

VIRUM GYMNASIUM

SRO

FYSIK OG KEMI

Applikationer af Bohrs atommodel og Lambert-Beers lov i spektroskopi

Forfatter

MINRUI KEVIN ZHOU

Vejledere

CARSTEN ANDREASEN

OLE VESTERLUND NIELSEN

28. november 2023



Resumé

I denne opgave undersøger vi, hvordan Bohrs atommodel og Lambert-Beers lov kan appliceres med hensyn til spektroskopi. Vi gør dette ved at kigge på emmision med hensyn til atomer og absorption med hensyn til molekyler. Vi benytter Bohrs atommodel til at optage et spektrum af atomar hydrogen, som vi sammenligner med spektret for enkeltioniseret helium og dobbelt-ioniseret lithium. Sammenfaldet mellem nogle af linjerne i spektrene for disse forklarer vi med Bohrs atommodel, der også kan bruges til at fortælle noget om hydrogenlignende atomer. Vi bruger Lambert-Beers lov til at bestemme koncentrationen af farvestofferne azorubin, sunset yellow og tartrazin i en Cuba Apricot Vodka vha. spektrofotometri. Disse får vi til at være henholdsvis 11,1 mg/L, 0,0593 mg/L og 13,4 mg/L.

Indhold

1	Introduktion	2
2	Teori	2
2.1	Bohrs atommodel	2
2.2	Lambert-Beers lov	3
2.3	Azorubin, sunset yellow og tartrazin	3
3	Metode	5
3.1	Spektrum for atomar hydrogen	5
3.2	Bestemmelse af koncentrationerne af farvestoffer i vodka	6
4	Resultater	9
4.1	Spektrum for atomar hydrogen	9
4.2	Bestemmelse af koncentrationerne af farvestoffer i vodka	11
5	Efterbehandling og diskussion	12
5.1	Spektrum for atomar hydrogen	12
5.2	Bestemmelse af koncentrationerne af farvestoffer i vodka	14
6	Konklusion	15

1 Introduktion

Ved at skyde fotoner på henholdsvis atomer og molekyler, kan man få informationer om dem. Dette fortæller Bohrs atommodel og Lambert-Beers lov noget om. I denne opgave viser vi, hvordan disse kan appliceres med hensyn til spektroskopi. Vi ser både på emmision med hensyn til atomer og absorption med hensyn til molekyler. Vi introducerer først Bohrs atommodel og derefter Lambert-Beers lov samt hvad absorbans er. Herefter undersøger vi tre farvestoffer, som er i en Cuba Apricot Vodka, da disse er relevante i forhold til en af eksperimenterne. Så benytter vi Bohrs atommodel til at optage et spektrum af atomar hydrogen, som vi sammenligner med spektret for enkeltioniseret helium og dobbelt-ioniseret lithium. Til sidst bruger vi Lambert-Beers lov til at bestemme koncentrationen af farvestofferne azorubin, sunset yellow og tartrazin i en Cuba Apricot Vodka vha. spektrofotometri.

2 Teori

2.1 Bohrs atommodel

I Bohrs atommodel består atomet af en positivt ladet kerne, hvor der er negative elektroner, som bevæger sig rundt om den i baner. Modellen tager udgangspunkt i to postulater.¹

Postulat 1. Atomet kan kun eksistere i nogle ganske bestemte stationære tilstande. I hver af disse tilstande har atomet en bestemt energi.

En stationær tilstand er en tilstand, hvor atomet ikke mister energi.

Postulat 2. Ændringer fra en tilstand med energien E_n til en anden med energien E_m kan ske ved, at atomet enten emitterer eller absorberer en foton med energien

$$h \cdot f = E_n - E_m$$

hvor f er atomets frekvens og h er Plancks konstant.

Ved at benytte disse postulater, kan man angiveligt komme frem til, at ligning 1 gælder for hydrogenatomet.²

$$E_n = -\frac{h \cdot c \cdot R}{n^2} \quad (1)$$

hvor h er Plancks konstant, c er lyssets fart og R er Rydberg-konstanten. Ved indsættelse af værdierne får vi

$$E_n = \frac{-13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

Bohrs model af hydrogenatomet kan også bruges til at forudsige spektrene for hydrogenlignende atomer. Atlså ioner, der er atomer, som har fået alle undtagen en af elektronerne fjernet. Da gælder ligning 2.³

$$E_n = \frac{-13,6 \text{ eV} \cdot Z^2}{n^2} \quad (2)$$

hvor Z er atomnummeret.

¹Brydensholt (2021), side 300

²Brydensholt (2021), side 302

³Rice University (2023), se 6.52

2.2 Lambert-Beers lov

Vi finder koncentrationen af farvestofferne i vodkaen ved at kigge på absorbansen. Denne måles med et spektrofotometer, hvori vi har en lyskilde, der passerer en monokromator og derefter en kuvette med opløsningen, hvorefter en detektor mäter lysets intensitet. Lysintensiteten måles først med det rene opløsningsmiddel i kuvetten og kaldes I_0 . Derefter mäter vi lysintensiteten med opløsningen nede i kuvetten, som vi kalder for I . Absorbansen, A , for opløsningen kan nu defineres.⁴

Definition 2.1 (Absorbans). Lad $A(\lambda)$ være absorbansen for opløsningen ved bølgelængden λ og lad I være lysintensiteten efter passage af opløsningen. Lad I_0 være lysintensiteten efter passage af det rene opløsningsmiddel. Så gælder der, at

$$A(\lambda) = \log_{10} \left(\frac{I_0}{I} \right).$$

Det viser sig, at når opløsningen er fortyndet, så koncentrationen af det absorberende stof er relativt lille, så absorbansen helst er mindre end 1, så er absorbansen proportional med den aktuelle stofmængdekonzentration af det absorberende stof, [stof], og at absorbansen også er proportional med lysvejens længde l .⁵ Da gælder Lambert-Beers lov, som ses i ligning 3, hvor ε_λ er den molære ekstinktionskoefficient, der afhænger af bølgelængden og det absorberende stof.

$$A(\lambda) = \varepsilon_\lambda \cdot l \cdot [\text{stof}] \quad (3)$$

I vores eksperiment angives koncentrationen af farvestofferne i mg/L og betegnes med c (farvestof). Lysvejens længde ændres heller ikke, og bølgelængden er konstant. Lambert-Beers lov kan derfor skrives som i ligning 4. For at se, hvorfor dette er tilfældet, bemærk at

$$k_\lambda = \frac{\varepsilon_\lambda \cdot l}{M(\text{stof})}$$

$$A(\lambda) = k_\lambda \cdot c(\text{stof}) \quad (4)$$

I en opløsning (som per definition er et homogent medium) med adskillige absorberende stoffer er absorbansbidragene for hvert enkelt absorberende stof additive.⁶ Det vil altså sige, at hvis en opløsning indeholder flere forskellige absorberende stoffer, så vil absorbansen for opløsningen være lig med summen af absorbanserne for opløsninger med de samme koncentrationer af de absorberende stoffer hver for sig.

2.3 Azorubin, sunset yellow og tartrazin

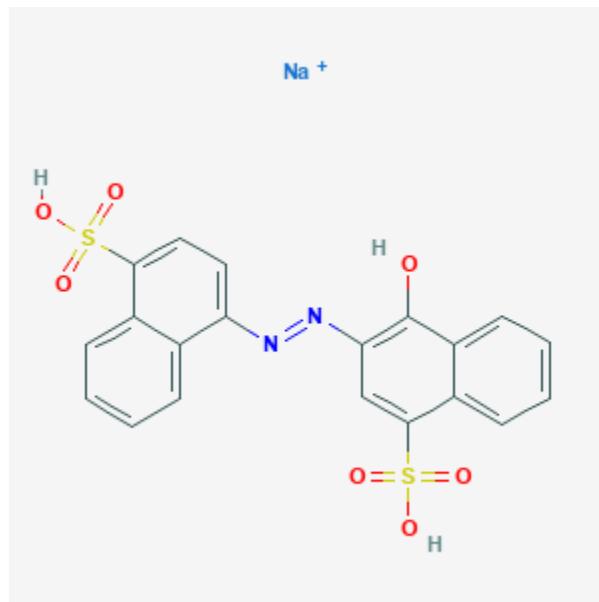
I vores Cuba Apricot Vodka er der tre forskellige absorberende stoffer. Disse er de tre kunstige farvestoffer, som kaldes azorubin, sunset yellow og tartrazin. Strukturformlerne for disse fra PubChem kan ses i fig. 1, fig. 2 og fig. 3.⁷

⁴Mygind et al. (2022), side 184

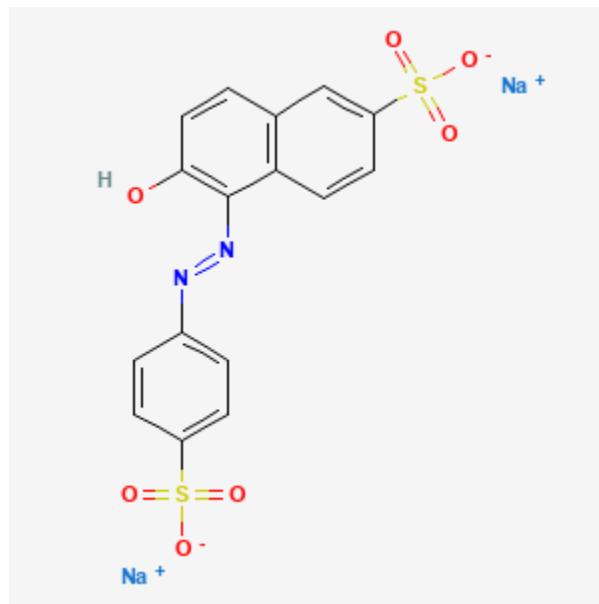
⁵Mygind et al. (2022), side 186

⁶Mayerhöfer et al. (2019), side 2749

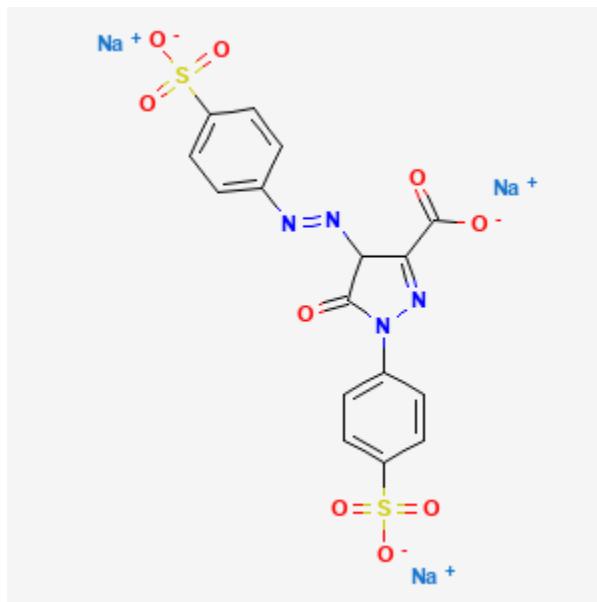
⁷PubChem (2023a,b,c)



Figur 1: Strukturformlen for azorubin

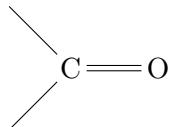


Figur 2: Strukturformlen for sunset yellow



Figur 3: Strukturformlen for tartrazin

Generelt siger man, at et organisk stof er farvet, hvis der minimum er otte konjugerede dobbeltbindinger i molekylet.⁸ Konjugerede dobbeltbindinger er dobbeltbindinger, hvormellem der er præcis én enkeltbinding. Da er det nemt at se, at der i hvert enkelt molekyle for de tre forskellige farvestoffer er mere end otte konjugerede dobbeltbindinger. Chromofore grupper har også betydning for stoffernes farve. De tre farvestoffer indeholder alle den chromofore gruppe azo, $-\text{N}=\text{N}-$, og er derfor azofarvestoffer. Med hensyn til chromofore grupper, indholder tartrazin også en carbonylgruppe:



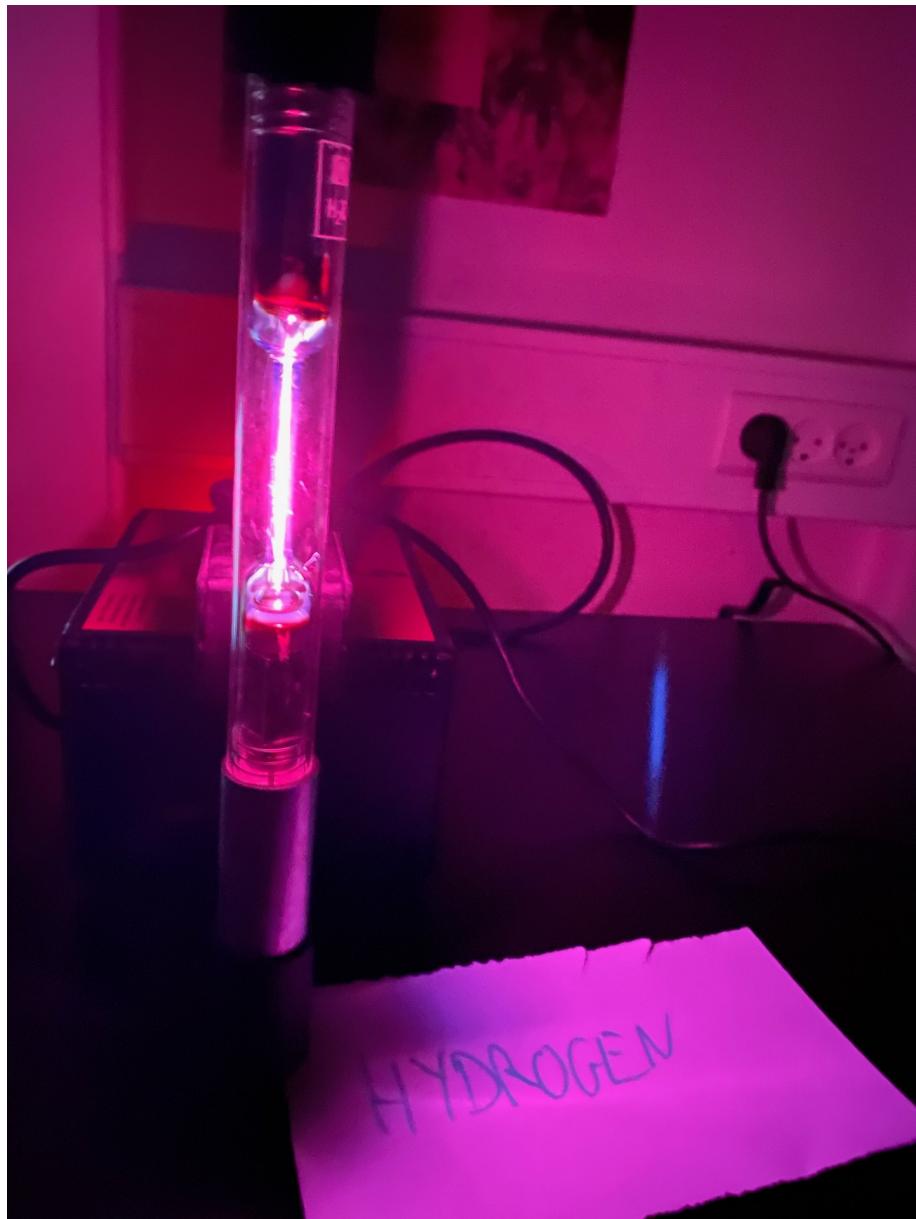
Med hensyn til auxochrome grupper, der er farvemodificerende, indeholder azorubin og sunset yellow en hydroxygruppe, $-\text{OH}$.

3 Metode

3.1 Spektrum for atomar hydrogen

Vi benyttede programmet LoggerPro til målingerne. Dette blev gjort med et fotospektrometer og tilhørende lyslederkabel, der blev forbundet til vores PC med et USB-kabel. Vi tændte vores udladningsrør med hydrogen i et mørkt rum som i fig. 4. Derefter førte vi lyslederkablet tæt på udladningsrøret for at måle den relative intensitet mht. forskellige bølgelængder. Til sidst tog vi et billede af hydrogenspektret gennem et gitter.

⁸Mygind et al. (2022), side 179



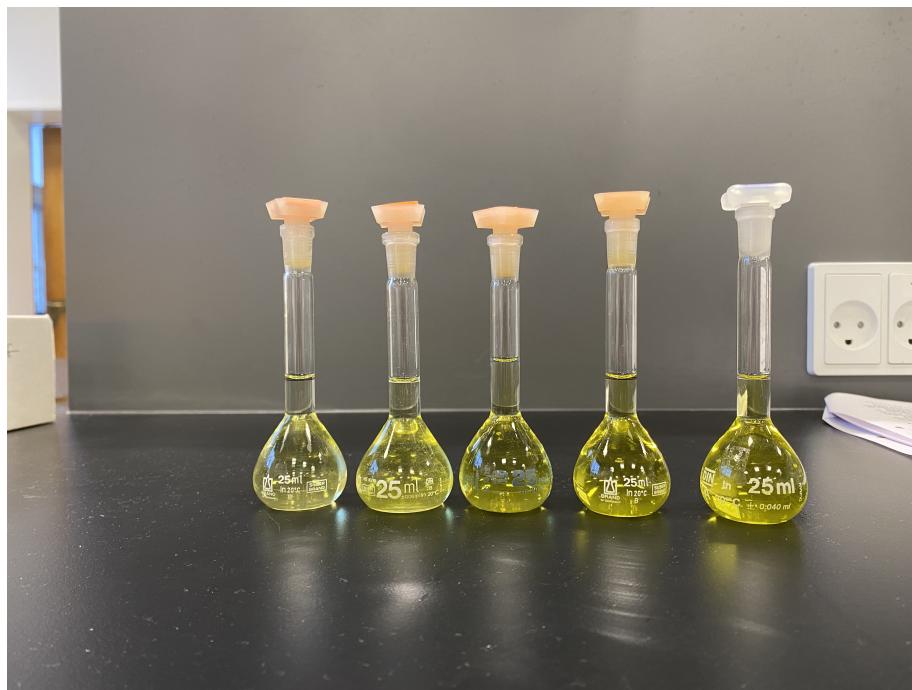
Figur 4: Tændt uladningsrør med hydrogen

3.2 Bestemmelse af koncentrationerne af farvestoffer i vodka

Først fremstillede vi fem standardopløsninger for hvert af de tre farvestoffer, henholdsvis azorubin, sunset yellow og tartrazin. Dette illustreres af tabel 1 og blev gjort i 25 mL målekolber, ved at fortynde vores stamopløsninger af farvestofferne, der havde koncentrationen 50,0 mg/L, med demineraliseret vand. Standardopløsningerne for tartrazin ses i fig. 5.

	Farvestof				
Opløsning nr.	1	2	3	4	5
Volumen 50,0 mg/L farvestof/mL	2,0	4,0	6,0	8,0	10,0
$c(\text{farvestof})/\text{mg/L i } 25 \text{ mL målekolbe}$	4,0	8,0	12,0	16,0	20,0

Tabel 1: Koncentrationen af farvestoffet i de numererede standardopløsninger



Figur 5: Standardopløsningerne for tartrazin

Programmet LoggerPro blev brugt ved målingerne sammen med et spektrofotometer. Vi tændte vores spektrofotometer og kalibrerede det med demineraliseret vand, da det er opløsningsmidlet. Brugen af spektrofotometeret sker som på fig. 6, hvor kuvetten sættes ned i spektrofotometeret med en pipettespids for at fastgøre denne. Vi fyldte derefter en kuvette op med opløsning nr. 5 for hvert af de tre farvestoffer og optog et absorptionsspektrum. Absorptionsspektret for tartrazin ses i fig. 8. Dernæst kunne vi bestemme bølgelængden for hver af de tre farvestoffer, hvor absorbansen er maksimal. Disse fremgår af tabel 2.

For hver af de fem standardopløsninger for de tre forskellige farvestoffer målte vi så absorbanserne ved de tre bølgelængder, hvor absorbansen er maksimal for deres respektive farvestof. Standardkurverne for tartrazin kan ses i fig. 11

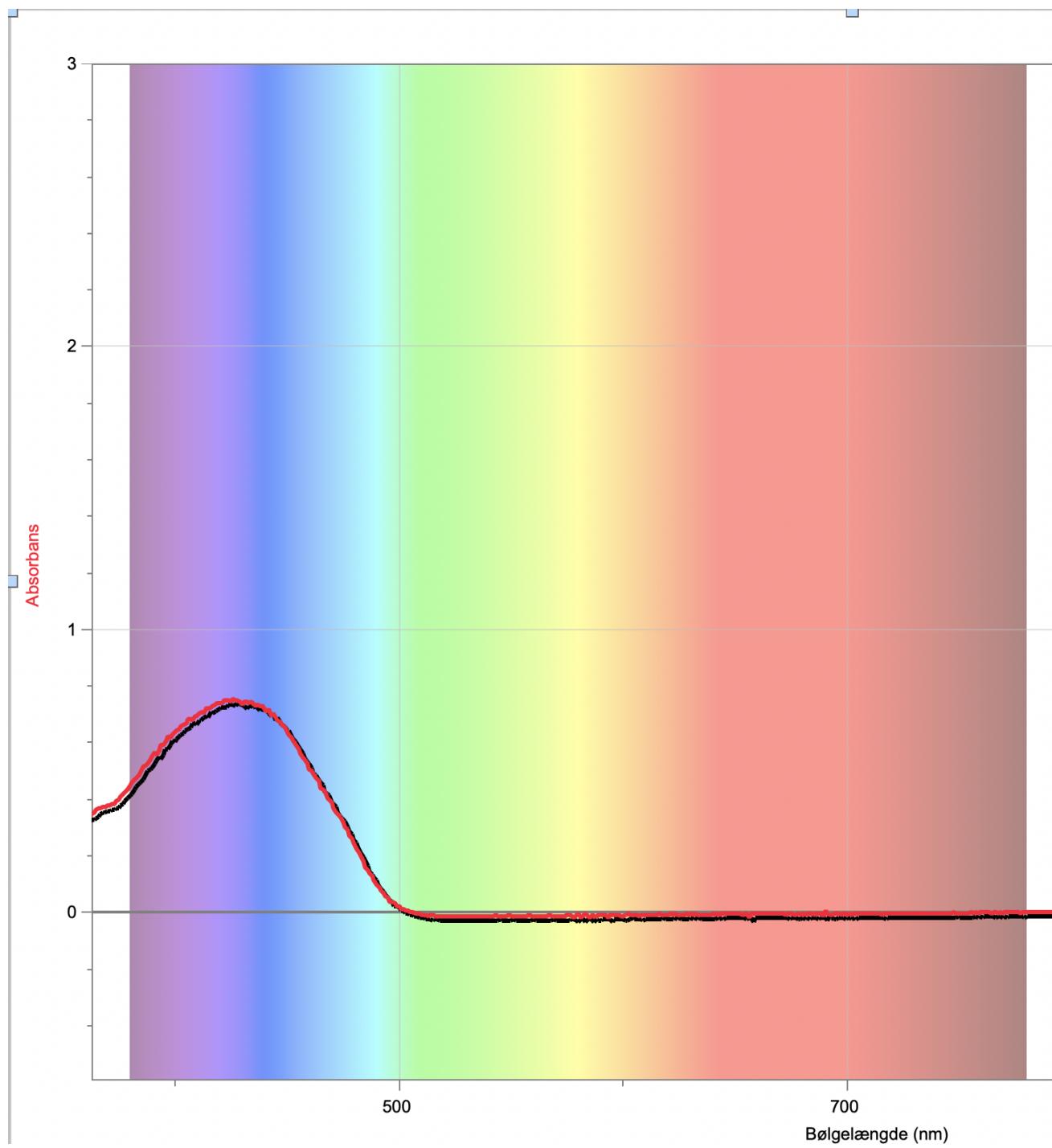
Til sidst fyldte vi en kuvette op med ”Cuba Apricot Vodka”, som ses i fig. 7. Vi målte så absorbanserne ved de samme tre bølgelængder, hvor absorbansen er maksimal for de tre forskellige farvestoffer.



Figur 6: Kuvette med opløsning i spektrofotometeret



Figur 7: En flaske med Cuba Apricot Vodka

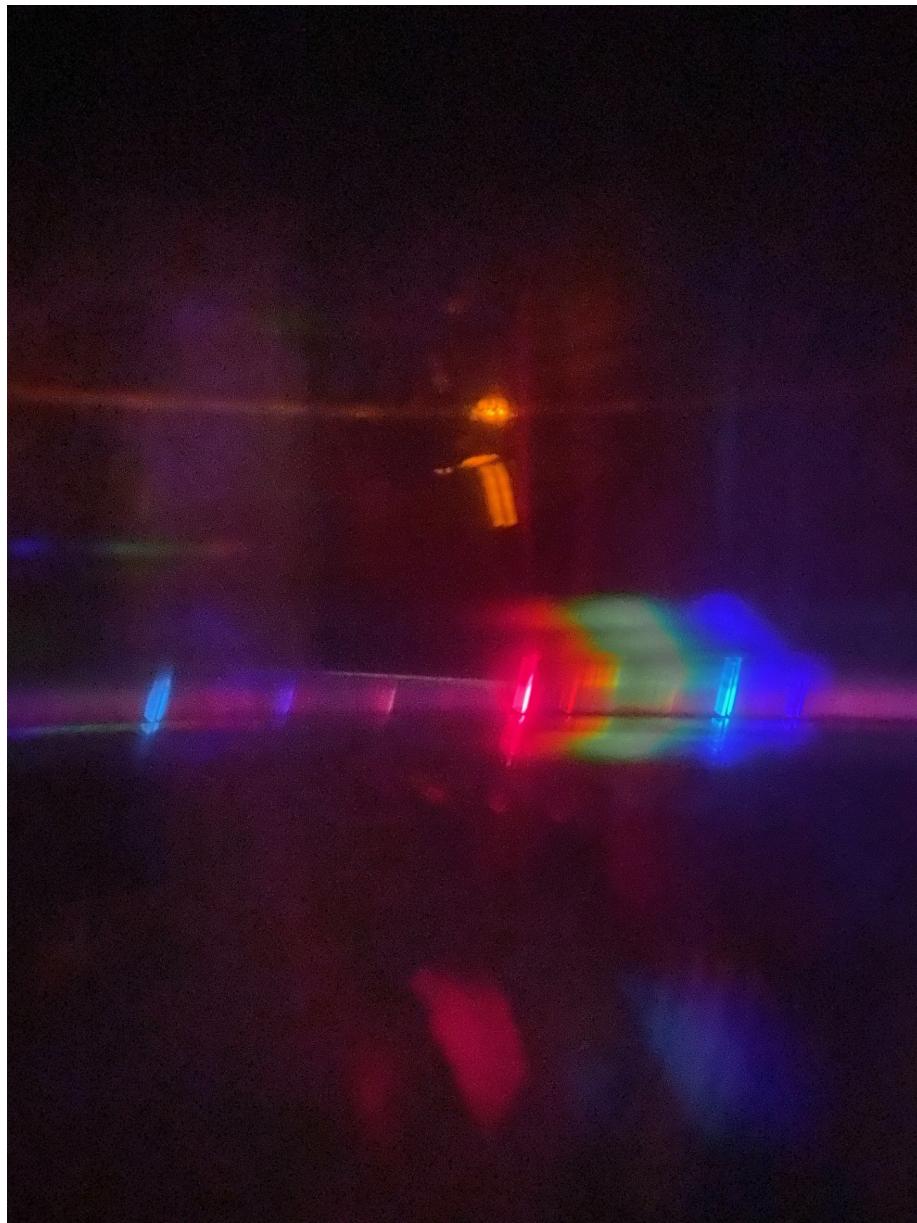


Figur 8: Absorptionsspektrum for tartrazin

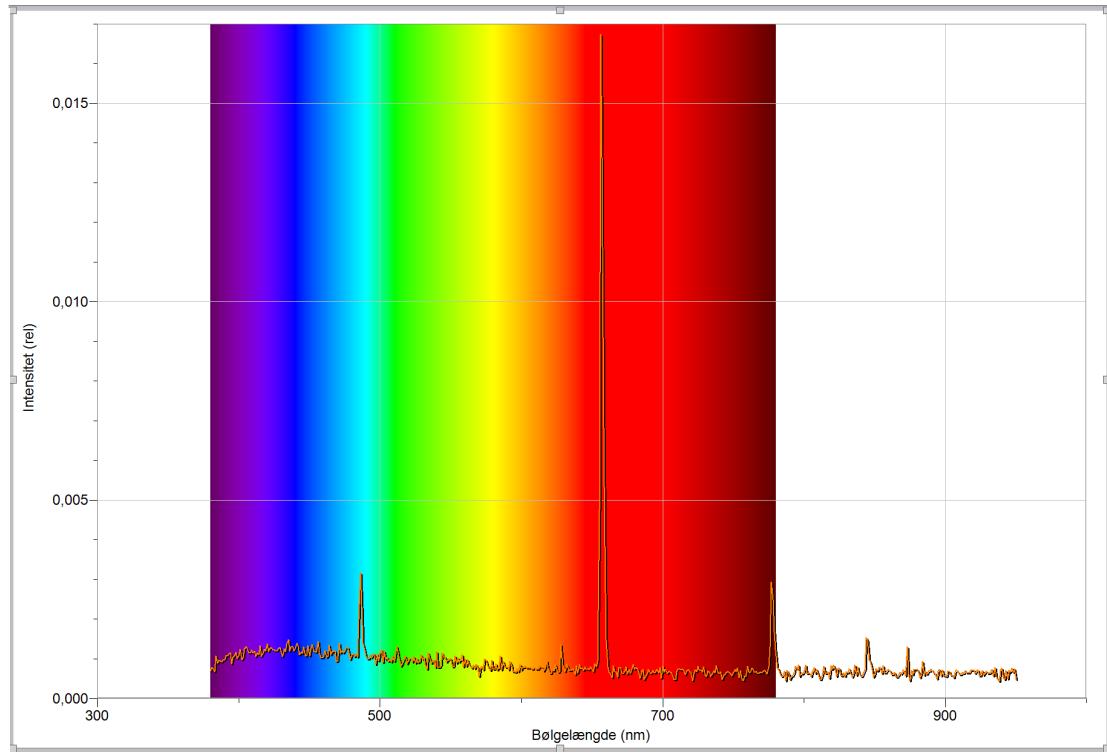
4 Resultater

4.1 Spektrum for atomar hydrogen

Vi har optaget spektret for atomar hydrogen både fotografisk gennem et gitter som i fig. 9 og via et spektrofotometer som i fig. 10.



Figur 9: Spektrum for hydrogen taget fotografisk gennem et gitter



Figur 10: Spektrum for hydrogen i LoggerPro taget med et spektrofotometer

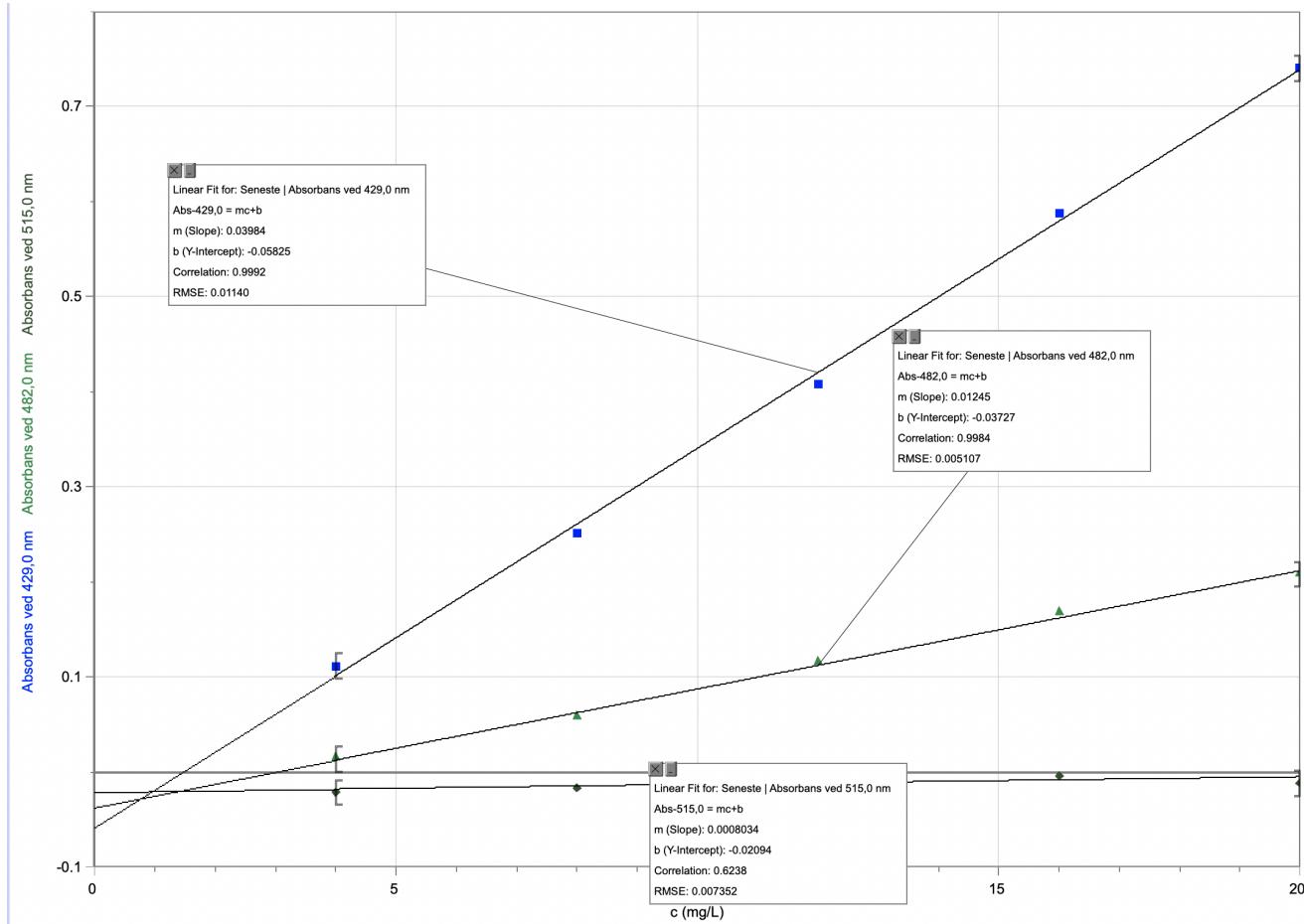
4.2 Bestemmelse af koncentrationerne af farvestoffer i vodka

Azorubin betegnes med a , sunset yellow betegnes med s og tartrazin betegnes med t . $\lambda_{\text{farvestof}}$ betegner bølgelængden, hvor absorbansen for farvestoffet er højest. Derudover betegner $k_{\lambda}^{\text{farvestof}}$ konstanten k_{λ} ved bølgelængden λ for farvestoffet.

Standardkurverne for tartrazin ses på fig. 11, hvor absorbanserne for standardopløsninger af tartrazin med koncentrationerne set i tabel 1 ved de tre bølgelængder, hvor absorbansen er maksimal for de tre farvestoffer, er vist. Standardkurver er også blevet lavet for de to andre farvestoffer, men er udeladt her. Hældningskoefficienterne for standardkurverne er da konstanterne $k_{\lambda}^{\text{farvestof}}$ i tabel 2.

λ_{max}	A_{vodka}	Azorubin	Sunset Yellow	Tartrazin
$\lambda_a = 515 \text{ nm}$	$A(\lambda_a) = 0,490$	$k_{\lambda_a}^a = 0,0428 \text{ L/mg}$	$k_{\lambda_a}^s = 0,03539 \text{ L/mg}$	$k_{\lambda_a}^t = 0,0008034 \text{ L/mg}$
$\lambda_s = 482 \text{ nm}$	$A(\lambda_s) = 0,530$	$k_{\lambda_s}^a = 0,0323 \text{ L/mg}$	$k_{\lambda_s}^s = 0,05204 \text{ L/mg}$	$k_{\lambda_s}^t = 0,01245 \text{ L/mg}$
$\lambda_t = 429 \text{ nm}$	$A(\lambda_t) = 0,669$	$k_{\lambda_t}^a = 0,0120 \text{ L/mg}$	$k_{\lambda_t}^s = 0,02316 \text{ L/mg}$	$k_{\lambda_t}^t = 0,03984 \text{ L/mg}$

Tabel 2: Bølgelængderne, hvor absorbansen er maksimal, absorbanserne for vodkaen ved disse bølgelængder og konstanterne.



Figur 11: Standardkurverne for tartrazin

5 Efterbehandling og diskussion

5.1 Spektrum for atomar hydrogen

Via LoggerPro fandt vi bølgelængderne for linjerne, hvilket kan ses i fig. 12. Bemærk at der i stedet for *opbevaringstid (min)* skal stå *bølgelængde (nm)*. Lad os nu sammenligne spektret for hydrogen med det for enkeltioniseret helium og dobbelt-ioniseret lithium.

Enkeltioniseret helium og dobbelt-ioniseret lithium er begge hydrogenlignende, siden de begge kun indeholder én elektron. Energiniveauerne for disse kan ses i fig. 13. Vi ser da, at energierne for nogle af tilstandene er ens for H og He^+ samt H og Li^{2+} . Siden forskellen på nogle af disse energier er ens for dem, vil det sige, at der er et sammenfald mellem nogle af linjerne i disses spektre. Grunden til, at nogle af energierne for tilstandene er ens, som er årsagen til sammenfaldet mellem nogle linjer i spektrene, kan findes i teorien i ligning 2:

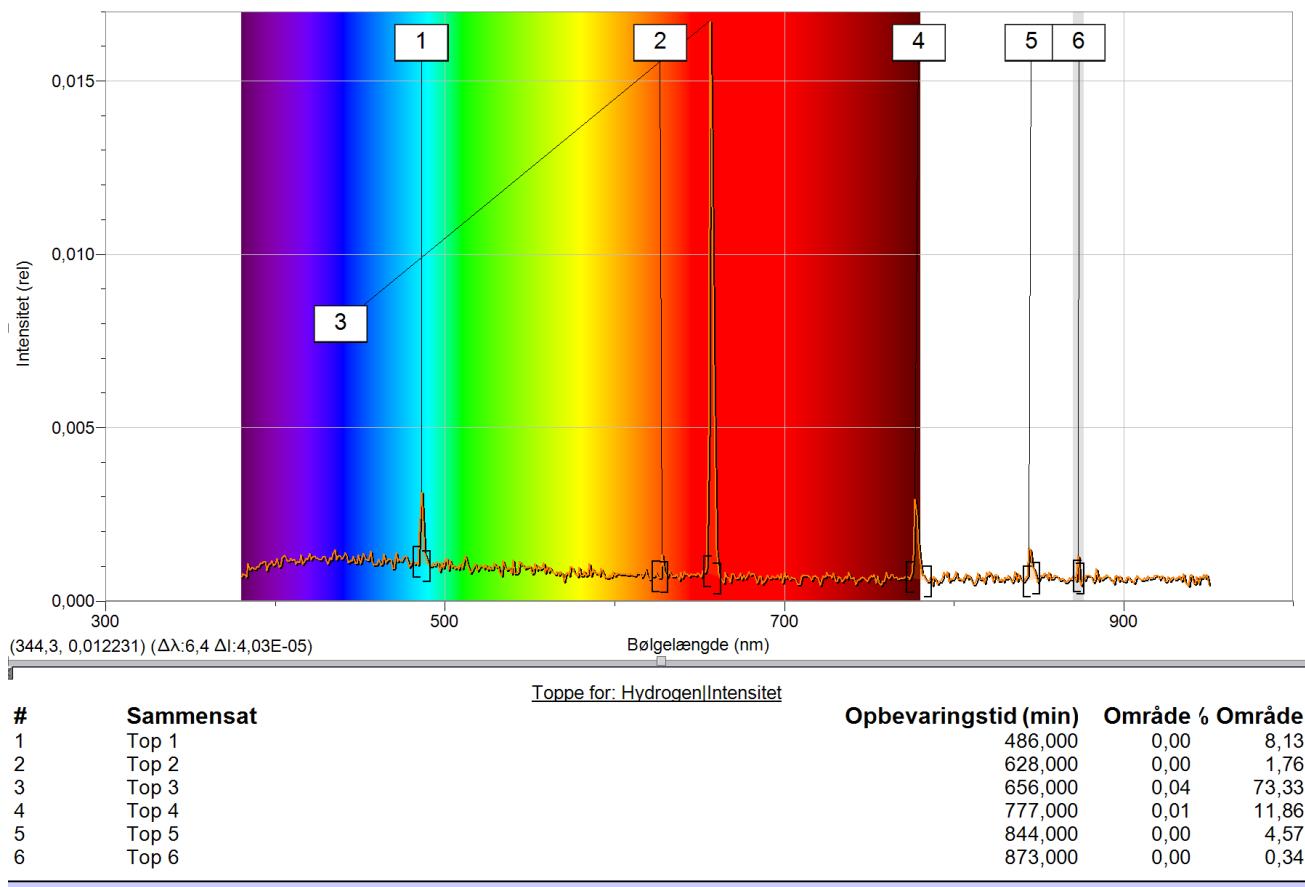
$$E_n = \frac{-13,6 \cdot Z^2}{n^2} = \frac{-13,6 \text{ eV}}{\left(\frac{n}{Z}\right)^2}$$

Siden der for He^+ gælder, at $Z = 2$, så må energien E_n være den samme som energien for en tilstand for hydrogen præcis når

$$n \in \{2m : m \in \mathbb{N}\}$$

På samme vis gælder der for Li^{2+} , at $Z = 3$. Altså må energien E_n være den samme som energien for en tilstand for hydrogen præcis når

$$n \in \{3m : m \in \mathbb{N}\}$$



Figur 12: Bølgelængderne for linjerne i hydrogenspektret (ikke opbevaringstid)

H	
<i>n</i>	<i>E</i> /eV
1	-13,598
2	-3,383
3	-1,491
4	-0,829
5	-0,523
6	-0,356
7	-0,256
8	-0,191
9	-0,146
10	-0,114

He⁺	
<i>n</i>	<i>E</i> /eV
1	-54,418
2	-13,608
3	-6,048
4	-3,398
5	-2,178
6	-1,508
7	-1,111
8	-0,850
9	-0,672
10	-0,544

Li⁺⁺	
<i>n</i>	<i>E</i> /eV
1	-122,38
2	-30,54
3	-13,53
4	-7,58
5	-4,82
6	-3,33
7	-2,42
8	-1,84
9	-1,44
10	-1,15

Figur 13: Energiniveauerne H, He⁺ og Li²⁺

5.2 Bestemmelse af koncentrationerne af farvestoffer i vodka

Vores måleresultater er i overensstemmelse med Lambert-Beers lov, da graferne i fig. 11 fortæller, at koncentrationen og absorbansen er ligefrem proportionale, siden linjerne bestemt via mindste kvadraters metode tilnærmelsesvis går gennem (0,0). Årsagen til den negative absorbans når koncentrationen er tæt på 0, er med stor sandsynlighed grundet sollys og lys fra lamperne i rummet, der ville øge lysintensiteten målt af detektoren i spektrofotometeret. Dette er den vigtigste fejlkilde i eksperimentet.

For at bestemme koncentrationerne koncentrationen af azorubin, sunset yellow og tartrazin i vores Cuba Apricot Vodka, udnytter vi additiviteten af absorbansbidragende for hvert enkelt absorberende stof i opløsningen (se Teori). Vi bruger størrelserne fra tabel 2 til at opstille tre ligninger med tre ubekendte:

$$0,0428 \cdot x + 0,03539 \cdot y + 0,0008034 \cdot z = 0,490$$

$$0,0323 \cdot x + 0,05204 \cdot y + 0,01245 \cdot z = 0,530$$

$$0,0120 \cdot x + 0,02316 \cdot y + 0,03984 \cdot z = 0,669$$

Vi får løsningen til cirka at være

$$x \approx 11,1 \wedge y \approx 0,0593 \wedge z \approx 13,4$$

Altså vil det sige at

$$c(a) \approx 11,1 \text{ mg/L}$$

$$c(s) \approx 0,0593 \text{ mg/L}$$

$$c(t) \approx 13,4 \text{ mg/L}$$

Vi har nu bestemt koncentrationerne for azorubin, sunset yellow og tartrazin i vores Cuba Apricot Vodka.

6 Konklusion

I denne opgave har vi kigget på Bohrs atommodel og brugt den til at forklare sammenfaldet mellem nogle af linjerne i spektrene for hydrogen, enkeltioniseret helium og dobbelt-ioniseret lithium. Vi optog et spektrum af hydrogen både fotografisk gennem et gitter og med et spektrofotometer. Vi brugte også et spektrofotometer til at måle absorbanserne ved bestemte bølgelængder for nogle standardopløsninger af azorubin, sunset yellow og tartrazin, som vi redegjorde for at være farvede. Vi så, at resultaterne var i overensstemmelse med Lambert-Beers lov. Derefter målte vi absorbanserne ved nogle bølgelængder for en Cuba Apricot Vodka, og benyttede så den additive egenskab ved de individuelle absorbansbidrag fra hvert enkelt absorberende stof til at finde koncentrationerne af de tre farvestoffer i vodkaen. Vi fandt koncentrationen af azorubin til at være 11,1 mg/L, koncentrationen af sunset yellow til at være 0,0593 mg/L og koncentrationen af tartrazin til at være 13,4 mg/L.

Litteratur

- Brydensholt, M. (2021). *Orbit B stx*. Aarhus: Systime, 2. ed.
- Mayerhöfer, T. G., Pipa, A. V., & Popp, J. (2019). Beer's Law-Why Integrated Absorbance Depends Linearly on Concentration. *ChemPhysChem*, 20(21), 2748–2753.
- Mygind, H., Axelsen, V., & Vesterlund Nielsen, O. (2022). *Basiskemi B*. Kbh.: Praxis, 3. ed.
- PubChem (2023a). Azorubin. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/135436509>.
- PubChem (2023b). Sunset Yellow FCF. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/17730>.
- PubChem (2023c). Tartrazine. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/164825>.
- Rice University (2023). 6.4 Bohr's Model of the Hydrogen Atom - University Physics Volume 3 — OpenStax. <https://openstax.org/books/university-physics-volume-3/pages/6-4-bohrs-model-of-the-hydrogen-atom>.