, βάσει της ΚΘΑ.

Κατανόηση της έννοιας του ενεργειακού φράγματος (Ενέργεια Ενεργοποίησης, E_a) των διμοριακών χημικών αντιδράσεων και συσχέτιση του με τη συνάρτηση κατανομής ταχυτήτων των μορίων.

Επίδραση της θερμοκρασίας στην κατανομή ταχυτήτων των μορίων και στην αποτελεσματικότητα των διμοριακών διεργασιών στην αέρια φάση.



Σχήμα 2. Σχηματική αναπαράσταση της επίδρασης της μάζας (α) και της θερμοκρασίας (β) στη συνάρτηση κατανομής ταχυτήτων των μορίων για το Αργό (Ar)..

Βιβλιογραφία

- [AtΦΧ : Κεφ. 15, 16, 20], **2.** Β. Μαυραντζάς, *Στατιστική θερμοδυναμική*, Ε.Α.Π. Πάτρα 2001.,
- 3.** F. C. Andrews, *Equilibrium statistical mechanics* (2η έκδοση), Wiley 1975

Κατά τη διάρκεια της άσκησης

Αναγνώριση και κατανόηση του ρόλου των επί μέρους τμημάτων του της οργανολογίας του πειράματος Maxwell.

- Δοχείο σταθερού όγκου εφοδιασμένο με ηλεκτρομηχανικά παλλόμενο επίπεδο.
- Ηλεκτροκινητήρας συζευγμένος με ροοστάτη μεταβλητής αντίστασης για την σταθερή τροφοδοσία ρεύματος και συνεπώς την επαγόμενη, σταθερής συχνότητας, ταλάντωση του επιπέδου.
- Στροβοσκόπιο με αναβοσβήνουσα λυχνία Xe ρυθμιζόμενης συχνότητας, για τον προσδιορισμό, μέσω συντονισμού της συχνότητας του δονούμενου επιπέδου.
- Ισομεγέθη υάλινα σφαιρίδια για την προσομοίωση των μορίων του αερίου.
- Φίλτρο ταχυτήτων που καθορίζει το διάνυσμα των ταχυτήτων των μορίων που θα αναλυθούν.

- Αναλυτής: 24 ομόκεντρα και ισαπέχοντα διαζώματα/τόξα που διαχωρίζονται μεταξύ τους με ισούψη άκαμπτα πετάσματα.
- Ανιχνευτής: 24 διαμερίσματα προσαρτημένα στον αναλυτή, όπου καταγράφεται ο αριθμός των μορίων που κατανεμήθηκαν στα αντίστοιχα διαζώματα του αναλυτή.

Μέτρηση της κατανομής ταχυτήτων των σφαιριδίων προσομοιώνοντας το ευγενές αέριο Ar.

- Προσδιορισμός του πλήθους των σφαιριδίων που κατανέμονται στα διαμερίσματα και της πιθανότητας κάθε τιμής της ιδιότητας της ταχύτητας.
- Κατασκευή διαγράμματος της πιθανότητας της ταχύτητας για κάθε διάζωμα, συναρτήσει της ταχύτητας, κατά τη διάρκεια διεξαγωγής του πειράματος. Επεξεργασία των πειραματικών δεδομένων, προσδιορισμός της μέσης πιθανότητας της ταχύτητας και της τυπικής της απόκλισης για κάθε διάζωμα και σύγκριση του εύρους των τιμών της ταχύτητας (du) με την αναμενόμενη τιμή.
- Προσδιορισμός της θερμοκρασίας της συλλογής για τις δεδομένες συνθήκες, βάσει της προσαρμογής της πιθανότητας της ταχύτητας με την συνάρτηση κατανομής Maxwell.

Μετά την άσκηση (στην εργαστηριακή αναφορά)

Περίληψη του πειράματος και των αποτελεσμάτων.

Περιγραφή πειραματικής διάταξης και μετρήσεων.

Πειραματικά δεδομένα (Πίνακες). Υπολογισμοί. Διαγράμματα.

Ανάλυση και κατανόηση αποτελεσμάτων στο πλαίσιο του θεωρητικού υποβάθρου. Ανάλυση σφάλματος.

Συμπεράσματα.

Πρόσθετες ασκήσεις ή βιβλιογραφική έρευνα όπως θα ζητηθεί από τον υπεύθυνο του εργαστηρίου.

Συντομογραφίες:

[AtΦΧ]

P.W. Atkins, J. DePaula 'Φυσικοχημεία' (Πανep. Εκδόσεις Κρήτης 2014)

Σύνδεσμος Οπτικού Μαγνητοσκοπημένου Υλικού

<https://opencourses.uoc.gr/courses/mod/page/view.php?id=9942>

A5.1 Κατευθύνσεις – Απαιτούμενα Αναφοράς

1. Κατασκευή διαγράμματος $N(u)/N$ συναρτήσει της u (N : ο συνολικός αριθμός σφαιριδίων, $N(u)$: ο αριθμός των σφαιριδίων στο εκάστοτε διαμέρισμα du). Κάθε διαμέρισμα αντιστοιχεί σε εύρος ταχυτήτων 80 m/s.

Επισημάνσεις: Απεικόνιση του σφάλματος dy , σε κάθε σημείο της γραφικής παράστασης (*τυπική απόκλιση των τριών μετρήσεων*). Προσαρμογή πειραματικών δεδομένων βάσει της έκφρασης 40. *Υπόθεση:* Τα σφαιρίδια αντιπροσωπεύουν άτομα αργού (Ar).

Ζητούμενο: Προσδιορισμός της αντιπροσωπευτικής θερμοκρασίας του πειράματος.

Υπόδειξη: Προσαρμογή δεδομένων με χρήση λογισμικού και αντικατάσταση στη συνάρτηση προσαρμογής, τις σταθερές για τα άτομα αργού.

2. Προσδιορισμός της θεωρητικής τιμής της πιθανότητας και απεικόνιση των αποτελεσμάτων σε κοινό διάγραμμα με την αντίστοιχη πειραματική.

Υπόδειξη: Υπολογίστε το πηλίκο $u^2 \exp(-mu^2/2k_B T) / \sum u^2 \exp(-mu^2/2k_B T)$ για τη θερμοκρασία που προέκυψε από την προσαρμογή (Ζητούμενο 1).

Ζητούμενο: Σχολιασμός των αποτελεσμάτων της προσαρμογής όσον αφορά a. στο μέγιστο της καμπύλης, b. στα όρια ορισμού της καμπύλης και c. Στη σύγκριση πειραματικής και θεωρητικής καμπύλης.

A5.II Ασκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

1. Ποια είναι η φυσική σημασία της πιθανότερης τιμής της ταχύτητας ($u_{\max}=(2k_B T/m)^{1/2}$), της μέσης ταχύτητας της κατανομής ($\langle u \rangle=(8k_B T/\pi m)^{1/2}$) και της ρίζας του μέσου τετραγώνου της ταχύτητας ($u_{\text{rms}}= (3k_B T/m)^{1/2}$, ενεργός ταχύτητα). Προσδιορίστε τις αριθμητικές τιμές των τριών ταχυτήτων, για τη θερμοκρασία του πειράματος. Ποια είναι η σχέση μεταξύ τους;

2. Τι μεταβολές αναμένεται να παρατηρηθούν στην κατανομή των ταχυτήτων με αύξηση της θερμοκρασίας; Κατασκευάστε διάγραμμα για τα ιδανικά αέρια He, Ne, Ar, Kr και Xe σε θερμοκρασία $T = 500 \text{ K}$, μέσω προσομοίωσης (χρήση λογισμικού). Ποιο στοιχείο παραμένει σταθερό και γιατί;

3. Ποια είναι η μέση ενέργεια ενός μορίου που βρίσκεται σε θάλαμο όγκου 72 cm^3 , για τη θερμοκρασία του πειράματος (Ζητούμενο 1). Ποια από τις χαρακτηριστικές ταχύτητες χρησιμοποιείται ως αντιπροσωπευτική, για τον προσδιορισμό της μέσης ενεργείας του μορίου και γιατί;

A5.III ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

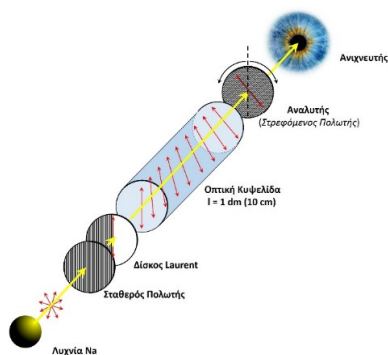
1. F. C. Andrews, *Equilibrium statistical mechanics* (2η έκδοση), Wiley 1975
2. G. D. Peckham and McNaught, I. J., *J. Chem. Educ.*, **1992**, 69, 554.
3. P. W. Atkins, *Φυσικοχημεία* τόμος II, Π.Ε.Κ. Ηράκλειο, **2009**.
4. Β. Μαυραντζάς, *Στατιστική θερμοδυναμική*, Ε.Α.Π. Πάτρα 2001.
5. J. A. Eldridge, *Phys. Rev.*, **1927**, 30, 931, ; I. F. Zartman, *Phys. Rev.*, **1931**, 37, 383, ; R. C. Miller, Kush, P., *Phys. Rev.*, **1955**, 99, 1314 ; J. Rainwater and Havens Jr., W. W., *Phys. Rev.*, **1946**, 70, 136

Άσκηση Α06: Πολωσιμετρία

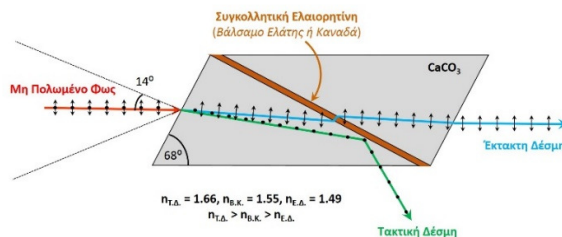
Αντικείμενο του πειράματος

Η άσκηση στοχεύει στην κατανόηση της έννοιας της πόλωσης του φωτός με βάση την ανυσματική περιγραφή της διάδοσης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Μελετάται η αλληλεπίδρασή του φωτός με οπτικές ενεργές ενώσεις, δηλαδή μόρια τα οποία έχουν την ικανότητα να στρέφουν το επίπεδο πόλωσης του φωτός. Ειδικότερα, στο πλαίσιο του πειράματος:

- θα προσδιοριστεί η ειδική στροφική ικανότητα του δισακχαριτή της κρυσταλλικής ζάχαρης (σακχαρόζη) μέσω της συσχέτισης της ικανότητας στροφής γραμμικώς πολωμένου φωτός, την οποία εμφανίζουν υδατικά διαλύματα ζάχαρης με τη συγκέντρωση αυτών και στη συνέχεια
- θα χρησιμοποιηθεί η πολωσιμετρία ως μέθοδος για τη κινητική μελέτη της όξινης υδρόλυσης της σακχαρόζης (ιμβερτοποίησης), προς τους επίσης οπτικώς ενεργούς μονοσακχαρίτες, D-γλυκόζη και D-φρουκτόζη.



Σχ. 1 Σχηματική απεικόνιση πολωσιμέτρου



Σχ. 2 Πρίσμα Nicol: Σχηματική αναπαράσταση της αρχής λειτουργίας ενός γραμμικού πολωτή

Θεωρητικό υπόβαθρο

Κυματική και σωματιδιακή υπόσταση φωτός – Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία.

Είδη πόλωσης φωτός: Γραμμική, κυκλική και ελλειπτική πόλωση.

Πολωτές και πρίσμα Nicol.

Δείκτης διάθλασης και διπλοθλαστικά υλικά.

Οπτική ενεργότητα και προϋποθέσεις συμμετρίας μορίων.

Οπτική στροφική ικανότητα και ειδική στροφική ικανότητα.

Εξάρτηση οπτικής στροφής από τη συγκέντρωση οπτικώς ενεργών ενώσεων (Νόμος Beer-Lambert !).

Ταχύτητα αντίδρασης και συντελεστής ταχύτητας αντίδρασης.

Νόμος ταχύτητας, τάξη αντίδρασης και μοριακότητα.

Εξάρτηση του συντελεστή (της σταθεράς) ταχύτητας της αντίδρασης, k , από τη θερμοκρασία – Νόμος Arrhenius.

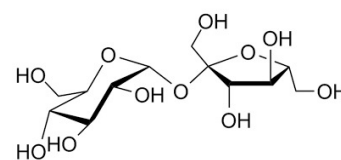
Πριν την άσκηση (προαπαιτούμενη γνώση)

Ιδιότητες οπτικώς ενεργών ενώσεων – Συμμετρία.

Συσχέτιση οπτικής στροφής με συγκέντρωση οπτικώς ενεργών ενώσεων – Ειδική στροφική Ικανότητα.

Μαθηματική περιγραφή αντιδράσεων που ακολουθούν κινητική πρώτης τάξης: $d[A]/dt = -k[A]$

Διάκριση **στιγμιαίας ταχύτητας αντιδράσεων** ($u = d[A]/dt$) και συντελεστή ταχύτητας αντίδρασης (k).



Σχ. 3 Μοριακή δομή της σακχαρόζης

Διάκριση της εμπειρικά προσδιοριζόμενης ποσότητας της **τάξης** μιας αντίδρασης (νόμος ταχύτητας στοιχειώδους ή σύνθετης αντίδρασης) και της **μοριακότητας** που ορίζεται **αποκλειστικά** για στοιχειώδεις αντιδράσεις

Βιβλιογραφία

1. P.W. Atkins, J. DePaula 'Φυσικοχημεία' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης 2014) [Κεφ. 21], 2. Γ. Ασημέλλης, 'Μαθήματα Οπτικής' (Σύγχρονη Γνώση, 2007).

URL Link: <http://www.chemistry.uoc.gr/lapkin/>

Κατά τη διάρκεια της άσκησης

Αναγνώριση των επί μέρους τμημάτων του πολωσιμέτρου.

- Μονοχρωματική λυχνία Na.
- Διπλοθλαστικοί πολωτές: Σταθερός (γραμμική πόλωση) και στρεφόμενος (αναλυτής).
- Οπτική κυψελίδα – Οπτική διαδρομή και αλληλεπίδραση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας με τα διαλύματα σακχαρόζης.
- Δίσκος Laurent και ανίχνευση της στροφής του πολωμένου φωτός.

Παρασκευή διαλυμάτων σακχαρόζης και νόμος αραιώσης διαλυμάτων.

Μετρήσεις

A) *Μέτρηση της ειδικής στροφικής ικανότητας της σακχαρόζης* $[\alpha]_{\lambda}^T$

- Προσδιορισμός $[\alpha]_{\lambda}^T$ μέσω μέτρησης της οπτικής στροφής του γραμμικά πολωμένου φωτός για διαφορετικές συγκεντρώσεις διαλυμάτων σακχαρόζης.
- Σύγκριση της $[\alpha]_{\lambda}^T$ με την αναγραφόμενη στο δοχείο φύλαξης της σακχαρόζης, εφόσον αναχθεί η εργαστηριακά προσδιοριζόμενη τιμή της, στη θερμοκρασία αναφοράς της αναγραφόμενης επί του δοχείου.
- Κατασκευή διαγράμματος οπτικής στροφής συναρτήσει της συγκέντρωσης, κατά τη διάρκεια διεξαγωγής του πειράματος, επεξεργασία πειραματικών δεδομένων και αξιολόγηση αποτελεσμάτων.

B) *Κινητική μελέτη της όξινης υδρόλυσης της σακχαρόζης (υμβερτοποίησης)*

- Κατανόηση του μηχανιστικού σχήματος της αντίδρασης και του τι αντιπροσωπεύει η εκάστοτε οπτική στροφή, που μετριέται στις διάφορες φάσεις της αντίδρασης.
- Καταγραφή της μεταβολής της συγκέντρωσης της σακχαρόζης (οπτική στροφή διαλύματος), συναρτήσει του χρόνου κατόπιν προσθήκης διαλύματος HCl, σε θερμοστατούμενο δοχείο (T = 303 K), Κατασκευή διαγράμματος με βάση κινητική αντίδρασης 1^{ης} τάξης (ψευδοπρώτης τάξης).
- Κινητική ανάλυση ανηγμένη σε όρους μετρούμενης οπτικής στροφής.
- Κατασκευή κινητικού διαγράμματος βάσει των υποδείξεων των βοηθών, κατά τη διάρκεια διεξαγωγής του πειράματος, επεξεργασία πειραματικών δεδομένων και αξιολόγηση αποτελεσμάτων (Να εξεταστεί αν ο προτεινόμενος μηχανισμός περιγράφεται από κινητική 1^{ης} τάξης).

Μετά την άσκηση (στην εργαστηριακή αναφορά)

Περίληψη του πειράματος και των αποτελεσμάτων.

Περιγραφή πειραματικής διάταξης και μετρήσεων.

Πειραματικά δεδομένα (Πίνακες). Υπολογισμοί. Διαγράμματα.

Ανάλυση και κατανόηση αποτελεσμάτων στο πλαίσιο του θεωρητικού υποβάθρου. Ανάλυση σφάλματος.

Συμπεράσματα.

Πρόσθετες ασκήσεις ή βιβλιογραφική έρευνα, όπως θα ζητηθεί από τον υπεύθυνο του εργαστηρίου.

Σύνδεσμος Οπτικού Μαγνητοσκοπημένου Υλικού

<https://opencourses.uoc.gr/courses/mod/page/view.php?id=9943>

A6.I Κατευθύνσεις – Απαιτούμενα Αναφοράς

1. Κατασκευή διαγράμματος α συναρτήσει της c (α : οπτική στροφή, c : συγκέντρωση διαλύματος σακχαρόζης).

Επισημάνσεις: Απεικόνιση των σφαλμάτων, σε κάθε σημείο της γραφικής παράστασης (απαιτείται διάδοση σφαλμάτων). Προσαρμογή πειραματικών δεδομένων βάσει της έκφρασης 1.

Ζητούμενα:

A. Προσδιορισμός της ειδικής στροφικής ικανότητας της σακχαρόζης, $[\alpha]_{\lambda}^T$, για τη θερμοκρασία και την πηγή φωτός που χρησιμοποιήθηκε και σύγκριση με την αντίστοιχη βιβλιογραφική. Σχολιασμός αποτελεσμάτων.

B. Προσδιορισμός καθαρότητας της σακχαρόζης (Σακχαριμετρία). Σχολιασμός αποτελεσμάτων.

Υπόδειξη: Χρησιμοποιήστε την εξίσωση 7 και τις ειδικές στροφικές ικανότητες της σουκρόζης και του ισομοριακού τελικού προϊόντος που είναι μίγμα D-γλυκόζης [+52,7°] και D-φρουκτόζης [-92,0°].

2. Κατασκευή διαγράμματος $\ln[\alpha(t)-\beta]$ συναρτήσει του χρόνου t .

Επισημάνσεις: Απεικόνιση των σφαλμάτων, σε κάθε σημείο της γραφικής παράστασης (απαιτείται διάδοση σφαλμάτων). Προσαρμογή πειραματικών δεδομένων βάσει της έκφρασης 12.

Ζητούμενο: Προσδιορισμός συντελεστή ταχύτητας της αντίδρασης υβερτοποίησης (Κινητική Πρώτης Τάξης) και σύγκριση με τον αντίστοιχο που προκύπτει βιβλιογραφικά από την έκφραση Arrhenius, $k = A \times e^{-E_a/RT}$. ($A = 1.5 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ και $E_a = 107.9 \text{ kJ mol}^{-1}$)

A6.II Ασκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

1. Περιγράψτε την αρχή λειτουργίας των πρισμάτων Nicol. Ορίστε το χρόνο ημιζωής, $\tau_{1/2}$, μιας αντίδρασης και προσδιορίστε το $\tau_{1/2}$ για την αντίδραση σας, θεωρώντας ότι ακολουθεί κινητικής πρώτης τάξης;

2. Σε ποια ατομική μετάβαση του Νατρίου αντιστοιχεί η φασματοσκοπική γραμμή D; Γιατί είναι διπλή;

3. Ποια ισομερή εμφανίζουν τα προϊόντα της υδρόλυσης και πως εξαρτάται η οπτική στροφή από αυτά; Η ανωμερίωση των σακχάρων, που προκύπτουν ως προϊόντα της αντίδρασης υβερτοποίησης, επηρεάζει το αποτέλεσμα της μέτρησης της οπτικής στροφής; Αιτιολογήστε.[5]

A6.III ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. F. A. Bettelheim, *Experimental Physical Chemistry*, 269-277, Philadelphia: Saunders **1971**

2. Y. B. Tewari, Goldberg, R. N., *J. Biol. Chem.*, **1989**, 264, 9901

3. S. W. Pennycook, *J. Am. Chem. Soc.*, **1926**, 48, 6 ; P. M. Leininger, Kilpatrick, M., *J. Am. Chem. Soc.*, **1938**, 60, 2891 ; J. Sturtevant, *J. Am. Chem. Soc.*, **1937**, 59, 1528 ; L. J. Heidt, Purves, C. B., *J. Am. Chem. Soc.*, **1938**, 60, 1206

4. J. G. Dawber, Brown, D. R. and Reed, R. A., *J. Chem. Educ.*, **1966**, 43, 34

5. H. Klosterfaard, *J. Chem. Educ.*, **1976**, 53, 298

6. URL: i. <http://web.lemoyne.edu/~giunta/wilhelmy.html>

ii. <http://web.lemoyne.edu/~giunta/arrlaw.html>

7. Μετάφραση του άρθρου υπάρχει στον ισότοπο:

<http://ead.univ-angers.fr/~jaspard/Page2/COURS/4EnzymologieLicence/2Cours2/3OriginalMMpaper.pdf>

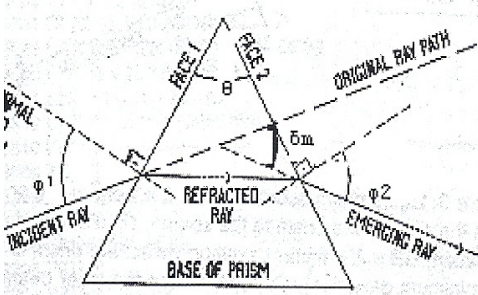
Άσκηση Α07: Διαθλασιμετρία

Αντικείμενο του πειράματος

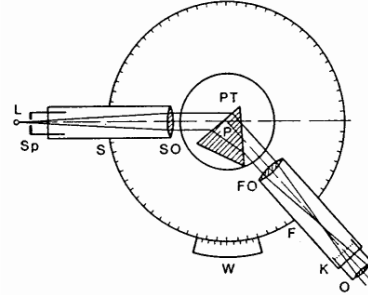
Αντικείμενο της άσκησης είναι η κατανόηση της οπτικής διασποράς/διασκεδασμού (δηλ, της ανάλυσης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας στις συνιστώσες συχνότητες), μέσω δύο βασικών οπτικών φαινομένων, της διάθλασης και της περίθλασης.

Στο πλαίσιο του πειράματος, χρησιμοποιείται μία απλή διάταξη φασματοσκοπίου για την ανάλυση της ορατής ακτινοβολίας από λυχνία ατμών ατομικού υδραργύρου (Hg) με τη χρήση πρίσματος ή φράγματος περίθλασης ως στοιχείων διασποράς. Πραγματοποιούνται μετρήσεις των γωνιών εκτροπής της ακτινοβολίας διαφορετικού μήκους κύματος (λ) σε σχέση με την προσπίπτουσα πολυχρωματική με σκοπό:

- τη μέτρηση του δείκτη διάθλασης, $n = n(\lambda)$, σε μία σειρά πρισμάτων που αποτελούνται από διαφορετικά οπτικά υλικά και το χαρακτηρισμό της διακριτικής ικανότητας (resolution, resolving power) κάθε πρίσματος.
- τον ακριβή προσδιορισμό των τιμών μήκους κύματος (λ / nm) των γραμμών εκπομπής του Hg, μέσω της ανάλυσης του φωτός (διασποράς) που επιτυγχάνεται με περιθλαστικό φράγμα.



Σχ. 1 Διάθλαση μιας ακτίνας από πρίσμα όταν η ακτίνα ακολουθεί συμμετρική πορεία διαδρομής (θέση ελάχιστης απόκλισης εκτροπής).



Σχ. 2 Σχηματικό διάγραμμα πορείας ακτίνας στο φασματοσκόπιο.

Θεωρητικό υπόβαθρο

Κλασική θεωρία αλληλεπίδρασης Η/Μ ακτινοβολίας – ύλης. Μοντέλο Lorentz.

Οπτικές και διηλεκτρικές ιδιότητες μορίων και υλικών.

Διπολική ροπή, πόλωση, επαγόμενη διπολική ροπή, πολωσιμότητα.

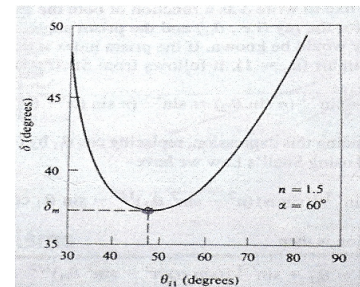
Διηλεκτρική σταθερά, δείκτης διάθλασης, οπτική διασπορά ($n=n(\lambda)$).

Ανάκλαση. Διάθλαση. Νόμος του Snell (γεωμετρική οπτική). Πρίσματα, φακοί.

Περίθλαση. Συμβολή (κυματική οπτική). Εφαρμογές : φράγμα περίθλασης.

Ανάλυση φωτός με διαθλαστικά ή περιθλαστικά στοιχεία διασποράς.

Φασματοσκοπία.



Σχ. 3 Εξάρτηση της γωνίας απόκλισης (δ / μοίρες) από τη γωνία πρόσπτωσης (θ / μοίρες)

Πριν την άσκηση (προαπαιτούμενη γνώση)

Επανάληψη στη γεωμετρική οπτική. Διάδοση φωτός., ανάκλαση, διάθλαση.

Επανάληψη στην κυματική οπτική, Φαινόμενα περίθλασης και συμβολής.

Βιβλιογραφία

1. [TR : Κεφ. 15], 2. [AtΦΧ : Κεφ. 13], [AtΦΧ2 : Κεφ. 19], 3. [EG : Κεφ. 7], 4. [ΑΣ-ΜΟπτ : Κεφ. 4, 6]

5. [Serway II: Κεφ. 34], 6. [Serway III: Κεφ. 35, 36, 37, 38], 7. [Young: Κεφ. 34-38]

URL Links:

Διασπορά /Διασκεδασμός (<http://users.auth.gr/vanidhis/pdf/paragogi/5.pdf>)

Στοιχεία Οπτικής – Μικροσκοπία

- Microscopy <http://www.olympusmicro.com/>
- Interactive tutorials <http://www.olympusmicro.com/primer/java/index.html>
- Light and color <http://www.olympusmicro.com/primer/lightandcolor/java.html>
- Light Microscopy http://www.olympus.co.uk/microscopy/images/Basics_of_Light_microscopy.pdf

Κατά τη διάρκεια της άσκησης

Αναγνώριση του φάσματος που προκύπτει από την ανάλυση του φωτός για κάθε χρώμα.

Προσδιορισμός της γωνίας ελαχίστης απόκλισης για δύο συμμετρικές θέσεις του πρίσματος (οξεία/αμβλεία).

Εξοικείωση με την ανάγνωση της κλίμακας του γωνιομέτρου. Μεγάλη κλίμακα – μικρή κλίμακα ακριβείας (Βερνιέρος), κατανόηση κλίμακας και επεξήγηση σφάλματος μέτρησης.

Επεξήγηση έννοιας γωνίας ελάχιστης πρόσπτωσης και γωνίας ελάχιστης απόκλισης, εξοικείωση με την εύρεση αυτής. Από τι εξαρτάται;

Καταγραφή της γωνίας απόκλισης που αντιστοιχεί σε κάθε χρώμα. Κατασκευή πίνακα για κάθε πρίσμα.

Επισημάνση μακροσκοπικών διαφορών στα φάσματα ανά πρίσμα. - Διακριτική ικανότητα.

Ανάλυση του φωτός μέσω περιθλαστικού φράγματος, επεξήγηση της περίθλασης και συμβολής κυμάτων καθώς και εννοιών.

Καταγραφή γωνίας και έντασης γραμμών εκπομπής σε περίθλαση 1^{ης} και 2^{ης} τάξης.

Κόκκινο χρώμα : Δεν διακρίνεται πάντα αλλά...«*Η φαντασία είναι πιο σημαντική από τη γνώση*» (Αl.Einstein).

Ταξινόμηση συστηματικών και τυχαίων σφαλμάτων.

Υπολογισμοί στο εργαστήριο

Καταγραφή αποτελεσμάτων από το περιθλαστικό φράγμα, για την εύρεση του μήκους κύματος που αντιστοιχεί σε κάθε χρώμα.

Εύρεση του δείκτη διάθλασης, που αντιστοιχεί σε κάθε γωνία.

Επεξεργασία των αποτελεσμάτων σε λογιστικό φύλλο.

Διαγράμματα. Δείκτη διάθλασης-μήκους κύματος. Προσαρμογή μέσω δευτεροβάθμιας καμπύλης.

Μετασχηματισμοί αξόνων, ώστε να προκύπτει γραμμική προσέγγιση.

Αποτύπωση του σφάλματος στα διαγράμματα.

Μετά την άσκηση (στην εργαστηριακή αναφορά)

Περίληψη του πειράματος και των αποτελεσμάτων (abstract).

Περιγραφή πειραματικής διάταξης και μετρήσεων.

Πειραματικά δεδομένα (Πίνακες). Υπολογισμοί. Διαγράμματα.

Ανάλυση και κατανόηση αποτελεσμάτων στο πλαίσιο του θεωρητικού υποβάθρου. Ανάλυση σφάλματος.

Συμπεράσματα.

Πρόσθετες ασκήσεις ή βιβλιογραφική έρευνα όπως θα ζητηθεί από τον υπεύθυνο του εργαστηρίου.

Σύνδεσμος Οπτικού Μαγνητοσκοπημένου Υλικού

<https://opencourses.uoc.gr/courses/mod/page/view.php?id=9917>

A7.1 Κατευθύνσεις – Απαιτούμενα Αναφοράς

1. Περιγραφή σφαλμάτων μεθοδολογίας, διάταξης και κλίμακας Βερνιέρου.

Επισημάνσεις: Διάκριση Τυχαίων (Gauss διασπορά) και συστηματικών (μονοπρόσημη τάση) σφαλμάτων.

Ζητούμενα:

A. Κατόπιν αφαίρεσης του σφάλματος του μηδενισμού του οργάνου, εφόσον έχει προηγηθεί βαθμονόμηση και έχει παρατηρηθεί απόκλιση εκ του μηδενός αναφέρετε και εξηγήστε αν το σφάλμα αυτό είναι συστηματικό ή τυχαίο;

B. Ποιο είναι το τυχαίο σφάλμα της ανάγνωσης του Βερνιέρου;

2. Ανάλυση πρωτογενών δεδομένων και βασικής φασματοσκοπίας ατομικής εκπομπής.

Ζητούμενα:

A. Προσδιορισμός μήκους κύματος των φασματικών γραμμών εκπομπής του ατόμου του υδράργυρου βάσει της έκφρασης 18, για περίθλαση Α τάξης. Σύγκριση των αποτελεσμάτων με τις τιμές της βιβλιογραφίας [2].

Υπόδειξη: Για τον προσδιορισμό του σφάλματος στο μήκος κύματος απαιτείται μετατροπή των γωνιών από μοίρες ($^{\circ}$) σε ακτίνια (rad).

B. Χαρακτηρισμός των ατομικών μεταπτώσεων που αντιστοιχούν σε κάθε γραμμή που παρατηρήθηκε και κατασκευή διαγράμματος Grotrian.

Υπόδειξη: Η τιμή βιβλιογραφίας για το ερυθρό χρώμα δίνεται από τον κατασκευαστή της λυχνίας.

Σημείωση: Το ζητούμενο 2B αφορά σε όσους έχουν κάνει το πείραμα ατομικής εκπομπής.

3. Κατασκευή γραφικών παραστάσεων του δείκτη διάθλασης συναρτήσει του μήκους κύματος, για κάθε πρίσμα που μελετήθηκε. Κανονικοποίηση του $n(\lambda)$ (στη μονάδα) των τριών πρισμάτων σε ένα διάγραμμα.

Επισημάνσεις: Το διάγραμμα κανονικοποίησης θα χρησιμοποιηθεί για τη σύγκριση της διακριτικής ικανότητας των πρισμάτων.

Ζητούμενα:

A. Προσδιορισμός διακριτικής ικανότητας των πρισμάτων, για κάθε μήκος κύματος (έκφραση 17) και της παραγώγου της εξίσωσης της καμπύλης διασποράς.

B. Διερεύνηση αν η διακριτική ικανότητα των πρισμάτων επιτρέπει τον διαχωρισμό της γραμμής D του Νατρίου.

Γ. Σύγκριση της διακριτικής ικανότητας των τριών πρισμάτων.

4. Κατασκευή μετασχηματισμένου γραφήματος: Άξονας των x : λ^{-2} και άξονας των y : $1/(n^2-1)$. Γραμμική προσαρμογή των πειραματικών δεδομένων. Υπολογίστε τη συχνότητα δόνησης. Σε ποια περιοχή αντιστοιχεί η χαρακτηριστική συχνότητα του υλικού. Συγκρίνετε τις πειραματικές τιμές των δεικτών διάθλασης με την βιβλιογραφία. Πως επιβεβαιώνεται η οπτική διασπορά από τα αποτελέσματα του πειράματος;

Επισημάνσεις: Για την κατασκευή του διαγράμματος θα χρησιμοποιηθούν οι τιμές λ , που προέκυψαν από το περιθλαστικό φράγμα, καθώς επίσης οι τιμές της βιβλιογραφίας [2].

Ζητούμενα:

A. Χαρακτηρισμός της περιοχής του φάσματος ακτινοβολίας που αντιστοιχεί στην χαρακτηριστική συχνότητα του υλικού και σύγκριση των πειραματικών τιμών των δεικτών διάθλασης με την βιβλιογραφία.

B. Εξηγήστε πως επιβεβαιώνεται η οπτική διασπορά από τα αποτελέσματα του πειράματος;

A7.II Ασκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

1. Περιγράψτε και εξηγήστε τις διαφορές μεταξύ των φαινομένων περίθλασης και διάθλασης και σχολιάστε τις διαφορές που παρατηρείτε στην ανάλυση του φάσματος ακτινοβολίας της λυχνίας Hg, κατά την εφαρμογή του περιθλαστικού φράγματος και των πρισμάτων.

2. Επηρεάζει το πάχος των γυάλινων τοιχωμάτων του πρίσματος μεθανόλης, την απόκλιση της δέσμης; Αποδείξτε.

3. Αιτιολογήστε τη σειρά των γωνιών απόκλισης των μηκών κύματος για ένα περιθλαστικό φράγμα καθώς και για ένα πρίσμα. Για ένα φράγμα περίθλασης η γενική εξίσωση είναι:

$$m \times \lambda = d(\sin \alpha \pm \sin \beta) \quad 19.$$

όπου α : η προσπίπτουσα γωνία και β : η γωνία περίθλασης (βλέπε σχήμα εγχειριδίου, Άσκηση 9). Για $m=1$ έχουμε:

$$\lambda = d(\sin \alpha \pm \sin \beta) \quad 20.$$

Κάτω από ποιες συνθήκες ισχύει η εξίσωση: $\lambda = G \times \sin \vartheta$; Ποια είναι η σχέση μεταξύ των G και b ;

A7.III ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. E. Hecht , *Optics*, Addison-Wesley, 4η έκδοση London: **2002**, 66-73

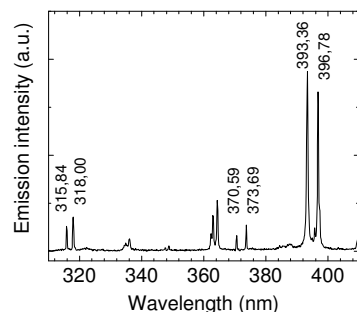
2. URL: <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>

Άσκηση B15: Ατομική Φασματοσκοπία

Αντικείμενο του πειράματος

Κύριος στόχος του πειράματος είναι η καταγραφή και μελέτη φασμάτων εκπομπής από διεγερμένα άτομα με σκοπό :

- την εξοικείωση με τη λειτουργία και χρήση απλής πειραματικής διάταξης φασματοσκοπίας εκπομπής και
- την κατανόηση της ηλεκτρονιακής δομής των πολυ-ηλεκτρονιακών ατόμων.



Σχ. 1 Φάσμα εκπομπής ιόντων Ca (Ca⁺ ή Ca II)



Σχ. 2 Σχηματικό διάγραμμα πειραματικής διάταξης καταγραφής φάσματος εκπομπής από λυχνία με φασματόμετρο οπτικών ινών

Θεωρητικό υπόβαθρο

Ατομική δομή

Ατομικά τροχιακά, Ηλεκτρονιακή διάταξη (electron configuration), Φασματοσκοπικοί όροι, Ενεργειακά επίπεδα ατόμων, Διαγράμματα Grottrian, Ηλεκτρονιακές μεταβάσεις, Κανόνες επιλογής.

Πριν την άσκηση (προαπαιτούμενη γνώση)

Επανάληψη στη δομή του ατόμου του Υδρογόνου.

Πρότυπο Bohr.

Εξίσωση Schrödinger, Κυματοσυναρτήσεις, Ατομικά τροχιακά,

Ενεργειακά επίπεδα, σταθερά Rydberg,

Φάσμα εκπομπής ατόμου H (σειρές Lyman, Balmer, Paschen κλπ),

Κανόνες επιλογής.

Αρχή δόμησης πολυ-ηλεκτρονιακών ατόμων.

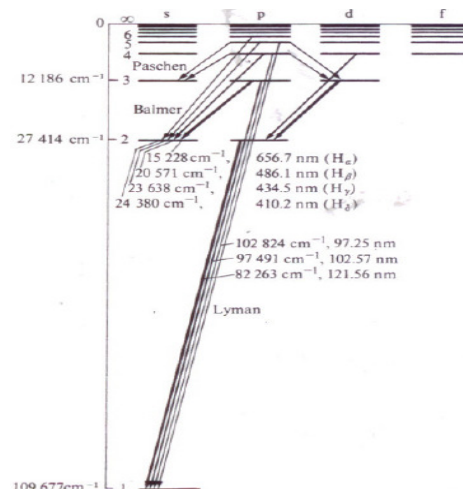
Βιβλιογραφία

1. [EG : Κεφ. 7, 8], 2. [TR : Κεφ. 8, 9, 10], 3. [AtΦΧ : Κεφ. 9]

4. [AtΦΧ2 : Κεφ. 15]

URL Links:

Atomic spectra database (NIST) <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>



Σχ. 3 Διάγραμμα Grottrian του ατόμου του υδρογόνου (H).

Harvard atomic spectral lines
Atomic spectral line database
Atomic spectra

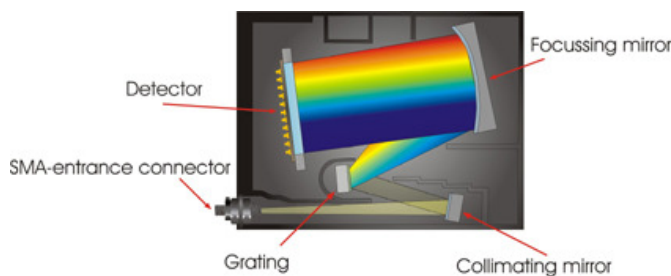
<http://www.cfa.harvard.edu/amp/ampdata/kurucz23/sekur.html>
<http://www.pmp.uni-hannover.de/cgi-bin/ssi/test/kurucz/sekur.html>
<http://www.itp.uni-hannover.de/~zawischa/ITP/atoms.html>

Κατά τη διάρκεια της άσκησης

Εισαγωγικά περί ατομικής φασματοσκοπίας.

Αναγνώριση των επι μέρους τμημάτων της διάταξης. Λειτουργία και ρόλος τους στο πείραμα.

- Λυχνία/ες
- Οπτική ίνα
- Οπτικά
- Φασματόμετρο φράγματος περίθλασης με ανιχνευτή CCD.



Σχ. 4 Σχηματικό διάγραμμα των οπτικών στοιχείων του φασματομέτρου

Συναρμολόγηση της διάταξης. Σχηματικό διάγραμμα. (βλ. Σχ. 2)

Έλεγχος λειτουργίας με λήψη φασμάτων από διάφορες πηγές (LED, λαμπτ. πυράκτωσης, φυσικό φως).

Εκμάθηση λογισμικού φασματομέτρου.

Καταγραφή και μελέτη ατομικών φασμάτων.

Βάσεις δεδομένων ατομικής φασματοσκοπίας.

Αποτίμηση συνολικής λειτουργίας της πειραματικής διάταξης.

Μετά την άσκηση (στην εργαστηριακή αναφορά)

Περίληψη του πειράματος και των αποτελεσμάτων.

Περιγραφή πειραματικής διάταξης και μετρήσεων.

Ανάλυση και κατανόηση αποτελεσμάτων στο πλαίσιο του θεωρητικού υποβάθρου.

Παρουσίαση φασμάτων υπο μορφή διαγράμματος $I=I(\lambda/nm)$. (βλ. Σχ. 1)

Διαγράμματα Grotrian. (βλ. Σχ.3 και διαφάνειες μαθήματος ΦΧ-Ι)

Πρόσθετες ασκήσεις ή βιβλιογραφική έρευνα όπως θα ζητηθεί από τον υπεύθυνο του εργαστηρίου.

Συνομογραφίες:

[AtΦΧ]	P.W. Atkins, J. DePaula 'Φυσικοχημεία' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης 2014)
[AtΦΧ2]	P.W. Atkins 'Φυσικοχημεία ΙΙ' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης 2009)
[TR]	Σ. Τραχανάς, 'Κβαντομηχανική Ι' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2005)
[EG]	D. D. Ebbing, S. D. Gammon, 'Γενική Χημεία', (Εκδ. ΤΡΑΥΛΟΣ, Αθήνα, 2002)

Σύνδεσμος Οπτικού Μαγνητοσκοπημένου Υλικού

<http://delos.datacenter.uoc.gr/opedelos/player?rid=75c745fe>

B15.I Κατευθύνσεις – Απαιτούμενα Αναφοράς

1. Παράθεση των πειραματικών φασμάτων εκπομπής που καταγράψατε από τις λυχνίες που εξετάσατε: Na, Zn, He, Cd, Hg, ως ένταση εκπομπής, I, συναρτήσει του μήκους κύματος, λ (nm).

Κατασκευή συγκεντρωτικού πίνακα των αποτελεσμάτων. Για κάθε φασματική γραμμή εκπομπής που παρατηρείτε στα πειραματικά φάσματα να αναγράψετε την παρατηρούμενη τιμή του λ (λ_{exp}) και από τα δεδομένα που παρουσιάζονται στο σχετικό ισότοπο [1], να παραθέσετε το αντίστοιχο μήκος κύματος εκπομπής (λ_{obs}), καθώς και τα στοιχεία που χαρακτηρίζουν κάθε μία από τις φασματικές μεταβάσεις που καταγράφετε (Ενέργεια αρχικού και τελικού επιπέδου, ηλεκτρονιακή διάταξη και φασματοσκοπικούς όρους).

Υπόδειξη: Πίνακες τις μορφωτικές παρατίθενται στην πρότυπη εργαστηριακή αναφορά στο e-class.

Επισημάνσεις: Προσδιορίστε τις πηγές των τιμών, τις μετρήσεις σας και διακρίνετέ τα σε τυχαία και συστηματικά. Εξηγήστε πώς παράγονται.

Ζητούμενα:

A. Σύγκριση των προσδιοριζόμενων ατομικών μεταβάσεων (λ_{exp}), για τητσίθε λυχνία, με τις πραγματικές τιμές, (λ_{obs}), όπως προκύπτουν από την αναφορά [1].

B. Ποσοτικοποίηση των συστηματικών σφαλμάτων εμφάνισης (μήκος κύματος, λ) των ατομικών φασματικών γραμμών εκπομπής των λυχνιών, βάσει των αποκλίσεων που παρατηρούνται στην αντιπαραβολή τους με τις αντίστοιχες της βιβλιογραφίας. Διόρθωση των πειραματικών δεδομένων.

2. Κατασκευή διαγράμματος Grottrian, για τα άτομα των οποίων τα ατομικά φάσματα εκπομπής μελετήθηκαν.

Υπόδειξη: Για το διάγραμμα Grottrian τοποθετήστε στον άξονα των x, τις ατομικές καταστάσεις και στον άξονα των y, τις αντίστοιχες τιμές ενέργειας. Χαρακτηρίστε με 1 όλες τις καταστάσεις S και με 2 όλες τις καταστάσεις P. Χρησιμοποιήστε ως σύμβολο αποτύπωσης της ενέργειας μια μικρή ευθεία. Τέλος, απεικονίστε την μετάβαση που έλαβε χώρα, με βέλος, κατευθυνόμενο από το ατομικό ενεργειακό επίπεδο, στο τελικό, και αναγράψτε τις. Εφόσον το κρίνετε αναγκαίο μπορείτε να διαχωρίσετε καταστάσεις singlet και triplet, προσθέτοντας αντίστοιχες στήλες στο διάγραμμα. Ενδεικτικά διαγράμματα Grottrian παρατίθενται στην πρότυπη εργαστηριακή αναφορά στο e-class.

Επισημάνσεις: Η εκπομπή ακτινοβολίας προέρχεται, τόσο από ουδέτερα άτομα Hg (I), όσο και από τα απλά κατιόντα Hg (II).

Ζητούμενα:

Χρησιμοποιώντας τον ισότοπο της βιβλιογραφίας [1] και [2] ταυτοποιήστε τις μεταβάσεις και μετατρέψτε τη ενεργειακή διαφορά σε κυματάρθμους (cm^{-1}).

B15.II Ασκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

1. Η διακριτική ικανότητα του φασματογράφου της διάταξης είναι ικανή να διαχωρίσει την D γραμμή του Νατρίου; Υπολογίστε τον ενεργειακό διαχωρισμό σύζευξης ιδιοπεριστροφής-τροχιάς (s-o, spin-orbit coupling) μεταξύ των ενεργειακών καταστάσεων $3p: ^2P_{1/2, 3/2}$, για το άτομο του Na.

Υπόδειξη: Η ενεργειακή διαφορά ΔE_{s-o} αφορά στις δύο "κίτρινες" γραμμές του φάσματος του Na.

2. Από μετρήσεις του ατομικού φάσματος του υδρογόνου λαμβάνονται τα εξής αποτελέσματα σε κυματάρθμους (cm^{-1}) και αφορούν σε αποδιέγερση από ανώτερη στοιβάδα (n'), προς την θεμελιώδη στάθμη ($n=1$): 82.259, 97.492, 102.824, 105.292, 106.632, 107.440. Υπολογίστε την ενέργεια ionτισμού, καθώς και την σταθερά του Rydberg (R_H), για το Υδρογόνο. Σχολιάστε τα αποτελέσματα σας.

Υπόδειξη: Κατασκευάστε διάγραμμα της ενέργειας μετάβασης (cm^{-1}) ως προς $1/n^2$ και προεκτείνετε την ευθεία που θα προκύψει μέχρι το σημείο $x=0$. Να σχολιάσετε το νόημα της τιμής $x=0$.

B15.III ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

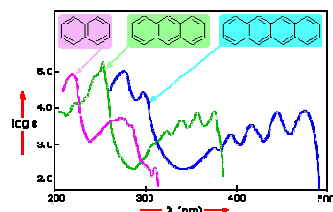
1. URL: http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html
2. D. Gullberg and Litzén, U., *Phys. Scr.*, **2000**, 61, 652
3. URL: <http://www.cfa.harvard.edu/amp/ampdata/kurucz23/sekur.html>

Άσκηση Β16: Φάσματοσκοπία Απορρόφησης Οργανικών Χρωστικών

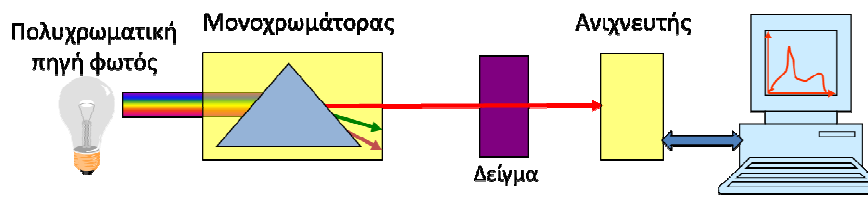
Αντικείμενο του πειράματος

Στο πλαίσιο του πειράματος πραγματοποιείται καταγραφή φασμάτων απορρόφησης υπεριώδους-ορατού (UV-Vis) μιας οικογένειας συζυγών οργανικών χρωστικών (κυανινών) με σκοπό.

- την εξοικείωση με τη λειτουργία και χρήση φασματοφωτομέτρου απορρόφησης υπεριώδους-ορατού,
- τη μελέτη και κατανόηση της ηλεκτρονιακής φασματοσκοπίας πολύ-ατομικών μορίων και
- την ερμηνεία των φασμάτων σύμφωνα με το πρότυπο (μοντέλο) του σωματιδίου σε φρέαρ δυναμικού.



Σχ. 1 Φάσματα απορρόφησης UV-Vis, $\epsilon(\lambda)$, πολύ-αρωματικών υδρογονανθράκων (PAH's)



Σχ. 2 Σχηματική αναπαράσταση βασικής διάταξης μέτρησης φάσματος απορρόφησης

Θεωρητικό υπόβαθρο

Σωματίδιο σε φρέαρ δυναμικού.

Επίλυση της εξίσωσης Schrödinger. Κυματοσυναρτήσεις. Ενεργειακά επίπεδα.

Ενεργειακό διάγραμμα Jablonski των ηλεκτρονιακών καταστάσεων πολύ-ατομικών μορίων.

Θεμελιώδεις φωτοφυσικές διεργασίες. Μεταβάσεις. Κανόνες επιλογής.

Βασικές αρχές φασματοσκοπίας απορρόφησης υπεριώδους-ορατού. Οργανολογία.

Νόμος Beer-Lambert. Συντελεστής απορρόφησης ϵ .

Πριν την άσκηση (προαπαιτούμενη γνώση)

Επανάληψη στο κβαντομηχανικό πρόβλημα του σωματίου σε φρέαρ δυναμικού.

Μοριακά τροχιακά (σ , π , n). Συζυγία. Μοριακή δομή.

Βασικές αρχές φασματοσκοπίας απορρόφησης υπεριώδους-ορατού.

Βιβλιογραφία

- [TR : Κεφ. 5], 2. [AtFX : Κεφ. 13], 3. [AtFX2 : Κεφ. 15], 4. H. Kuhn, 'A Quantum Mechanical Theory of Light Absorption of Organic Dyes and Similar Compounds' *J. Chem. Phys.* **17**, 1198-1212 (1949), 5. J. Autschbach, 'Why the Particle-in-a-Box Model Works Well for Cyanine Dyes but Not for Conjugated Polyenes', *J. Chem. Educ.* **84**, 1840-5 (2007).

URL Links:

http://en.wikipedia.org/wiki/Ultraviolet%20%93visible_spectroscopy

http://en.wikipedia.org/wiki/Beer%20%93Lambert_law

<http://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/virttxtjml/spectrpy/uv-vis/spectrum.htm>

<http://www.chemguide.co.uk/analysis/uvvisible/theory.html>

<http://teaching.shu.ac.uk/hwb/chemistry/tutorials/molspec/uvvisab1.htm>

Κατά τη διάρκεια της άσκησης

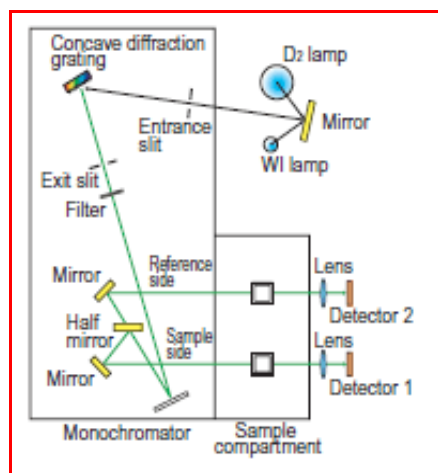
Παρασκευή διαλυμάτων των χρωστικών (stock solutions) και αραιώσεις αυτών ώστε να προκύψουν διαλύματα με απορρόφηση A στην περιοχή 0-1.

Αναγνώριση των βασικών τμημάτων του φασματοφωτομέτρου απορρόφησης υπεριώδους-ορατού (Hitachi 1800). Λυχνίες, Μονοχρωμάτορας, Ανιχνευτής, Οπτικά, Κυψελίδες.

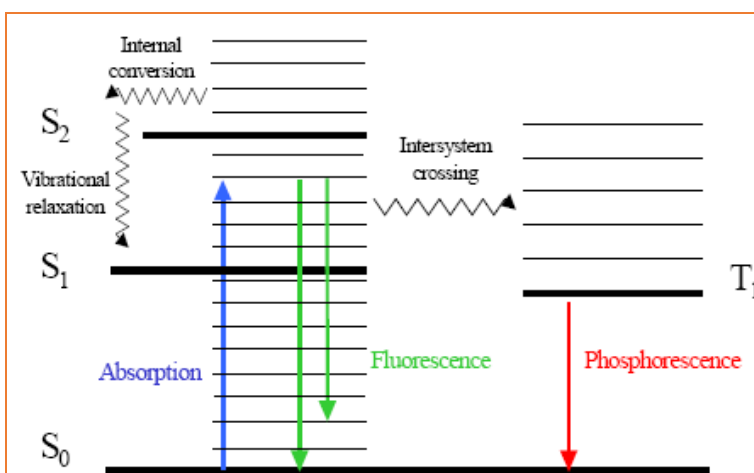
Εξοικείωση με το λογισμικό του φασματοφωτομέτρου.

Καταγραφή φασμάτων απορρόφησης (και διαπερατότητας) του διαλύτη και των τριών χρωστικών.

Μελέτη της επίδρασης παραμέτρων λειτουργίας (π.χ. εύρος σχισμής μονοχρωμάτορας, ταχύτητα σάρωσης κλπ) του φασματοφωτομέτρου στη μορφή και διακριτική ανάλυση των φασμάτων.



Σχ. 3 Σχηματικό διάγραμμα οπτικής διάταξης φασματοφωτομέτρου απορρόφησης υπεριώδους-ορατού διπλής δέσμης.



Σχ. 2 Τυπικό ενεργειακό διάγραμμα Jablonski των ηλεκτρονικών καταστάσεων οργανικού μορίου και βασικές φωτοφυσικές διεργασίες.

Μετά την άσκηση (στην εργαστηριακή αναφορά)

Περίληψη του πειράματος και των αποτελεσμάτων.

Περιγραφή οργάνου και πειραματικής διαδικασίας.

Αποτελέσματα (Φάσματα (βλ. Σχ. 1), Πίνακες, Διαγράμματα)

Υπολογισμοί. Ανάλυση σφάλματος.

Ανάλυση και κατανόηση αποτελεσμάτων στο πλαίσιο του θεωρητικού υποβάθρου. Συμπεράσματα.

Πρόσθετες ασκήσεις ή βιβλιογραφική έρευνα όπως θα ζητηθεί από τον υπεύθυνο του εργαστηρίου.

Συντομογραφίες:

[AtΦΧ] P.W. Atkins, J. DePaula 'Φυσικοχημεία' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης 2014)

[AtΦΧ2] P.W. Atkins 'Φυσικοχημεία ΙΙ' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης 2009)

[TR] Σ. Τραχανάς, 'Κβαντομηχανική Ι' (Πανεπ. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2005)

Σύνδεσμος Οπτικού Μαγνητοσκοπημένου Υλικού

<https://opencourses.uoc.gr/courses/mod/page/view.php?id=9941>

B16.I Κατευθύνσεις – Απαιτούμενα Αναφοράς

1. Παράθεση των φασμάτων απορρόφησης που καταγράψατε από τις τρεις χρωστικές. Καταγραφή των μέγιστων απορρόφησης συναρτήσει του μήκους κύματος (λ_{\max} / nm), για κάθε ένωση και αντίστοιχα την απορροφητικότητα του τυφλού της μεθανόλης. Αφαίρεση της συνεισφοράς της μεθανόλης από τα φάσματα των τριών χρωστικών.

Επισημάνσεις: Παρατήρηση και ερμηνεία διαφορών μεταξύ των διαφορετικών φασμάτων τυφλών μεθανόλης που λαμβάνονται.

Ζητούμενα:

A. Κατασκευή συγκεντρωτικού πίνακα των διορθωμένων μέγιστων των απορροφήσεων και των αντιστοιχών τιμών μήκους κύματος που εμφανίζονται, για τις τρεις χρωστικές.

B. Ερμηνεία του χρώματος κάθε χρωστικής, σε σχέση με την περιοχή μήκους κύματος που απορροφά και χαρακτηρισμός της μετατόπισης. [4] Εξηγήστε αν η μετατόπιση είναι αναμενομένη. Να αναφέρετε και να σχολιάσετε το σχετικό θεωρητικό πρότυπο (μοντέλο).

2. Κατασκευή διαγράμματος απορροφητικότητας (A) συναρτήσει της συγκέντρωσης συγκεκριμένου διαλύματος χρωστικής, κατόπιν διαδοχικών αραιώσεων (c_0 , $c_0/2$ και $c_0/4$). Υπολογίστε τις συγκεντρώσεις των δειγμάτων σας από τα αριθμητικά δεδομένα του εργαστηριακού τετραδίου όσον αφορά στις συγκεντρώσεις και στις αραιώσεις.

Επισημάνσεις: Χρησιμοποιήστε τις διορθωμένες τιμές απορροφητικότητας των χρωστικών, για την ποσοτικοποίηση της άγνωστης συγκέντρωσης.

Ζητούμενα:

Προσδιορισμός της αρχικής συγκέντρωσης του διαλύματος έχοντας ως δεδομένο τον γραμμομοριακό συντελεστή απορροφητικότητας [5], ϵ , βάσει του νόμου των Beer-Lambert. Σύγκριση με την αρχικά εκτιμώμενη και αίτια παρατηρούμενης απόκλισης.

B16.II Ασκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

1. Ποια είναι η σημασία του ϵ και τι δηλώνει η αύξηση του από την πρώτη, στην τρίτη ένωση.

2. Μετατρέψτε τα μήκη κύματος όπου έχετε καταγράψει μέγιστα απορρόφησης του κάθε διαλύματος των χρωστικών, σε κυματάριθμους (cm^{-1}). Προσδιορίστε τις ενεργειακές διαφορές των τριών κορυφών που διακρίνονται, για κάθε χρωστική. Σε ποια περιοχή του φάσματος αντιστοιχούν [3], [7]; Με ποιο επιχειρήμα οι συγγραφείς της αναφοράς [7] τεκμηριώνουν την άποψή τους; Μπορείτε να αιτιολογήσετε;

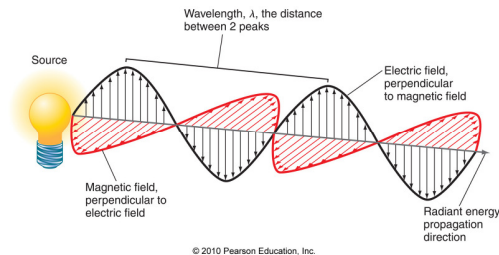
B16.III ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. H. Kuhn, *J. Chem. Phys.*, **1949**, 17, 1198
2. D. P. Shoemaker, Garland, C. W. and Nibler, J. W., *Experiments in Physical Chemistry*, 6th ed., Section XIV, McGraw-Hill New York: **1996**.
3. R. D. Burkhart and Howells, P. N., *J. Chem. Educ.*, **1929**, 56, 249
4. Φ. Νταής, *Φασματοσκοπία*, Εκδόσεις Ε.Α.Π. Πάτρα: **2001**
5. S. E. Sheppard, Geddes, A. L., *J. Am. Chem. Soc.*, **1944**, 66, 2003
6. D. A. Bahnick, *J. Chem. Educ.*, **1994**, 71, 171
7. A. Zarow and Shin, Y-G., *Am. J. Undergrad. Res.*, **2009**, 8, 7

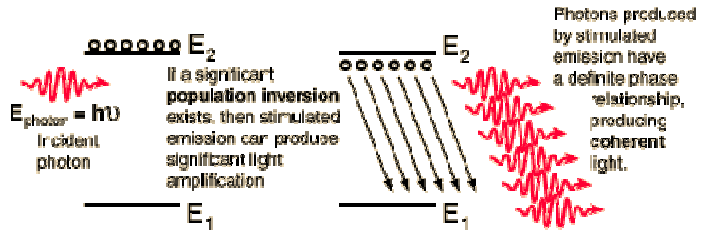
Άσκηση Β19: Αρχές λειτουργίας λέιζερ – Πόλωση φωτός – Νόμος Malus

Αντικείμενο του πειράματος

Κύριος στόχος του πειράματος είναι ο χαρακτηρισμός της ακτινοβολίας που παράγεται από ένα διοδικό λέιζερ ημιαγωγού (semiconductor diode laser) και μια φωτοεκπομπό δίοδο (LED, light emitting diode) ως προς την πόλωση και η εφαρμογή του Νόμου του Malus.



Σχ. 1 Ακτινοβολία ως ηλεκτρομαγνητικό κύμα



Σχ. 2 Σχηματική αναπαράσταση της διαδικασίας αναστροφής πληθυσμού και εξαναγκασμένης εκπομπής ακτινοβολίας (δράση laser)

Θεωρητικό υπόβαθρο

Αρχές λειτουργίας laser.

Αναστροφή πληθυσμών. Εξαναγκασμένη εκπομπή. Αυθόρμητη εκπομπή (φθορισμός, φωσφορισμός).

Συντελεστές Einstein.

Άντληση. Ενεργό υλικό, Οπτική κοιλότητα.

Χαρακτηριστικές ιδιότητες ακτινοβολίας λέιζερ.

Τύποι λέιζερ. Πηγές λέιζερ συνεχούς λειτουργίας (cw). Παλμικά λέιζερ.

Διανυσματικά χαρακτηριστικά Η/Μ κυμάτων. Πόλωση.

Πολωτικά υλικά, είδη πολωτών. Πλακίδια καθυστέρησης φάσης.

Δείκτης διάθλασης. Διπλοθλαστικότητα.

Πριν την άσκηση (προαπαιτούμενη γνώση)

Επανάληψη στη διανυσματική περιγραφή Η/Μ κυμάτων.

$$\vec{E} = E_0 \left\{ \hat{i} \sin \left[\frac{2\pi}{\lambda} (z - ct) \right] + \hat{j} \sin \left[\frac{2\pi}{\lambda} \left(z - ct \pm \frac{\pi}{2} \right) \right] \right\}$$

Π.χ.

Συχνότητα-Περίοδος-Μήκος κύματος-Πλάτος ταλάντωσης ηλεκτρικού πεδίου. Ένταση ακτινοβολίας.

Πόλωση (γραμμική, κυκλική). Φάση.

Βασικές τριγωνομετρικές σχέσεις (π.χ. $\eta\mu 2\theta$, $\sigma\upsilon\nu 2\theta$, $\eta\mu^2\theta$, $\sigma\upsilon\nu^2\theta$, ...)

Βιβλιογραφία

1. [AtΦΧ : Κεφ. 13], 2. [AtΦΧ2 : Κεφ. 13, 19], 3. [TR : Κεφ. 15], 4. [EG : Κεφ. 7], 5. [ΑΣ-ΜΟπτ : Κεφ. 1, 3]

URL Links:

<http://en.wikipedia.org/wiki/Polarizer>

<http://ocw.mit.edu/courses/physics/8-02-electricity-and-magnetism-spring-2002/video-lectures/lecture-30-polarizers-and-maluss-law/>

http://pe2bz.philpem.me.uk/Lights/-%20Laser/Info-902-LaserCourse/c06-10/mod06_10.htm

https://en.wikipedia.org/wiki/%C3%89tienne-Louis_Malus



Σχ. 3 Διχρωικοί πολωτές σε διασταυρωμένη διεύθυνση (με κάθετους του άξονες πόλωσης)

Κατά τη διάρκεια της άσκησης

ΠΡΟΣΟΧΗ : Να λάβετε τα κατάλληλα μέτρα ασφαλούς χρήσης πηγών λέιζερ

Εισαγωγικά στοιχεία για τα λέιζερ και χαρακτηριστικές ιδιότητες αυτών.

Αναγνώριση των επί μέρους τμημάτων της διάταξης.

- Πηγές ακτινοβολίας (λέιζερ, LED). Αρχές λειτουργίας.
- Οπτικά (κάτοπτρα, πρίσμα, ίριδα, συγκεντρωτικός φακός).
- Διχρωικός πολωτής (Polaroid). Διπλοθλαστικός πολωτής (πλακίδιο $\lambda/4$).
- Φωτοανιχνευτής. Ενισχυτής

Συναρμολόγηση της διάταξης. Σχηματικό διάγραμμα. (βλ. Σχ. 3)

A) Μετρήσεις με πηγή laser ημιαγωγού

Ευθυγράμμιση της πειραματικής διάταξης (βλ. Σχ. 3)

Μέτρηση της έντασης της ακτινοβολίας μετά από διέλευση της δέσμης του λέιζερ μέσω: [i] ενός πολωτή, [ii] δύο πολωτών [iii] δυο πολωτών και ενός πλακιδίου καθυστέρησης $\lambda/4$.

B) Μετρήσεις με φωτοεκπομπό δίοδο (LED)

Μέτρηση της έντασης της ακτινοβολίας μετά από διέλευση της δέσμης του LED μέσω [i] ενός πολωτή, [ii] δύο πολωτών.

Αποτίμηση συνολικής λειτουργίας της πειραματικής διάταξης. Συζήτηση σφαλμάτων στις μετρήσεις.

Γ) Επεξεργασία δεδομένων στο εργαστήριο

Επεξεργασία των πειραματικών δεδομένων.

Κατασκευή κατάλληλων διαγραμμάτων σύμφωνα με τις οδηγίες που παρέχονται στο εγχειρίδιο και προσδιορισμός του τύπου πόλωσης που εμφανίζουν οι πηγές λέιζερ και LED καθώς και της επίδρασης του πλακιδίου $\lambda/4$ στην πόλωση του λέιζερ.

Μετά την άσκηση (στην εργαστηριακή αναφορά)

Περίληψη του πειράματος και των αποτελεσμάτων.

Περιγραφή πειραματικής διάταξης και μετρήσεων.

Πειραματικά δεδομένα (Πίνακες). Υπολογισμοί. Διαγράμματα.

Ανάλυση και κατανόηση αποτελεσμάτων στο πλαίσιο του θεωρητικού υποβάθρου. Ανάλυση σφάλματος. Συμπεράσματα.

Πρόσθετες ασκήσεις ή βιβλιογραφική έρευνα όπως θα ζητηθεί από τον υπεύθυνο του εργαστηρίου.

Συνομογραφίες:

[AtΦΧ]	P.W. Atkins, J. DePaula 'Φυσικοχημεία' (Πανep. Εκδόσεις Κρήτης 2014)
[AtΦΧ2]	P.W. Atkins 'Φυσικοχημεία II' (Πανep. Εκδόσεις Κρήτης 2009)
[TR]	Σ. Τραχανάς, 'Κβαντομηχανική I' (Πανep. Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο 2005)
[EG]	D. D. Ebbing, S. D. Gammon, 'Γενική Χημεία', (Εκδ. ΤΡΑΥΛΟΣ, Αθήνα, 2002)
[ΑΣ-ΜΟπτ]	Γ. Ασημέλλης, 'Μαθήματα Οπτικής' (Σύγχρονη Γνώση, 2007)

Σύνδεσμος Οπτικού Μαγνητοσκοπημένου Υλικού

<https://opencourses.uoc.gr/courses/mod/page/view.php?id=9944>



Σχ.3 Τμήμα της πειραματικής διάταξης. Διακρίνονται η ίριδα, ο πρώτος πολωτής, το πλακίδιο καθυστέρησης, και ο δεύτερος πολωτής σε κατάλληλα στηρίγματα ευθυγραμμισμένα σε οπτικό φορέα καθώς και το πολύμετρο.

B19.I Κατευθύνσεις – Απαιτούμενα Αναφοράς

1. Κατασκευή διαγράμματος $(I-I_0)/(I_{\max}-I_0)$ συναρτήσει της γωνίας θ (θ : η γωνία του πολωτή σε ακτίνια (rad) I_0 : το ρεύμα υποβάθρου για ένα πολωτή). Προσαρμογή της καμπύλης στην εξίσωση $y = P1 \times \cos((2\theta)+a) + P2$.

Βοήθημα: (Δείτε http://eilotas.chemistry.uoc.gr/eclass/modules/document/file.php/TMA111/XHM-311_LabPChem-I_PLOTS_Learning-Objectives_F2017.pdf)

Υπόδειξη: Ο νόμος του Malus εκφράζεται από τη συγκεκριμένη εξίσωση βάσει τριγωνομετρίας: $\cos(2\theta)=2 \times \cos^2(\theta)-1$.

Επισημάνσεις: Αποτύπωση των σφαλμάτων σε κάθε πειραματικό σημείο, τόσο στη γωνία όσο, και στην ένταση του φωτός (απαιτείται διάδοση σφάλματος).

Ζητούμενα:

- A. Απόδοση της φυσικής σημασίας του μεγίστου που παρατηρείται και εντοπισμός του ελαχίστου;
- B. Προσδιορισμός των τιμών που πρέπει να έχουν οι συντελεστές P1 και P2.
- Γ. Χαρακτηρισμός του φωτός που παράγεται από το laser ως πολωμένο ή όχι και το αντίστοιχο της διόδου ως μερικώς ή πλήρως μη πολωμένο. Εξηγήστε. (Λάβετε υπόψη την άσκηση **B19.II 1.**)

2. Κατασκευή διαγράμματος $(I-I_0)/(I_{\max}-I_0)$ συναρτήσει του $\cos^2\theta$ (θ : η γωνία μεταξύ των οπτικών αξόνων των δύο πολωτών, I_0 : το ρεύμα υποβάθρου για δυο πολωτές) και προσαρμόστε γραμμικά τα πειραματικά δεδομένα.

Υπόδειξη: Διαδώστε στο σφάλμα στους άξονες αφού πρώτα μετατρέψτε τις γωνίες σε ακτίνια.

Ζητούμενα: A. Εξηγήστε γιατί το συγκεκριμένο διάγραμμα ακολουθεί γραμμική συσχέτιση. Προσδιορίστε την κλίση της ευθείας και εξηγήστε τη σημασία της;

B. Κατασκευάστε τις αντίστοιχες γραφικές παραστάσεις (1 και 2) για τη λυχνία διόδου. Αναφέρετε τις παρατηρήσεις σας και συγκρίνετε με το φως του laser.

3. Κατασκευή δύο διαγραμμάτων, για την περίπτωση της χρήσης πλακιδίου καθυστέρησης, (Laser και δυο γραμμικοί πολωτές) με αποτύπωση στον άξονα των γ α) το πηλίκο $(I-I_0)/(I_{\max}-I_0)$ και β) την ένταση I (χωρίς αφαίρεση του υποβάθρου και κανονικοποίηση), συναρτήσει της γωνίας θ , μεταξύ του άξονα του πολωτή και του αντίστοιχου του πλακιδίου καθυστέρησης). Προσαρμόστε τα πειραματικά σας δεδομένα στη συνάρτηση:

$$\gamma = A \times \cos^2(\theta+\alpha) \times \sin^2(\theta+\alpha).$$

Υπόδειξη 1: Τριγωνομετρικά, αν η γωνία του πλακιδίου καθυστέρησης είναι θ , ως προς τον πρώτο πολωτή, θα είναι $\pi/2-\theta$ ως προς τον δεύτερο πολωτή. Συνεπώς, $\cos^2[\pi/2-\theta] = \sin^2(\theta)$.

Υπόδειξη 2: Από τον συντελεστή A του δεύτερου διαγράμματος προκύπτει η διαφορά δ που επιφέρει το πλακίδιο καθυστέρησης στο μήκος κύματος των 650 nm: $A = I_{\text{αρχικό}} \times \sin^2(\delta/2)$. $I_{\text{αρχικό}}$ είναι η ένταση του laser χωρίς κανένα οπτικό στοιχείο μετά την αφαίρεση του τυφλού I_0 .

Επισημάνσεις: Το πλακίδιο καθυστέρησης δημιουργεί ελλειπτικά πολωμένο φως, εκτός από τις οριακές γωνίες 0° και 90° όπου έχουμε γραμμικά πολωμένο φως και τη γωνία 45° όπου έχουμε κυκλικά πολωμένο φως. (Εξηγήστε γιατί και σε σχέση με το διάγραμμα).

Ζητούμενο:

Η εύρεση της διαφοράς φάσης μεταξύ των δυο συνιστωσών που προκαλείται από το πλακίδιο καθυστέρησης στο μήκος κύματος εκπομπής του laser.

B19.II Ασκήσεις – Ερωτήσεις Αναφοράς

1. Υπολογίστε το βαθμό πόλωσης, p , του φωτός, από τα μέγιστα και τα ελάχιστα των εντάσεων του ρεύματος που διήλθε από την φωτοδίοδο, για ένα πολωτή, χρησιμοποιώντας σαν πηγή ακτινοβολίας α) το laser, β) τη φωτοεκπομπή δίοδο(LED).

Υπόδειξη: Ισχύει η έκφραση $p = (I_{max} - I_{min}) / [(I_{max} - I_{min}) + 2 \times I_{min}] = (I_{max} - I_{min}) / [(I_{max} + I_{min})]$ (I_{max} και I_{min} : η μέγιστη και η ελάχιστη ένταση του ρεύματος που προκύπτει από το διάγραμμα. (Ερώτηση B19.1.1.)

2. Με ποιους τρόπους είναι δυνατόν να παραχθεί πολωμένο φως.

3. Τι είναι η γωνία Brewster;

B19.III ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. D. Andrews, *Lasers in Chemistry*, Springer, Third edition, Heidelberg: **1990**
2. URL: <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>
3. W. F. Coleman, *J. Chem. Educ.*, **1982**, 59, 441
4. R. N. Zare, Spencer, B. H., Springer, D. S. and Jacobson, M. P., *Laser Experiment for Beginners*, University Science Books, Sausalito, California: **1995**
5. R. W. Schwenz and R. J. Moore, *Physical Chemistry: Developing a Dynamic Curriculum*, Washington, DC : American Chemical Society, **1993**
6. Θ. Κιτσόπουλος, Άγγελος, Δ., *Διαφάνειες μαθήματος Φασματοσκοπίας*, **2000**
7. Γ. Ασημέλλης, *Μαθήματα Οπτικής*, Pressline Auhna: **2005**

Συνοπτικός Οδηγός Συγγραφής Εργαστηριακής Αναφοράς

1. Η εργαστηριακή αναφορά

Η αναφορά της εργαστηριακής άσκησης αποτελεί το μέσο επικοινωνίας του πειραματιστή με τον επιστημονικό κόσμο. Αποτυπώνει με ακρίβεια και σαφήνεια το σκοπό και τη βασική θεωρία του πειράματος, τη μεθοδολογία που ακολουθήθηκε, τα υλικά και την οργανολογία που χρησιμοποιήθηκε (πειραματική συσκευή, διάταξη), παρουσιάζει τα δεδομένα που ελήφθησαν κατά τις πειραματικές μετρήσεις και τους υπολογισμούς, σχολιάζει την ακρίβεια των μετρήσεων και παραθέτει τα αποτελέσματα και τα συμπεράσματα της πειραματικής εργασίας.

Ως εκ τούτου είναι εξαιρετικά σημαντικό το περιεχόμενό και η δομή της αναφοράς να παρέχουν ακριβή, ουσιαστική και διαυγή περιγραφή, των πειραματικών μετρήσεων και των συνθηκών καθώς και των αποτελεσμάτων και συμπερασμάτων.

Στη συνέχεια δίδονται αναλυτικά οδηγίες σχετικά με τη δομή και τη μορφοποίηση της εργαστηριακής αναφοράς.

2. Δομή και Μορφοποίησης της Αναφοράς

2.1. Δομή

Στις σελίδες 4-12 παρατίθεται αναλυτικό υπόδειγμα με σύντομη περιγραφή του περιεχομένου και της οργάνωσης της αναφοράς.

Η προτεινόμενη δομή της αναφοράς για τα Εργαστήρια Φυσικοχημείας θα πρέπει να τηρείται με συνέπεια, ώστε η εργασία όλων των ομάδων να αξιολογείται υπό το ίδιο πρίσμα. Επίσης, όλα τα μέλη κάθε ομάδας πρέπει να έχουν την πλήρη εποπτεία του περιεχομένου της αναφοράς έτσι ώστε το κείμενο στο σύνολό του να χαρακτηρίζεται από ενιαίο τρόπο γραφής, δομή και μορφοποίηση επιτρέποντας στον αναγνώστη (και τον αξιολογητή) να αποκομίσει ακριβή και σαφή εικόνα των πειραματικών εργασιών, των μετρήσεων της ανάλυσης των αποτελεσμάτων και των συμπερασμάτων.

Επισημαίνεται ότι σοβαρή παρέκκλιση από τις οδηγίες σύνταξης αναφορών ενδέχεται να επιφέρει συνέπειες στην τελική βαθμολόγησή τους.

2.2. Μορφοποίηση

Η ομοιογενής μορφοποίηση του κειμένου των αναφορών είναι απαραίτητη έτσι ώστε η αξιολόγησή τους να αφορά αποκλειστικά στο περιεχόμενο των γεγραμμένων ενώ συγχρόνως οι συγγραφείς να αποκτήσουν δεξιότητες ορθής και εύληπτης παρουσίασης πειραματικών αποτελεσμάτων.

Στη συνέχεια περιγράφονται οι απαιτήσεις για τη συγγραφή, παρουσίαση, εκτύπωση και βιβλιοδεσία της αναφοράς.

A. Γραμματοσειρά (Font και FontSize)

i) *Τίτλοι κεφαλαίων και υποκεφαλαίων*: **Bold** και αριθμημένοι.

Times New Roman 14 ή Calibri 14 ή Arial 12

ii) *Κυρίως Κείμενο*:

Times New Roman 12 ή Calibri 12 ή 11 ή Arial 10

iii) Χρήση αυτούσιου κειμένου από βιβλιογραφία: *Italics*

«Εντός εισαγωγικών και με πλάγιους χαρακτήρες»

B. Διάστιχο

Δηλώνει την απόσταση μεταξύ των γραμμών και επιλέγεται **1.5 γραμμή**, ώστε το κείμενο να είναι ευανάγνωστο.

Γ. Κατανομή – Στοίχιση κειμένου στις σελίδες

Το κείμενο της αναφοράς παρατίθεται συγγράφεται σε μία στήλη και στοιχίζεται ομοιόμορφα ως προς τα άκρα της σελίδας επιλέγοντας την πλήρη στοίχιση κειμένου από τις επιλογές του κειμενογράφου (Justify, ctrl+J). Οι πίνακες, τα διαγράμματα, οι αντιδράσεις και οι εξισώσεις προτείνεται να στοιχίζονται στο κέντρο της σελίδας ή της γραμμής, όπου αναφέρονται (Center, ctrl+E).

Δ. Περιθώρια Σελίδων (Margins)

Τα περιθώρια θα πρέπει να έχουν οριστεί σε όλες τις αναφορές στην επιλογή Κανονικά (Normal): Αριστερά και Δεξιά: **1.25"** και Πάνω και Κάτω: **1.00"**

Ε. Εκτύπωση Αναφοράς

Συστήνεται, για οικονομία, μείωση του όγκου των εντύπων που παράγετε και πρωτίστως για την ελαχιστοποίηση της επιβάρυνσης του περιβάλλοντος, η αναφορά να εκτυπώνεται χρησιμοποιώντας και τις δύο όψεις των φύλλων Α4, εκτός από περιπτώσεις που απαιτείται να υπάρχει κενή σελίδα, όπως για παράδειγμα, η εσωτερική σελίδα του εξωφύλλου.

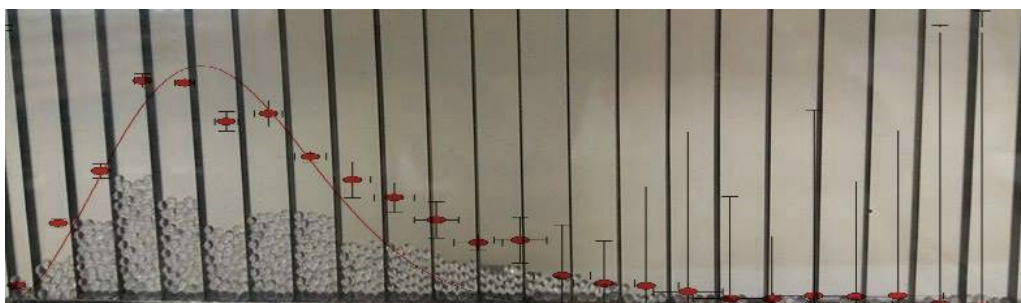
Ζ. Βιβλιοδεσία

Οποιοσδήποτε τρόπος βιβλιοδεσίας είναι αποδεκτός, με μοναδική εξαίρεση τη χρήση συνδετήρα. Σε περίπτωση που οι αναφορές συρράπτονται συστήνεται να παραδίδονται εντός ζελατίνας, ώστε να είναι λιγότερο πιθανή η όποια ακούσια φθορά τους, κατά την παράδοση και διόρθωσή τους.



ΤΙΤΛΟΣ ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑΚΗΣ ΑΣΚΗΣΗΣ

[Υπότιτλος (αν υπάρχει)]



ΟΜΑΔΑ Χ (Χ : αριθμός ομάδας)

Βασίλειος Παπαδημητρίου^{α,1}, Νικόλαος Στρατηγάκης^{α,2}, Δημήτριος Άγγλος^{α,3}

^α Εργαστήριο Φυσικοχημείας, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστημιούπολη Ηρακλείου, Βασιλικά – Βούτες 70013, Πανεπιστήμιο Κρήτης

¹bpapadim@uoc.gr; ²stratign@uoc.gr; ³anglos@uoc.gr

Μεταπτυχιακός/ή Βοηθός :

Εξώφυλλο

Περιέχει τον τίτλο της άσκησης, την ημερομηνία διεξαγωγής της, τον υπεύθυνο μεταπτυχιακό βοηθό της άσκησης, την ημερομηνία παράδοσης, την ομάδα (π.χ. Α1), τα ονόματα των συγγραφέων (με τον Α.Μ.) και τον κοινό τους σύνδεσμο (affiliation), με το Τμήμα Χημείας του Πανεπιστημίου Κρήτης. Το εξώφυλλο πρέπει να είναι οργανωμένο άρτια και μπορεί να περιλαμβάνει μία περιγραφική για την άσκηση εικόνα (graphical abstract).

Υπόδειγμα Εργαστηριακής Αναφοράς

(Τίτλος Εργαστηριακής Άσκησης)

Περίληψη (Μία έως δύο παράγραφοι)

Σύντομα, περιεκτικά και με ακρίβεια, αποφεύγοντας μη ουσιαστικές λεπτομέρειες, οι συγγραφείς περιγράφουν το αντικείμενο του πειράματος και τη μέθοδο που χρησιμοποιήθηκε, αναφέρουν την πειραματική διάταξη, τα μεγέθη που μετρήθηκαν και τις συνθήκες των μετρήσεων και συνοψίζουν το/τα κύριο/α αποτέλεσμα/τα ή συμπέρασμα/τα της άσκησης. Το συγκεκριμένο τμήμα της αναφοράς είναι ιδιαίτερα σημαντικό, καθώς βοηθάει τους συγγραφείς να οργανώσουν το πλαίσιο σύνταξης και τη δομή της αναφοράς ενώ δίδει στον αναγνώστη συνοπτικά τη συνολική εικόνα της εργασίας. Ως εκ τούτου συστήνεται η περίληψη να συγγράφεται εξαρχής (πριν τη συγγραφή του κυρίως κειμένου).

1. Σκοπός Πειράματος

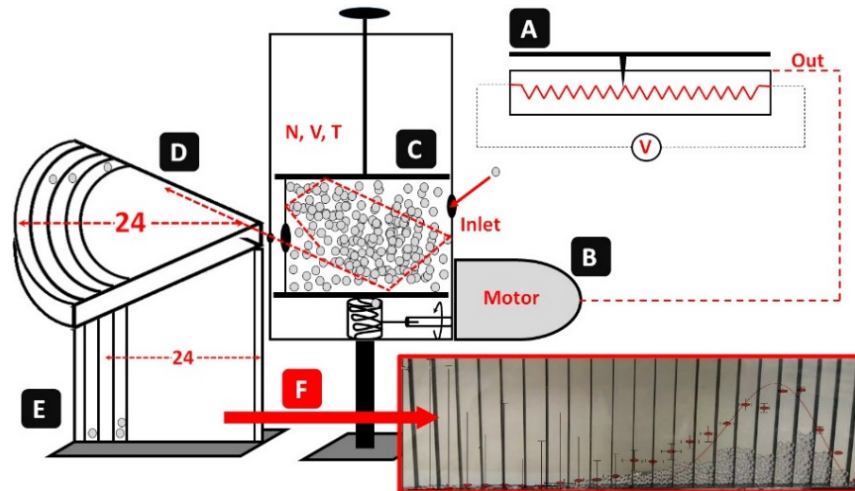
Στη συγκεκριμένη ενότητα της αναφοράς οι συγγραφείς καλούνται να περιγράψουν εν συντομία το αντικείμενο και το σκοπό της άσκησης παρουσιάζοντας τη λογική της μεθόδου και των μετρήσεων. Με τον τρόπο αυτό προσελκύουν το ενδιαφέρον του αναγνώστη και κοινωνούν στον επιστημονικό κόσμο γιατί είναι σημαντική η εργασία τους.

2. Πειραματικό Μέρος

Στο Πειραματικό Μέρος παρατίθενται αναλυτικά η πειραματική διάταξη¹ (περιγραμματική απεικόνιση, block diagram), περιγράφεται λεπτομερώς η πειραματική διαδικασία και οι συνθήκες του πειράματος ενώ παρατίθεται το

¹ Απαιτείται αναφορά στα επί μέρους όργανα, που χρησιμοποιούνται στην πειραματική διαδικασία και τα χαρακτηριστικά τους, π.χ. «χρησιμοποιήθηκε πηγή ακτινοβολίας λέιζερ He-Ne συνεχούς λειτουργίας, ισχύος 10 mW, που εκπέμπει στα 632.8 nm (κατασκευαστής: Melles-Griot)»

απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο στο οποίο στηρίζεται το πείραμα, π. χ., νόμοι φυσικής ή χημείας και οι σχετικές μαθηματικές εκφράσεις που χρησιμοποιήθηκαν για την ανάλυση των αποτελεσμάτων. Όπου χρειάζεται δίδεται αναφορά στη βιβλιογραφία.²



Σχήμα 1. Περιγραμμάτικη απεικόνιση της διάταξης προσομοίωσης που χρησιμοποιήθηκε για τον προσδιορισμό της κατανομής ταχυτήτων κατά Maxwell, σε ιδανικό αέριο. [1]

Επιπλέον, στο συγκεκριμένο τμήμα παρατίθενται ενδεχόμενα πειράματα ελέγχου και τροποποιήσεις της πειραματικής διάταξης και/ή διαδικασίας εξηγώντας το λόγο που διενεργήθηκαν και το σκοπό τους. Ιδιαίτερη προσοχή πρέπει να δοθεί στο γεγονός ότι στο πειραματικό μέρος ΔΕΝ παρατίθενται αποτελέσματα.

3. Αποτελέσματα

Επίσης, παρουσιάζονται οι μέθοδοι επεξεργασίας και ανάλυσης των πειραματικών δεδομένων με λεπτομερή αναφορά στα πειραματικά σφάλματα και την επίδρασή αυτών στην ακρίβεια των μετρήσεων και των υπολογισμών. Η ενότητα αυτή αποτελεί το κυριότερο τμήμα της αναφοράς, όπου οι συγγραφείς παραθέτουν με ακριβή και κατανοητό, για τον αναγνώστη, τρόπο τα δεδομένα από τις πειραματικές μετρήσεις (raw data), τις μεθόδους επεξεργασίας και ανάλυσης των πειραματικών δεδομένων

² Δηλαδή, πού ευρίσκονται οι οδηγίες που ακολουθήσαμε, π.χ. «η πειραματική διαδικασία που ακολουθήσαμε περιγράφεται στο εγχειρίδιο των εργαστηριακών ασκήσεων»

και λεπτομερή αναφορά στα πειραματικά σφάλματα και την επίδρασή αυτών στην ακρίβεια των μετρήσεων και των υπολογισμών (ανάλυση σφάλματος).

Πειραματικές μετρήσεις

Στην υποενότητα αυτή παρουσιάζονται τα πειραματικά δεδομένα υπό μορφή πινάκων ή φασμάτων. Οι πίνακες πρέπει να είναι κατάλληλα οργανωμένοι και ευανάγνωστοι, εισάγονται με παραπομπή εντός του κειμένου, αριθμούνται κατ' αύξουσα σειρά (Πίνακας 1) ενώ το περιεχόμενό τους δίδεται με τη μορφή κεφαλίδας (μαζί με την αρίθμηση ακριβώς πάνω από τον πίνακα). Είναι σημαντικό κάθε πίνακας να έχει ένα χαρακτηριστικό τίτλο, ο οποίος αναφέρεται στα πειραματικά δεδομένα που εμπεριέχονται σ' αυτόν. Κάθε στήλη πρέπει να περιγράφει με σαφήνεια την ποσότητα, που μετράται ή υπολογίζεται καθώς και τις αντίστοιχες μονάδες. Επίσης πρέπει να σημειώνονται οι σχετικές πειραματικές συνθήκες/παράμετροι, ώστε ο αναγνώστης να έχει ολοκληρωμένη εικόνα των μετρήσεων. Επεξηγήσεις των περιεχομένων του πίνακα, ώστε να μην υπάρχουν επαναλήψεις εντός του πίνακα, αλλά και για να περιοριστεί το περιεχόμενο των κελιών, δίνονται, κατόπιν παραπομπής εντός του πίνακα, ως υποσημείωση στον πίνακα (κάτω μέρος του πίνακα).

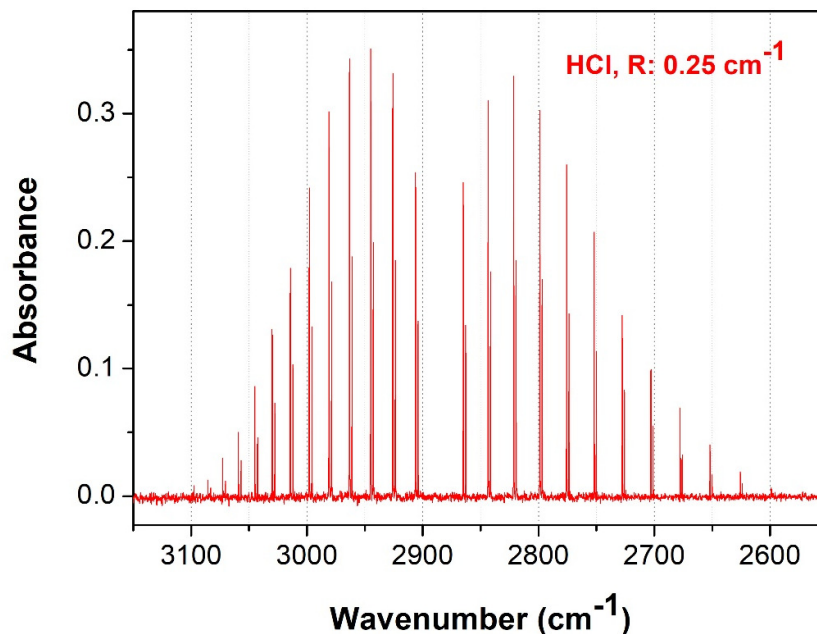
Πίνακας 1. Ενεργειακές καταστάσεις β-καροτένιου^α

Κατάσταση	Συμμετρία ^β	Ενέργεια / cm ⁻¹
Θεμελιώδης		
S ₀	¹ A _g	0
Διεγερμένες (singlet)		
S ₁	¹ A _g	14300
S ₂	¹ B _u	20400
S ₃	¹ B _u	33500
Διεγερμένες (triplet)		
T ₁		6400
T ₂		14500
T ₃		25500

^α Αναφορές {2, 3}

^β Η συμμετρία των καταστάσεων δίδεται με βάση τις αντίστοιχες ΜΑΠ (μη αναγώγιμες αναπαράστασεις) της ομάδας συμμετρίας σημείου C_{2h} .

Στην περίπτωση που τα πρωτογενή δεδομένα που συλλέγονται είναι φάσματα, τότε παρουσιάζονται τα φάσματα (Διάγραμμα 1) με τις κατάλληλες επεξηγήσεις (άξονες y , x) και, όπου χρειάζεται, ακολουθούμενα από τους σχετικούς πίνακες.



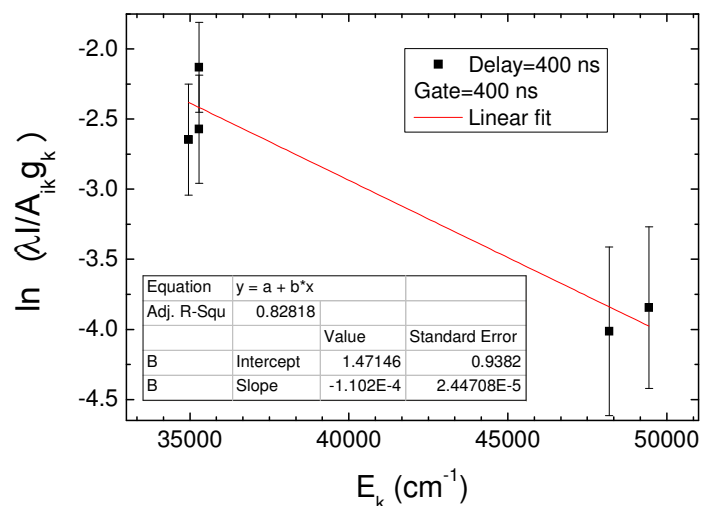
Διάγραμμα 1. Φάσμα απορρόφησης υπέρυθρου (IR) μίγματος αέριου υδροχλωρίου σε ήλιο (5 % HCl σε He, $p = 100$ Torr). Το φάσμα αντιπροσωπεύει τη μέση τιμή, 100 διαδοχικών σαρώσεων και έχει καταγραφεί με διακριτική ικανότητα $R = 0.25$ cm^{-1} . Διακρίνονται οι κορυφές του H^{35}Cl , καθώς και αυτές του H^{37}Cl μετατοπισμένες σε μικρότερες τιμές συχνότητας (κυματαρίθμου) οι οποίες εμφανίζουν χαμηλότερη απορροφητικότητα που αντανακλά τη σχετική αφθονία των ισωτόπων του χλωρίου ($^{35}\text{Cl}:^{37}\text{Cl} = 3:1$).

Επεξεργασία δεδομένων, υπολογισμοί

Απαραίτητα στην παρούσα υποενότητα παρουσιάζεται, στοιχειοθετημένα με ένα παράδειγμα υπολογισμών, η οποία επεξεργασία πραγματοποιείται στα δεδομένα (αριθμητικές μετατροπές ή μετατροπές μονάδων και υπολογισμοί) ώστε να προκύψουν τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται. Γενικά δίδεται ένα αριθμητικό παράδειγμα από κάθε στάδιο υπολογισμού με σαφή αναφορά στη βασική ή τις βασικές σχέσεις, που χρησιμοποιούνται, όπως (αν) αυτές έχουν περιγραφεί στην

ενότητα 1 ή 2. Εφόσον ζητηθεί παρουσιάζονται επιπλέον οι αποδείξεις των σχετικών εξισώσεων που χρησιμοποιούνται στους υπολογισμούς ή παρατίθεται τεκμηριωμένη αναφορά στη βιβλιογραφία.

Στην παρούσα υποενότητα συμπεριλαμβάνονται επίσης, αριθμημένα τα διαγράμματα που κατασκευάστηκαν για την απεικόνιση των φαινομένων που μελετήθηκαν και των τιμών των ιδιοτήτων που μετρήθηκαν. Τα διαγράμματα εισάγονται περιγραφικά στο κείμενο με κατάλληλη παραπομπή (Διάγραμμα 2), αλλά όλα τα περιεχόμενα του διαγράμματος θα πρέπει να περιγράφονται συνοπτικά σε κατάλληλο υπότιτλο (λεζάντα) του διαγράμματος, ώστε ο αναγνώστης να αντιλαμβάνεται εύκολα τη συνολική εικόνα και πληροφορία των όσων απεικονίζονται, χωρίς να χρειάζεται να ανατρέξει στο κείμενο (stand-alone plot). Στους άξονες σημειώνονται τα αντίστοιχα μεγέθη και οι μονάδες τους. Η όποια περαιτέρω επεξήγηση περιγράφεται αναλυτικά εντός του κειμένου. Όπου απαιτείται υποδεικνύονται τα αντίστοιχα σφάλματα (βλ. π.χ. Διάγραμμα 2).



Διάγραμμα 2. Διάγραμμα Boltzmann για τον υπολογισμό της θερμοκρασίας πλάσματος. Χρησιμοποιούνται δεδομένα από τις φασματικές γραμμές εκπομπής πλάσματος σχηματιζόμενου κατά τη φωτοαποδόμηση με παλμικό λέιζερ δείγματος στερεού μολύβδου (Pb) και στοιχεία από την ιστοσελίδα ατομικών δεδομένων του NIST [4]. $\lambda_{LASER} = 1064 \text{ nm}$, $\tau_{LASER} = 10 \text{ ns}$.

Ανάλυση σφαλμάτων

Η ενότητα αυτή είναι από τις σημαντικότερες της εργαστηριακής αναφοράς καθώς μέσω της ανάλυσης των πειραματικών σφαλμάτων διαπιστώνεται και τεκμηριώνεται η αξιοπιστία των μετρήσεων και των υπολογισμών. Ειδικότερα θα πρέπει να αναφέρεται και να αιτιολογείται η φύση των σφαλμάτων (τυχαία ή συστηματικά) και το όριο εμπιστοσύνης που εκφράζουν ενώ θα πρέπει να δίδονται οι υπολογισμοί διάδοσης του σφάλματος μέσω των διαφόρων υπολογισμών κατά την επεξεργασία των πρωτογενών δεδομένων.

Λεπτομερείς πληροφορίες παρουσιάζονται στο Κεφ. Ι του εγχειριδίου ασκήσεων Φυσικοχημείας [5] και σε σχετικά συγγράμματα [6, 7].

4. Ανάλυση-συζήτηση Αποτελεσμάτων – Ασκήσεις

Στο συγκεκριμένο τμήμα της αναφοράς σχολιάζονται τα αποτελέσματα και συγκρίνονται, είτε μεταξύ τους, είτε με αντίστοιχα της βιβλιογραφίας όσον αφορά την ακρίβεια ή/και τη φυσική τους σημασία και προτείνονται βελτιώσεις στην πειραματική διαδικασία. Επιθυμητή είναι η κατασκευή συνοπτικού πίνακα εφ' όσον υπάρχουν περισσότερα του ενός αποτελέσματα. Η παρουσίαση των αποτελεσμάτων ως προς τις αριθμητικές τους τιμές πρέπει απαραίτητα να γίνεται με τα σωστά σημαντικά ψηφία και να συμπεριλαμβάνεται το πειραματικό σφάλμα (το οποίο πρέπει να λαμβάνεται υπ' όψιν και κατά τη σύγκριση των αποτελεσμάτων). Επίσης πρέπει να παρατίθενται οι όποιες σχετικές με τα αποτελέσματα και την ερμηνεία τους, πειραματικές παρατηρήσεις, που θα βοηθήσουν τον αναγνώστη να εκτιμήσει την ποιότητα της δουλειάς των συγγραφέων.

Τέλος, στο τμήμα αυτό συμπεριλαμβάνονται οι ζητούμενες, για το εκάστοτε εργαστηριακό πείραμα, ασκήσεις, που μπορούν να τις βρουν όλα τα μέλη των ομάδων στο overview κάθε άσκησης, στην ιστοσελίδα του Εργαστηρίου στο e-class.

5. Συμπεράσματα

Στο τμήμα των συμπερασμάτων, οι συγγραφείς, παρουσιάζουν τα κύρια συμπεράσματα που εξήχθησαν από το πείραμά τους και βοηθούν τον αναγνώστη να εστιάσει στα σημαντικά ευρήματα της εργασίας τους.

6. Βιβλιογραφία

Η βιβλιογραφία αποτελεί ακριβή αναφορά στις πηγές στοιχείων που χρησιμοποιήθηκαν στη σύνταξη της εργαστηριακής αναφοράς. Δίδεται με ακρίβεια στο τέλος της αναφοράς, με την αντίστοιχη παραπομπή εντός του κειμένου και βοηθάει τον αναγνώστη να αντιστοιχίσει την όποια δήλωση των συγγραφέων εντός του κειμένου, με το επιστημονικό βιβλίο (textbook), ηλεκτρονικό σύνδεσμο, επιστημονικό εγχειρίδιο ή επιστημονική δημοσίευση που χρησιμοποιήθηκαν. Προσοχή η βιβλιογραφία έχει συγκεκριμένο και ακριβή τρόπο γραφής για βιβλία, άρθρα σε επιστημονικά περιοδικά και ιστοσελίδες (αναφέρονται οι συγγραφείς, ο τίτλος περιοδικού ή βιβλίου, ο εκδοτικός οίκος όταν πρόκειται για βιβλίο, ο τόμος, η σελίδα και το έτος δημοσίευσης, ο σύνδεσμος σε ιστοσελίδα) και πρέπει να δίνεται πάντα με παραπομπή (αριθμητική κατά προτίμηση, π.χ. [3,4]) εντός του κειμένου.

1. G. D. Peckham and McNaught, I. J., Applications of Maxwell-Boltzmann distribution diagrams *J. Chem. Educ.*, **1992**, *69*, 554.
2. K. Gaier, A. Angerhofer and H.C. Wolf, The lowest excited electronic singlet states of all-trans β -carotene single crystals, *Chem. Phys. Lett.* **187**, 103-109 (1991).
3. T. Buckup, T. Lebold, A. Weigel, W. Wohlleben, M. Motzkus, Singlet versus triplet dynamics of β -carotene studied by quantum control spectroscopy, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* **180** 314–321 (2006).
4. URL: http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html
5. Θ. Κιτσόπουλος, Α. Ρίζος, Ν. Στρατηγάκης, «Εργαστηριακές Ασκήσεις Φυσικοχημείας», Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας, Ηράκλειο 2008.
6. D.P. Schoemaker, C.W. Garland, J.W. Nibler “Experiments in Physical Chemistry”, Mc Graw Hill, New York, 2009
7. R. N. Zare, Spencer, B. H., Springer, D. S. and Jacobson, M. P., *Laser Experiment for Beginners*, University Science Books, Sausalito, California: **1995**

7. Συνεισφορά Μελών Ομάδας

Στο τμήμα αυτό της αναφοράς αναφέρεται αναλυτικά η συνεισφορά των μελών της ομάδας περιγράφοντας αναλυτικά τα τμήματα της αναφοράς που συνεισέφερε κάθε μέλος (επί τοις εκατό (%) συνεισφορά).

Παραρτήματα

Η αναφορά μπορεί να περιέχει παραρτήματα (στο τέλος της αναφοράς), στα οποία οι συγγραφείς μπορούν να συμπεριλάβουν πίνακες, δεδομένα ή διαγράμματα, που η συνδρομή τους μπορεί να δράσει επικουρικά στην κατανόηση ή την επεξήγηση φαινομένων ή ενδέχεται να αφορούν στο ενδιαφέρον μίας πιο ειδικευμένης επιστημονικής κοινότητας, αλλά δεν αξιολογούνται απαραίτητα, ώστε να συμπεριληφθούν στο κύριο σώμα της αναφοράς.