

ALBERT-LUDWIGS-UNIVERSITÄT FREIBURG  
PHYSIKLABOR FÜR ANFÄNGER\*INNEN, TEIL 2  
WINTERSEMESTER 2021/22

VERSUCH 78 AM 03.03.2022

## Farbstoffe

Gruppe 211:  
06.03.2022

Assistent:

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Ziel des Versuchs</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Aufbau und Durchführung</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Auswertung und Fehleranalyse</b>	<b>3</b>
3.1	Absorptionsspektren der drei Farbstoffe . . . . .	3
3.2	Teilchen-im-Kasten-Modell und effektive Kastenlänge . . . . .	6
3.3	Abhängigkeit der Absorption von der Farbstoffkonzentration . . . . .	10
<b>4</b>	<b>Diskussion der Ergebnisse</b>	<b>13</b>
4.1	Vergleich mit Literaturwerten . . . . .	13
4.2	Zusammenstellung der Ergebnisse . . . . .	13
4.3	Fehlerdiskussion . . . . .	14
4.4	Verbesserte Messmethoden . . . . .	15
<b>5</b>	<b>Literatur</b>	<b>16</b>
<b>6</b>	<b>Anhang</b>	<b>17</b>
6.1	Tabellen und Grafiken . . . . .	17
6.2	Laborbuch . . . . .	21
6.3	Tabellenverzeichnis . . . . .	23
6.4	Abbildungsverzeichnis . . . . .	23

## 1 Ziel des Versuchs

Im Folgenden sollen die Absorptionsgrade von Cyaninfarbstoffen untersucht werden. Dabei werden zunächst die Spektren von drei unterschiedlichen, mit Weißlicht bestrahlten, Cyaninfarbstoffen gemessen und hieraus die Absorptionsgrade ermittelt. Mithilfe des Modells des unendlich hohen Potentialkastens und unter Verwendung der maximal absorbierten Wellenlängen, wird dann die effektive Kastenlänge der Moleküle bestimmt. In einem weiteren Versuchsteil wird die Konzentration der Farbstofflösung variiert und so die Abhängigkeit des Absorptionsgrades von der Konzentration untersucht.

## 2 Aufbau und Durchführung

Um die oben genannten Ziele zu erreichen, wird der in [Abbildung 1](#) dargestellte Versuchsaufbau verwendet.

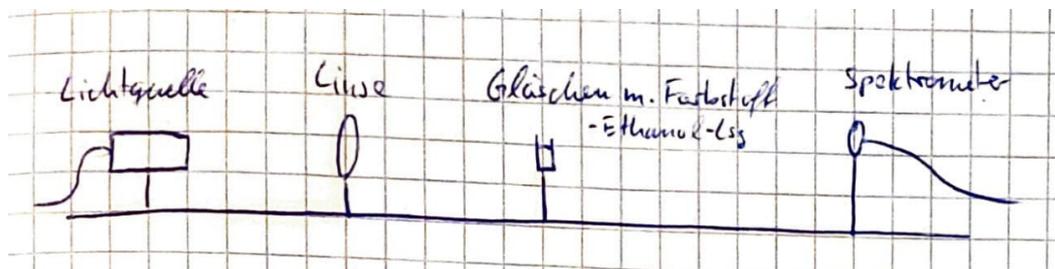


Abb. 1: Skizze des Versuchsaufbaus aus [Abbildung 20](#).

Zunächst werden Lichtquelle, Linse und Spektrometer so justiert, dass das Spektrometer gut ausgeleuchtet ist. Die Daten des Spektrometers werden mit der Software „OceanView“ (siehe [Abbildung 13](#) im Anhang) ausgewertet. Die Helligkeit der Lichtquelle wird so heruntergeregelt, dass das komplette Spektrum  $S$  im Messbereich der Intensität liegt. Um Einflüsse von Streulicht zu verringern, wird der Raum abgedunkelt.

Es stehen ein roter, ein blauer und ein cyan Farbstoff zur Verfügung. Das Farbstoffpulver wird mit Ethanol so verdünnt, dass das gesamte Spektrum noch zu sehen ist, also keine Wellenlänge komplett absorbiert wird. Beim Einspannen der Lösung wird darauf geachtet, dass nicht die matte Seite des Probebehälters beschienen wird.

In einer ersten Versuchsreihe wird nun ein Vergleichsspektrum  $S_0$  von reinem Ethanol aufgenommen. Anschließend werden von roter, blauer und cyan Farbstofflösung die Spektren  $S_1$ ,  $S_2$  beziehungsweise  $S_3$  aufgenommen. Hierbei werden pro Lösung 100 Spektren in einem Zeitabstand von 100 ms aufgezeichnet.

Um die Abhängigkeit von der Konzentration der Lösung zu untersuchen, wird der blaue Farbstoff verwendet. Zuerst wird hierfür eine Basislösung mit dem Farbstoff hergestellt, die dann mit Ethanol weiter verdünnt wird. Dafür wird ein Volumen  $V_F$  der Basislösung mit einem Volumen  $V_E$  Ethanol im Probebehälter vermischt. Die Gesamtlösung hat das Volumen 4 mL. Es wird dabei das Spektrum  $S_c$  für die Konzentrationen  $c = 100\%, 90\%, \dots, 10\%, 0\%$  gemessen.

Zur Dosierung der Flüssigkeiten werden eine große und eine kleine Pipette verwendet. Dabei wird darauf geachtet, dass der Knopf zum Laden nur bis zum ersten Widerstand durchgedrückt wird. Die Unsicherheiten der Pipetten sind in [Abbildung 14](#) im Anhang angegeben.

### 3 Auswertung und Fehleranalyse

#### 3.1 Absorptionsspektren der drei Farbstoffe

Zur Auswertung der gemessenen Spektren, werden zunächst die 100 Messreihen pro Farbe gemittelt. Die Unsicherheit wird durch die Standardabweichung des Mittelwerts berechnet. Dabei werden Formeln aus [3] verwendet. Die so erhaltenen Spektren für die Vergleichslösung und exemplarisch für die rote Farblösung sind in [Abbildung 2](#) und [Abbildung 3](#) zu sehen. Da durch die hohe Anzahl an Messreihen die Unsicherheiten sehr klein werden, sind sie aus Gründen der Übersichtlichkeit in den Diagrammen nicht dargestellt. Die Spektren der anderen Farben sind im Anhang in [Abbildung 15](#) und [Abbildung 16](#) zu finden.

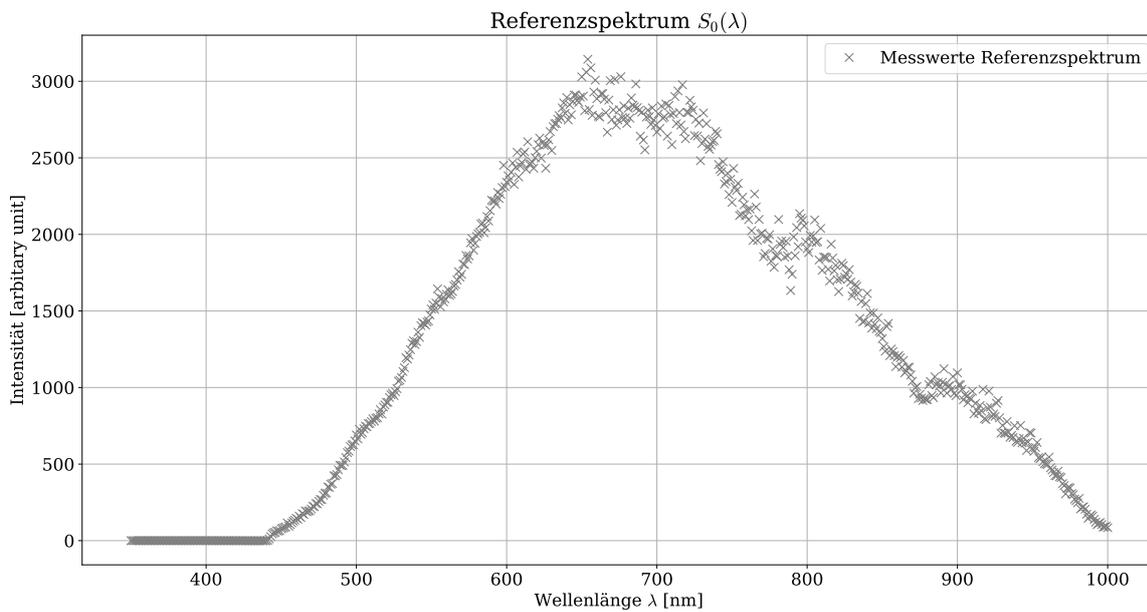


Abb. 2: Eingezeichnet ist das Spektrum  $S_0$  des reinen Ethanol, wobei jeder eingetragene Wert ein Mittelwert aus den 100 Messreihen ist. Dabei ist die Intensität in arbitrary units gegen die Wellenlänge  $\lambda$  in nm aufgetragen.

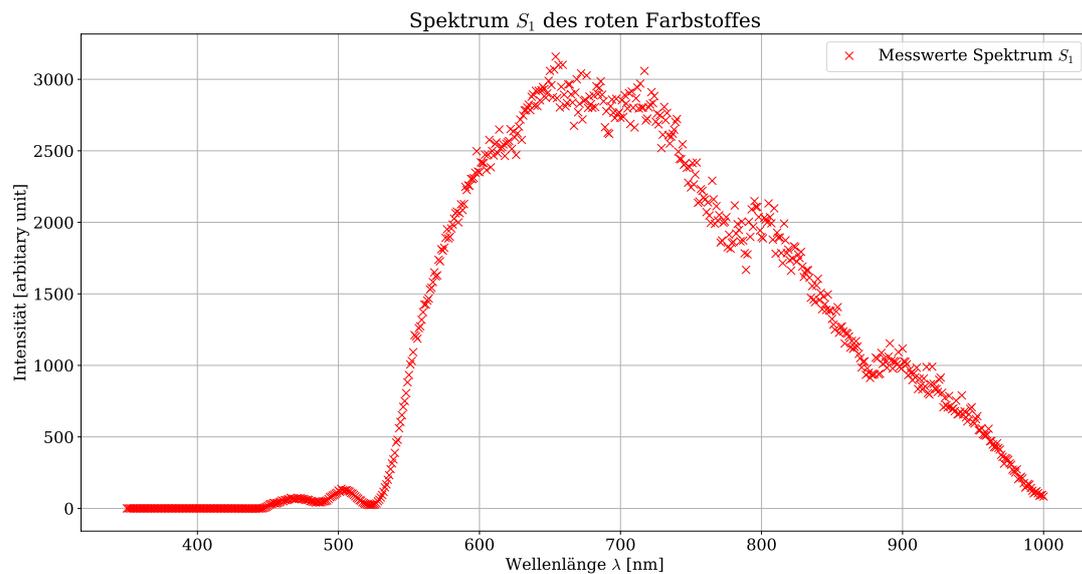


Abb. 3: Eingezeichnet ist das Spektrum  $S_1$  der roten Farblösung, wobei jeder eingetragene Wert ein Mittelwert aus den 100 Messreihen ist. Dabei ist die Intensität in arbitrary units gegen die Wellenlänge  $\lambda$  in nm aufgetragen.

Bei der Bestrahlung der Farblösung werden einige Wellenlängen absorbiert. Im Bereich dieser Wellenlängen unterscheiden sich die Spektren der Farben  $S_i$  vom Vergleichsspektrum  $S_0$ . Die Spektren sind in einem gemeinsamen Bild in [Abbildung 4](#) aufgetragen.

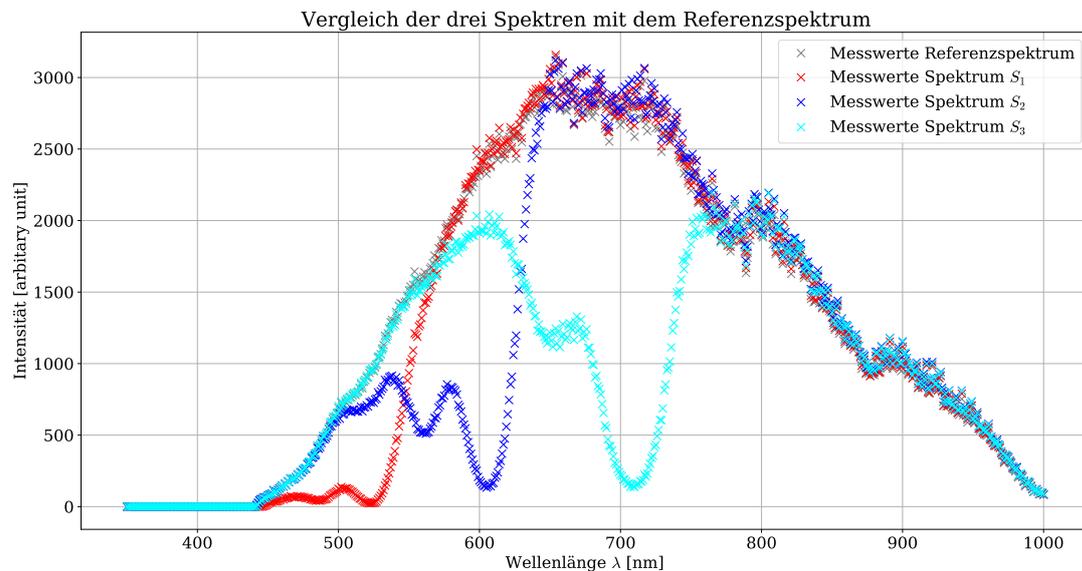


Abb. 4: Eingezeichnet sind die Spektren der drei Farblösungen, sowie der Vergleichslösung. Außerdem ist jeder eingetragene Wert ein Mittelwert aus den 100 Messreihen. Dabei ist die Intensität in arbitrary units gegen die Wellenlänge  $\lambda$  in nm aufgetragen.

Um ermitteln zu können, welche Wellenlängen wie stark absorbiert werden, wird der Absorptionsgrad  $A$  berechnet. Die Unsicherheit ergibt sich dabei durch Fehlerfortpflanzung mit Formeln aus [3]:

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

$$\Delta A = \sqrt{\left(\frac{\Delta S_i}{S_0}\right)^2 + \left(-\frac{S_i \cdot \Delta S_0}{S_0^2}\right)^2}. \quad (2)$$

Der Absorptionsgrad  $A_r$  des roten Farbstoffes ist in [Abbildung 5](#) dargestellt.

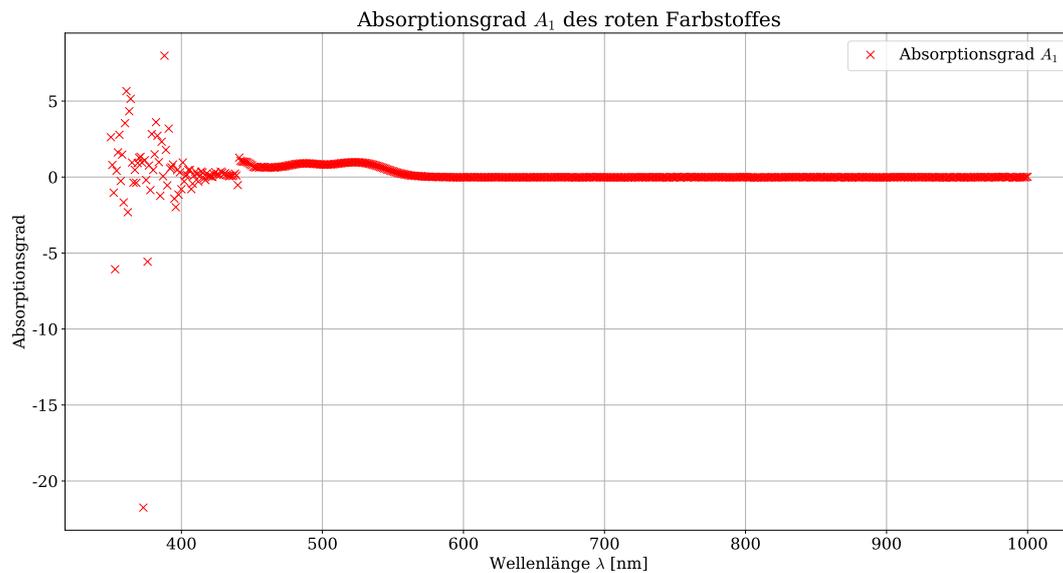


Abb. 5: Eingezeichnet ist der Absorptionsgrad  $A_1$  des roten Farbstoffs. Dabei ist der Absorptionsgrad gegen die Wellenlänge  $\lambda$  in nm aufgetragen.

Es fällt auf, dass für kleine Wellenlängen  $\lambda$  die Absorptionsgrade sehr stark streuen und teilweise über eins und unter null liegen. Betrachtet man die Spektren in [Abbildung 4](#) in diesem Wellenlängenbereich, so fällt auf, dass die Intensitäten  $I$  hier sehr gering sind. Außerdem muss man bemerken, dass ein Absorptionsgrad von über eins physikalisch nicht sinnvoll ist, da nicht mehr Licht absorbiert werden kann als eingestrahlt wird. Diese Werte zu Beginn sind also auf statistische Streuungen im niedrigen Intensitätsbereich zurückzuführen und können als Rauschen vernachlässigt werden. Der Absorptionsgrad ohne Rauschen ist in [Abbildung 6](#) eingezeichnet.

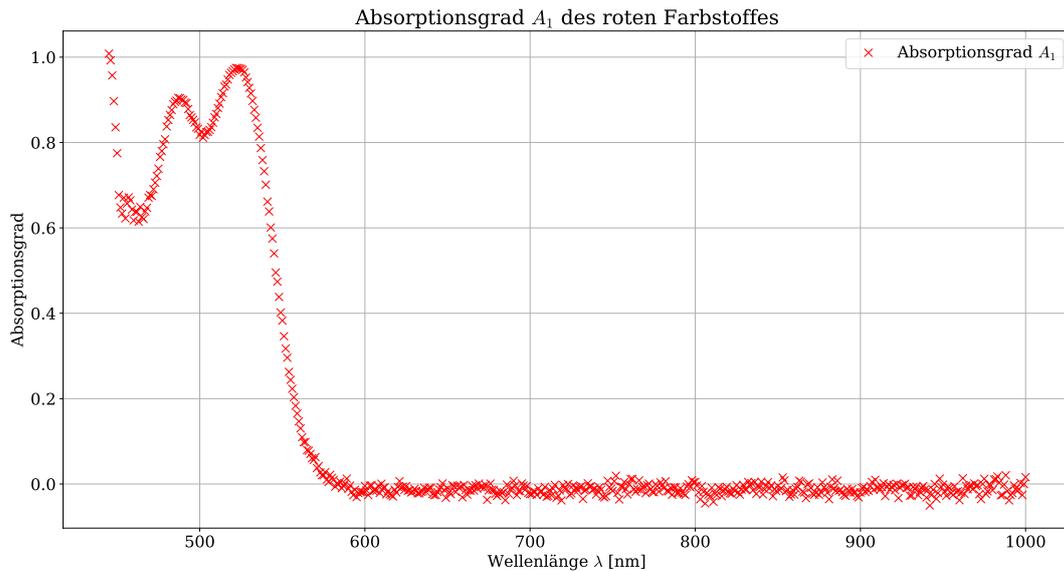


Abb. 6: Eingezeichnet ist der Absorptionsgrad  $A_1$  des roten Farbstoffs. Dabei ist der Absorptionsgrad gegen die Wellenlänge  $\lambda$  in nm aufgetragen und das Rauschen wurde abgeschnitten.

Aus den Absorptionsgraden können nun die maximal absorbierten Wellenlängen ausgelesen werden. Um eine Unsicherheit auf diese Wellenlängen abschätzen zu können, wird untersucht, wie groß der Wellenlängenbereich um die Maxima ist, in denen der Absorptionsgrad mit der maximalen Absorption noch verträglich ist. Hierfür wird ein  $t$ -Wert mit Formeln aus [3] bestimmt, der für eine gute Verträglichkeit unter 2 liegen muss. Für die Unsicherheit der maximal absorbierten Wellenlängen wird, um den gemachten Fehler nicht zu unterschätzen, der größte so ermittelte Fehler für alle Maxima verwendet. Für den roten Farbstoff ergeben sich durch dieses Vorgehen ein Hauptmaximum bei  $\lambda_{H,r}$  und ein Nebenmaximum bei  $\lambda_{N,r}$ :

$$\begin{aligned}\lambda_{H,r} &= (522 \pm 3) \text{ nm}, \\ \lambda_{N,r} &= (487 \pm 3) \text{ nm}.\end{aligned}$$

Diese Maxima sind im Absorptionsgraddiagramm gekennzeichnet und befinden sich im Anhang in [Abbildung 17](#).

Durch analoges Vorgehen können die Haupt- und Nebenmaxima der anderen beiden Farbstoffe ermittelt werden. Sie betragen

$$\begin{aligned}\lambda_{H,b} &= (605 \pm 3) \text{ nm}, \\ \lambda_{N,b} &= (562 \pm 3) \text{ nm}, \\ \lambda_{H,c} &= (709 \pm 3) \text{ nm}, \\ \lambda_{N,c} &= (653 \pm 3) \text{ nm}.\end{aligned}$$

und sind im Anhang in [Abbildung 18](#) und [Abbildung 19](#) zu sehen.

### 3.2 Teilchen-im-Kasten-Modell und effektive Kastenlänge

Cyaninfarbstoffe bestehen aus Molekülen, die näherungsweise mit dem Modell eines unendlich hohen Potentialkastens beschrieben werden können. In [Abbildung 7](#) sind die Moleküle der Farbstoffe dargestellt.

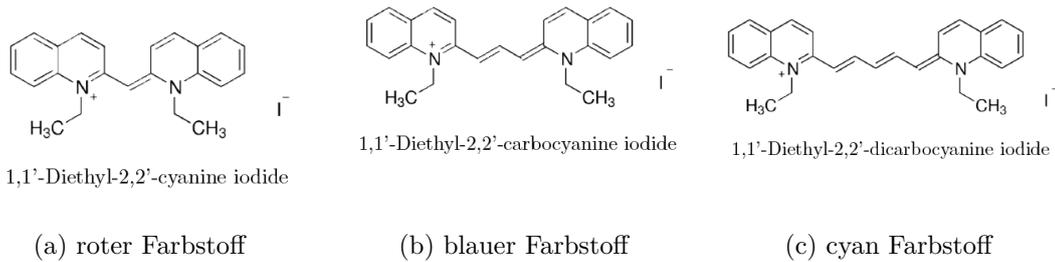


Abb. 7: Skizzen der drei verwendeten Cyanin-Moleküle aus [1].

Der Abstand  $L$  zwischen den Stickstoffatomen N kann als Kastenlänge angenommen werden. Pro Bindung zwischen den Stickstoffatomen gibt es ein frei bewegliches sogenanntes  $\pi$ -Elektron. Diese Elektronen besetzen die unterschiedlichen Energieniveaus im Potentialkasten. Für das  $n$ -te Energieniveau gilt dabei:

$$E_n = \frac{h^2}{8m_e L^2} \cdot n^2 \quad \text{für } n = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

Aufgrund des Pauli-Prinzips [4] können die Energieniveaus nur mit höchstens zwei Elektronen mit unterschiedlichem Spin besetzt werden. Eine Skizze des Potentialkastens des roten Farbstoffes mit den mit Elektronen besetzten Energieniveaus ist in [Abbildung 8](#) zu sehen.

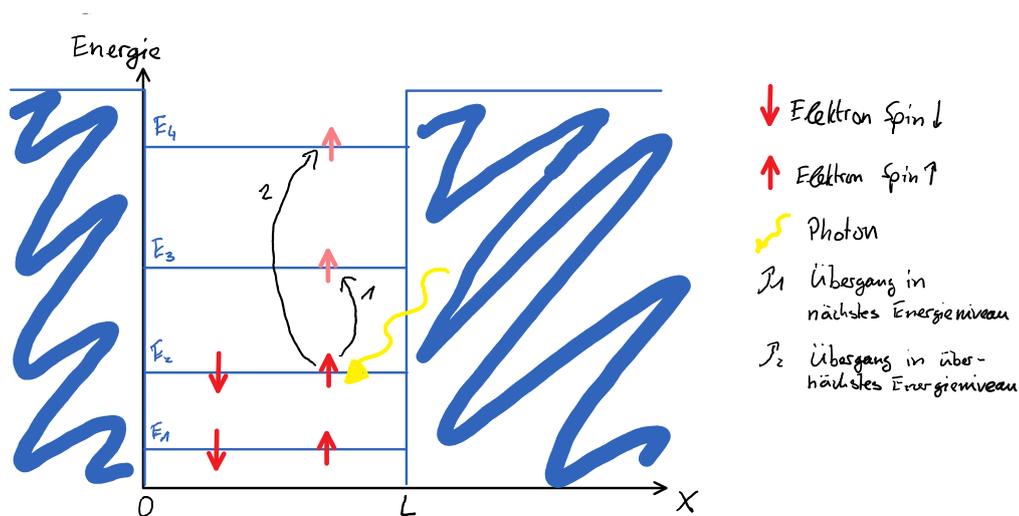


Abb. 8: Zu sehen ist eine Skizze des Potentialtopfes für den roten Farbstoff 1,1'-Diethyl-2,2'-cyanine iodide. Es sind vier  $\pi$ -Elektronen in ihrem Grundzustand und die Anregung durch ein Photon in das nächste und das übernächste Energieniveau dargestellt.

Wird das Molekül mit Licht beschienen, kann ein Elektron aus dem höchsten Energieniveau in das nächste oder übernächste Energieniveau angehoben werden. Die Energiedifferenz bei einem Wechsel vom  $n$ -ten in das  $m$ -te Energieniveau ist:

$$\Delta E_{n,m} = |E_m - E_n|, \quad (4)$$

$$= \frac{h^2}{8m_e L^2} \cdot |m^2 - n^2|. \quad (5)$$

Dabei wird ein Photon mit genau dieser Wellenlänge absorbiert. Für die Energie dieses Photons gilt:

$$E_{phot} = \frac{hc}{\lambda}. \quad (6)$$

Setzt man diese Energien gleich erhält man für die Kastenlänge  $L$ :

$$E_{phot} = \frac{hc}{\lambda} \stackrel{!}{=} \frac{h^2}{8m_e L^2} \cdot |m^2 - n^2| = \Delta E_{n,m}, \quad (7)$$

$$L = \sqrt{\frac{h\lambda}{8m_e c} \cdot |m^2 - n^2|}. \quad (8)$$

Die Berechnung von  $L$  aus den maximal absorbierten Wellenlängen wird exemplarisch für den roten Farbstoff durchgeführt. Das Molekül des roten Farbstoffes, das in [Abbildung 7a](#) zu sehen ist hat vier  $\pi$ -Elektronen. Wie in [Abbildung 8](#) dargestellt, sind im unangeregten Zustand die ersten beiden Energieniveaus mit Elektronen besetzt. Bei der einfachen Anregung des Moleküls wird also ein Elektron vom zweiten Energieniveau ins dritte Energieniveau gehoben. Für die Kastenlänge und seine Unsicherheit mit Fehlerfortpflanzung aus [\[3\]](#) folgt somit:

$$L = \sqrt{\frac{h\lambda}{8m_e c} \cdot (3^2 - 2^2)} \quad (9)$$

$$= \sqrt{\frac{5h\lambda}{8m_e c}}, \quad (10)$$

$$\Delta L = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5h}{8m_e c \lambda}} \cdot \Delta \lambda. \quad (11)$$

Dieser Sprung geschieht am häufigsten und absorbiert weniger Energie. Deswegen ist dieser Übergang dem Hauptmaximum zuzuordnen. Durch Einsetzen der Wellenlänge  $\lambda_{H,r}$  des Hauptmaximums des roten Farbstoffes ergibt sich:

$$L = (8,90 \pm 0,03) \text{ \AA}.$$

Das Nebenmaximum kommt wahrscheinlich durch den Sprung eines Elektrons aus dem höchsten Energieniveau in das übernächste zustande. Es gilt also:

$$L = \sqrt{\frac{h\lambda}{8m_e c} \cdot (4^2 - 2^2)} \quad (12)$$

$$= \sqrt{\frac{12h\lambda}{8m_e c}}, \quad (13)$$

$$\Delta L = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{12h}{8m_e c \lambda}} \cdot \Delta \lambda. \quad (14)$$

Mit der Wellenlänge  $\lambda_{N,r}$  des Nebenmaximums folgt für die Kastenlänge:

$$L = (13,31 \pm 0,04) \text{ \AA}.$$

Analoges Vorgehen für den blauen und cyan Farbstoff liefert Werte für die Kastenlängen  $L$ , die in [Tabelle 2](#) in [Unterabschnitt 4.2](#) zu finden sind.

Trägt man die so bestimmten Kastenlängen  $L$  gegen die Anzahl  $n$  der beteiligten  $\pi$ -Elektronen auf, so ergibt sich folgendes in [Abbildung 9](#) zu sehendes Diagramm.

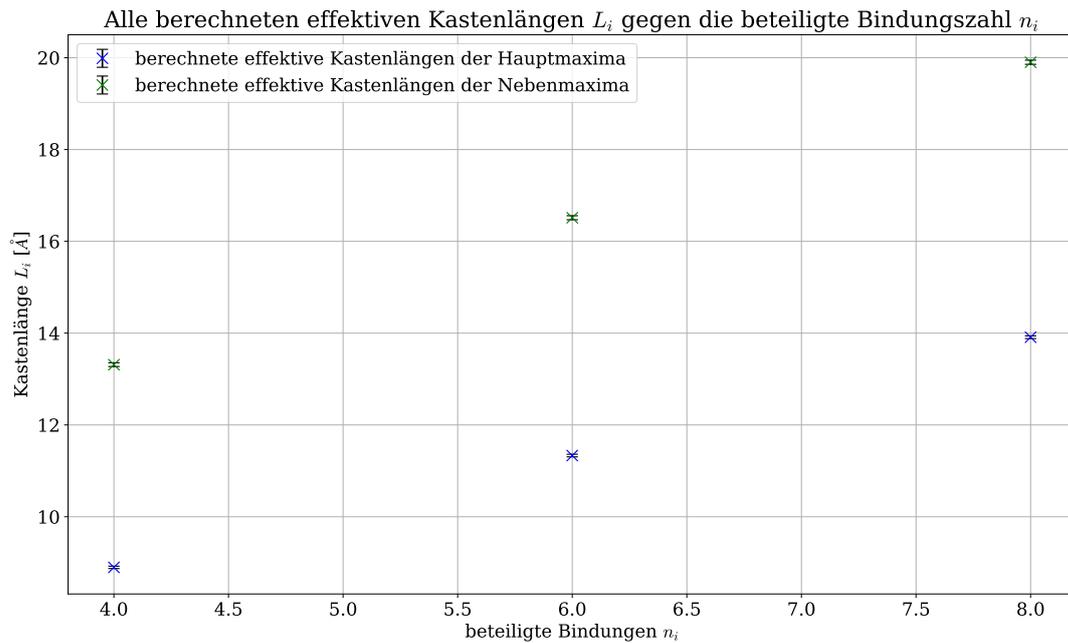


Abb. 9: Aufgetragen sind die berechneten effektiven Kastenlängen  $L_i$  in Å gegen die beteiligten Bindungen  $n_i$ . In blau sind die berechneten Kastenlängen für die Hauptmaxima und in grün sind die Kastenlängen für die Nebenmaxima eingezeichnet.

Man sieht, dass die aus den Messpunkten berechneten Kastenlängen zu den Hauptmaxima etwa auf einer Geraden liegen. Die Kastenlängen zu den Nebenmaxima liegen alle darüber, aber ebenfalls auf einer Geraden, die etwa parallel verläuft. Es ist aufgrund der Linearität zu vermuten, dass die Interpretation der Hauptmaxima korrekt ist. Da die Nebenmaxima aber sehr unterschiedliche Werte für die Kastenlänge  $L$  liefern, sind diese eventuell nicht als Sprung in das übernächste Energieniveau zu interpretieren. Dies wird in der Fehlerdiskussion aufgegriffen. Im Folgenden werden deswegen nur die Hauptmaxima betrachtet.

Es wird eine lineare Regression mit Formeln aus [3] durchgeführt. Sie ist zusammen mit den Werten in [Abbildung 10](#) eingezeichnet.

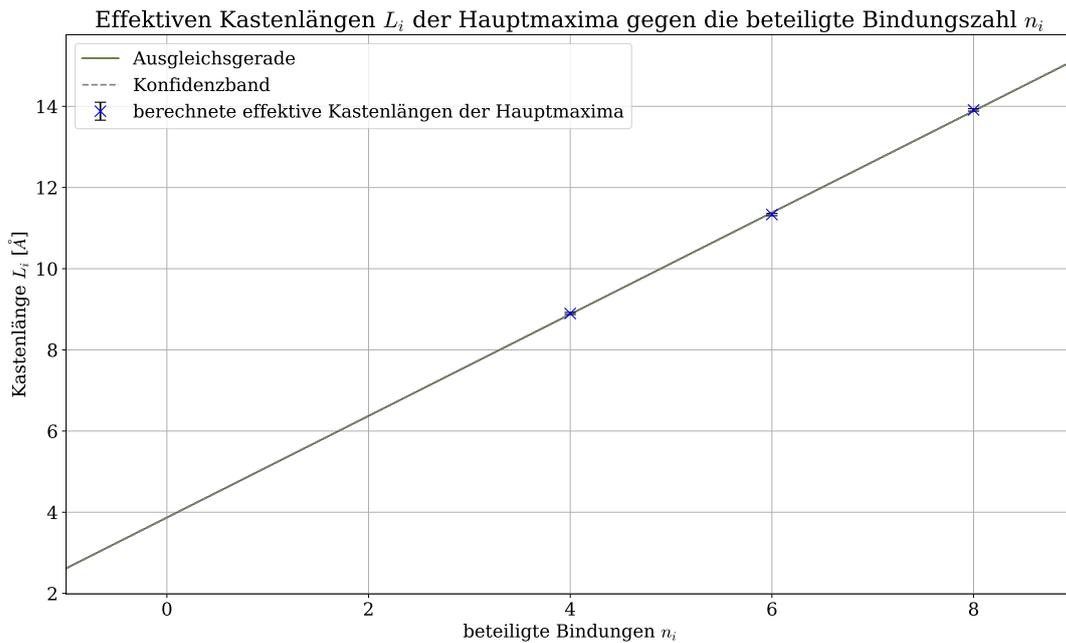


Abb. 10: Aufgetragen sind die berechneten effektiven Kastenlängen  $L_i$  in Å gegen die beteiligten Bindungen  $n_i$ . Zusätzlich zu den Hauptmaxima ist eine lineare Regression mit einem  $1\sigma$ -Konfidenzband eingezeichnet, das allerdings sehr schmal und daher schlecht sichtbar ist.

Die Steigung  $b$  und der y-Achsenabschnitt  $y_0$  der Ausgleichsgeraden und ihre Unsicherheiten ergeben dabei folgende Werte:

$$b = (1,252 \pm 0,010) \text{ \AA},$$

$$y_0 = (3,87 \pm 0,06) \text{ \AA}.$$

Die Steigung  $b$  ist dabei ein Maß für die Länge einer Kohlenstoffbindung. Der y-Achsenabschnitt  $y_0$  kann als Abstand zwischen den Stickstoff-Atomen ohne Kohlenstoffketten interpretiert werden.

### 3.3 Abhängigkeit der Absorption von der Farbstoffkonzentration

Im letzten Versuchsteil werden erneut Messungen am blauen Farbstoff durchgeführt, um die Abhängigkeit der Absorption von der Konzentration des Farbstoffes zu bestimmen. Um vergleichbare Werte zu erhalten, wird zunächst eine Basislösung mit Spektrum  $S_{100\%}$  hergestellt und dann so verdünnt, dass die relative Konzentration an Basislösung in Zehnerschritten abfällt. Die dadurch gemessenen Spektren sind auf dem Screenshot von „OceanView“ in [Abbildung 13](#) im Anhang zu erkennen.

Zur Bestimmung der Absorptionsgrade wird analog wie in den vorherigen Versuchsteilen vorgegangen, wobei [Gleichung 1](#) und [Gleichung 2](#) verwendet werden. Es werden dabei die beiden Wellenlängen untersucht, bei denen der blaue Farbstoff Absorptionsmaxima hat ( $\lambda_{H,b} = (605 \pm 3) \text{ nm}$  und  $\lambda_{N,b} = (562 \pm 3) \text{ nm}$ ), da dort die größten Unterschiede messbar sind. Die für diese Wellenlängen bestimmten Absorptionsgrade sind in der folgenden [Abbildung 11](#) aufgetragen.

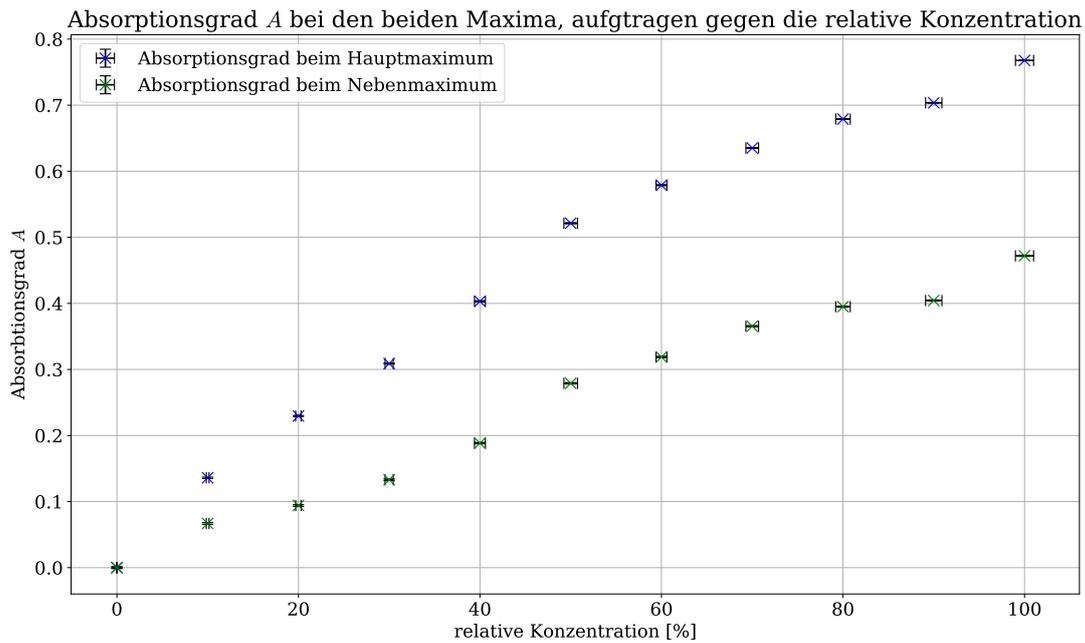


Abb. 11: Aufgetragen ist der Absorptionsgrad  $A$  gegen die relative Konzentration  $c$  der blauen Farblösung in %. In blau sind die Absorptionsgrade für die Hauptmaxima und in grün sind die Absorptionsgrade für die Nebenmaxima eingezeichnet.

Durch numerische Minimierung von  $\chi^2$ , wie in [3] beschrieben, werden die Messwerte an die Funktion  $A(c) = 1 - e^{-ac}$  angepasst, wobei  $a$  der zu bestimmende Parameter ist. Auch die Fehler auf  $a$  werden wie in [3] beschrieben bestimmt. Es ergeben sich die folgenden Werte für  $a$ :

$$a_{H,b} = 1,4090 \pm 0,0004,$$

$$a_{N,b} = 0,6157 \pm 0,0004.$$

Die extrem kleinen Fehler scheinen recht unrealistisch zu sein und werden deshalb in der Fehlerdiskussion näher beleuchtet. Auch in [Abbildung 12](#) sind die Fehler auf die eingezeichneten Anpassungen sehr klein und deshalb nur schlecht zu erkennen.

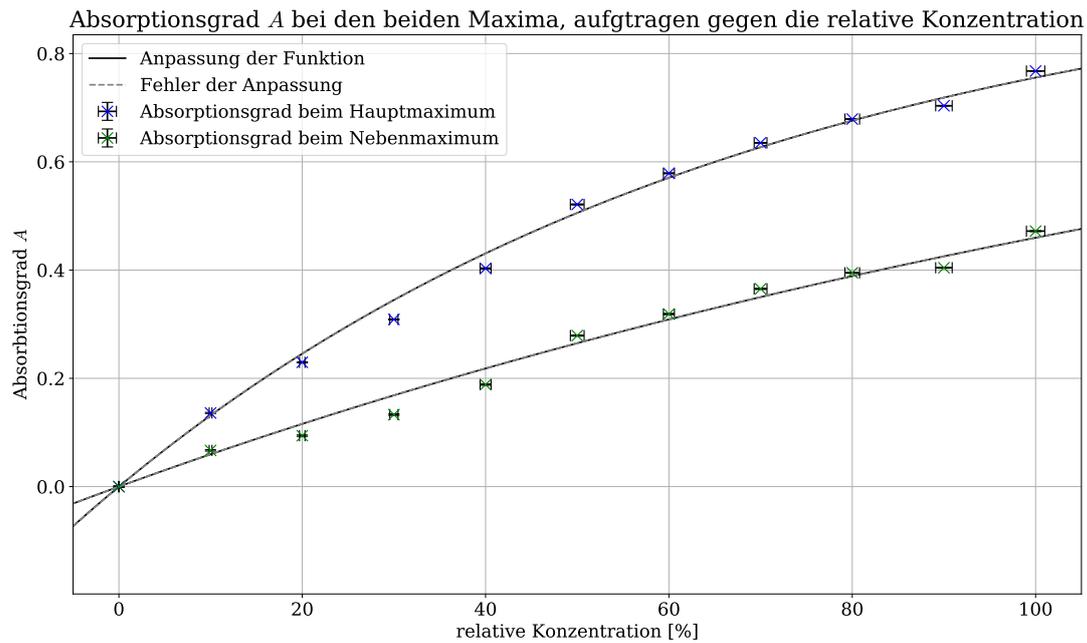


Abb. 12: Aufgetragen ist der Absorptionsgrad  $A$  gegen die relative Konzentration  $c$  der blauen Farblösung in %. In blau sind die Absorptionsgrade für die Hauptmaxima und in grün sind die Absorptionsgrade für die Nebenmaxima eingezeichnet. Zusätzlich sind noch die mit numerischer Minimierung angepassten Funktionen und deren Fehler eingezeichnet, die sehr klein und daher schlecht erkennbar sind.

Auch wenn die berechneten Werte um die angepasste Funktion herum streuen, ist insgesamt erkennbar, dass der Ansatz  $A(c) = 1 - e^{-ac}$  ein realistisches Modell für die Beschreibung des gegebenen physikalischen Zusammenhangs ist. Für das Verhältnis  $I(c)/I_0$  zwischen der konzentrationsabhängigen Intensität  $I(c)$  und der Anfangsintensität  $I_0$  ergibt sich damit ein Zusammenhang von  $I(c)/I_0 \propto e^{-ac}$ , was auch der Erwartung eines exponentiellen Abfalls entspricht.

## 4 Diskussion der Ergebnisse

### 4.1 Vergleich mit Literaturwerten

Zunächst sollen die Wellenlängen der Hauptmaxima der drei Spektren mit Literaturwerten verglichen werden. Als Literaturwerte werden Angaben eines Herstellers dieser Farbstoffe verwendet [5]:

$$\begin{aligned}\lambda_{Lit,r} &= 524 \text{ nm}, \\ \lambda_{Lit,b} &= 614 \text{ nm}, \\ \lambda_{Lit,c} &= 707 \text{ nm}.\end{aligned}$$

Mit Formeln aus [3] ergeben sich die  $t$ -Werte der gemessenen Wellenlängen, wobei ein  $t$ -Wert von unter 2 für eine gute und ein  $t$ -Wert von über 2 für eine schlechte Verträglichkeit spricht:

$$\begin{aligned}t_r &= 0,7, \\ t_b &= 3,0, \\ t_c &= 0,7.\end{aligned}$$

Damit liegen alle Werte in einem verträglichen Bereich, obwohl die relativen Fehler in einer Größenordnung von 0,4% bis 0,6% ebenfalls sehr gering sind.

Ein Vergleich der berechneten Daten für die effektiven Kastenlängen mit Literaturwerten gestaltet sich als schwierig, da diese Längen von der Länge der einzelnen Bindungen, der Stärke der Bindungen, den verwendeten Atomen und der Geometrie des Moleküls abhängen. Die Steigung  $b = (1,252 \pm 0,010) \text{ \AA}$  sollte jedoch ungefähr im Rahmen der Bindungslängen einzelner Kohlenstoffbindungen liegen. Nach [6] liegen diese ungefähr in einem Rahmen zwischen  $1,37 \text{ \AA}$  und  $1,54 \text{ \AA}$ . Damit liegt der berechnete Wert etwas unter den Literaturwerten, was sich vermutlich auf die Geometrie des Moleküls zurückführen lässt und in der Fehlerdiskussion näher beleuchtet werden soll.

Für die Analyse der Konzentrationen ist kein Vergleich mit Literaturwerten möglich, da es sich bei der verwendeten Basislösung um eine willkürlich gewählte Mischung handelt und damit ein qualitativer Vergleich nicht möglich ist.

### 4.2 Zusammenstellung der Ergebnisse

Die Auswertung der Spektren der verschiedenen Farbstoffe ergibt, dass bei jedem Farbstoff zwei Wellenlängen maximal absorbiert werden. Es gibt jeweils ein Haupt- und ein Nebenmaximum. Die ermittelten Wellenlängen sowie die Literaturwerte und  $t$ -Werte sind in [Tabelle 1](#) zusammengestellt.

Tab. 1: Zusammengestellt sind die Wellenlängen  $\lambda$  der Haupt- und Nebenmaxima des Absorptionsgrades von rotem, blauem und cyan Farbstoff. Außerdem sind die Literaturwerte für die Hauptmaxima aus [5] mit den zugehörigen  $t$ -Werten eingetragen.

	Wellenlänge $\lambda$	Literaturwert für $\lambda$	$t$ -Wert
roter Farbstoff Hauptmax.	$(522 \pm 3) \text{ nm}$	524 nm	0,7
roter Farbstoff Nebenmax.	$(487 \pm 3) \text{ nm}$	-	-
blauer Farbstoff Hauptmax.	$(605 \pm 3) \text{ nm}$	614 nm	3,0
blauer Farbstoff Nebenmax.	$(562 \pm 3) \text{ nm}$	-	-
cyan Farbstoff Hauptmax.	$(709 \pm 3) \text{ nm}$	707 nm	0,7
cyan Farbstoff Nebenmax.	$(653 \pm 3) \text{ nm}$	-	-

Aus den Wellenlängen der Hauptmaxima können die Längen  $L$  der Kohlenstoffketten zwischen den Stickstoffatomen der verschiedenen Farbstoffe ermittelt werden. Diese Längen  $L$ , die der Kastenlänge entsprechen, sind in [Tabelle 2](#) dokumentiert.

Tab. 2: Zusammengestellt sind die Wellenlängen  $\lambda$  der Haupt- und Nebenmaxima des Absorptionsgrades von roten, blauem und cyan Farbstoff. Außerdem sind die Anzahl an Bindungen  $n$  und die Kastenlänge  $L$  eingetragen.

	Wellenlänge $\lambda$	Bindungsanzahl $n$	Kastenlänge $L$
roter Farbstoff	$(522 \pm 3)$ nm	4	$(8,90 \pm 0,03)$ Å
blauer Farbstoff	$(614 \pm 3)$ nm	6	$(11,33 \pm 0,03)$ Å
cyan Farbstoff	$(707 \pm 3)$ nm	8	$(13,91 \pm 0,03)$ Å

Durch Auftragung dieser Längen  $L$  gegen die Anzahl  $n$  an beteiligten Bindung kann auf die Bindungslänge  $b$  und den Abstand  $y_0$  zwischen den Stickstoffatomen ohne Kohlenstoffketten geschlossen werden. Es ergeben sich folgende Werte:

$$b = (1,252 \pm 0,010) \text{ Å},$$

$$y_0 = (3,87 \pm 0,06) \text{ Å}.$$

Zuletzt kann die Abhängigkeit des Absorptionsgrades  $A$  von der Konzentration  $c$  des blauen Farbstoffs zu folgendem exponentiellem Verlauf ermittelt werden:

$$A(c) = 1 - e^{-ac},$$

Mit folgenden Werten  $a$  für Haupt- und Nebenmaximum:

$$a_{H,b} = 1,4090 \pm 0,0004,$$

$$a_{N,b} = 0,6157 \pm 0,0004.$$

### 4.3 Fehlerdiskussion

Im ersten Versuchsteil fällt als einziger nicht ganz so gut verträglicher Wert der  $t$ -Wert  $t_b = 3,0$  für die Absorptionswellenlänge des blauen Farbstoffes auf. Eine mögliche Ursache ist, dass der Fehler für das Maximum ein wenig zu klein geschätzt wurde. Außerdem ist nicht sicher, wie genau die Herstellerangaben aus [\[5\]](#) tatsächlich sind. Insgesamt liegen die Werte jedoch alle ungefähr im Rahmen dieser Angaben.

Auffällig bei der Auswertung der effektiven Kastenlängen ist, dass die aus den Nebenmaxima errechneten Kastenlängen nicht auf der selben Gerade liegen, wie die aus den Hauptmaxima berechneten Werte. Besonders in [Abbildung 9](#) ist zu erkennen, dass sich die Werte auf einer Gerade parallel zu der Hauptgerade befinden. Daraus lässt sich schließen, dass das verwendete Teilchen-im-Kasten-Modell nicht besonders gut für die Auswertung der Nebenmaxima geeignet ist. Denkbar wäre beispielsweise, dass es sich bei den Nebenmaxima um Sprünge zwischen anderen Energieebenen handelt als angenommen. Auch andere Effekte, die der Einfachheit halber in der Theorie vernachlässigt wurden, könnten eine Rolle spielen. Denkbar wäre hier zum Beispiel, dass der Potentialkasten nicht unendlich hoch ist und die Wände beispielsweise parabelförmig verlaufen.

Die berechneten Kastenlängen der Nebenmaxima unterscheiden sich alle ungefähr um den Faktor 1,5 von den Werten, die aus den Hauptmaxima berechnet wurden. Es wäre also denkbar, dass dieser Faktor in dem Modell vernachlässigt wurde. Außerdem wäre es möglich, dass innerhalb

der Wurzel ein Faktor 2 fehlt, da  $\sqrt{2} \approx 1,5$ . Wie sich dieser fehlende Faktor erklären lässt, ist uns nicht bekannt.

Wie bereits beim Vergleich mit Literaturwerten beschrieben, liegt der berechnete mittlere Bindungsabstand etwas unter den erwarteten Werten. Dies lässt sich aber leicht über die Geometrie der Moleküle erklären: Da die Bindungen unter einem bestimmten Winkel zueinander stehen, ist die effektive Kastenlänge insgesamt kleiner, als die Summe aller einzelnen Bindungslängen. Eine genauere Betrachtung gestaltet sich schwierig, da es sich um komplexe Moleküle mit komplizierter Geometrie und verschiedenen Bindungsstärken handelt.

Bei der numerischen Minimierung der Ausgleichskurve fällt der extrem kleine Fehler auf den Parameter  $a_{H,b} = 1,4090 \pm 0,0004$  auf. Dieser Fehler ist sehr unrealistisch, da die gefundene Ausgleichskurve den Verlauf zwar gut, jedoch nicht perfekt beschreibt und es zu einigen Streuungen um das gewählte Modell kommt. Da bei der Berechnung dieser Unsicherheiten auch die Fehler auf die einzelnen Messwerte entscheidend mit einfließen, ist es wahrscheinlich, dass sich die kleine Unsicherheit aus den extrem kleinen Fehlern der gemessenen Werte für den Absorptionsgrad ergeben. Diese wurden insgesamt vermutlich deutlich zu niedrig geschätzt. Es wäre aber auch denkbar, dass es bei der Bestimmung der Unsicherheit auf den Parameter zu mathematischen Fehlern gekommen ist.

#### 4.4 Verbesserte Messmethoden

Um eine Verbesserung der Messung der Konzentrationsabhängigkeit zu erzielen, könnte man nach jeder Messung den Probenbehälter auswaschen. Dadurch kann vermieden werden, dass eventuelle Rückstände der zuvor gemessenen Farblösung die Konzentration verfälschen. Außerdem gab es in den Pipetten immer kleinere Rückstände in der Plastikspitze, weshalb auch hier eine Verfälschung der Konzentrationen zustande kommen könnte. Daher ist es ratsam, die Flüssigkeitsreste in der Pipette zu beobachten und durch beispielsweise ausschütteln zu minimieren.

Zur Verbesserung der Farbstoffkonzentrationen könnte man auch absolute Konzentrationen des Farbstoffes statt relativen Konzentrationen nutzen. Eine Möglichkeit hierfür wäre, die Masse des Farbstoffs mit einer Feinwaage und daraus die exakte Stoffmenge in der Farblösung zu bestimmen. Dadurch könnte man die absolute Absorptionsstärke des Farbstoffes bestimmen.

Zur Verbesserung der Messung der maximalen Absorptionswellenlängen könnte man auch eine Lampe mit einem UV-Anteil im Spektrum nutzen. Damit könnte man eventuelle Absorptionen bei diesen Wellenlängen untersuchen. Mit Hilfe dieser zusätzlichen Nebenmaxima könnte man das Modell des Potentialkastens verbessern und eventuell Rückschlüsse auf die Verhältnisse der Kastenlängen von den Haupt- und Nebenmaxima ziehen.

Eine letzte Möglichkeit zur Verbesserung ist es den Raum noch besser abzdunkeln und jegliche reflektierende Oberflächen im Raum zu überdecken um unerwünschte Einstrahlung von Licht auf dem Messgerät zu vermeiden.

## Literatur

- [1] Dr. Christof Bartels, Dr. Lukas Bruder, Dr. Thomas Pfohl: *Versuch 78 - Farbstoffe, Versuchsbeschreibung des Physiklabors für Anfänger\*innen*, (2022)
- [2] Paul A. Tipler, Gene Mosca: *Physik*, (2015), Abschnitt 33.1 und 33.2 „Teilchen im Kasten“
- [3] Dr. Christof Bartels, Dr. Lukas Bruder, Dr. Thomas Pfohl: *Datenanalyse Teil A & B - Skript zur Vorlesung am 06.09.2021 und 28.02.2022*, (2021/22)
- [4] Walter Steffen Falk: *Der eindimensionale Kasten; das Elektronengas-Modell* <https://silo.tips/download/2-der-eindimensionale-kasten-das-elektronengas-modell>, (2017), (aufgerufen am: 04.03.2022)
- [5] Sigma-Aldrich Chemie GmbH: *1,1-Diethyl-2,2-cyaninioidid, Pinacyanolioidid, 1,1-Diethyl-2,2-dicarbocyaninioidid*, <https://www.sigmaaldrich.com/DE/de/product/sial/323764>, (2022), (aufgerufen am: 04.03.2022)
- [6] Dr. Björn Lippold: *Chemie.de: Bindungslänge*, [https://www.chemie.de/lexikon/Bindungsl%C3%A4nge.html#\\_ref-0/](https://www.chemie.de/lexikon/Bindungsl%C3%A4nge.html#_ref-0/), (2022), (aufgerufen am: 04.03.2022)

## 6 Anhang

### 6.1 Tabellen und Grafiken

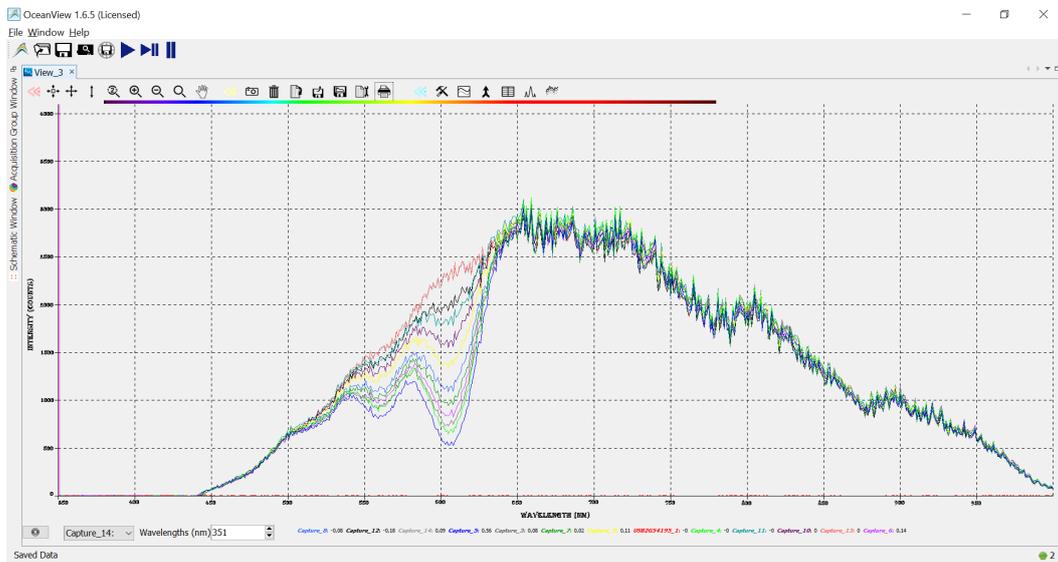


Abb. 13: Screenshot der verwendeten Software „OceanView“ mit allen Spektren der unterschiedlichen Farbstoffkonzentrationen.

SPA - 1000	100	$\pm 1.5$	$\leq 1.0$
100~1000	500	$\pm 1.5$	$\leq 0.5$
$\mu\text{l}$	1000	$\pm 1.2$	$\leq 0.5$
SPA - 5000	1000	$\pm 1.5$	$\leq 0.5$
1000~5000	2500	$\pm 1.0$	$\leq 0.5$
$\mu\text{l}$	5000	$\pm 1.0$	$\leq 0.5$

Abb. 14: Unsicherheiten der Pipetten aus der Gebrauchsanleitung aus [1].

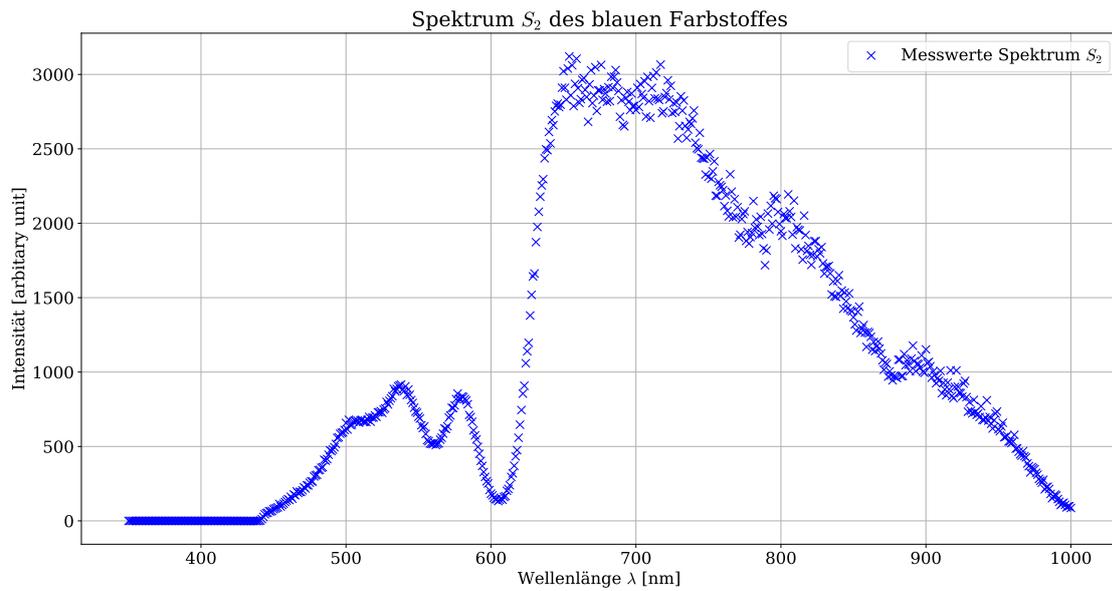


Abb. 15: Eingezeichnet ist das Spektrum  $S_2$  der blauen Farblösung, wobei jeder eingetragene Wert ein Mittelwert aus den 100 Messreihen ist. Dabei ist die Intensität in arbitrary units gegen die Wellenlänge  $\lambda$  in nm aufgetragen.

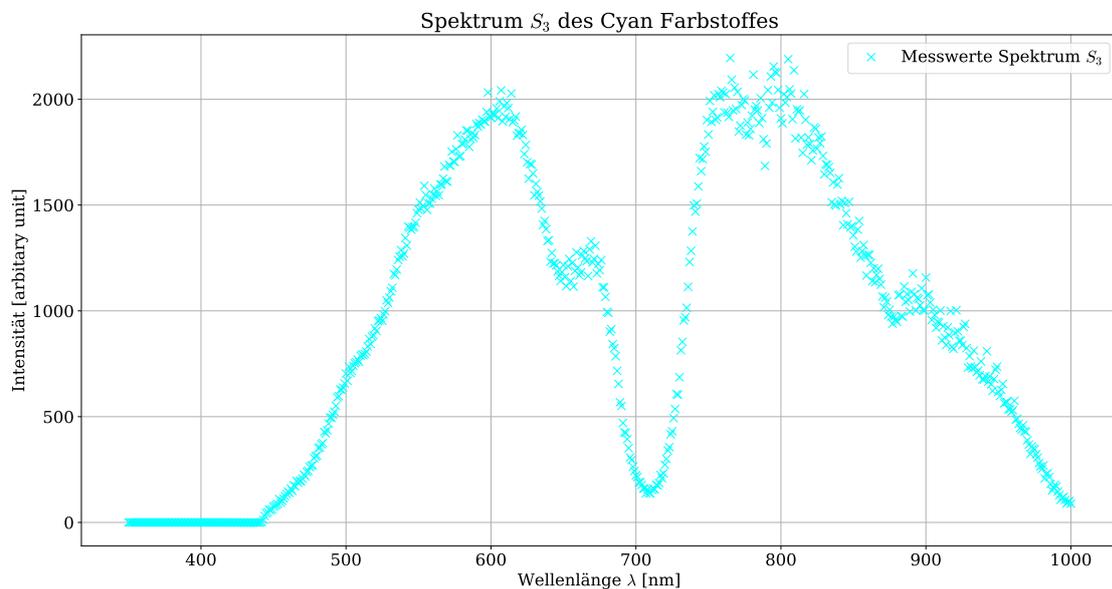


Abb. 16: Eingezeichnet ist das Spektrum  $S_3$  der cyan Farblösung, wobei jeder eingetragene Wert ein Mittelwert aus den 100 Messreihen ist. Dabei ist die Intensität in arbitrary units gegen die Wellenlänge  $\lambda$  in nm aufgetragen.

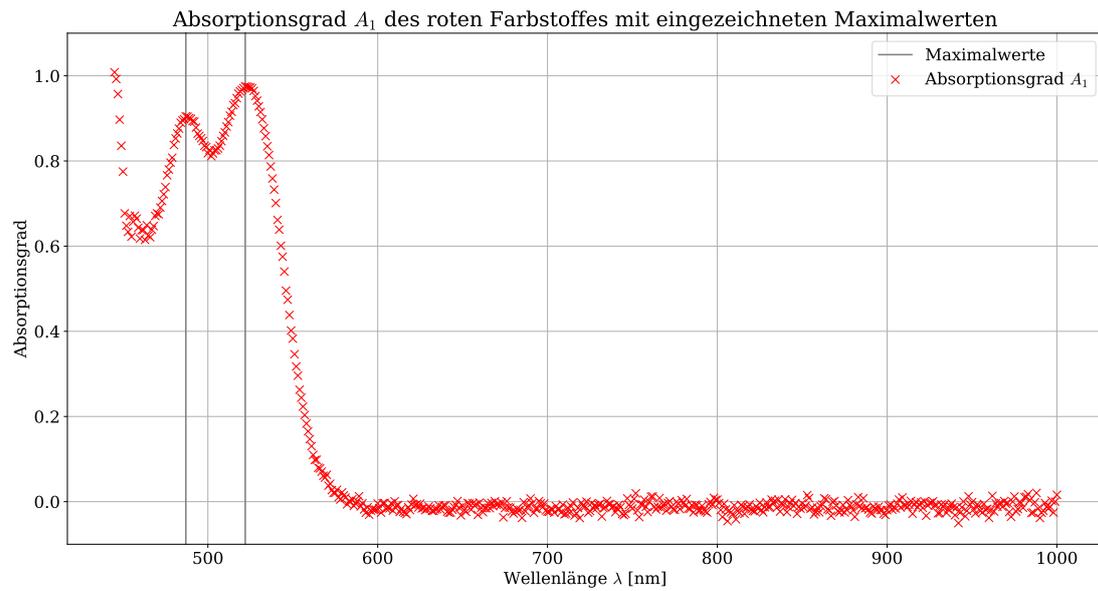


Abb. 17: Eingezeichnet ist der Absorptionsgrad  $A_1$  des roten Farbstoffes. Dabei ist der Absorptionsgrad gegen die Wellenlänge  $\lambda$  in nm aufgetragen und das Rauschen wurde abgeschnitten. Außerdem sind die zwei Maximalwerte der Absorption eingetragen.

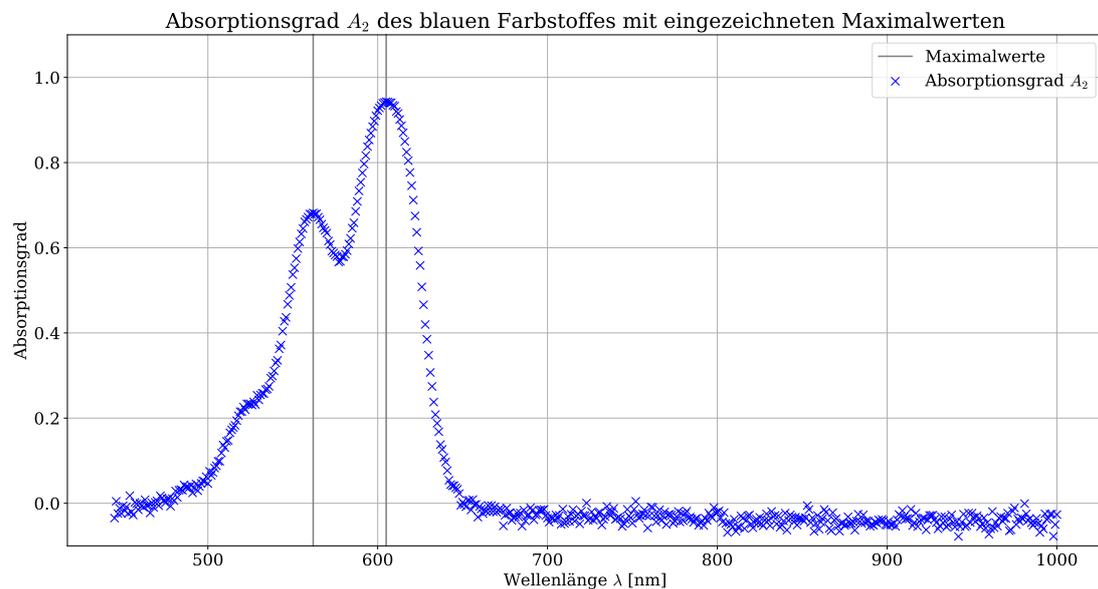


Abb. 18: Eingezeichnet ist der Absorptionsgrad  $A_2$  des blauen Farbstoffes. Dabei ist der Absorptionsgrad gegen die Wellenlänge  $\lambda$  in nm aufgetragen und das Rauschen wurde abgeschnitten. Außerdem sind die zwei Maximalwerte der Absorption eingetragen.

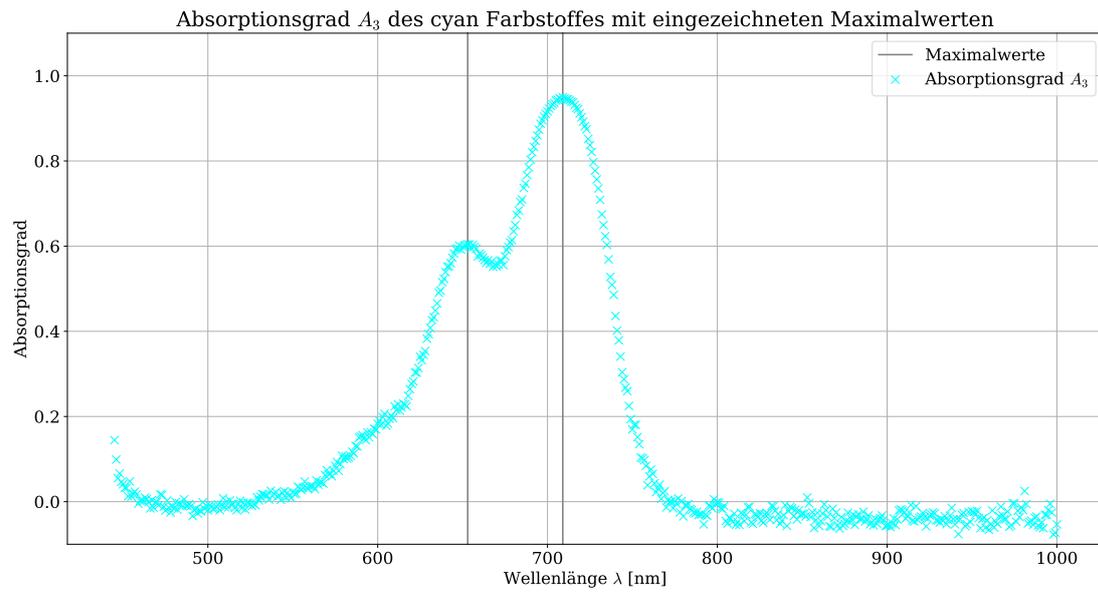
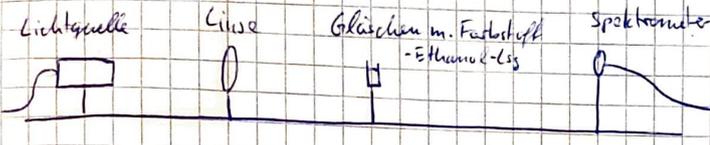


Abb. 19: Eingezeichnet ist der Absorptionsgrad  $A_3$  des cyan Farbstoffes. Dabei ist der Absorptionsgrad gegen die Wellenlänge  $\lambda$  in nm aufgetragen und das Rauschen wurde abgeschnitten. Außerdem sind die zwei Maximalwerte der Absorption eingetragen.

## 6.2 Laborbuch

Versuch 78 Farbstoffe 03.03.22

1) Versuchsaufbau / Durchführung



- Fenster sind abgedunkelt, Tür offen
- Es werden pro Farbe 100 Messreihen genommen

1.1

- nur Ethanol
- roter Farbstoff
- blauer Farbstoff
- Cyanblauer Farbstoff

1.2

- herstellen von 225 ml blauer Farblösung
- Messung von 100%, 50%, 10% Farblösung
- Dosierung der Lösung und d. Ethanol mit Pipette
- Unsicheren Pipetten siehe Foto
- 4 ml Gesamtlösung

2) Messung

Bei der Messung des Vergleichspektrums fällt auf, dass <sup>sich</sup> je nach Drehung des Probebehälters, die Intensität des Spektrums ändert. (eine Seite ist matt)  
Wir nehmen die Ausrichtung mit der höheren Intensität (transparente Seite)

2.1 Messdaten: siehe Dateien Referenz: „50 Referenz“

roter Farbstoff: „S1 rot“  
blauer Farbstoff: „S1 blau“  
Cyanblauer Farbstoff: „S1 cyan“

2.2

		Pipette Farbe	Farbstoff V in ml	Pipette Ethanol	Ethanol V in ml
100%	„Reihe 1“	gr. Pipette	4	✓	0
50%	„Reihe 2 90“	gr.	3,6	kl.	0,4
20%	„	gr.	3,2	kl.	0,8
70%	„	gr.	2,8	gr	1,2
	⚠ Gefäß ist überglänzt ⚠	gr	2,4	gr	1,6

Es ist aufgefallen, dass die Pipetten nicht gleich angezogen wurden.  
Die Messreihen wurden erneut durchgeführt.

Abb. 20: Laborbuch, Seite 1

Neue Messreihe (Umschweifen s. Foto) Pipette wird bis zum 1. Wickelstapel gedrückt

Volumen V Farbstoff in ml	vom Pipette	Volumen V Ethanol in ml	vom Pipette
4,0	gr	/	<del>gr</del> /
3,6	gr	0,4	kl
3,2	gr	0,8	kl
2,8	gr	1,2	gr
2,4	gr	1,6	gr
2,0	gr	2,0	gr
1,6	gr	2,4	gr
1,2	gr	2,8	gr
0,8	kl	3,2	gr
0,4	kl	3,6	gr
0,0	/	4,0	gr

Tutor: Mehdi A. Belhaj

Abb. 21: Laborbuch, Seite 2

## Tabellenverzeichnis

1	Maximal absorbierten Wellenlängen mit Literaturwerten . . . . .	13
2	Kastenlängen . . . . .	14

## Abbildungsverzeichnis

1	Versuchsaufbau . . . . .	2
2	Spektrum der Vergleichslösung . . . . .	3
3	Spektrum der roten Farblösung . . . . .	4
4	Spektren aller Farblösungen und der Vergleichslösung . . . . .	4
5	Absorptionsgrad der roten Farblösung . . . . .	5
6	Absorptionsgrad der roten Farblösung ohne Rauschen . . . . .	6
7	Skizzen der Cyanin-Moleküle . . . . .	7
8	Skizze der Potentialkästen . . . . .	7
9	Alle berechneten effektiven Kastenlängen $L_i$ für die Haupt- und Nebenmaxima . . . . .	9
10	Effektiven Kastenlängen $L_i$ für die Hauptmaxima mit linearer Regression . . . . .	10
11	Absorptionsgrad der Haupt- und Nebenmaxima gegen die relative Konzentration . . . . .	11
12	Absorptionsgrad der Haupt- und Nebenmaxima gegen die relative Konzentration mit angepasster Funktion . . . . .	12
13	Screenshot von OceanView . . . . .	17
14	Unsicherheiten der Pipetten . . . . .	17
15	Spektrum der blauen Farblösung . . . . .	18
16	Spektrum der cyan Farblösung . . . . .	18
17	Absorptionsgrad der roten Farblösung ohne Rauschen und mit Maximalwerten für die Absorption . . . . .	19
18	Absorptionsgrad der blauen Farblösung ohne Rauschen und mit Maximalwerten für die Absorption . . . . .	19
19	Absorptionsgrad der cyan Farblösung ohne Rauschen und mit Maximalwerten für die Absorption . . . . .	20
20	Laborbuch, Seite 1 . . . . .	21
21	Laborbuch, Seite 2 . . . . .	22