

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Ziel des Versuchs</b>	<b>1</b>
<b>2 Versuchsaufbau</b>	<b>1</b>
<b>3 Versuchsdurchführung</b>	<b>1</b>
<b>4 Auswertung</b>	<b>2</b>
4.1 Absorptionsspektren der Farbstoffe . . . . .	2
4.2 Teilchen-im-Kasten-Modell . . . . .	2
4.3 Abhängigkeit der Absorption von der Farbstoff-Konzentration . . . . .	6
<b>5 Diskussion</b>	<b>10</b>
5.1 Absorptionsspektren der Farbstoffe . . . . .	10
5.2 Teilchen-im-Kasten-Modell . . . . .	10
5.3 Abhängigkeit der Absorption von der Farbstoff-Konzentration . . . . .	11
5.4 Diskussion der Messmethoden . . . . .	11
<b>A Anhang</b>	<b>12</b>
A.1 Abbildungen . . . . .	12
A.2 Rohdaten . . . . .	14

# 1 Ziel des Versuchs

In diesem Versuch werden für drei Cyanin-Farbstoffe die Absorptionsspektren bestimmt. Mit Hilfe der Absorptionsspektren wird mit dem Teilchen-im-Kasten-Modell die effektiven Kastenlängen bestimmt. Anschließend werden für einen Farbstoff die Absorptionsspektren in Abhängigkeit der relativen Konzentration bestimmt.

# 2 Versuchsaufbau

Eine Glühlampe, eine Blende mit verschiedenen Lochgrößen, eine Sammellinse, ein Halter für eine Küvette mit Farbstofflösung und ein Lichtleiteradapter mit Lichtleiter wurden in dieser Reihenfolge auf einer optischen Bank montiert. Der Lichtleiter wurde mit einem USB-Spektrometer verbunden, das mit einem Laptop verbunden war. Das Spektrum wurde am Laptop von der Software Ocean View angezeigt. Außerdem gab es verschiedene Bechergläser und zwei Kolbenpipetten für Volumina von 100 bis 1000  $\mu\text{L}$  bzw. 1 bis 5 mL mit Einwegspitzen.

# 3 Versuchsdurchführung

Zu Beginn wurde das Spektrum von Ethanol aufgenommen, welches als Referenzspektrum genutzt wird. Dafür wurde eine Küvette mit Ethanol in der befestigt und die Glühlampe eingeschaltet. Die Helligkeit der Lampe, die Größe der Blende, die Position der Linse, der Probe und des Lichtleiteradapters wurden so angepasst, dass das auf dem Laptop angezeigte Spektrum möglichst den ganzen Messbereich ausgefüllt, aber sich auf jeden Fall innerhalb des Messbereichs befunden hat. Für den Rest des Versuchs wurden die Komponenten nicht mehr verschoben, und es wurde auch darauf geachtet, dass das Kabel zwischen Lichtleiteradapter und Laptop nicht bewegt wurde.

Danach wurde eine Lösung von blauem Farbstoff (1,1'-Diethyl-2,2'-carbocyaniniodid) in einer weiteren Küvette angerührt und in der Klemmhalterung befestigt. Im angezeigten Spektrum war zu sehen, dass der Farbstoff so konzentriert war, dass die Wellenlängen in einigen Bereichen komplett absorbiert wurden. Ohne den Versuchsaufbau zu verändern wurde das Spektrum am Laptop beobachtet und durch wiederholte Entfernung von ungefähr der Hälfte der in der Küvette vorhandenen Lösung und Hinzugabe von reinem Ethanol wurde die Lösung verdünnt, bis das Spektrum für jede Wellenlänge sichtbar war.

Mit dem Ocean View Programm wurden für das Spektrum 100 Einzelmessungen durchgeführt und in einem Ordner gespeichert.

Dieser Prozess wurde für den türkisen Farbstoff (1,1'-Diethyl-2,2'-dicarbocyanine iodide) und für den roten Farbstoff (1,1'-Diethyl-2,2'-cyanine iodide) wiederholt.

Die chemische Zusammensetzung der einzelnen Farbstoffe sind in Abb. 1 bis 3 dargestellt.

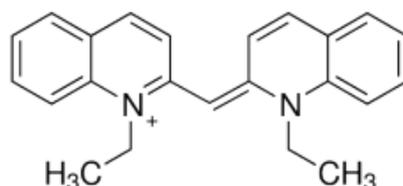


Abbildung 1: Rot: 1,1'-Diethyl-2,2'-cyanine [1]

Im zweiten Teil wurde der blaue Farbstoff genommen und wiederholt verdünnt, bis das Spektrum vom Referenzspektrum nicht mehr zu unterscheiden war. Dabei wurde in jedem Verdünnungsschritt von 3 mL blauer Lösung 1 mL entfernt und durch reinen Ethanol ersetzt. Bei jedem Verdünnungsschritt wurden wie zuvor 100 Einzelmessungen des Spektrums aufgenommen und abgespeichert.

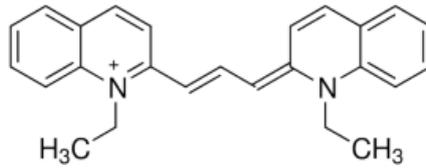


Abbildung 2: Blau: 1,1'-Diethyl-2,2'-carbocyanine [1]

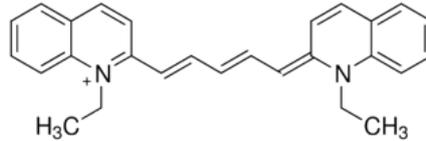


Abbildung 3: Türkis: 1,1'-Diethyl-2,2'-dicarbocyanine [1]

## 4 Auswertung

### 4.1 Absorptionsspektren der Farbstoffe

Die für jede Lösung jeweils 100 Einzelaufnahmen des Spektrums wurden gemittelt. Der Fehler ergibt sich dabei aus der Standardabweichung des Mittelwert. Da die so bestimmten Unsicherheiten auf das Spektrum sehr gering und kaum sichtbar sind, sind in Abb. 4 die Spektren in Abhängigkeit der Wellenlänge ohne Unsicherheiten dargestellt. Eine weiteres Diagramm der Spektren mit den zugehörigen Fehlern ist im Anhang in Abb. 10 zu sehen.

Der Absorptionsgrad  $A$  eines Farbspektrums berechnet sich mit

$$A_i = 1 - \frac{S_i}{S_0}, \quad (1)$$

wobei  $S_0$  für das Referenzspektrum und  $S_i$  für das Farbspektrum mit  $i = \{\text{blau, rot, türkis}\}$  steht.

Die Unsicherheiten berechnen sich dabei über Gaußsche Fehlerfortpflanzung mit

$$s_{A_i} = \sqrt{\left(\frac{s_{S_i}}{S_0}\right)^2 + \left(\frac{S_i}{S_0^2} s_{S_0}\right)^2}. \quad (2)$$

Die erhaltenen Absorptionsspektren sind in Abb. 5 dargestellt. Auch hier sind die Unsicherheiten so gering, dass sie kaum zu erkennen sind. Deswegen sind sie auch hier nicht mit eingezeichnet. In Anhang A sind in Abb. 11 die Absorptionsspektren mit Fehlern zu sehen.

Um die Wellenlängen zu finden, bei denen die Absorption maximal wird, wurde die Funktion `argmax` von `numpy` verwendet. Da es jeweils zwei erkennbare Maxima gab, wurden die Wellenlängen beider Maxima (ein globales und ein lokales) identifiziert. Die Maxima sind zusammen mit den Absorptionsspektren in Abb. 5 eingezeichnet. Die Wellenlängen  $\lambda_i$ , bei denen die Farbstoffe jeweils maximal absorbieren, sind in Tabelle 1 eingetragen.

### 4.2 Teilchen-im-Kasten-Modell

Die Energie  $E$  eines Photons ergibt sich aus

$$E = h\nu, \quad (3)$$

wobei  $h$  die Planckkonstante und  $\nu$  die Frequenz des Photons bezeichnen.

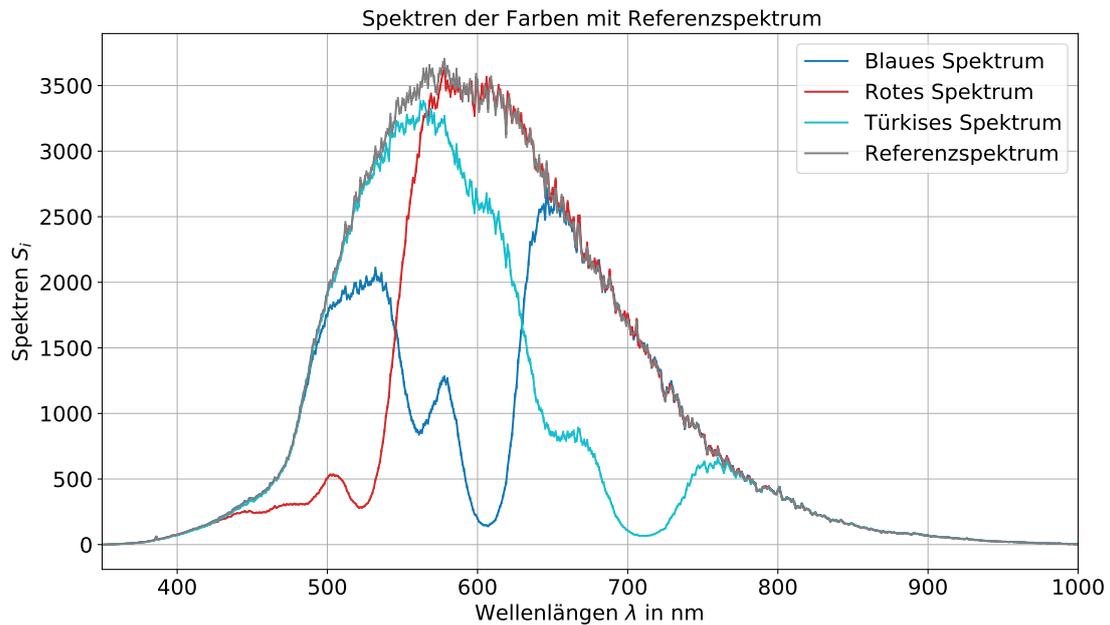


Abbildung 4: Mittelwerte der aufgenommenen Spektren der Lösungen mit blauer Farbe (blaue Linie), roter Farbe (rote Linie) und türkiser Farbe (türkise Linie) sowie ein Referenzspektrum von reinem Ethanol (graue Linie). Die Unsicherheiten sind hier nicht eingezeichnet, aber in Anhang A in Abb. 10 zu sehen.

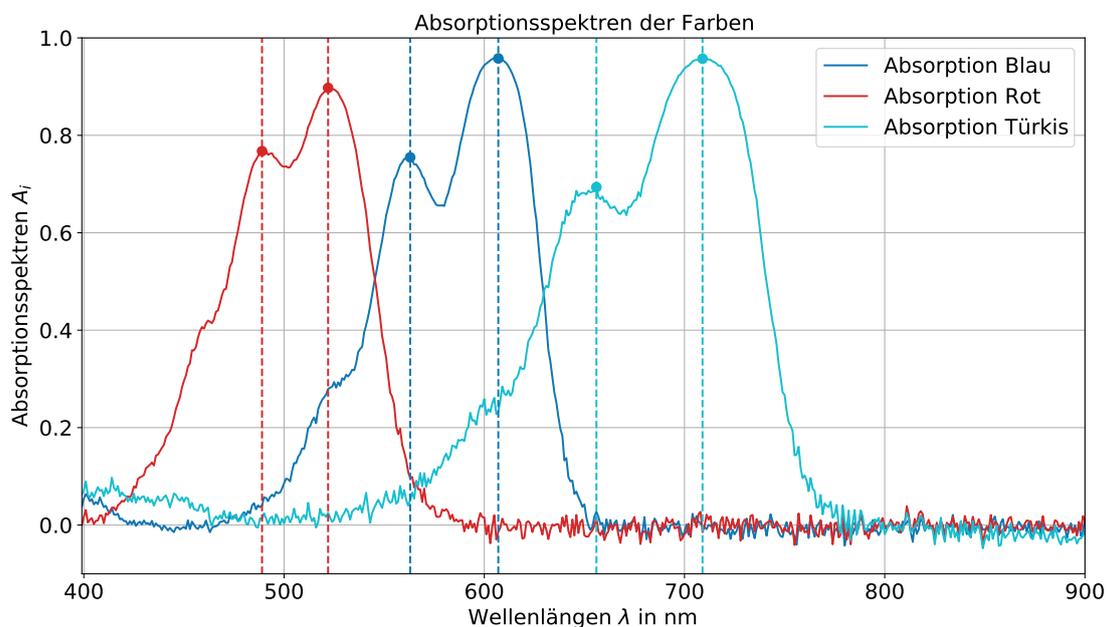


Abbildung 5: Absorptionsspektren der verschiedenen Farbstoffe. Die gefundenen Maxima der Absorption sind eingezeichnet und mit ihren zugehörigen Wellenlängen in Tabelle 1 eingetragen. Zur Übersichtlichkeit sind die Unsicherheiten auf die Absorption nicht mit eingetragen, die Absorptionsspektren mit Unsicherheiten sind in Anhang A in Abb. 11 zu sehen.

	$\lambda_{\max, \text{gl}}$ in nm	$\lambda_{\max, \text{lk}}$ in nm
Blau	607	563
Rot	522	489
Türkis	709	656

Tabelle 1: Wellenlängen der globalen (gl) und lokalen (lk) Maxima der Absorption für den blauen (blaue Linie), den roten (rote Linie) und den türkisen (türkise Linie) Farbstoff. Die Maxima zusammen mit den Absorptionsspektren sind in Abb. 5 eingezeichnet.

Innerhalb eines Potentialtopfs der Form

$$E_{\text{pot}}(x) = \begin{cases} \infty & \text{für } x < 0 \\ 0 & \text{für } 0 < x < L \\ \infty & \text{für } x > L, \end{cases} \quad (4)$$

der also die Länge  $L$  hat, lautet die Schrödingergleichung:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x) = 0, \quad (5)$$

wobei  $\hbar = h/2\pi$  die reduzierte Planckkonstante bezeichnet.

Die Lösung dieser Gleichung unter Berücksichtigung der Randbedingungen

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0$$

liefert die Quantisierungsbedingung

$$E_j = \frac{j^2\hbar^2}{8mL^2} = j^2 E_1, \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (6)$$

an die Energie, die Teilchen im Kasten haben kann. Hierbei bezeichnet  $m$  die Masse des Teilchens.

In diesem Versuch trifft das Licht, also Photonen verschiedener Frequenzen, auf den Farbstoff. Aus der Versuchsanleitung [1] ist bekannt, dass es pro Bindung auf der Kette zwischen den beiden N-Atomen ein  $\pi$ -Elektron gibt, das sich entlang der Kette frei bewegen kann. Für den blauen Farbstoff sind das also sechs Elektronen, für den roten vier und für den türkisen acht (siehe die chemische Zusammensetzung in Abb. 1 bis 3). Diese Elektronen sind die Elektronen, die sich durch die Kollision mit Photonen auf ein höheres Energieniveau bewegen können. Nach dem Pauliprinzip können sich immer nur zwei Elektronen auf einem Energiezustand befinden. Die Potentialtöpfe, die sich also für die verschiedenen Farbstoffe ergeben, sind in Abb. 6 dargestellt.

Wenn Photonen auf die Farbstoffe treffen, können sie ihre Energie abgeben und die Elektronen auf ein höheres Energieniveau heben. Die Photonen, die genau die Energie haben, die eines der obersten Elektronen auf ein höheres Energieniveau bringt, werden also beim Auftreffen auf den Farbstoff maximal absorbiert. Dabei gilt also mit Gleichung (3) für ein Farbstoff, bei dem ein Elektron von der Stufe  $j - 1$  auf die Stufe  $j$  gehoben wird

$$h\nu = |E_j - E_{j-1}|. \quad (7)$$

Aus der Quantisierungsbedingung in Gleichung (6) erhält man für den Energieunterschied der Energieniveaus

$$|E_j - E_{j-1}| = \frac{\hbar^2}{8mL^2} (2j - 1). \quad (8)$$

Durch Gleichsetzen von Gleichung (7) und Gleichung (8) und Umformen erhält man mit

$$L = \sqrt{\frac{\hbar^2 (2j - 1)}{8m h \nu}} \quad (9)$$

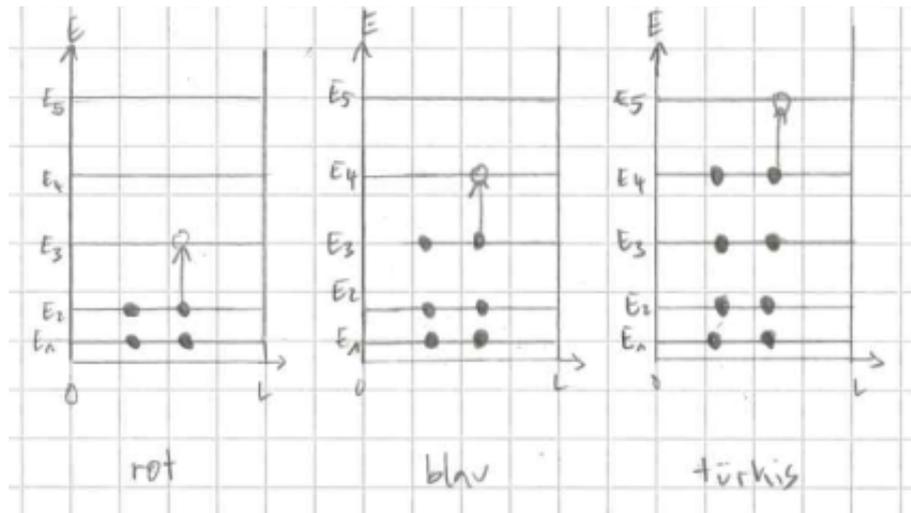


Abbildung 6: Skizze der Potentialtöpfe für rot, blau und türkis. Für jede Bindung (chemische Zusammensetzung in Abb. 1 bis 3) gibt es ein freies  $\pi$ -Elektron, von denen nach dem Pauliprinzip nur zwei auf einer Energiestufe sein können. Diese sind aus energetischen Gründen auf den untersten Stufen verteilt. Bei Anregung kann also nur ein Elektron der höchsten besetzten Stufe auf ein höheres Niveau gehoben werden.

einen Wert für die Kastenlänge. Mit dem Zusammenhang

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \quad (10)$$

für die Frequenz  $\nu$ , der Wellenlänge  $\lambda$  und der Ausbreitungsgeschwindigkeit (Lichtgeschwindigkeit)  $c$  des Photons erhält man aus Gleichung (9) mit

$$L = \sqrt{\frac{h(2j-1)\lambda_{\max}}{8mc}} \quad (11)$$

einen Wert für die Kastenlänge des Potentialtopfs in Abhängigkeit der Wellenlänge  $\lambda_{\max}$ , bei der das Licht maximal absorbiert wird. Hierfür wurde für  $\lambda_{\max}$  die Wellenlängen der großen Maxima  $\lambda_{\max, \text{ groß}}$  aus Abb. 5 und Tabelle 1 in Abschnitt 4.1 verwendet.

Die Anzahl der Bindungen  $n$  der Elektronen für die Farben sind

$$n_{\text{blau}} = 6 \quad n_{\text{rot}} = 4 \quad n_{\text{türkis}} = 8.$$

Da es immer zwei Elektronen auf einer Energiestufe gibt, und durch die Photonen jeweils eins der Elektronen auf dem höchsten Energieniveau auf das nächsthöhere Energieniveau gehoben wird, erhält man

$$j = \frac{n}{2} + 1 \quad (12)$$

für die die Stufe  $j$ , auf der sich dann das durch das Licht angeregte Elektron befindet. Man erhält also

$$j_{\text{blau}} = 4 \quad j_{\text{rot}} = 3 \quad j_{\text{türkis}} = 5, \quad (13)$$

und für die Kastenlängen ergibt sich dann entsprechend durch Einsetzen dieser Werte in Gleichung (11):

$$L_{\text{blau}} = 1,1 \cdot 10^{-9} \text{ m} \quad L_{\text{rot}} = 8,9 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad L_{\text{türkis}} = 1,4 \cdot 10^{-9} \text{ m}.$$

Die Unsicherheit auf die Kastenlänge ergibt sich hierbei mit

$$s_L = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{h(2j-1)}{8mc\lambda_{\max}}} s_{\lambda_{\max}}$$

durch Gaußsche Fehlerfortpflanzung. Da für die Wellenlängen der maximalen Absorption keine Unsicherheiten bekannt sind, konnte hier der Fehler auf die Kastenlängen nicht bestimmt werden.

In Abb. 7 sind die effektiven Kastenlängen  $L_i$  gegen die Anzahl der beteiligten Bindungen  $n$  aufgetragen. Auch wenn nur drei Datenpunkte vorliegen, ist ein linearer Zusammenhang deutlich zu erkennen. Deswegen wurde eine lineare Regression der Form  $L_i = mn + c$  durchgeführt. In Abb. 7 ist die erhaltene Ausgleichsgerade mit ihren Fehlergeraden miteingezeichnet. Die lineare Regression ergibt

$$\begin{aligned} m &= (1,254 \pm 0,010) \cdot 10^{-10} \text{ m} \\ c &= (3,87 \pm 0,06) \cdot 10^{-10} \text{ m.} \end{aligned} \tag{14}$$

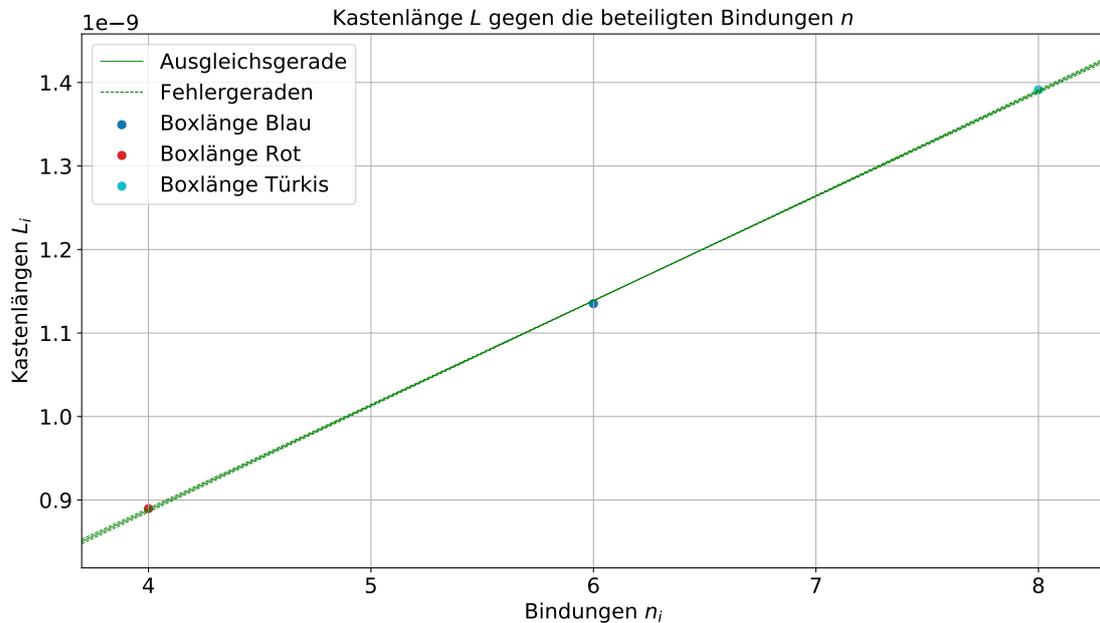


Abbildung 7: Auftragung der effektiven Kastenlänge  $L$  gegen die Anzahl der beteiligten Bindungen  $n$ . Eine lineare Regression der Form  $L_i = mn + c$  wurde durchgeführt und Ausgleichsgerade mitsamt Fehlergeraden wurde eingezeichnet. Die Bestwerte der Parameter stehen in Gleichung (14).

### 4.3 Abhängigkeit der Absorption von der Farbstoff-Konzentration

Wie schon in Abschnitt 4.1 wurde für jede Konzentration aus den 100 Messungen des Spektrums der Mittelwert gebildet und für die Unsicherheit die Standardabweichung des Mittelwerts verwendet. In Abb. 8 sind die Spektren der verschiedenen Konzentrationen dargestellt. Hier sind wieder die Fehler nicht eingezeichnet, um eine bessere Übersichtlichkeit zu erhalten. Ein Diagramm mit Fehlern ist in Anhang A in Abb. 12 zu sehen. Die erste Messreihe wurde mit  $(3,00 \pm 0,03)$  mL der Farblösung durchgeführt. Bei jedem Verdünnungsschritt wurden daraufhin  $(1,000 \pm 0,015)$  mL der Lösung entfernt und durch  $(1,000 \pm 0,015)$  mL Ethanol ersetzt. Die Fehler ergeben sich dabei aus Herstellerangaben [2].

Da bei jedem Verdünnungsschritt ein Drittel der Lösung entfernt und durch Ethanol ersetzt wurde, ergibt sich die Konzentration  $c_i$  einer Messung nach  $i$  Verdünnungsschritten aus

$$c_i = \left(\frac{2}{3}\right)^i c_0,$$

wobei  $c_0$  die Anfangskonzentration bezeichnet.

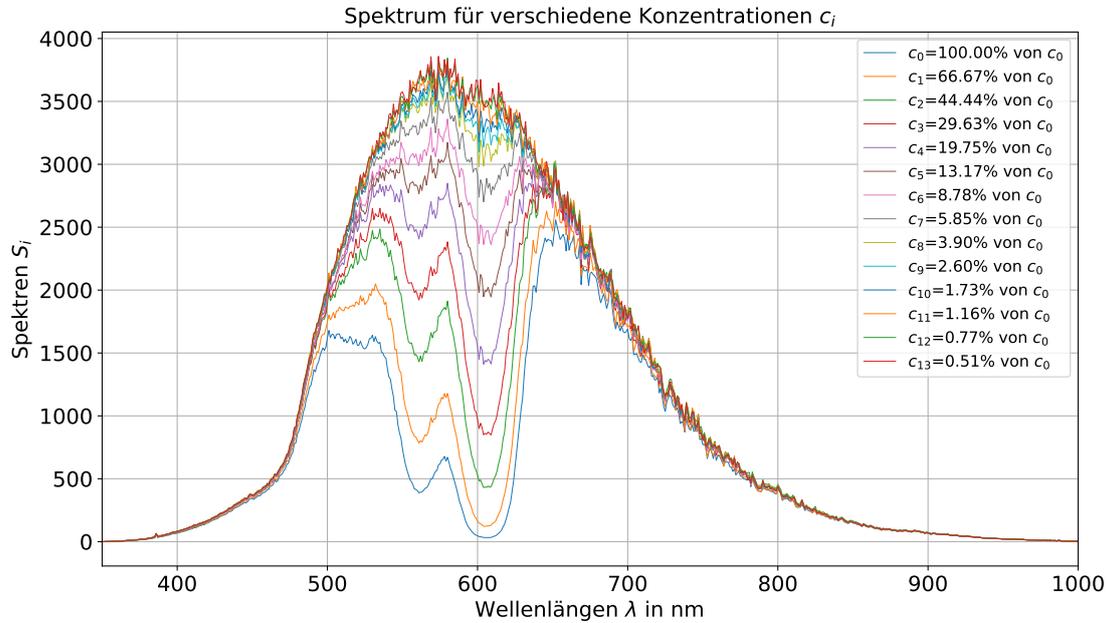


Abbildung 8: Spektren des blauen Farbstoffs bei verschiedenen Konzentrationen ohne Unsicherheiten.

Wie in Abschnitt 4.1 wurde mit Gleichungen (1) und (2) der Absorptionsgrad der in Tabelle 1 bestimmten Wellenlänge der maximalen Absorption  $\lambda_{\max, \text{gro\ss}}$  berechnet. Der Fehler auf den Absorptionsgrad ergibt sich dabei wieder wie in Gleichung (2) durch Gaußsche Fehlerfortpflanzung. Die Wellenlängen der maximalen Absorption wurde dabei so gewählt, dass an dieser Wellenlänge die größte Abweichung vom Referenzspektrum zu beobachten ist und somit am Besten Rückschlüsse auf das Verhalten des Farbstoffs bei verschiedenen Konzentrationen zu treffen ist. Die berechneten Werte für die verschiedenen Konzentrationen mit Unsicherheiten sind in Tabelle 2 eingetragen.

Dann wurde der Absorptionsgrad  $A$  gegen die relative Konzentration  $c$  aufgetragen. Die Fehler ergeben sich durch Gaußsche Fehlerfortpflanzung, sind aber so klein, dass sie im Diagramm nicht zu sehen sind. Das Diagramm ist in Abb. 9 zu sehen.

Mit der Funktion `curve_fit` von `scipy.optimize` wurde durch numerische  $\chi$ -Quadrat Minimierung eine Anpassung der Form

$$A = 1 - e^{-ac}$$

vorgenommen. Da schon in Abb. 8 erkennbar ist, dass die Spektren einiger Konzentrationen sehr nah am Referenzspektrum liegen, und in Abb. 9 zu sehen ist, dass der Absorptionsgrad sehr niedriger Konzentration kleiner als null ist, kann geschlossen werden, dass sich diese Messungen im Rahmen der vorhandenen Messgenauigkeit nicht von denen des Referenzspektrums unterscheiden lässt. Die negativen Absorptionsgrade ergeben sich dabei durch statistische Schwankungen in der Messung. Um eine möglichst repräsentative Anpassung an den Absorptionsgrad in Abhängigkeit der Konzentration zu erhalten, wurde der Fit nur mit den Messwerten, deren Absorptionsgrad über null lag, vorgenommen.

Konzentration $c$ in %	Absorption $A$ in %
100,00	$99,03 \pm 0,13$
66,67	$96,3 \pm 0,2$
44,44	$86,7 \pm 0,3$
29,63	$73,3 \pm 0,4$
19,75	$56,3 \pm 0,6$
13,17	$39,1 \pm 0,7$
8,78	$25,5 \pm 1,0$
5,85	$15,3 \pm 1,0$
3,90	$4,8 \pm 1,0$
2,60	$0,6 \pm 1,0$
1,73	$-0,8 \pm 1,1$
1,16	$-5,2 \pm 1,2$
0,77	$-5,3 \pm 1,1$
0,51	$-4,8 \pm 1,0$

Tabelle 2: Absorptionsgrad der Lösung des blauen Farbstoffs bei der Wellenlänge der maximalen Absorption für verschiedene Konzentrationen.

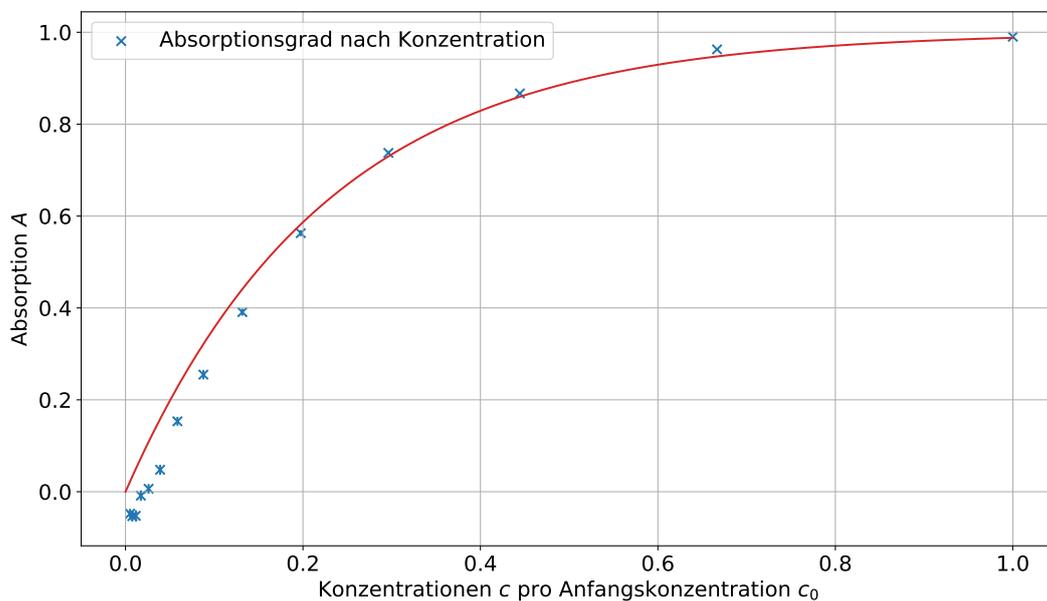


Abbildung 9: Auftragung des Absorptionsgrads  $A$  gegen die relative Konzentration  $c$ . Die Fehler auf den Absorptionsgrad sind miteingezeichnet, aber so klein, dass sie kaum sichtbar sind. Durch numerische  $\chi$ -Quadrat Minimierung wurde mit `curve_fit` von `scipy.optimize` eine Anpassung an eine Funktion der Form  $A = 1 - e^{-ac}$  vorgenommen. Für die Anpassung wurden nur die Werte verwendet, deren Absorption größer als null ist. Die Bestwerte für die Parameter sind in Gleichung (15).

Der Fit ergibt

$$a = 4,40 \pm 0,17. \quad (15)$$

## 5 Diskussion

### 5.1 Absorptionsspektren der Farbstoffe

Im ersten Versuchsteil wurden für das Referenzspektrum und die Farbspektren jeweils 100 Messungen durchgeführt und anschließend gemittelt. Die Unsicherheiten auf die Spektren wurden dabei aus der Standardabweichung des Mittelwerts bestimmt. Die erhaltenen Spektren sind ohne Unsicherheiten in Abb. 4, mit Unsicherheiten in Abb. 10 dargestellt.

Aus dem Referenzspektrum und den Farbspektren wurden daraufhin für die verschiedenen Farben die Absorptionsspektren bestimmt. Die Absorptionsspektren sind ohne Unsicherheiten in Abb. 5, mit Unsicherheiten in Abb. 10 dargestellt.

Für die Absorption des Lichts wurden für alle Farbstoffe mit

$$\lambda_{\text{blau, gl}} = 607 \text{ nm}$$

$$\lambda_{\text{blau, lk}} = 563 \text{ nm}$$

$$\lambda_{\text{rot, gl}} = 522 \text{ nm}$$

$$\lambda_{\text{rot, lk}} = 48 \text{ nm}$$

$$\lambda_{\text{türkis, gl}} = 709 \text{ nm}$$

$$\lambda_{\text{türkis, lk}} = 656 \text{ nm}$$

ein globales  $\lambda_{\text{gl}}$  und ein lokales  $\lambda_{\text{lk}}$  Maximum bestimmt.

### 5.2 Teilchen-im-Kasten-Modell

Bei der Interpretation mit dem Teilchen-im-Kasten-Modell wird die Absorption bestimmter Wellenlängen als Anregung der freien  $\pi$ -Elektronen der Farbstoffe gedeutet. Hierbei werden die Elektronen der Bindungen als Teilchen auf verschiedenen Energieniveaus in einem unendlich hohen Potentialtopf betrachtet. Die Photonen mit den Wellenlängen, die maximal absorbiert werden, haben dabei genau die Energie, die nötig ist, um ein Elektron der höchsten Energiestufe auf die nächsthöhere Energiestufe zu heben. Eine Skizze der Elektronen der verschiedenen Farbstoffe und deren Energieniveaus sowie der Energieniveaus, auf die die angeregten Elektronen steigen, ist in Abb. 6 zu sehen.

Aus den Wellenlängen der maximalen Absorption des Lichts wurden für die verschiedenen Farben mit

$$L_{\text{blau}} = 1,1 \text{ nm}$$

$$L_{\text{rot}} = 0,89 \text{ nm}$$

$$L_{\text{blau}} = 1,4 \text{ nm}$$

die Längen  $L_i$  der Potentialtöpfe bestimmt.

Anschließend wurden die Kastenlängen gegen die Anzahl der beteiligten Bindungen aufgetragen und eine lineare Regression der Form  $L = mn + c$  durchgeführt. Die Auftragung mit Regression ist in Abb. 7 dargestellt. Für die Parameter erhält man:

$$m = (1,254 \pm 0,010) \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$c = (3,87 \pm 0,06) \cdot 10^{-10} \text{ m}.$$

Auffällig ist, dass der y-Achsenabschnitt positiv und damit insbesondere nicht null ist. Da im Diagramm die Kastenlänge gegen die Anzahl der Bindungen, also gegen die freien  $\pi$ -Elektronen, aufgetragen wurde, impliziert dies eine Kastenlänge bei einem Molekül ohne freie  $\pi$ -Elektronen. Anschaulich ergibt der Achsenabschnitt also einen Wert für den Abstand zweier Stickstoffmoleküle,

die direkt miteinander verbunden sind. Man erhält also einen Wert für den Durchmesser eines solchen Moleküls.

Die Steigung der Regressionsgerade  $m$  beschreibt die Kastenlänge pro Bindung, also die Kastenlänge pro  $\pi$ -Elektron. Sie beschreibt also die Zunahme der Kastenlänge pro Kohlenstoffbindung und ergibt somit einen Wert für die Länge einer solchen Bindung.

### 5.3 Abhängigkeit der Absorption von der Farbstoff-Konzentration

Im letzten Teil wurde die Abhängigkeit der Absorption von der Konzentration des Farbstoffs untersucht. Die Spektren der verschiedenen Konzentrationen sind in Abb. 8 dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass schon geringe Änderungen der Konzentration zu starker Abweichung in den Spektren führt. Die für diese Spektren an den globalen Absorptionsmaxima berechneten Werte für die Absorption in Abhängigkeit der Konzentration sind in Tabelle 2 eingetragen. Auch hier wird deutlich, dass mit abnehmender Konzentration die Absorption stark sinkt, so dass schon nach neun Verdünnungsschritten das Spektrum nicht vom Referenzspektrum zu unterscheiden ist. Die Auftragung der Absorption gegen die relative Konzentration steigt zunächst stark an und nähert sich dann einem Grenzwert. Anpassung an eine Funktion der Form  $A = 1 - e^{-ac}$  durch numerische  $\chi$ -Quadrat Minimierung liefert mit

$$a = 4,40 \pm 0,17$$

einen Wert für den Parameter  $a$ .

### 5.4 Diskussion der Messmethoden

Im diesen Versuch war es möglich, relativ genaue Messungen durchzuführen. Durch die Aufnahme von 100 Spektren und anschließende Mittelung konnten die statistischen Fehler sehr gering gehalten werden. So war es möglich, die Absorptionsmaxima sehr genau zu beobachten. Allerdings wurde bei der Bestimmung der Maxima ein Einzelwert ohne Unsicherheit verwendet. Es ist also möglich, dass hier ein Wert verwendet wurde, der aufgrund statistischer Schwankungen zu hoch war und dass die dadurch identifizierte Wellenlänge möglicherweise nicht die tatsächliche Wellenlänge des Absorptionsmaximums ist. Dieser mögliche Fehler, der sich auf die berechnete Kastenlänge auswirkt, könnte minimiert werden, in dem das Maximum z.B. mit einem Gauß-Fit bestimmt wird. So könnte auch ein Fehler auf die erhaltenen Kastenlängen bestimmt werden.

Eine weitere mögliche Fehlerquelle ist die Aufzeichnung des Spektrum selbst. Schon kleine Änderungen am Versuchsaufbau wie z.B. das Verschieben einiger Komponenten auf der optischen Bank könnten sich stark auf die Aufzeichnung ausgewirkt haben. Die Aufnahme vieler Spektren mit anschließender Mittelung verringert den Einfluss solcher Fehler, die nur sehr kurzzeitig Einfluss auf den Versuchsaufbau ausüben (wie z.B. etwaiges Flackern der Glühbirne etc.). Mögliche Verschiebungen des Versuchsaufbaus zwischen den Messungen verschiedener Farben bzw. Konzentrationen werden hierbei allerdings nicht beachtet. Da das Spektrometer nicht kalibriert wurde, ist es auch nicht auszuschließen, dass systematische Fehler in der Aufnahme der Spektren existieren. So könnte es z.B. eine Verschiebung der Spekten entlang der Wellenlängen geben, was zu falsch bestimmten Kastenlängen führen könnte.

Im zweiten Versuchsteil wurde mit bei der Interpretation mit dem Teilchen-im-Kasten-Modell eine starke Vereinfachung vorgenommen. So ist z.B. die Annahme, die Teilchen befänden sich in einem Kasten konstanten Potentials und unendlichem Potential außerhalb eine Idealisierung der tatsächlichen chemischen und physikalischen Zusammenhänge.

Bei Untersuchung der Konzentration wurde bei jedem Verdünnungsschritt eine bestimmte Menge der Lösung durch Ethanol ersetzt. Zur Bestimmung der Konzentration wurde hierbei davon ausgegangen, dass mit den verwendeten Kolbenhubpipetten die Mengen sehr genau bestimmt wurden. Nicht beachtet wurden hier die Messunsicherheit der Pipetten sowie die Möglichkeit, dass die Pipetten nicht immer komplett gefüllt bzw. ausgeleert wurden.

# A Anhang

## A.1 Abbildungen

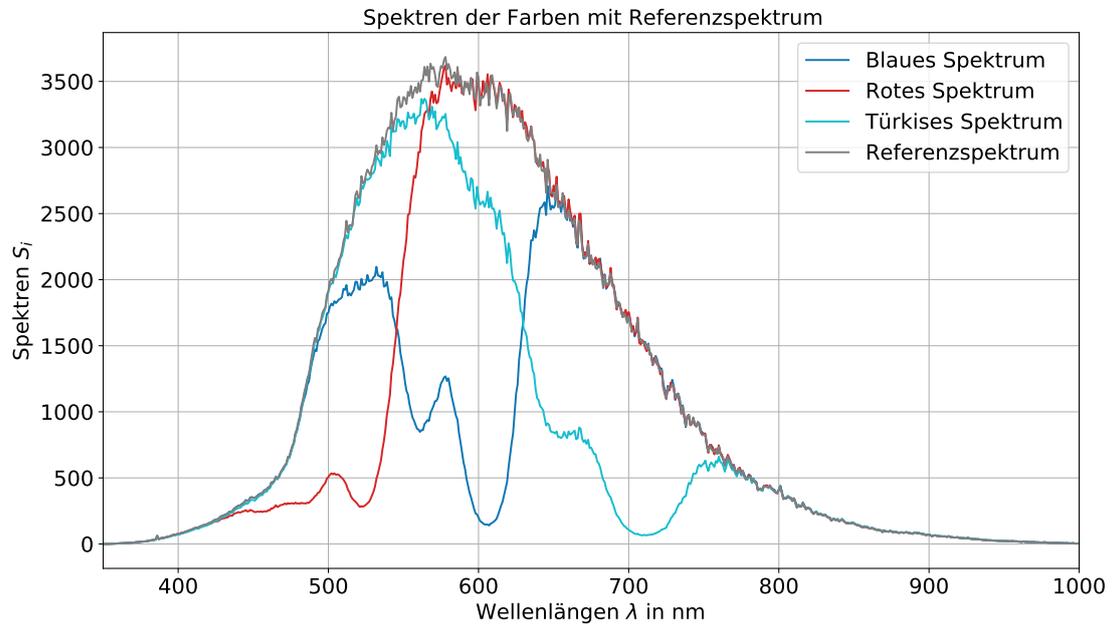


Abbildung 10: Mittelwerte der aufgenommenen Spektren der Lösungen mit blauer Farbe (blaue Linie), roter Farbe (rote Linie) und türkiser Farbe (türkise Linie) sowie ein Referenzspektrum von reinem Ethanol (graue Linie) mit Unsicherheiten. Die Unsicherheiten ergeben sich aus der Standardabweichung des Mittelwerts. Ein Diagramm ohne Unsicherheiten ist in Abb. 4 zu sehen.

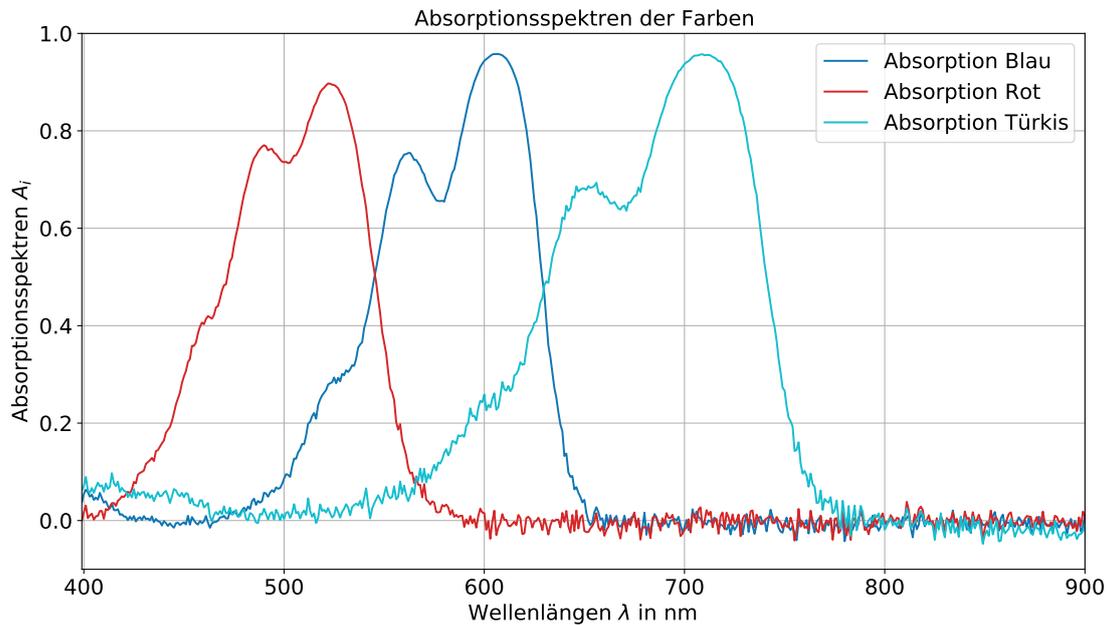


Abbildung 11: Absorptionsspektren des blauen (blaue Linie), des roten (rote Linie) und des türkisen (türkise Linie) Farbstoffs. Die Unsicherheiten sind mit eingezeichnet. Die Absorptionsspektren ohne Unsicherheiten sind in Abschnitt 4.1 in Abb. 10 zu sehen

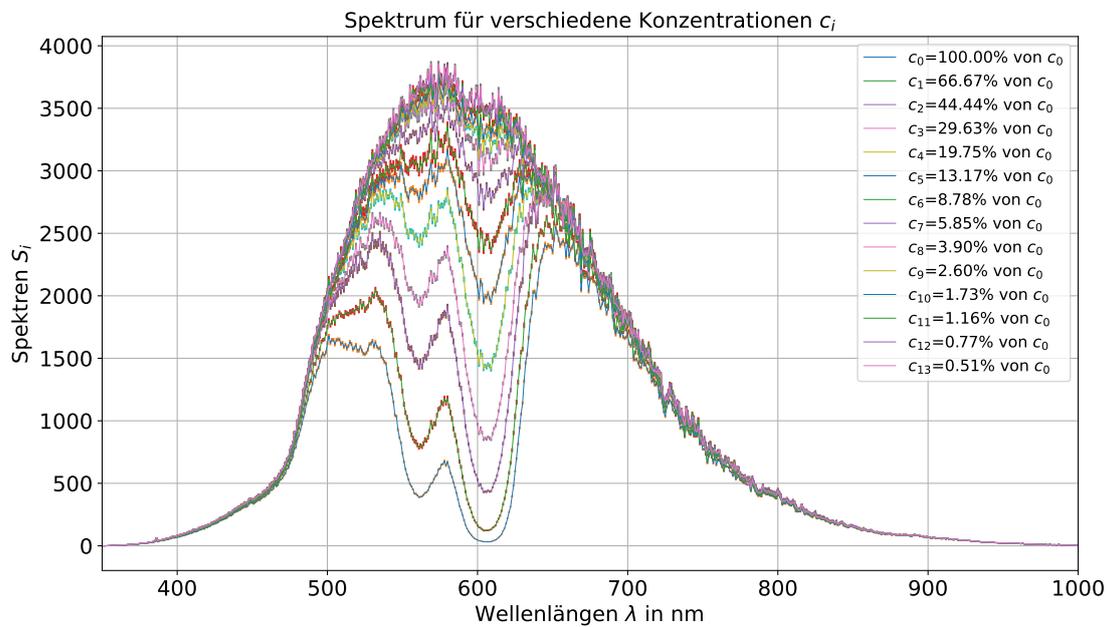


Abbildung 12: Spektren des blauen Farbstoffs bei verschiedenen Konzentrationen mit Unsicherheiten.

## A.2 Rohdaten

V 78 11.3.22

rot - 1,1'-Diethyl-2,2'-cyanine iodide  
blau - 1,1'-Diethyl-2,2'-carbocyanine iodide  
tdcs - 1,1'-Diethyl-2,2'-dicyanocyanine iodide

4.) Anfang: 3ml Ethanol mit blau

Für jeden Schritt: 1ml Lösung raus, 1ml Ethanol rein

Blende  
Gleichspannung  
Sammellinse  
Einkollekt  
Lichtleiter  
USB Spektrometer  
Laptop  
Ocean-View

Tutor: Mehdi A. Belhaj

## Literatur

- [1] *Physiklabor für Anfänger\*innen Teil 2, Anleitung Versuch 78, Farbstoffe*. Physikalisches Institut, Fakultät für Mathematik und Physik, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 2022, 11. März 2022.
- [2] *SurePette Benutzerhandbuch*. AccuBioTech Co., Ltd, 11. März 2022. URL: <https://omnibus.uni-freiburg.de/~phypra/ap/78/SurePette%5C%20Benutzerhandbuch.pdf>.