Optična rotacija raztopine saharoze

Matija Zanjkoviča, Mesarec Tilena in Petauer Majaa

^aUniverza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko

Povzetek—V tej nalogi smo merili optično rotacijo polarizirane svetlobe v raztopinah saharoze različnih koncentracij pri dveh valovnih dolžinah (rdeča in zelena). Iz podatkov smo izračunali specifično rotacijo, ocenili napake in analizirali odvisnost od valovne dolžine z Drudejevo enačbo.

Ključne besede-specifična rotacija, saharoza, Drudejeva enačba, med

1. Uvod

O ptična rotacija je pojav, kjer kiralne molekule, kot je saharoza, zavrtijo ravnino polarizirane svetlobe. Ta pojav je odvisen od koncentracije snovi c, dolžine poti svetlobe l in valovne dolžine λ. Namen vaje je določiti specifično rotacijo pri različnih koncentracijah in valovnih dolžinah ter preveriti Drudejev model disperzije.

2. Teorija

Kot rotacije α je povezan s specifično rotacijo $[\alpha]_{\lambda}$ preko:

$$\alpha(\lambda) = [\alpha]_{\lambda} \cdot c \cdot l$$

Specifična rotacija je funkcija valovne dolžine in jo lahko približamo z Drudejevim modelom:

$$[\alpha](\lambda) = \frac{k\lambda^2}{\lambda^2 - A^2}$$

kjer sta k in A parametra, ki ju določimo iz eksperimentalnih podatkov.

3. Merjene količine

- Koncentracija saharoze c (g/mL)
- Valovna dolžina λ (nm),
- Kot rotacije α (°),
- Dolžina cevi l (dm)

4. Meritye

Dolžina cevi:

$$L = (11.5 \pm 0.5) \,\mathrm{dm}$$

$$L = 11.5 (1 \pm 0.043) \,\mathrm{dm}$$

Volumen raztopine je bil:

$$V = (3000 \pm 60) \,\mathrm{mL}$$

$$V = 3000 (1 \pm 0.02) \,\mathrm{mL}$$

To smo počeli pri konstantni temperaturi $T=22\pm1\,^{\circ}\text{C}$, saj na specifično rotacijo vpliva tudi temperatura.

Masa saharoze je bila izmerjena z napako 3 g. Relativna napaka koncentracije:

σc
_
0.033
0.020
0.014
0.011
0.010

Tabela 1. Relativna napaka koncentracije raztopine saharoze.

Pri meritvah smo opazili, da je pleksi steklo na obeh straneh cevi povzročilo dodatno rotacijo svetlobe. Ta učinek smo upoštevali pri izračunu kotov rotacije.

c [g/mL]	α_r [°]	α_z [°]	Δα [°]
0.000	75	79	2
0.030	90	96	2
0.050	102	110	2
0.070	115	126	2
0.090	131	136	2
0.100	137	141	2

Tabela 2. Izmerjeni koti rotacije za rdečo (α_r) in zeleno (α_z) svetlobo.

Meritve z odšteto začetno vrednostjo:

c [g/mL]	α_r [°]	α_z [°]	Δα [°]	$\sigma \alpha_r$	$\sigma \alpha_z$
0.000	0	0	4		
0.030	15	17	4	0,26	0,24
0.050	27	31	4	0,15	0,13
0.070	40	47	4	0,10	0,09
0.090	56	57	4	0,07	0,07
0.100	62	64	4	0,06	0,06

Tabela 3. Koti rotacije z odšteto začetno vrednostjo za rdečo (α_r) in zeleno (α_z) svetlobo.

5. Izračun specifične rotacije

Specifična rotacija $[\alpha]$ za vsako meritev:

$$[\alpha] = \frac{\alpha}{c \cdot L}$$

kjer je L dolžina cevi (npr. L = 1 dm).

5.1. Rezultati za rdečo valovno dolžino

$$[\alpha]_{c=0.030} = 43 (1 \pm 0.36)$$

$$[\alpha]_{c=0.050} = 47 (1 \pm 0.23)$$

$$[\alpha]_{c=0.070} = 50 (1 \pm 0.17)$$

$$[\alpha]_{c=0.090} = 54 (1 \pm 0.15)$$

$$[\alpha]_{c=0.100} = 54 (1 \pm 0.14)$$

5.2. Rezultati za zeleno valovno dolžino

$$[\alpha]_{c=0.030} = 49 (1 \pm 0.33)$$

$$[\alpha]_{c=0.050} = 54 (1 \pm 0.21)$$

$$[\alpha]_{c=0.070} = 58 (1 \pm 0.16)$$

$$[\alpha]_{c=0.090} = 55 (1 \pm 0.14)$$

$$[\alpha]_{c=0.100} = 56 (1 \pm 0.14)$$

6. Analiza: Drudejev model

Ker smo specifično rotacijo $[\alpha](\lambda)$ merili pri dveh različnih valovnih dolžinah, smo podatkom prilegli Drudejevo enačbo, ki opisuje odvisnost specifične rotacije od valovne dolžine λ :

$$[\alpha](\lambda) = \frac{k\lambda^2}{\lambda^2 - A^2}$$

Parametra k in A smo določili numerično.

```
spec_rot_r = [43, 47, 50, 54, 54] # specifična rotacija

→ za rdečo (primer)

   spec_rot_z = [49, 54, 58, 55, 56] # specifična rotacija
        ⇔ za zeleno (primer)
   rel_errors_r = [0.36, 0.23, 0.17, 0.15, 0.14]
   rel_errors_z = [0.33, 0.21, 0.16, 0.14, 0.14]
   lambda_vals = [635]*5 + [532]*5 # valovne dolžine v nm
   lambda_errs = [1] * len(lambda_vals) # napaka +-1 nm
   import numpy as np
8
   import matplotlib.pyplot as plt
10
   from scipy.optimize import curve_fit
11
   alpha_vals = np.concatenate((spec_rot_r, spec_rot_z))
12
   alpha_errs_r = [val * rel for val, rel in zip(spec_rot_r,
13
        → rel_errors_r)]
   alpha_errs_z = [val * rel for val, rel in zip(spec_rot_z,
14
        → rel_errors_z)]
   alpha_errs = np.concatenate((alpha_errs_r, alpha_errs_z)
15
        → )
17
   def drude(lambda_nm, k, A):
       return (k * lambda_nm**2) / (lambda_nm**2 - A**2)
18
19
   params, cov = curve_fit(
20
21
       drude.
22
       lambda_vals,
       alpha_vals,
       sigma=alpha_errs,
24
25
       absolute_sigma=True,
       p0=(1e4, 200)
26
27
   k_{fit}, A_{fit} = params
28
   k_err, A_err = np.sqrt(np.diag(cov))
29
   print("Ujemajoči parametri:")
31
   print(f" k = {k_fit:.2f} +- {k_err:.2f}")
print(f" A = {A_fit:.2f} +- {A_err:.2f} nm")
32
33
   lambda_fit = np.linspace(450, 700, 300)
35
   alpha_fit = drude(lambda_fit, k_fit, A_fit)
36
37
38
   plt.figure(figsize=(8, 5))
   plt.errorbar(
39
       lambda_vals
40
       alpha_vals,
41
42
       xerr=lambda errs.
       yerr=alpha_errs,
43
       fmt='o'.
       markersize=6,
45
       markerfacecolor='steelblue',
46
       markeredgecolor='black',
47
       ecolor='gray',
       elinewidth=1,
       capsize=4.
       label='Izmerjeni podatki z napako'
51
52
   plt.plot(lambda_fit, alpha_fit, color='cornflowerblue',
53
        → linewidth=2.2, label='Drudejevo prileganje')
   plt.xlabel('Valovna dolžina lambda (nm)')
   plt.ylabel('Specifična rotacija [alpha](lambda)')
55
   plt.title('Prileganje podatkov Drudejevi enačbi')
   plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
57
   plt.legend()
  plt.tight_layout()
  plt.show()
60
```

Koda 1. Numerično prileganje Drudejeve enačbe

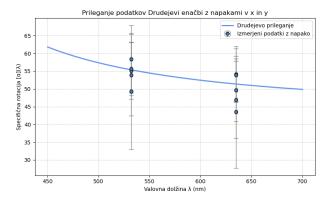
Rezultati prileganja:

$$k = (43.88 \pm 11.85)$$

 $k = 43.88 (1 \pm 0.27)$

$$A = (242.28 \pm 146.87)$$

 $A = 242.28 (1 \pm 0.61)$



Slika 1. Prileganje Drudejeve enačbe eksperimentalnim podatkom specifične rotacije.

6.1. Napake in rezultati

Rdeči laser (635 nm):

$$[\alpha]_{635 \text{ nm}} = (51 \pm 47)$$

 $[\alpha]_{635 \text{ nm}} = 51 (1 \pm 0, 92)$

Zeleni laser (532 nm):

$$[\alpha]_{532 \,\text{nm}} = (55 \pm 47)$$

 $[\alpha]_{532 \,\text{nm}} = 55 \,(1 \pm 0, 85)$

Modri laser (450 nm):

$$[\alpha]_{450 \,\text{nm}} = (62 \pm 47)$$

 $[\alpha]_{450 \,\text{nm}} = 62 \,(1 \pm 0,77)$

7. Zaključek

Eksperiment je pokazal, da se optična rotacija saharoze v vodi spreminja z različnimi koncentracijami in valovnimi dolžinami. Izračunana specifična rotacija potrjuje teorijo o optični aktivnosti in Drudejev model dobro opiše odvisnost od valovne dolžine.