

Spektroskopie

Integriertes Praktikum

Verfasser: Julian Krauß, Luca Nils Knödler,
Emil Rauscher
Matrikelnummer: 3664757, 365222, 3659652
E-Mail-Adresse: 184060@stud.uni-stuttgart.de
182549@stud.uni-stuttgart.de
182994@stud.uni-stuttgart.de
Assistentin: Selina Itzigebl
Versuchsdatum: 15.12.2022

Inhalt

1. Theorie	3
1.1 Die Elektronenhülle und Atomspektren	3
1.2 Die Balmer-Serie	3
1.3 Grundlagen der optischen Absorptionsspektroskopie	4
1.4 Das Teilchen im eindimensionalen Kasten.....	4
1.5 Die Länge eines π -Elektronensystems	4
2. Versuch 1: Balmer-Serie.....	5
2.1 Aufgabenstellung.....	5
2.2 Aufbau und Durchführung	5
2.3 Beobachtungen.....	6
2.4 Auswertung	6
2.4.1 Bestimmung der Wellenlänge der $H\alpha$, $H\beta$ und $H\gamma$ -Linien	6
2.4.2 Berechnung der Wellenlängen der $H\alpha$, $H\beta$ und $H\gamma$ -Linien mit Hilfe der Balmer-Serienformel.....	7
2.4.3 Berechnung der Ionisierungsenergie des Wasserstoffatoms	8
2.4.4 Berechnung des Bohr'schen Radius	8
2.5 Fehlerbetrachtung	9
3. Versuch 2.....	9
3.1 Aufgabenstellung.....	9
3.2 Durchführung	9
3.3 Auswertung	9
3.4 Fehlerbetrachtung	11
4. Quellen.....	11

1. Theorie

1.1 Die Elektronenhülle und Atomspektren

Es besteht ein großer Zusammenhang zwischen dem Reaktionsverhalten eines Stoffes und seiner Elektronenhülle. Die Elektronen eines Atoms bewegen sich in der Elektronenhülle um den Atomkern und haben so sowohl potentielle als auch kinetische Energie. Je größer der gemittelte Abstand eines Elektrons vom Atomkern ist, desto größer ist seine potentielle Energie. Der genaue Aufbau einer Atomhülle kann mit Hilfe der Atomspektren bestimmt werden. Wird weißes Licht auf ein Prisma gelenkt, so wird es in seine einzelnen Wellenlängen zerteilt. In einem Spektroskop erscheinen diese Wellen als Farbbänder. Generell können Wellen durch ihre Wellenlänge λ , also die Distanz zwischen zwei Maxima und ihre Frequenz ν , also die Anzahl an Schwingungen pro Sekunde, beschrieben werden. Zwischen der Wellenlänge λ , der Frequenz ν und der Lichtgeschwindigkeit $c = 3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ gilt folgender Zusammenhang:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \quad (1)$$

Die Energie E des Lichts mit der Wellenlänge λ lässt sich mit Hilfe des Planck'schen Wirkungsquantum $h = 6,6262 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ folgender Formel berechnen.

$$E = h \cdot \frac{c}{\lambda} \quad (2)$$

1.2 Die Balmer-Serie

1859 wurde von Gustav Kirchhoff und Robert Bunsen gezeigt, dass Atome nur spezifische Wellenlängen von Licht absorbieren beziehungsweise emittieren. Diese diskontinuierlichen Spektren sind für jedes Atom spezifisch. 1885 beschrieb Johann Jakob Balmer die Linien des Spektrums von Wasserstoff mit folgender Formel. Mit der Rydberg-Konstante R_H , der Lichtgeschwindigkeit c der Hauptquantenzahl n und der Frequenz ν .

$$\nu_{n_1 \rightarrow n_2} = R_H \cdot c \cdot \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \quad (3)$$

Für die Balmer-Serie gilt, dass $n_1 = 1$ ist, und $n_2 = 2, 3, 4, 5, 6, 7$. Der Vorteil der Balmer-Serie ist, dass die Frequenzen des Lichts, die bei der Balmer-Serie entstehen im sichtbaren Bereich liegen.

1.3 Grundlagen der optischen Absorptionsspektroskopie

Licht wird auf eine Küvette mit einer Stofflösung geschickt. Dabei wird die Intensität des Lichts gemessen, bevor es auf die Küvette trifft und nachdem es die Küvette verlässt. Die Intensität des Lichts nach Verlassen der Küvette I_1 kann durch folgende Funktion beschrieben werden. Die Formel setzt sich zusammen aus der Intensität des Lichts vor der Küvette I_0 , dem molaren Extinktionsfaktor $\varepsilon(\lambda)$, der Konzentration des Stoffes c_0 und die Schichtdicke d .

$$I_1 = I_0 \cdot e^{-\varepsilon(\lambda) \cdot c_0 \cdot d} \quad (4)$$

Da $\varepsilon(\lambda)$ eine spezifische Stoffkonstante ist, und die Intensität des Lichts einfach gemessen werden kann, kann so die Konzentration des Stoffes bestimmt werden. Wird Licht auf einen Stoff gestrahlt, so nimmt dieser Energie auf. Das Molekül kann so in verschiedene Energiezustände angeregt werden.

1.4 Das Teilchen im eindimensionalen Kasten

Das Teilchen im eindimensionalen Kasten ist ein Modell, in dem ein Elektron in einem Kasten eingesperrt wird, der unendlich hohe Wände hat, sodass das Elektron nicht entweichen kann. Die Energiezustände des Elektrons können wie folgt beschrieben werden. Mit Energie E_n des Elektrons bei der Hauptquantenzahl n , dem Planckschen Wirkungsquantum h , der Elektronenmasse $m_e = 9,10938188 \cdot 10^{-31}$ kg und der Länge des Kastens L .

$$E_n = \frac{n^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot L^2} \quad (5)$$

Ein Elektron im energetischen Grundzustand besitzt für $n_{\text{Grundzustand (g)}}$ den Wert 1. Wird dieses Elektron angeregt, geht es in den nächstmöglichen unbesetzten Energiezustand über. So besitzt $n_{\text{angeregt (a)}}$ den Wert 2. Um das Elektron von einem Energiezustand in den nächsten anzuregen, wird Energie ΔE benötigt. Diese Energie kann nach folgender Formel berechnet werden. Dabei gilt, dass $n_g = \frac{N}{2}$ und $n_a = \frac{N}{2+1}$ ist, mit N = die Anzahl der Elektronen.

$$\Delta E = \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot L^2} \cdot (N + 1) \quad (6)$$

1.5 Die Länge eines π -Elektronensystems

Das Modell vom Teilchen im eindimensionalen Kasten kann auf Moleküle mit alternierenden Einfach- und Doppel-Bindungen übertragen werden. In diesem Fall sind die π -Elektronen über den Bindungen delokalisiert. Wenn ΔE und N bekannt sind, kann die Länge des eindimensionalen Kastens L berechnet werden, indem Gleichung 5 nach L umgestellt wird.

$$L = \sqrt{\frac{h^2 \cdot (N + 1)}{8 \cdot m_e \cdot \Delta E}} \quad (7)$$

2. Versuch 1: Balmer-Serie

2.1 Aufgabenstellung

Ziel des Versuches war es die Balmer-Serie zu bestimmen. Des Weiteren sollten die Wellenlängen der Balmer-Linien gemessen und berechnet werden, sowie die Ionisierungsenergie und der Bohr'sche Atomradius eines Wasserstoffatoms berechnet werden.

2.2 Aufbau und Durchführung

Die Balmer-Lampe wurde für 10 Minuten aufgeheizt. Während die Lampe aufheizte, wurden die Sammellinsen, der verstellbare Spalt sowie das Rowland Gitter eingestellt, damit die Spektrallinien möglichst scharf und hell werden. Sobald die Balmer-Lampe warm genug war und die Spektrallinien sich stabilisiert hatten, wurden die Spektrallinien abgezeichnet.

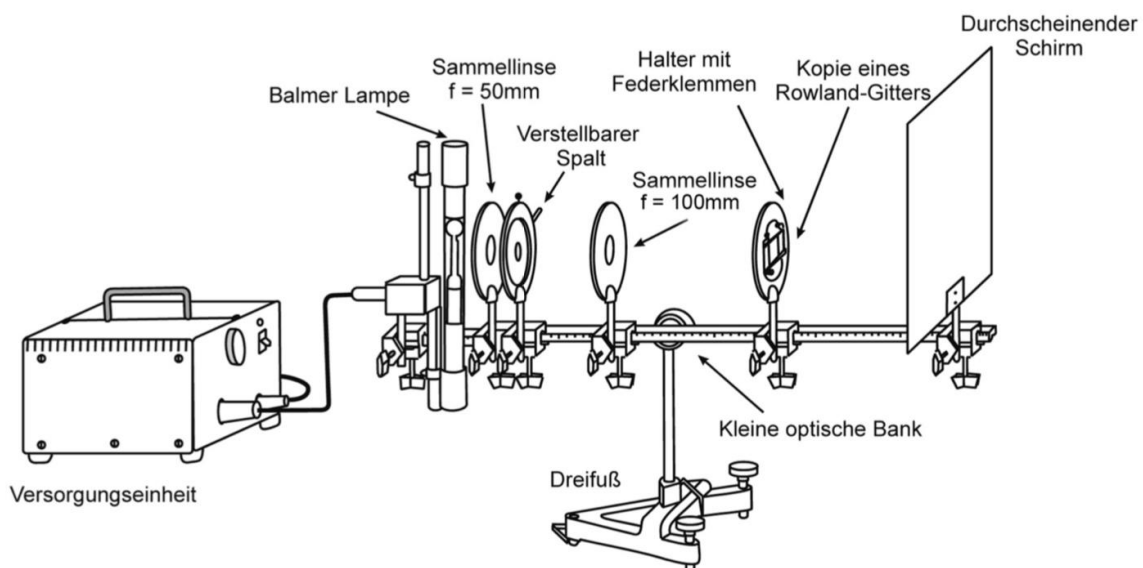


Abbildung 1: Der Versuchsaufbau bestand aus einer optischen Bank auf welcher der Reihe nach: eine Sammellinse ($f = 50\text{mm}$), ein verstellbarer Spalt, eine weitere Sammellinse ($f = 100\text{mm}$), ein Rowland-Gitter sowie ein durchscheinender Schirm befestigt war. Am Anfang der Bank befand sich die Balmer-Lampe zusammen mit ihrer Versorgungseinheit. Der Abstand zwischen Schirm und Rowland-Gitter betrug $A = 12\text{cm}$. ^[1]

2.3 Beobachtung

In der Mitte des Schirms war eine Linie mit der gleichen Farbe wie die Balmer-Lampe zu erkennen. Mit ungefähr dem gleichen Abstand zeichneten sich links und rechts zur Mittellinie zwei türkise Linien ab. Weiter außen zeichneten sich zuerst zwei rote und danach zwei blaue Linien ab. Die blauen Linien hatten jedoch nur eine sehr schwache Leuchtkraft.

2.4 Auswertung

2.4.1 Bestimmung der Wellenlänge der H_α -, H_β - und H_γ -Linien

Bei der roten Linie handelte es sich um H_α , die türkise war H_β und die blaue war H_γ . Die Mittelwerte der Abstände der gleichfarbigen Linie zur Mittellinie M wurden berechnet und zusammen mit der jeweiligen Farbe und Bezeichnung dokumentiert.

Tabelle 1: Mittelwert des Abstands der gleichfarbigen Linien zusammen mit deren Farbe und Bezeichnung.

Spektrallinie	Farbe der Linie	Mittelwert des Abstands x zu M in 10^{-2}m	Beugungsmaxima m . Ordnung
M (Mittellinie)	Magenta	0	0
H_γ	Blau	7,35	2
H_β	Türkis	3,30	1
H_α	Rot	4,55	1

Zur Berechnung der jeweiligen Wellenlängen wird die Gleichung (8) verwendet:

$$\lambda = \frac{d \cdot \sin(\tan^{-1}(\frac{x}{A}))}{m} \quad (8)$$

Mit dem Abstand zur Mittellinie x , der Gitterkonstanten $d = \frac{1}{600} \cdot 10^{-3}\text{m}$, dem Beugungsmaximum m -ter Ordnung und dem Abstand zwischen Gitter und Schirm A kann die Wellenlänge λ berechnet werden.

Es folgt eine Beispielrechnung für H_α mit Hilfe der Gleichung (8):

$$\lambda = \frac{\frac{1}{600} \cdot 10^{-3}\text{m} \cdot \sin(\tan^{-1} \frac{4,55 \cdot 10^{-2}\text{m}}{12 \cdot 10^{-2}\text{m}})}{1}$$

$$\lambda \approx 590 \text{ nm}$$

Die Wellenlänge von H_β und H_γ wurden analog zu H_α berechnet.

Tabelle 2: Berechnung der Wellenlängen λ der Spektrallinien aus dem Versuch 1.

Spektrallinie	Wellenlängen λ in nm
H_γ	435
H_β	442
H_α	590

2.4.2 Berechnung der Wellenlängen der H_α , H_β und H_γ -Linien mit Hilfe der Balmer-Serienformel

Zur Berechnung der Balmer-Serie wird die Balmer-Serienformel verwendet:

$$\nu_{n_2 \rightarrow n_1} = R_H \cdot c \cdot \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

Das Ersetzen von ν durch die Beziehung $\nu = \frac{c}{\lambda_{\text{Balmer}}}$ und formt dies nach λ_{Balmer} um entsteht Gleichung (9):

$$\lambda_{\text{Balmer}} = \frac{1}{R_H \cdot \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)} \quad (9)$$

Dabei wird die Rydberg-Konstante R_H mit $1,0968 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$, die Lichtgeschwindigkeit c mit $3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, $n_1 = 2$ und $n_2 = 3;4;5;6;7$ verwendet.

Es folgt eine Beispielrechnung für H_α bzw. $n_2 = 3$ mithilfe der Gleichung (9):

$$\lambda_{\text{Balmer}} = \left| \frac{1}{R_H \cdot \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{2^2} \right)} \right|$$

$$\lambda_{\text{Balmer}} \approx 655 \text{ nm}$$

Die Werte für von H_β und H_γ wurden analog zu H_α berechnet.

Tabelle 3: Die Spektrallinien H_β , H_γ und H_α und die dazugehörigen Werte für n_2 und λ_{Balmer} in nm.

Spektrallinie	n_2	λ_{Balmer} in nm
H_α	3	655
H_β	4	485
H_γ	5	433

2.4.3 Berechnung der Ionisierungsenergie des Wasserstoffatoms:

Wird ein H-Atom ionisiert, wird davon ausgegangen, dass n_1 gleich 1 ist und n_2 gegen unendlich läuft. Daraus ergibt sich zusammen mit $E = h \cdot \nu$ die Gleichung (10):

$$E = R_H \cdot h \cdot c \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (10)$$

$$E = R_H \cdot h \cdot c \cdot \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{\infty} \right)$$

$$E = R_H \cdot h \cdot c$$

$$E \approx 2,179 \cdot 10^{-18} \text{ J} \cdot \text{s}$$

Hierbei ist h das Plank'sche Wirkungsquantum und E die Ionisierungsenergie welche für das Wasserstoffatom bei ca. $E = 2,179 \cdot 10^{-18} \text{ J} \cdot \text{s}$ liegt.

2.4.4 Berechnung des Bohr'schen Radius

Zur Berechnung des Bohr'schen Radius wird die Gleichung (11) verwendet:

$$r_{\text{Bohr}} = \frac{n^2 \cdot \varepsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot m_e \cdot e^2} \quad (11)$$

Mit der Anzahl der Elektronen n , hier 1, der elektrischen Feldkonstanten ε_0 , dem Plank'schen Wirkungsquantum h , der Elektronenmasse m_e und der Elementarladung e .^[2]

Werden die Konstanten in Gleichung (11) eingesetzt ergibt sich daraus:

$$r_{\text{Bohr}} = \frac{1^2 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} \frac{\text{A} \cdot \text{s}}{\text{V} \cdot \text{m}} \cdot (6,62607015 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2}{\pi \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C})^2}$$

$$r_{\text{Bohr}} = 5,111 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

2.5 Fehlerbetrachtung:

Die Abweichungen zwischen gemessenen und berechneten Wellenlängen könnte daher kommen, dass der Versuch nicht in einem Vakuum, sondern an der Luft betrieben wurde und die Luft, Brechungen und Verfälschungen des Lichts verursacht haben könnte.

3. Versuch 2

3.1 Aufgabenstellung

Ziel des Versuches war es das Absorptionsspektrum von β -Carotin zu messen und damit die Länge des π -Elektronensystems zu berechnen.

3.2 Durchführung

Das Gerät wurde zunächst kalibriert, indem eine Messung mit Cyclohexan durchgeführt wurde. Dann wurde die Küvette mit β -Carotin gefüllt und in das Spektrometer gegeben. Das Programm wurde gestartet, und die Messreihe mit allen Spektren wurde gemessen. Bei dem erhaltenen Diagramm wurde das Maximum markiert und der Graph ausgedruckt.

3.3 Auswertung

In folgendem Diagramm wurde das Absorptionsspektrum von β -Carotin dargestellt.

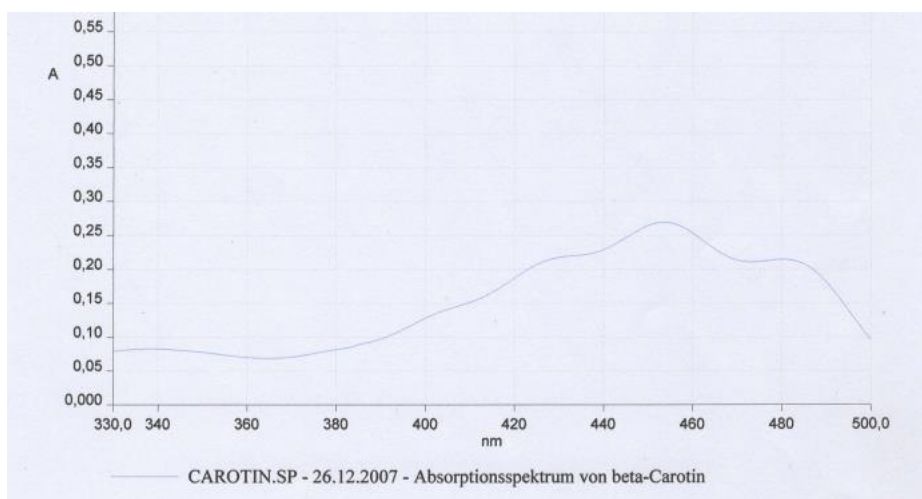


Abbildung 2: Absorptionsspektrum von β -Carotin

Das Absorptionsmaximum liegt bei $\lambda = 453,59 \text{ nm}$. Nach Formel (2) lässt sich daraus die Energie ΔE berechnen.

$$E = h \cdot \frac{c}{\lambda} \quad (2)$$

$$E = 6,26 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot \frac{3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{453,59 \cdot 10^{-9} \text{ m}}$$

$$E = 4,38 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Nun kann diese Energie ΔE zusammen mit der Anzahl der π -Elektronen N in Formel (7) eingesetzt werden und so die Länge des β -Carotins näherungsweise bestimmt werden.

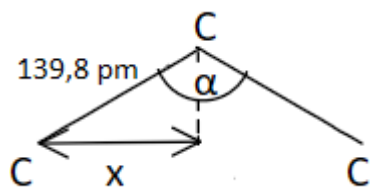
$$L = \sqrt{\frac{h^2 \cdot (N + 1)}{8 \cdot m_e \cdot \Delta E}} \quad (7)$$

$$L = \sqrt{\frac{6,26 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot (22 + 1)}{8 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 4,38 \cdot 10^{-19} \text{ J}}}$$

$$L = 2,12 \cdot 10^{-9} \text{ m}$$

Die Länge des π -Elektronensystems beträgt also $L = 2,12 \cdot 10^{-9} \text{ m}$. Werden die Elektronen angeregt, so entspricht das einem elektronischen Übergang von 11 zu 12, da es 22 Elektronen sind, sind so nach dem Pauli-Prinzip 11 Energiezustände möglich. Werden die Elektronen nun angeregt, erhöht sich der Energiezustand vom höchsten besetzten zum niedrigsten unbesetzten Zustand. In diesem Fall also von 11 zu 12.

Es gibt jedoch noch die Möglichkeit die Länge des π -Elektronensystems geometrisch zu bestimmen, indem das Dreieck, dass von 3 Kohlenstoffatomen aufgespannt wird, in zwei rechtwinkelige Dreiecke aufteilt wird. Da der Winkel zwischen zwei Kohlenstoffatombindungen bekannt ist, und die Bindungslänge ebenfalls bekannt ist, kann die gerade Distanz zwischen den Kohlenstoffatomen berechnet werden.



(Abbildung 3: Darstellung zur Berechnung von x)

Die trigonometrische Funktion beinhaltet x:

$$\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \frac{x}{139,8 \text{ pm}} \quad (11)$$

Nun kann diese Formel nach x umgestellt werden.

$$x = \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cdot 139,8 \text{ pm} \quad (12)$$

Nun kann x berechnet werden.

$$\sin\left(\frac{120}{2}\right) \cdot 139,8 \text{ pm} = 121,07 \text{ pm}$$

Diese errechnete Distanz muss nun mit 22 multipliziert werden, um auf die volle Länge des π -Elektronensystems zu kommen.

$$121,07 \text{ pm} \cdot 22 = 2663,55 \text{ pm}$$

3.4 Fehlerbetrachtung

Es ist festzustellen, dass zwischen dem durch das Absorptionsspektrometer erhaltenen Wert, und dem geometrisch bestimmten Wert eine Abweichung von 20 % liegt. Diese Abweichung ist dadurch zu erklären, dass das Molekül nicht starr ist, da die Temperatur über 0 Kelvin liegt. Dies wird allerdings bei der geometrischen Bestimmung der Moleküllänge angenommen. Außerdem wird bei der Berechnung der Länge des π -Elektronensystems über das Absorptionsspektrometer angenommen, dass die Kohlenstoffbindungen ein einziger langer Strich wären, auch das entspricht nicht der Realität.

4. Quellen

[1] I. Hartenbach IP-Skript Stuttgart Wintersemester 2022/2023

[2]<https://www.spektrum.de/lexikon/physik/bohrscherradius/1823#:~:text=Bohrscher%20Radius%20der%20innersten,daraus%20a0%203D%200%2C529nm>.

(Abgerufen am 17.12.2022 um 15.50 Uhr)