

Robert Strothmann, 5040218
Jonas Scholz, 5153815
David Ueberle, 4903184

Jonas.Scholz@fu-berlin.de
Robert.Strothmann@fu-berlin.de
Ueberleda@zedat.fu-berlin.de

Laborbericht / Versuchsprotokoll

K11-Gasdiffusion

Datum der Versuchsdurchführung: 19. Juni 2018
Datum der Protokolleinreichung: 2. August 2018
Assistent/in:
Dateiname:S11-5040218-5153815-4903184-1

Mit der Einreichung wird versichert, dass das Protokoll von den oben eingetragenen Personen in gemeinschaftlicher Arbeit angefertigt worden ist und dass sämtliche Quellen, die zur Erstellung des Protokolls genutzt wurden, im 6. Teil des Protokolls (Literatur) kenntlich gemacht worden sind.

1 Einleitung

Aufgrund der Interaktion von Materie mit elektromagnetischer Strahlung ist es möglich diese zu untersuchen und somit zu charakterisieren. Dies kann auf qualitative und/oder auf quantitative Weise geschehen. Im Falle der UV/Vis-Spektroskopie nutzt man die Absorption vor allem von Molekülen und Komplexen im sichtbaren sowie im ultravioletten Bereich des Lichtes. Mit dem Lambert-Beerschen Gesetz wird die Beziehung zwischen der Konzentration und der Extinktion beschrieben. Dieses Gesetz soll im Folgenden am Beispiel des Kristallviolett untersucht werden.

2 Theoretische Grundlagen

Grundvoraussetzung der UV/Vis-Spektroskopie ist eine Lichtquelle die monochromatisches Licht emittiert bzw. eine polychromatische Lichtquelle bei der das Licht anschließend durch ein Prisma oder ein Gitter aufgespalten wird. Diese wird nun in zwei Strahlen aufgespalten. Der eine durchläuft nur eine mit dem Lösungsmittel gefüllte Küvette und dient der Referenz, der Andere durchläuft die gleiche Küvette jedoch gefüllt mit dem Analyten in dem Lösungsmittel. Da jedes Medium einen Teil der Strahlung absorbiert kann nun nach Durchlaufen der beiden Küvetten subtraktiv der alleinige Beitrag des Analyten ermittelt werden. Die Änderung der Intensität ist proportional zum molaren dekadischen Extinktionskoeffizienten, der Intensität des Lichtes, der Konzentration des Analyten und der Länge des Weges, den das Licht geht, wie in Formel 1 beschrieben.

$$-dI = \epsilon \cdot I \cdot c \cdot dL \quad (1)$$

Unter der Voraussetzung, dass ϵ keine Funktion von c ist, was dann der Fall ist, wenn die Photoabsorptionswahrscheinlichkeit für jedes Analytmolekül gleich ist, ist es möglich die Gleichung 1 über den gesamten Weg L zu integrieren. Dies ist dann einfach möglich, wenn vorher durch I geteilt wurde.

$$\frac{dI}{I} = -\epsilon \cdot c \cdot dL \quad (2)$$

$$\int_{I_{L=0}}^{I_{L=L_{max}}} \frac{dI}{I} = - \int_{I_{L=0}}^{I_{L=L_{max}}} \epsilon \cdot c \cdot dL \quad (3)$$

Durch das Integrieren ergibt sich somit Gleichung 4

$$\ln \frac{I_{L=0}}{I_{L=L_{max}}} = \epsilon \cdot c \cdot L_{max} \quad (4)$$

Durch Ersetzen des natürlichen Logarithmus durch den dekadischen und des Extinktionskoeffizienten durch den dekadischen Extinktionskoeffizienten erhält man nun das Lambert-Beersche Gesetz in Gleichung 5.

$$\log \frac{I_{L=0}}{I_{L=L_{max}}} = \epsilon_{10} \cdot c \cdot L_{max} \quad (5)$$

$I_{L=0}$ entspricht praktisch der Intensität des Lichtes, dass den Weg durch die Referenzküvette und $I_{L=L_{max}}$ der Intensität des Lichtes, dass den Weg durch die Probenküvette gegangen ist. Somit ist dieser Bruch gleich der Transmission T der Probe, welche durch das Spektrometer gemessen wird.

3 Durchführung

Es wurden 100 ml einer Stammlösung von Kristallviolett mit einer Konzentration von $c = 1.00 \cdot 10^{-4}$ M in Ethanol hergestellt. Durch Verdünnen der ersten Stammlösung im Verhältnis 1 : 10 wurde die zweite Stammlösung mit einer Konzentration von $c = 1.00 \cdot 10^{-5}$ M hergestellt. Diese Lösung diente als Basis einer Verdünnungsreihe bei der jeweils 10 ml folgender Konzentrationen verdünnt wurden: $c = 1.00 \cdot 10^{-6}$ M, $3.00 \cdot 10^{-6}$ M, $5.00 \cdot 10^{-6}$ M, $8.00 \cdot 10^{-6}$ M, $1.50 \cdot 10^{-5}$ M, $5.00 \cdot 10^{-5}$ M und $8.00 \cdot 10^{-5}$ M. Die einzelnen Verdünnungen wurden dann in dem Spektrophotometer JASCO V-750 hinsichtlich der Absorption untersucht. In der Referenzküvette befand sich der gleiche Ethanol mit dem die Verdünnungsreihe gemacht wurde. Anschließend wurden die Messdaten mittels IGOR Pro ausgewertet.

4 Auswertung

Um die Extinktionsspektren zu erzeugen wurde das Ethanol/Ethanol Transmissionspektrum I_{Leer} (siehe Abbildung 6.1) jeweils durch die Transmissionspektren I_{Substanz} (siehe Abbildung 6.2), welche verschiedenen Konzentrationen des Kristallvioletts gelöst in Ethanol enthielten, dividiert und anschließend der dekadische Logarithmus aus dem Quotienten gebildet. Die erhaltenen Extinktionsgraphen wurden in Abbildung 4.1 aufgetragen. Es wurde angenommen, dass in der Analyse die Messungenauigkeit der Waage die größte Fehlerquelle darstellt. Deshalb wurde die Fehlerbetrachtung lediglich am Ende des Abschnitts gesamt durchgeführt. Die Absorption der $8 \cdot 10^{-5} \frac{\text{mol}}{\text{L}}$ Probe war so stark, dass keine diskreten Werte im Bereich des Maximums gefunden werden konnten. In der Abbildung wurde daher bei einer Extinktion von 3 der Graph abgeschnitten, um die restlichen Maxima besser erkennen zu können.

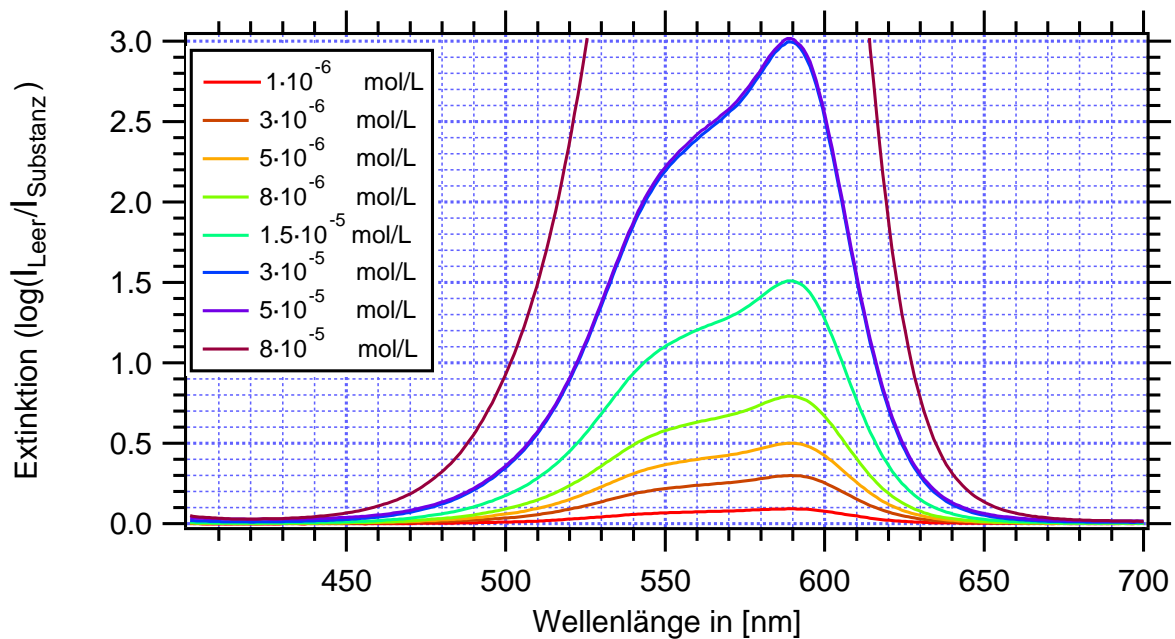


Abbildung 4.1: Extinktionen einer Kristallviolett/Ethanol Lösung verschiedener Konzentrationen. Die zugrundeliegenden Transmissionsmessungen wurden mit einem JASCO V-750 Spektrometer aufgenommen unter Verwendung von PMMA Küvetten mit einer Wegstrecke $L = 10\text{mm}$. Die Graphik wurde mit Igor Pro 6.37 erstellt.

Durch das Anlegen eines *off set* konnte mithilfe des Programms *Igor Pro 6.37* die Extension am Absorptionsmaximum für jede Konzentration abgelesen werden. Das Absorptionsmaximum wurde bei 598nm gefunden. Hierfür wurde der Abstand des Extrema zum *off set* bestimmt. Die Werte wurden in Tabelle 4.1 zusammengefasst.

Tabelle 4.1: Ermittelte Extension am Absorptionsmaximum aller unterschiedlichen, gemessenen Konzentrationen. Die Werte wurden als Differenz der Kurve zum Wert erhalten

Konzentration $\left[\frac{\text{mol}}{\text{L}}\right]$	Extension
$1 \cdot 10^{-6}$	0.0910
$3 \cdot 10^{-6}$	0.2978
$5 \cdot 10^{-6}$	0.4993
$8 \cdot 10^{-6}$	0.7912
$15 \cdot 10^{-6}$	1.5088
$30 \cdot 10^{-6}$	2.9955
$50 \cdot 10^{-6}$	3.1669
$80 \cdot 10^{-6}$	5.0021

Die so erhaltenen Wertepaare wurden anschließend mit dem Programm *python 3* gegeneinander aufgetragen um eine diskrete Funktion der Extension über der Konzentration

zu erhalten. Anschließend wurde durch die ersten sechs, als linear anzunehmende Wertepaare eine lineare Regression durchgeführt. Dieses Vorgehen wird in Abbildung 4.2 gezeigt.

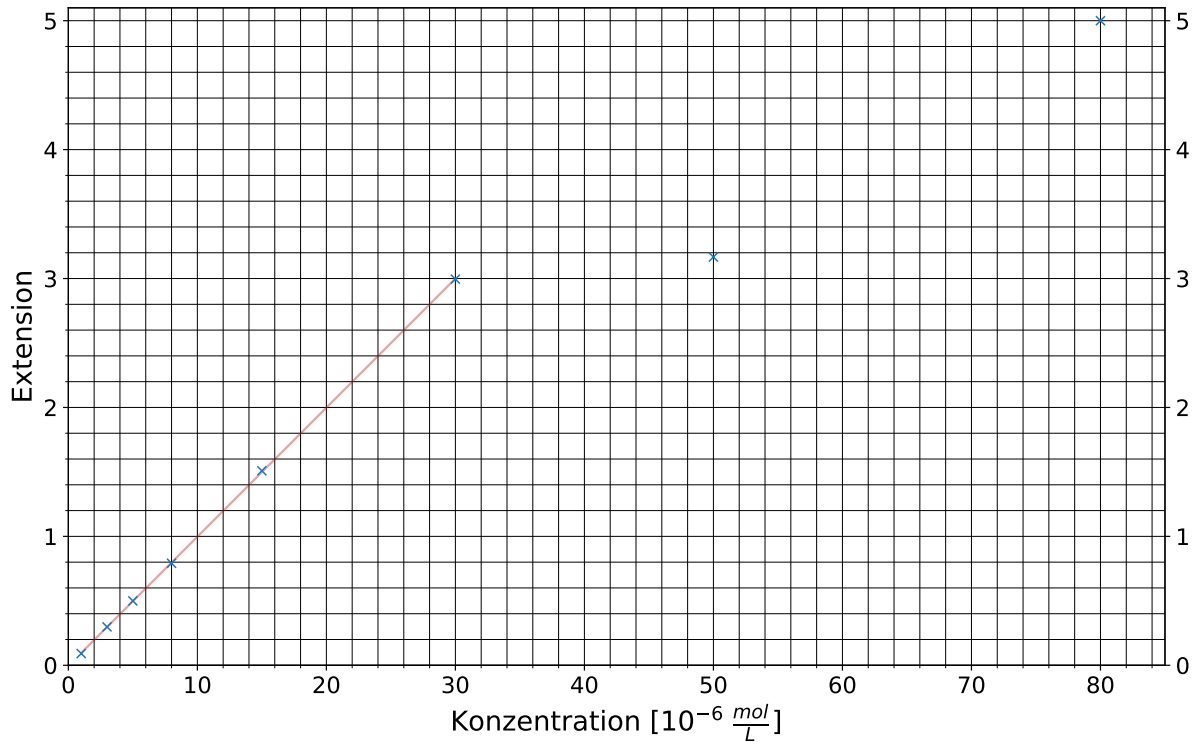


Abbildung 4.2: Auftragung der Extension am Maximum (bei 598 nm) gegen die Konzentration. In rot ist die Ausgleichsgerade der durchgeführten linearen Regression der sechs ersten Werte dargestellt. Abbildung und Regression wurden in *python 3* durchgeführt.

Die Steigung der vorliegenden Ausgleichsgerade entspricht nach Gleichung ?? in einer Näherung dem Produkt aus dekadische Extinktionskoeffizient sowie Küvettenlänge. Die Näherung resultiert aus der hohen Verdünnung der betrachteten Lösungen, also dem linear anzunehmenden Verlauf der Extinktion mit der Konzentration. Das exemplarisch gezeigte Vorgehen wurde für 13 weitere Wellenlängen im Abstand von ungefähr 10nm wiederholt um molare dekadische Extinktionskoeffizienten für unterschiedliche Wellenlängen zu erhalten. Die Graphen zu den weiteren Wellenlängen zeigen gleiche Trends und werden hier nicht explizit gezeigt. Für eine gegebene Küvettenlänge von 10mm ergeben sich für die 14 betrachteten Wellenlängen in Tabelle ?? gezeigte dekadische Extinktionskoeffizient. Da die Einheit $\left[\frac{\text{L}}{\text{mol} \cdot \text{cm}}\right]$ für die dekadische Extinktionskoeffizient eine gängige Darstellung ist, werden die Ergebnisse in dieser Einheit gezeigt.

Tabelle 4.2: Ermittelte dekadischen Extinktionskoeffizient für verschiedene Wellenlängen

Wellenlänge [nm]	molare dekadische Extinktionskoeffizient $[10^3 \cdot \frac{\text{L}}{\text{mol} \cdot \text{cm}}]$
510.7	1.21
520.6	1.93
530.6	3.06
540.6	4.63
550.5	6.27
560.6	7.37
570.4	8.57
580.4	9.40
590.4	9.99
598.0	10.01
600.3	8.32
610.3	4.98
620.2	2.33
630.2	0.96

Werden die molaren dekadischen Extinktionskoeffizienten über der Wellenlänge aufgetragen ergibt sich Abbildung 4.3.

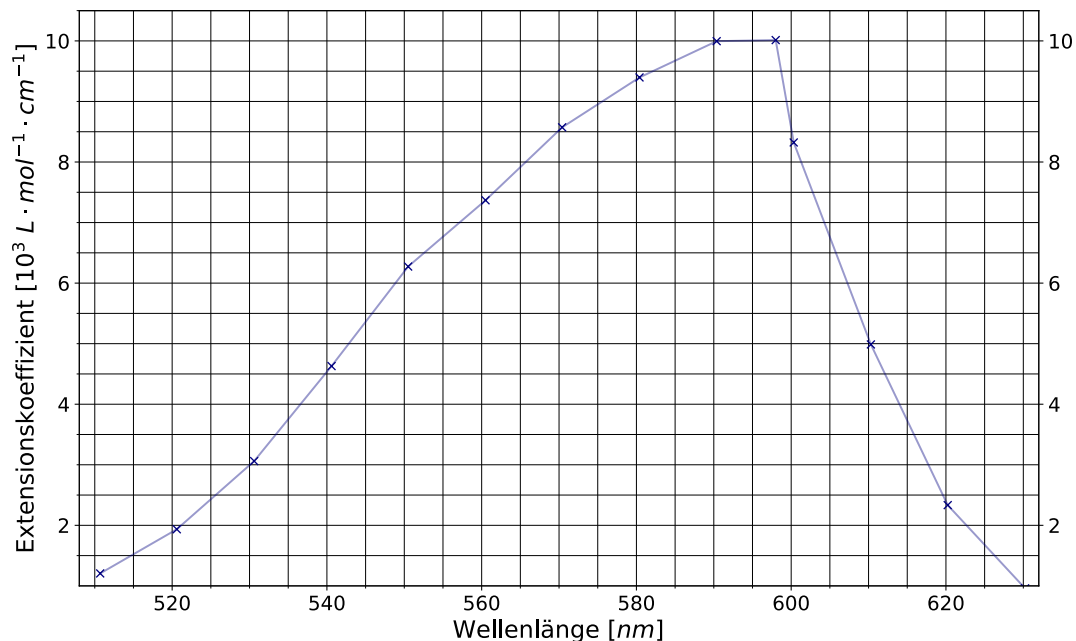


Abbildung 4.3: Auftragung der dekadischen Extinktionskoeffizienten über den untersuchten Wellenlängen. Kreuze verdeutlichen die erhaltenen Werte und Linien die zu erwartenden dekadischen Extinktionskoeffizienten für alle weiteren Wellenlängen als Kurve unter der Annahme eines linearen Verhältnisses zwischen den errechneten Werten

Zwar sind die verschiedenen Werte für die untersuchten Wellenlängen diskret, es kann jedoch unter Annahme eines linearen Verhaltens zwischen den Wellenlängen eine genäherte Kurve erhalten werden. Durch diese Kurve können Aussagen über alle weiteren Wellenlängen unter Näherung einer hoch verdünnten Lösung getroffen werden.

Fehlerbetrachtung

Wie bereits am Anfang dieses Abschnitts erwähnt, wurde der Fehler des durchgeführten Experimentes vor allem durch das Abwiegen des Kristallvioletts gegeben. Die verwendete Wage als *electronic balance* Modell von KERN & Sohn GmbH zeigte beim abwiegen einer Mikrodosis der Substanz eine große Schwankung des Gewichts. Ebenfalls konnte beim Umschütten der Substanz vom Wegepapier in das Versuchsgefäß nicht sichergestellt werden, dass die gesamte Menge überführt wurde. Diese beiden stark fehlerbehafteten Vorgänge für eine sehr kleine Menge an Substanz lässt eine ebenfalls stark fehlerbehaftete Konzentration resultieren. Da in Abbildung 4.2 ein linearer Verlauf der Ausgleichsgerade bei geringen Konzentrationen vorliegt, kann vermutet werden, dass die Unsicherheit in der Konzentration keinen Fehler auf die Ergebnisse folgen lässt. Da die Stammlösung bereits vor Beginn des Experiments eine fehlerbehaftete Konzentration besaß stimmen zwar die vorliegenden Konzentrationen nicht, jedoch die erhaltenden Trends der molaren dekadischen Extinktionskoeffizienten aus der Rechnung.

5 Zusammenfassung

Die erhaltene Kurve der molaren dekadischen Extinktionskoeffizienten über der Wellenlänge zeigt eine gute Übereinstimmung mit der Erwartung (vgl. Abbildung 5.1). Für das gemessene Absorptionsmaximum bei 598nm wird der höchste Extinktionskoeffizienten gefunden.

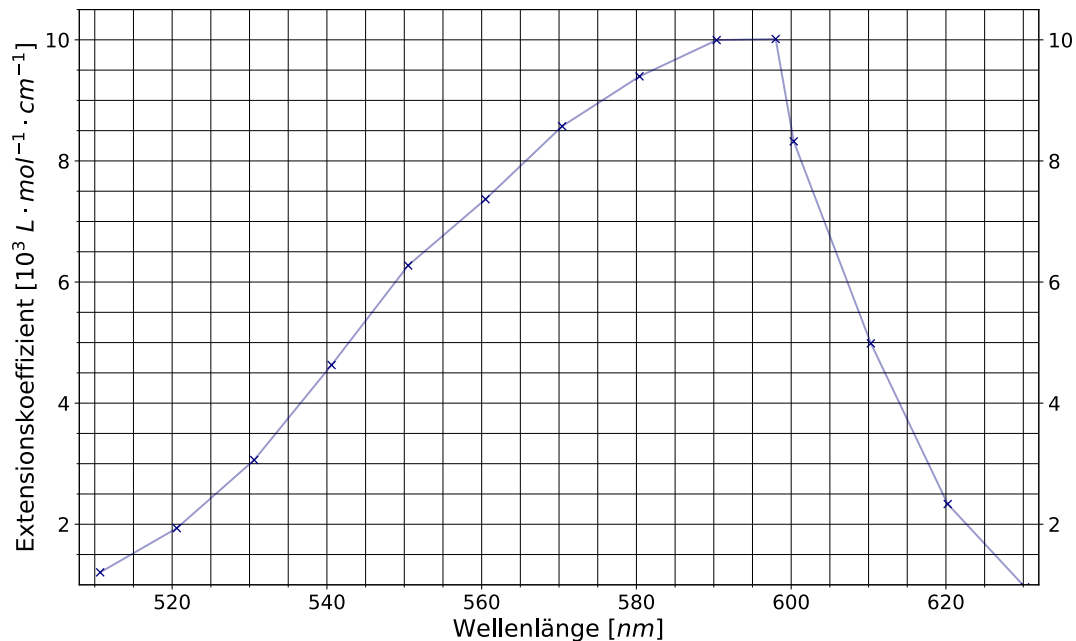


Abbildung 5.1: Auftragung der dekadischen Extinktionskoeffizienten über den untersuchten Wellenlängen. Kreuze verdeutlichen die erhaltenen Werte und Linien die zu erwartenden dekadischen Extinktionskoeffizienten für alle weiteren Wellenlängen als Kurve unter der Annahme eines linearen Verhältnisses zwischen den errechneten Werten

Da keine Vergleichswerte vorlagen wird die Qualität der Ergebnisse mit einer Kausalitätsanalyse überprüft. Zum Einen entspricht das Ergebnis dem nach der Absorptionsmessung erwarteten Verlauf. Zum Anderen liegen die relativen Werte der molaren dekadischen Extinktionskoeffizienten mit Werten von 200 bis 1000 $\frac{\text{L}}{\text{mol} \cdot \text{cm}}$ in zu erwartenden Größenordnungen für organische Farbstoffe.

Der Fehler durch das Abwiegen und Überführen konnte identifiziert werden, hat jedoch keinen großen Einfluss auf die relativen Ergebnisse. Für weitere Analyse der UV/Vis Absorption dieses Farbstoffes sollte, sofern die absolute Konzentration Relevanz hat, dieser Fehler mehr berücksichtigt werden. So kann z.B durch die erhaltenen Daten keine deutliche Aussage gemacht werden, ab welcher Konzentration die Lösung nicht mehr als ideal anzunehmen ist, da die vorliegenden Konzentrationen sehr stark fehlerbehaftet sind.

6 Rohdaten

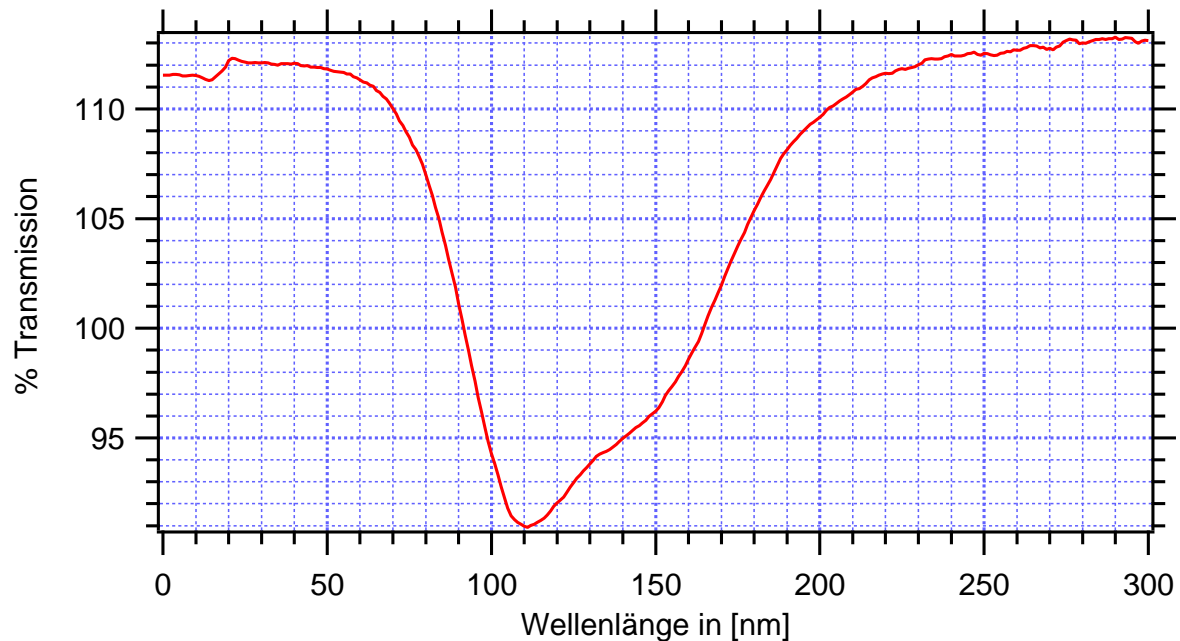


Abbildung 6.1: relative Transmission der Ethanol/Ethanol Probe im Spektralbereich 400 - 700 nm. Der Graph wurde mit Igor Pro 6.37 erstellt. Als Spektrometer wurde das JASCO V-750 verwendet mit PMMA Küvetten ($L = 10\text{mm}$).

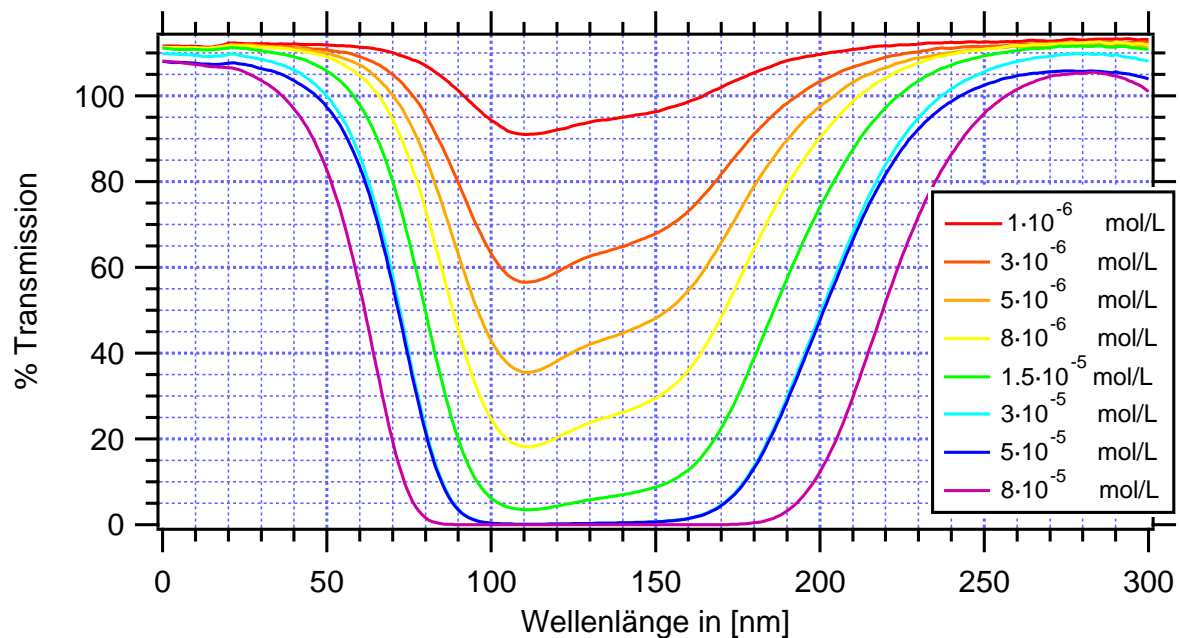


Abbildung 6.2: relative Transmission der Kristallviolett/Ethanol Lösung verschiedener Konzentrationen im Spektralbereich 400 - 700 nm. Der Graph wurde mit Igor Pro 6.37 erstellt. Als Spektrometer wurde das JASCO V-750 verwendet mit PMMA Küvetten ($L = 10\text{mm}$).

Tabelle 6.1: Rohdaten der relativen Transmissionen ethanolischer Lösungen von Kristallviolett im Spektralbereich 400-700 nm. Als Spektrometer wurde das JASCO V-750 verwendet mit PMMA Küvetten ($L = 10\text{mm}$).

λ in nm	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-6}$
700.0	111.02	109.799	107.964	108.083	111.544	111.206	111.347	111.248
699.0	111.005	109.766	107.903	107.998	111.533	111.188	111.299	111.234
698.0	110.933	109.722	107.834	107.936	111.542	111.238	111.25	111.245
697.0	110.854	109.71	107.764	107.914	111.581	111.232	111.212	111.233
696.0	110.783	109.683	107.758	107.86	111.57	111.281	111.185	111.216
695.0	110.779	109.649	107.715	107.804	111.561	111.296	111.155	111.254
694.0	110.737	109.618	107.729	107.681	111.51	111.239	111.186	111.256
693.0	110.763	109.588	107.718	107.58	111.499	111.108	111.161	111.242
692.0	110.797	109.524	107.689	107.508	111.514	111.007	111.175	111.221
691.0	110.823	109.49	107.639	107.413	111.54	110.986	111.172	111.174
690.0	110.801	109.387	107.531	107.314	111.521	111.028	111.1	111.185
689.0	110.763	109.308	107.455	107.192	111.487	110.978	111.033	111.16
688.0	110.705	109.199	107.395	107.072	111.408	110.964	110.997	111.107
687.0	110.663	109.174	107.367	106.913	111.342	110.974	110.989	111.094
686.0	110.648	109.137	107.344	106.811	111.301	111.017	110.996	111.084
685.0	110.663	109.175	107.284	106.712	111.336	111.112	111.134	111.122
684.0	110.783	109.221	107.297	106.718	111.464	111.178	111.273	111.224
683.0	110.842	109.267	107.33	106.69	111.592	111.273	111.339	111.278
682.0	110.921	109.294	107.397	106.672	111.739	111.382	111.399	111.461
681.0	111.02	109.403	107.433	106.57	111.907	111.445	111.51	111.55
680.0	111.14	109.594	107.586	106.531	112.197	111.645	111.766	111.708
679.0	111.187	109.705	107.618	106.469	112.306	111.667	111.901	111.718
678.0	111.139	109.665	107.632	106.353	112.299	111.748	111.862	111.685
677.0	111.107	109.5	107.469	106.093	112.225	111.692	111.806	111.644
676.0	111.016	109.345	107.35	105.818	112.169	111.664	111.754	111.623
675.0	111.041	109.183	107.287	105.482	112.134	111.559	111.814	111.6
674.0	110.929	109.032	107.142	105.174	112.107	111.525	111.831	111.554
673.0	110.812	108.92	106.98	104.817	112.095	111.507	111.832	111.456
672.0	110.727	108.811	106.771	104.438	112.112	111.593	111.729	111.378
671.0	110.607	108.672	106.497	103.982	112.093	111.545	111.674	111.324
670.0	110.523	108.478	106.287	103.549	112.103	111.54	111.568	111.275
669.0	110.354	108.323	106.124	103.101	112.124	111.415	111.572	111.24
668.0	110.254	108.136	105.982	102.665	112.098	111.424	111.506	111.233
667.0	110.13	107.963	105.849	102.149	112.042	111.355	111.487	111.202
666.0	109.962	107.695	105.586	101.579	112.026	111.319	111.396	111.17
665.0	109.844	107.456	105.364	100.981	112.002	111.335	111.339	111.099
664.0	109.675	107.215	105.034	100.278	112.068	111.34	111.299	111.049
663.0	109.573	106.988	104.717	99.5612	112.065	111.322	111.234	110.984

Tabelle 6.1: Rohdaten der relativen Transmissionen ethanolischer Lösungen von Kristallviolett im Spektralbereich 400-700 nm. Als Spektrometer wurde das JASCO V-750 verwendet mit PMMA Küvetten ($L = 10\text{mm}$).

λ in nm	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-6}$
662.0	109.411	106.683	104.333	98.7148	112.055	111.324	111.161	110.907
661.0	109.27	106.302	103.938	97.8673	112.053	111.27	111.063	110.767
660.0	109.037	105.963	103.507	96.9289	112.08	111.233	111.032	110.667
659.0	108.795	105.569	103.044	95.9404	112.06	111.15	110.943	110.509
658.0	108.609	105.149	102.544	94.8683	111.973	111.158	110.907	110.42
657.0	108.423	104.618	102.087	93.7577	111.955	111.209	110.859	110.268
656.0	108.102	104.082	101.596	92.5356	111.975	111.11	110.761	110.144
655.0	107.748	103.517	101.025	91.1449	111.911	110.965	110.55	110.035
654.0	107.408	102.919	100.478	89.7158	111.902	110.849	110.319	109.873
653.0	107.037	102.251	99.8337	88.0731	111.892	110.865	110.235	109.694
652.0	106.641	101.52	99.0684	86.4108	111.897	110.859	110.142	109.495
651.0	106.202	100.736	98.2328	84.5538	111.844	110.802	110.043	109.261
650.0	105.745	99.8774	97.3178	82.6298	111.814	110.657	109.901	109.037
649.0	105.244	98.9558	96.4023	80.4751	111.772	110.511	109.668	108.758
648.0	104.679	97.9363	95.3788	78.254	111.711	110.388	109.461	108.443
647.0	104.073	96.7927	94.2942	75.914	111.695	110.294	109.217	108.061
646.0	103.476	95.6239	93.0812	73.4531	111.685	110.163	108.991	107.609
645.0	102.732	94.3434	91.7463	70.783	111.653	110.117	108.721	107.169
644.0	101.921	92.9672	90.2525	67.9593	111.594	110.014	108.431	106.773
643.0	101.015	91.4228	88.6885	64.9888	111.592	109.842	108.143	106.317
642.0	100.052	89.7045	87.0457	61.8586	111.467	109.596	107.836	105.853
641.0	98.996	87.8985	85.3034	58.6106	111.412	109.319	107.541	105.288
640.0	97.8492	85.9252	83.3707	55.2368	111.325	109.094	107.114	104.708
639.0	96.593	83.7744	81.3108	51.7419	111.23	108.831	106.713	104.057
638.0	95.2467	81.4811	79.098	48.1343	111.181	108.569	106.188	103.369
637.0	93.8238	79.0659	76.7361	44.463	111.085	108.203	105.642	102.547
636.0	92.261	76.5277	74.1779	40.7309	111.027	107.891	104.984	101.685
635.0	90.5288	73.8249	71.4572	36.9747	110.833	107.484	104.27	100.784
634.0	88.7086	70.9234	68.5536	33.2661	110.754	107.095	103.544	99.7554
633.0	86.7515	67.8959	65.55	29.5971	110.576	106.616	102.772	98.6036
632.0	84.7114	64.6777	62.4787	26.0699	110.455	106.114	101.988	97.3265
631.0	82.4845	61.3556	59.2043	22.6539	110.257	105.473	101.073	95.9445
630.0	80.0868	57.9376	55.8446	19.4434	110.016	104.85	100.098	94.4091
629.0	77.5519	54.3865	52.385	16.4367	109.764	104.249	99.1058	92.8592
628.0	74.8663	50.7589	48.8823	13.7104	109.464	103.592	98.0171	91.1684
627.0	72.0642	47.0575	45.3193	11.2363	109.244	102.824	96.8076	89.3592
626.0	69.1157	43.3642	41.7237	9.04663	108.966	101.938	95.4458	87.4119
625.0	66.1006	39.6628	38.1622	7.15075	108.702	101.008	93.9867	85.3118

Tabelle 6.1: Rohdaten der relativen Transmissionen ethanolischer Lösungen von Kristallviolett im Spektralbereich 400-700 nm. Als Spektrometer wurde das JASCO V-750 verwendet mit PMMA Küvetten ($L = 10\text{mm}$).

λ in nm	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-6}$
624.0	62.9844	36.0152	34.6176	5.55125	108.358	100.116	92.4747	83.1795
623.0	59.78	32.4266	31.1465	4.22715	108.143	99.1951	90.8597	80.9698
622.0	56.471	28.9782	27.7772	3.14364	107.841	98.0979	89.1437	78.5874
621.0	53.1188	25.6621	24.5797	2.28664	107.47	96.9127	87.3212	76.101
620.0	49.6904	22.4993	21.5402	1.61025	106.994	95.4517	85.6501	73.3838
619.0	46.2899	19.5287	18.6809	1.11027	106.539	94.1543	83.633	70.7409
618.0	42.9163	16.8105	16.06	0.750629	106.039	92.7463	81.515	68.0087
617.0	39.6205	14.3517	13.6906	0.495237	105.509	91.2673	79.3244	65.1659
616.0	36.4026	12.1244	11.5682	0.319511	104.985	89.7384	77.0871	62.2785
615.0	33.2819	10.1556	9.6729	0.200724	104.377	88.2036	74.8212	59.4052
614.0	30.2748	8.42477	8.00478	0.124597	103.788	86.5977	72.4852	56.533
613.0	27.4177	6.91313	6.55656	0.0767228	103.149	84.8861	70.1476	53.7154
612.0	24.6913	5.62115	5.32737	0.0467061	102.509	83.1615	67.7492	50.8477
611.0	22.1404	4.52377	4.29153	0.0282828	101.874	81.3693	65.3661	48.0084
610.0	19.7792	3.61328	3.42508	0.0181931	101.124	79.661	62.9543	45.1957
609.0	17.6235	2.87439	2.718	0.0122195	100.413	77.8732	60.6226	42.5311
608.0	15.6662	2.27698	2.14707	0.00898351	99.7075	76.0504	58.3123	39.951
607.0	13.8994	1.79379	1.69042	0.00699706	98.984	74.2392	56.036	37.5529
606.0	12.336	1.41189	1.33276	0.00599382	98.2877	72.4313	53.8182	35.2682
605.0	10.9284	1.114	1.048	0.00468502	97.5933	70.6933	51.7194	33.1354
604.0	9.69558	0.878916	0.827397	0.00387984	96.8598	69.0448	49.6855	31.0851
603.0	8.60511	0.699295	0.655587	0.00337155	96.1722	67.4437	47.781	29.2329
602.0	7.68402	0.558724	0.521366	0.00321585	95.4476	65.9694	46.0223	27.5267
601.0	6.88139	0.451337	0.418216	0.00340731	94.8457	64.5605	44.3737	26.0119
600.0	6.20381	0.36276	0.339582	0.00327159	94.2664	63.2015	42.8924	24.6231
599.0	5.62504	0.294428	0.279831	0.00306212	93.8504	61.9597	41.5481	23.3704
598.0	5.1332	0.245807	0.233187	0.00272632	93.3045	60.8208	40.3319	22.2715
597.0	4.73054	0.209712	0.196729	0.00277203	92.7727	59.831	39.2867	21.3181
596.0	4.39963	0.182835	0.171223	0.00265647	92.2572	58.967	38.363	20.5197
595.0	4.12537	0.161753	0.150292	0.00289469	91.7933	58.2402	37.6225	19.8428
594.0	3.91376	0.145736	0.136484	0.00268553	91.454	57.64	36.9734	19.2989
593.0	3.74392	0.133198	0.126124	0.00321677	91.2702	57.1811	36.454	18.8883
592.0	3.62635	0.124906	0.119154	0.00279125	91.1567	56.8421	36.0307	18.5753
591.0	3.54585	0.118163	0.114664	0.00307848	91.0708	56.6163	35.7468	18.3401
590.0	3.49285	0.114705	0.110089	0.00221922	90.9721	56.5078	35.5695	18.1875
589.0	3.47386	0.113272	0.107982	0.00252926	90.9234	56.4718	35.5012	18.1288
588.0	3.48513	0.113896	0.107887	0.00283405	91.0084	56.5471	35.5481	18.1577
587.0	3.52808	0.117772	0.110639	0.00296989	91.0646	56.6741	35.6872	18.2708

Tabelle 6.1: Rohdaten der relativen Transmissionen ethanolischer Lösungen von Kristallviolett im Spektralbereich 400-700 nm. Als Spektrometer wurde das JASCO V-750 verwendet mit PMMA Küvetten ($L = 10\text{mm}$).

λ in nm	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-6}$
586.0	3.60068	0.12075	0.115388	0.00263137	91.155	56.8612	35.8809	18.4492
585.0	3.68082	0.127016	0.120889	0.00237336	91.233	57.0901	36.1388	18.682
584.0	3.77163	0.13216	0.126871	0.00204742	91.3363	57.3526	36.4917	18.947
583.0	3.88118	0.140583	0.133783	0.00214281	91.4862	57.6729	36.857	19.2515
582.0	4.01733	0.150673	0.141169	0.00294273	91.6807	58.0683	37.2523	19.5693
581.0	4.16209	0.161093	0.152311	0.00310303	91.8888	58.4587	37.6984	19.9244
580.0	4.31341	0.173135	0.164268	0.00298077	92.0366	58.8837	38.1504	20.2864
579.0	4.46478	0.185298	0.175893	0.00254391	92.1737	59.2846	38.6074	20.6794
578.0	4.62292	0.197663	0.18714	0.00256361	92.3098	59.714	39.0125	21.069
577.0	4.78204	0.21069	0.199109	0.00248553	92.517	60.1098	39.4334	21.4482
576.0	4.93957	0.225488	0.212507	0.00277861	92.7612	60.5473	39.8448	21.8145
575.0	5.09243	0.239771	0.224797	0.00208536	92.979	60.9319	40.2622	22.1719
574.0	5.24158	0.254838	0.238447	0.00178218	93.167	61.3373	40.6707	22.5239
573.0	5.38741	0.268943	0.252215	0.00169514	93.323	61.6813	41.0304	22.8632
572.0	5.53173	0.282015	0.266087	0.00221957	93.4959	61.9938	41.3461	23.1757
571.0	5.6702	0.295168	0.279329	0.00272332	93.6458	62.2769	41.6855	23.4726
570.0	5.80484	0.305739	0.292854	0.00302472	93.8176	62.541	42.0234	23.7346
569.0	5.92375	0.319867	0.303306	0.00244669	93.9864	62.8008	42.335	23.9915
568.0	6.04333	0.333744	0.316153	0.00302408	94.1583	62.9928	42.5932	24.245
567.0	6.15425	0.347226	0.32645	0.00264431	94.26	63.2578	42.8495	24.5074
566.0	6.27346	0.359179	0.339908	0.00252569	94.3422	63.4424	43.0941	24.7361
565.0	6.37489	0.37254	0.351881	0.00212913	94.3926	63.6667	43.3687	24.983
564.0	6.48437	0.385391	0.365074	0.00231458	94.4808	63.912	43.6171	25.2038
563.0	6.59084	0.400271	0.37646	0.00204538	94.5845	64.1445	43.8656	25.448
562.0	6.7092	0.414529	0.391657	0.00253599	94.7068	64.3645	44.0915	25.6838
561.0	6.83992	0.432036	0.40341	0.00257738	94.8461	64.5973	44.3724	25.9414
560.0	6.96609	0.449651	0.419572	0.00244064	94.9875	64.838	44.6622	26.184
559.0	7.10663	0.468378	0.436369	0.00210037	95.0833	65.1077	44.9589	26.4468
558.0	7.24511	0.486245	0.456282	0.00221159	95.2131	65.377	45.2692	26.705
557.0	7.40614	0.506135	0.478145	0.00228149	95.3455	65.6616	45.6012	26.9837
556.0	7.56833	0.529361	0.497956	0.00296232	95.4813	65.9847	45.91	27.2852
555.0	7.74641	0.553184	0.519232	0.00295354	95.5578	66.2852	46.2083	27.6171
554.0	7.92845	0.576277	0.541489	0.00169033	95.6789	66.5998	46.5513	27.9688
553.0	8.11331	0.601086	0.567717	0.00143519	95.8089	66.8625	46.9283	28.3169
552.0	8.31109	0.630181	0.599224	0.00107489	95.9888	67.1702	47.3296	28.6711
551.0	8.52616	0.663109	0.629232	0.00252153	96.1061	67.4822	47.7034	29.0659
550.0	8.76018	0.701018	0.662803	0.00288158	96.2187	67.8743	48.1178	29.4612
549.0	9.0105	0.74272	0.702173	0.00221157	96.3884	68.2391	48.5744	29.9269

Tabelle 6.1: Rohdaten der relativen Transmissionen ethanolischer Lösungen von Kristallviolett im Spektralbereich 400-700 nm. Als Spektrometer wurde das JASCO V-750 verwendet mit PMMA Küvetten ($L = 10\text{mm}$).

λ in nm	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-6}$
548.0	9.28856	0.785866	0.745854	0.00182422	96.6421	68.6565	49.065	30.3982
547.0	9.59187	0.838852	0.795632	0.00185185	96.9401	69.0811	49.6109	30.9301
546.0	9.92115	0.899724	0.852063	0.00191363	97.1711	69.548	50.1749	31.4855
545.0	10.2776	0.972102	0.91444	0.00318838	97.3526	70.0585	50.7743	32.0904
544.0	10.6888	1.04953	0.990028	0.00356744	97.5512	70.6123	51.4266	32.7434
543.0	11.1449	1.13792	1.07263	0.00339992	97.7986	71.1715	52.1504	33.4535
542.0	11.6541	1.24043	1.17332	0.00287198	98.0368	71.7773	52.9403	34.2298
541.0	12.1968	1.35614	1.2874	0.00361579	98.2994	72.3985	53.7959	35.0821
540.0	12.7812	1.49138	1.42426	0.00431198	98.5881	73.0747	54.6125	35.9607
539.0	13.4231	1.64921	1.57942	0.00450622	98.8892	73.7858	55.4824	36.9391
538.0	14.1319	1.83128	1.74384	0.00451376	99.1358	74.6023	56.4299	37.9377
537.0	14.9407	2.04332	1.94508	0.00426562	99.3989	75.4424	57.4289	39.048
536.0	15.811	2.28504	2.17501	0.00540148	99.738	76.2917	58.4787	40.1947
535.0	16.7461	2.56131	2.44413	0.00695433	100.175	77.108	59.5958	41.4407
534.0	17.7396	2.87478	2.74491	0.00847505	100.561	77.9324	60.7754	42.757
533.0	18.8191	3.22884	3.08716	0.0105573	100.953	78.7813	61.9934	44.1109
532.0	19.9797	3.64626	3.47726	0.0135192	101.277	79.7699	63.2268	45.4725
531.0	21.2269	4.10413	3.92104	0.0192541	101.608	80.7277	64.4735	46.875
530.0	22.5302	4.62266	4.42265	0.0253115	101.96	81.7408	65.7538	48.3506
529.0	23.8885	5.18767	4.98485	0.0332392	102.344	82.6601	67.0198	49.9049
528.0	25.3075	5.82334	5.60839	0.0443309	102.741	83.5977	68.2978	51.462
527.0	26.8037	6.53165	6.29838	0.0603351	103.064	84.614	69.6004	53.0763
526.0	28.3811	7.31671	7.05241	0.0798819	103.411	85.5577	70.9426	54.6856
525.0	30.0215	8.17948	7.88455	0.107344	103.732	86.4966	72.2777	56.3421
524.0	31.7135	9.11814	8.789	0.142212	104.067	87.3909	73.6261	57.9765
523.0	33.4377	10.1286	9.76406	0.186939	104.372	88.3096	74.95	59.6015
522.0	35.1982	11.2189	10.8212	0.244377	104.727	89.2547	76.3018	61.195
521.0	37.0095	12.3832	11.9536	0.316464	105.063	90.1504	77.6249	62.8015
520.0	38.8422	13.6346	13.1755	0.410672	105.363	91.053	78.923	64.3668
519.0	40.7057	14.9692	14.4738	0.522141	105.654	91.8842	80.1684	65.9098
518.0	42.5556	16.3563	15.842	0.661163	105.949	92.6233	81.3287	67.451
517.0	44.4136	17.8112	17.2579	0.829846	106.245	93.3576	82.4492	68.9823
516.0	46.2884	19.3378	18.7486	1.03413	106.503	94.1514	83.5067	70.5434
515.0	48.1392	20.9305	20.3121	1.27485	106.778	94.9214	84.6043	72.0841
514.0	50.0407	22.5741	21.8995	1.55749	107.107	95.6614	85.696	73.5934
513.0	51.871	24.2613	23.5344	1.88646	107.414	96.3256	86.7918	75.0023
512.0	53.7339	25.9893	25.2129	2.26843	107.74	96.9935	87.8013	76.3836
511.0	55.5404	27.7819	26.9433	2.71141	107.946	97.7043	88.7759	77.7435

Tabelle 6.1: Rohdaten der relativen Transmissionen ethanolischer Lösungen von Kristallviolett im Spektralbereich 400-700 nm. Als Spektrometer wurde das JASCO V-750 verwendet mit PMMA Küvetten ($L = 10\text{mm}$).

λ in nm	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-6}$
510.0	57.3438	29.6226	28.7841	3.22195	108.143	98.2185	89.5623	79.0682
509.0	59.1602	31.5158	30.6063	3.78395	108.342	98.7999	90.4816	80.3511
508.0	60.9276	33.3801	32.4202	4.41791	108.515	99.3405	91.4319	81.5749
507.0	62.66	35.2784	34.2642	5.11176	108.652	99.9017	92.354	82.7583
506.0	64.3832	37.1853	36.1617	5.88397	108.841	100.448	93.223	83.9097
505.0	66.1164	39.1198	38.0722	6.74065	108.993	100.967	94.0574	85.0555
504.0	67.7817	41.0489	39.9833	7.68253	109.141	101.489	94.7911	86.1716
503.0	69.3826	43.0094	41.8923	8.70954	109.292	102.009	95.4984	87.23
502.0	70.9254	44.9568	43.8177	9.82284	109.385	102.488	96.136	88.2794
501.0	72.4274	46.9654	45.7432	11.0088	109.507	102.903	96.8102	89.2609
500.0	73.9612	48.9054	47.693	12.28	109.621	103.266	97.4584	90.2316
499.0	75.4093	50.8771	49.6159	13.6254	109.746	103.656	98.0557	91.1726
498.0	76.8416	52.7849	51.4846	15.0683	109.922	103.997	98.595	92.0425
497.0	78.2407	54.7608	53.3703	16.597	110.062	104.333	99.2065	92.9346
496.0	79.6512	56.7275	55.2465	18.2123	110.136	104.679	99.7109	93.8525
495.0	81.0306	58.6842	57.1341	19.9042	110.236	105.074	100.332	94.65
494.0	82.3787	60.6	59.0207	21.7065	110.365	105.485	100.931	95.5234
493.0	83.6992	62.4856	60.8929	23.5919	110.458	105.836	101.539	96.3102
492.0	84.9949	64.3917	62.7381	25.5687	110.546	106.109	102.088	97.1272
491.0	86.2301	66.2671	64.568	27.612	110.651	106.389	102.634	97.8642
490.0	87.4115	68.111	66.372	29.7131	110.766	106.636	103.062	98.5897
489.0	88.5616	69.8977	68.1422	31.8435	110.885	106.918	103.569	99.3095
488.0	89.7563	71.6538	69.829	34.0012	110.929	107.149	104.03	99.9914
487.0	90.8445	73.4013	71.5044	36.2096	111.025	107.397	104.405	100.589
486.0	91.8963	75.0753	73.1013	38.479	111.148	107.664	104.71	101.151
485.0	92.8449	76.6955	74.6758	40.7363	111.325	107.87	105.008	101.71
484.0	93.807	78.2413	76.1724	42.9767	111.415	108.129	105.344	102.27
483.0	94.7089	79.7143	77.6129	45.2034	111.471	108.314	105.699	102.825
482.0	95.5131	81.1932	79.0041	47.4333	111.538	108.557	106.071	103.332
481.0	96.3772	82.5991	80.3568	49.6651	111.584	108.737	106.269	103.744
480.0	97.1971	83.9398	81.6718	51.8672	111.62	108.964	106.513	104.133
479.0	98.0233	85.2488	82.9453	54.0748	111.616	109.194	106.785	104.558
478.0	98.771	86.5089	84.1829	56.2086	111.633	109.355	107.137	104.994
477.0	99.4397	87.7125	85.366	58.355	111.729	109.477	107.449	105.381
476.0	100.04	88.8618	86.4743	60.4503	111.805	109.559	107.669	105.745
475.0	100.635	89.9558	87.5452	62.4531	111.83	109.711	107.788	106.111
474.0	101.236	91.0537	88.5884	64.4323	111.809	109.858	108.019	106.451
473.0	101.856	92.0592	89.583	66.3309	111.859	109.982	108.273	106.783

Tabelle 6.1: Rohdaten der relativen Transmissionen ethanolischer Lösungen von Kristallviolett im Spektralbereich 400-700 nm. Als Spektrometer wurde das JASCO V-750 verwendet mit PMMA Küvetten ($L = 10\text{mm}$).

λ in nm	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-6}$
472.0	102.428	93.0326	90.5258	68.2142	111.889	110.084	108.543	107.062
471.0	102.892	93.9834	91.4114	70.0509	111.925	110.178	108.696	107.373
470.0	103.434	94.8232	92.2019	71.8482	112.019	110.269	108.795	107.655
469.0	103.942	95.6429	92.9797	73.5767	112.082	110.371	108.87	107.895
468.0	104.392	96.437	93.791	75.2687	112.231	110.465	108.993	108.171
467.0	104.817	97.2686	94.5576	76.8181	112.271	110.609	109.149	108.455
466.0	105.176	97.9863	95.2568	78.3382	112.287	110.766	109.296	108.661
465.0	105.607	98.6788	95.8707	79.8041	112.276	110.951	109.436	108.894
464.0	106.01	99.3285	96.4695	81.2112	112.267	111.046	109.616	109.08
463.0	106.294	99.9273	97.1164	82.5963	112.287	111.095	109.781	109.264
462.0	106.545	100.495	97.6426	83.8333	112.37	111.03	109.86	109.372
461.0	106.827	101.016	98.1834	85.0661	112.418	111.017	109.951	109.491
460.0	107.142	101.546	98.6447	86.2742	112.48	111.015	110.003	109.607
459.0	107.461	102.084	99.1444	87.4293	112.419	111.112	110.135	109.788
458.0	107.726	102.597	99.5904	88.5028	112.409	111.22	110.196	109.953
457.0	107.958	103.005	100.052	89.5907	112.415	111.31	110.364	110.108
456.0	108.153	103.438	100.454	90.6545	112.453	111.374	110.425	110.236
455.0	108.314	103.83	100.83	91.7078	112.517	111.411	110.58	110.379
454.0	108.5	104.21	101.221	92.6483	112.536	111.482	110.686	110.437
453.0	108.675	104.525	101.561	93.4863	112.58	111.457	110.685	110.524
452.0	108.871	104.882	101.865	94.2786	112.476	111.458	110.643	110.605
451.0	109.043	105.197	102.1	95.0629	112.448	111.377	110.653	110.644
450.0	109.316	105.625	102.499	95.9019	112.533	111.525	110.912	110.753
449.0	109.413	105.909	102.78	96.6282	112.519	111.524	111.015	110.887
448.0	109.558	106.186	103.001	97.2358	112.461	111.567	111.045	110.959
447.0	109.732	106.464	103.227	97.9041	112.433	111.58	111.082	111.04
446.0	109.868	106.751	103.463	98.4494	112.452	111.573	111.154	111.103
445.0	109.992	106.972	103.776	99.0785	112.533	111.569	111.183	111.243
444.0	110.057	107.18	103.974	99.6152	112.549	111.662	111.242	111.404
443.0	110.164	107.424	104.168	100.135	112.626	111.726	111.304	111.503
442.0	110.308	107.646	104.268	100.625	112.598	111.855	111.415	111.656
441.0	110.435	107.804	104.47	101.028	112.688	111.859	111.553	111.693
440.0	110.537	107.952	104.668	101.477	112.671	112.018	111.509	111.786
439.0	110.601	108.152	104.795	101.822	112.671	112.017	111.405	111.701
438.0	110.786	108.313	104.914	102.251	112.772	112.081	111.35	111.683
437.0	110.877	108.471	105.007	102.545	112.796	112.081	111.323	111.728
436.0	110.969	108.563	105.128	102.917	112.891	112.06	111.342	111.838
435.0	111.007	108.797	105.201	103.208	112.883	112.128	111.353	111.911

Tabelle 6.1: Rohdaten der relativen Transmissionen ethanolischer Lösungen von Kristallviolett im Spektralbereich 400-700 nm. Als Spektrometer wurde das JASCO V-750 verwendet mit PMMA Küvetten ($L = 10\text{mm}$).

λ in nm	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-6}$
434.0	110.994	108.883	105.257	103.504	112.86	112.109	111.408	111.921
433.0	111.04	108.965	105.334	103.799	112.789	112.128	111.537	111.896
432.0	111.069	108.988	105.445	104.025	112.814	112.128	111.573	111.92
431.0	111.107	109.08	105.542	104.285	112.718	112.242	111.671	111.968
430.0	111.09	109.19	105.612	104.534	112.771	112.265	111.554	112.004
429.0	111.268	109.265	105.619	104.661	112.7	112.276	111.613	112.014
428.0	111.357	109.409	105.707	104.794	112.816	112.293	111.644	111.984
427.0	111.539	109.515	105.728	104.801	112.868	112.357	111.771	112.075
426.0	111.466	109.642	105.76	104.928	113.039	112.322	111.822	112.109
425.0	111.444	109.614	105.789	104.975	113.121	112.271	111.876	112.191
424.0	111.48	109.682	105.732	105.065	113.189	112.305	111.873	112.223
423.0	111.541	109.683	105.756	105.177	113.141	112.313	111.882	112.283
422.0	111.53	109.783	105.715	105.256	113.128	112.392	111.819	112.326
421.0	111.548	109.771	105.664	105.275	112.975	112.361	111.836	112.322
420.0	111.551	109.848	105.664	105.164	113.015	112.314	111.809	112.314
419.0	111.522	109.777	105.661	105.289	112.997	112.309	111.834	112.379
418.0	111.49	109.68	105.767	105.414	113.063	112.212	111.825	112.426
417.0	111.459	109.63	105.787	105.508	113.109	112.232	111.775	112.449
416.0	111.575	109.649	105.724	105.392	113.158	112.192	111.711	112.503
415.0	111.568	109.699	105.669	105.295	113.167	112.299	111.792	112.538
414.0	111.558	109.674	105.61	105.181	113.204	112.281	111.778	112.421
413.0	111.438	109.62	105.521	105.118	113.159	112.355	111.851	112.31
412.0	111.343	109.399	105.42	104.859	113.207	112.375	111.795	112.205
411.0	111.271	109.355	105.284	104.681	113.205	112.443	111.715	112.229
410.0	111.405	109.65	105.558	104.611	113.271	112.45	111.846	112.506
409.0	111.477	109.451	105.345	104.34	113.169	112.277	111.821	112.372
408.0	111.508	109.193	105.271	104.149	113.191	112.285	111.704	112.388
407.0	111.473	109.003	105.112	103.889	113.252	112.289	111.756	112.258
406.0	111.296	108.942	105.091	103.486	113.24	112.382	111.666	112.102
405.0	111.152	108.85	104.919	103.247	113.22	112.335	111.592	112.008
404.0	111.129	108.788	104.681	102.862	113.068	112.366	111.522	112.084
403.0	111.046	108.479	104.488	102.544	112.985	112.486	111.517	112.135
402.0	110.951	108.385	104.341	102.138	113.095	112.563	111.6	112.117
401.0	110.817	108.185	104.171	101.622	113.133	112.549	111.607	111.958
400.0	110.882	108.072	103.929	100.918	113.108	112.414	111.626	111.799