

# A50: Absorptionsspektren von Farbstoffen

Gruppe:

Betreuer:

20. April 2024

In diesem Versuch werden die Absorptionsspektren verschiedener Cyanfarbstoffe untersucht und aus den Peaks zwischen 400-800nm die Anzahl der ungesättigten Kohlenstoffe der Ketten bestimmt. Die Messergebnisse werden mit theoretischen Ergebnissen aus dem Teilchen im Kasten Modell gegenübergestellt.

# 1 Einleitung

Nach Absorption von Photonen im sichtbaren und ultravioletten Spektralbereich (hier 400-800nm) kann es zur Anregung von Valenzelektronen in einen elektronisch angeregten Zustand kommen.

Mit einem Spektrometer wird eben diese Absorption gemessen, sodass ermittelt werden kann, welche Moleküle Licht einer bestimmten Wellenlänge absorbieren. Allgemein wird bei der Absorption das Verhältnis aus gemessener Lichtintensität  $I$  nach Passieren der Probe und einfallender Lichtintensität  $I_0$  gemessen. Mit dem Lambert-Beer'schen Gesetz kann das Verhältnis der Extinktionskoeffizienten  $\epsilon$  beschrieben werden. Eine theoretische Vorhersage kann mithilfe des Teilchenim-Kasten-Modell erfolgen.

# 2 Versuchsdurchführung

Für das Experiment wurden verschiedene Cyanidfarbstoffe in einem UV/VIS/NIR-Spektrometer Perkin Elmer Lambda 19 gemessen. Vor Beginn einer Probenmessung wurde eine Basislinie gemessen zur Vorbeugung von Ozonbildung. Die Proben wurden in transparenten Küvetten vorbereitet und vorsichtig in das Spektrometer gegeben. Das Gehäuse des Spektrometers wurde geschlossen und nach Einstellung des Messbereichs und der Genauigkeit in der Software führte das Spektrometer die Messung automatisch durch.

# 3 Strukturformeln

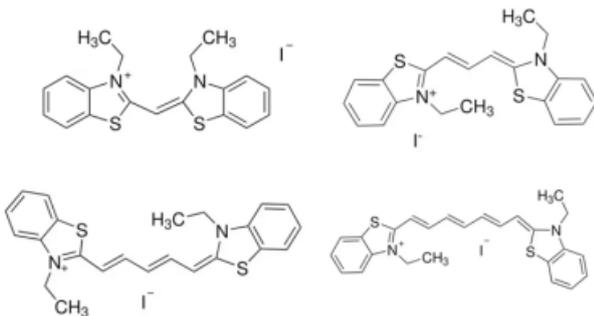


Abbildung 1: Strukturformeln: DTI o. l., DTDCI o. r., DTCI u. l., DTTCI u. r.

Molekül	k	j
DTI	0	2
DTCI	1	3
DTDCI	2	4
DTTCI	3	5

Tabelle 1: k und j Werte der einzelnen Moleküle

# 4 Spektren

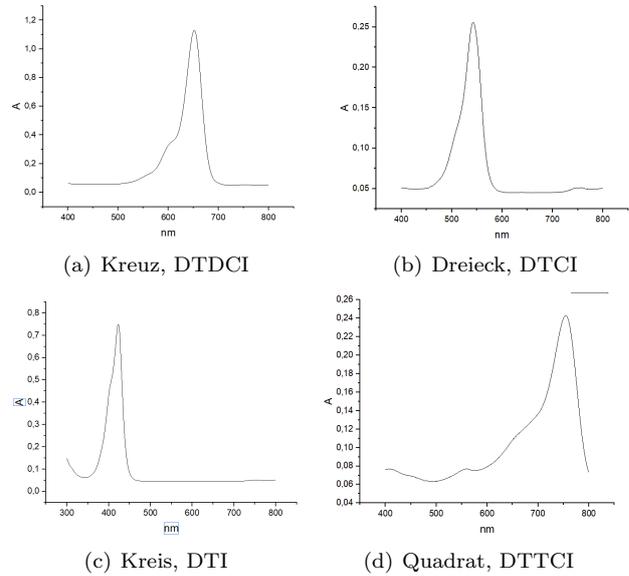


Abbildung 2: Spektren

# 5 Auswertung

## 5.1 Rohdaten

System	$\lambda_{max}/nm$	OD	$\lambda_1/nm$	$\lambda_2/nm$
Kreuz	652	1,130	629	669
Dreieck	542	0,256	512	563
Kreis	423	0,751	397	434
Quadrat	755	0,243	698	782

Tabelle 2: Messwerte

## 5.2 Berechnete Größen

Die folgenden Gleichungen wurden genutzt zur Berechnung der Werte in der nachfolgenden Tabelle.

$$\Delta E = \frac{h \cdot c}{\lambda_{max}} \quad (1)$$

$$\Delta \nu = \frac{c}{\lambda_1} - \frac{c}{\lambda_2} \quad (2)$$

System	$\Delta E/10^{-19}J$	$\Delta \nu/THz$
Kreuz	3,04	28,50
Dreieck	3,665	53,04
Kreis	4,696	64,38
Quadrat	2,631	46,14

Tabelle 3: Absorbierte Energie und Differenz der Frequenzen

### 5.3 Zuordnung

System	Molekül
Kreuz	DTDCI
Dreieck	DTCI
Kreis	DTI
Quadrat	DTTCI

Tabelle 4: Zuordnung: Probe zu Molekül

Es wird davon ausgegangen das sich die absorbierte Energie  $\Delta E$  mit zunehmender Größe des  $pi$ -Elektronensystems verringert, da weniger Energie benötigt wird um die Elektronen anzuregen. Daraus folgt, dass DTI (Kreis) am meisten Energie absorbiert ( $\Delta E = 4,696 \cdot 10^{-19} J$ )(Tabelle 3) und dann mit aufsteigender Länge die absorbierte Energie abnimmt.

## 6 Teilchen im Kasten

### 6.1 Theoretische Vorhersage

Molekül	j	$n_H$	$n_L$	$L/pm$
DTI	2	3	4	864
DTCI	3	4	5	1152
DTDCI	4	5	6	1440
DTTCI	5	6	7	1728

Tabelle 5: Theoretische Werte für die Farbstoffe

Die theoretische Vorhersage erfolgt mithilfe der Formel

$$\Delta E = \frac{h^2}{8mL} \cdot (n_L^2 - n_H^2). \quad (3)$$

Der Wert für L errechnet sich aus:

$$L = (2n + 2) \cdot d \quad (4)$$

### 6.2 Vergleich Experiment und Theorie

Die Ergebnisse aus dem Experiment stimmen gut mit den Theoriewerten überein. Dabei ist zu beachten, dass die Wellenlänge und die Energie umgekehrtproportional zueinander sind, das führt dazu, dass die Abweichungen in der Energie und Wellenlänge unterschiedlich aussehen.

## 7 Lambert-Beer-Gesetz

Die Berechnung für den maximalen molaren Absorptionskoeffizienten erfolgt über einen großen Anteil von Naturkonstanten

$$\frac{N_A}{6 \cdot \ln(10) \cdot c \varepsilon_0 h^2} = 1,477 \cdot 10^{93} \frac{1}{mol A^2 m^2 kgs}. \quad (5)$$

Die Gleichung

$$\varepsilon_{max} = \frac{\int_{\nu_2}^{\nu_1} \varepsilon(\nu) d\nu}{\Delta\nu} \quad (6)$$

enthält außerdem den integralen Absorptionskoeffizienten  $A$ , der das Integral über die Bande beschreibt und gleichgesetzt werden kann mit [1]

$$A = \int_{\nu_2}^{\nu_1} \varepsilon(\nu) d\nu = \frac{N_A}{6 \cdot \ln(10) \cdot c \varepsilon_0 h^2} \cdot \Delta E |\mu_{fi}|^2. \quad (7)$$

Somit ergibt sich

$$\varepsilon_{max} = \frac{1,477 \cdot 10^{93} \frac{1}{mol A^2 m^2 kgs} \cdot \Delta E \cdot |\mu_{fi}|^2}{\Delta\nu}. \quad (8)$$

Für das Quadrat des Übergangdipols gilt:

$$\mu_{fi} = -e \left( \frac{2}{L} \right) \frac{(2n+1)^2 - 1}{(2n+1)^2} \approx - \left( \frac{2eL}{\pi^2} \right) \quad (9)$$

Molekül	$\Delta E/J$	$ \mu_{fi} /Cm$	Integral	$\varepsilon_{max}$
DTDCI	$3,2 \cdot 10^{-19}$	$-4,68 \cdot 10^{-29}$	$1,04 \cdot 10^{18}$	$3,63 \cdot 10^4$
DTTCI	$2,6 \cdot 10^{-19}$	$-5,61 \cdot 10^{-29}$	$1,22 \cdot 10^{18}$	$2,64 \cdot 10^4$

Tabelle 6: Bestimmung von  $\varepsilon_{max}$

Zur Bestimmung der Konzentration wurde die Formel

$$c = \frac{OD_{max}}{d \cdot \varepsilon_{max}} \quad (10)$$

verwendet, mit  $OD_{max}$  aus Tabelle 2,  $\varepsilon_{max}$  aus Tabelle 6 und  $d = 1cm$  als Länge der Küvette.

Molekül	c (mol/L)
DTDCI	$3,11 \cdot 10^3$
DTTCI	$9,20 \cdot 10^3$

Tabelle 7: Bestimmung der Konzentration

## 8 Zusatzaufgabe

Naturkonstanten:

- Plank-Konstante:  $h = 6,63 \cdot 10^{-34} J \cdot s$  [2]
- Lichtgeschwindigkeit:  $c = 2,998 \cdot 10^8 \frac{m}{s}$
- Masse eines Elektrons:  $m_e = 9,12 \cdot 10^{-31} kg$
- Avogadrokonstante:  $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \frac{1}{mol}$
- Permittivität:  $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \frac{C^2}{m \cdot J}$  [3]
- Energie eines Elektrons:  $e = 1,6 \cdot 10^{-19} J$

## 9 Gute wissenschaftliche Praxis

Wissenschaftliche Integrität ist die Basis für das Vertrauen der Öffentlichkeit in die Forschung. Am KIT verpflichtet die Satzung zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis alle Mitglieder zur Einhaltung der Grundprinzipien guter wissenschaftlicher Praxis. Hierzu zählt die Angabe aller verwendeten Hilfsmittel. Für die Erstellung dieses Protokolls wurden neben den im Literaturverzeichnis genannten Quellen folgende Hilfs-

mittel verwendet (Bitte ankreuzen, sofern verwendet.):

Keine Verwendung weiterer Hilfsmittel

Chatgpt oder äquivalente Programme:

Altprotokolle: Musterprotokoll des Praktikums, Protokoll von Gruppe 06, Protokoll von Gruppe 16 WS22/23

(Vorlesungs-)Skripte: Praktikumsversuche im Plenum von PD Dr. Höfener

Nicht wissenschaftlich zitierfähige Internetquellen, z. B. Wikipedia:

Korrektur- und sonstige Hilfen:

## 10. Literatur

- (1) Atkins de Paula, K., *Physikalische Chemie, Sechste Auflage*; Wiley-VCH: 2022, S. 544 f.
- (2) Atkins de Paula, K., *Physikalische Chemie, Sechste Auflage*; Wiley-VCH: 2022, S. 310.
- (3) Atkins de Paula, K., *Physikalische Chemie, Sechste Auflage*; Wiley-VCH: 2022, S. 46.