Spectrofotometer

Gunar Stevens Tweede Bachelor Fysica en Sterrenkunde Opstelling 8

Groep **5**16 november 2023

Abstract

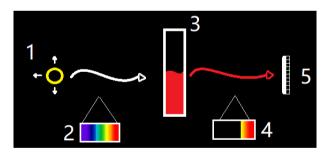
In dit experiment werd er gekeken naar de invloed van kleur van een oplossing op zijn transmissiespectrum. Ook werden er via de wet van Lambert-Beer 2 onbekende methyleenblauwconcentraties bepaald aan de hand van hun transmissiespectrum: $c_X = (17, 13 \pm 1, 2) \text{mg}/100 \text{ml}$ en van Y: $c_Y = (12, 00 \pm 0, 91) \text{mg}/100 \text{ml}$. Ten slotte werden er onbekende elementen geïdentificeerd aan de hand van hun emissiespectrum: Cd, Hg, H en He.

1 Inleiding

In dit verslag worden de resultaten van het experiment met betrekking tot de spectrofotometer besproken zowel als conclusies getrokken uit desbetreffende resultaten. In dit experiment trachtte men de transmissiespectra van verschillende oplossingen te onderzoeken en enkele eigenschappen te achterhalen van desbetreffende oplossingen via een spectrofotometer. Ook werd er via dit instrument gekeken naar de emissiespectra van 4 verschillende lampen.

2 Experimentele methode

De geutiliseerde opstelling voor dit experiment luidt: een spectrofotometer(Ocean Optics Red Tide USB650), een USB kabel, een laptop(Windows OS) met USB-A poort en software SpectraSuite, 10 cuvetten met $d=1\mathrm{cm}$ met gedestilleerd water waarvan er 3 ook een kleurstof(rood,groen,geel) bevatten en waarvan er een andere 6 methyleenblauw in verschillende concentraties bevatten: (1) 2,5mg/100ml, (2)5mg/100ml, (3) 10mg/100ml en (4) 25mg/100ml waarbij de laatste twee concentraties van cuvet X en Y niet gegeven zijn (de laatste cuvet zonder supplement is onze referentiecuvet), zwart balkje met de grootte van een cuvet en 4 verschillende spectraallampen.



Figuur 1: Simplistische illustratie van de experimentele opstelling met daarop een bron(1), een cuvet bevattende een oplossing(3) en een CCD-detector(5). (2) en (4) representeren het spectrum van het licht voor en na de cuvet.

Figuur 1 illustreert de essentie van de methodiek(zie deze voor referenties). Een bron(1) zal licht uitzenden met een bepaald emissiespectrum(2). Een deel van het geradieerde licht zal door de oplossing in de cuvet(3) reizen met een gereduceerd spectrum(4). Deze zal gedetecteerd worden door de CCD-detector die de intensiteit per nm golflengte zal opmeten gaande van 350nm tot 1000nm. Zo bekijken we verschillende oplossingen en kunnen we hun emissiespectrum bestuderen. Voor de studie van de spectraallampen is de configuratie equivalent, er is enkel geen intermediaire oplossing, i.e. het geëmitteerde licht van de spectraallamp zal direct worden opgemeten door de CCD-detector. Initieel gaan we het zwarte balkje plaatsen op de positie van de cuvet. Men zal dan waarnemen dat er nogsteeds een intensiteit wordt opgemeten door de detector. Dit fenomeen heet dark current, waarbij er een stroom wordt gegenereerd in de detector zonder direct invallende fotonen te wijten aan externe factoren. In de software SpectraSuite is er

echter een optie om deze current mee te rekenen en ervoor te corrigeren. De referentiecuvet laat ons toe het 'normale' spectrum te zien. Zo berekenen we alles relatief tot deze referentiecuvet. Men zou kunnen beargumenteren dat geen cuvet equivalent zou zijn, maar het spectrum van de cuvet met gedestilleerd water(de referentiecuvet) is al beïnvloedt door extinctie veroorzaakt door bv. de wand van de cuvet, sinds dat we enkel geïnteresseerd zijn in de invloed van kleurstoffen en oplossingen, is de referentiecuvet dus de beste optie.

2.1 Tranmissiespectra gekleurde vloeistoffen

Het eerste onderzoek dat we uitvoeren is via de kleuroplossingen en de referentiecuvet. We vragen ons af welke invloed de kleur van de oplossing heeft op het emissiespectrum van desbetreffende oplossing. Zo trachtten we het emissiespectrum van de rode, groene en gele vloeistof, en die van de referentiecuvet te achterhalen. Relatief tot het spectrum van de referentiecuvet kan men dan bekijken welke golflengtes van straling de oplossing wel en niet doorlaat.

2.2 Transmissiespectra methyleenblauwoplossingen

In deze subsectie gaan we de tranmissiecoëfficiënten van de methyleenblauwoplossingen bepalen(t.o.v. de referentiecuvet). Deze wordt gegeven door:

$$T = \frac{I(\lambda)}{I_0(\lambda)} \tag{1}$$

Met I_0 de intensiteit van de straling doorheen de referentiecuvet, I de intensiteit van de straling doorheen de methyleenblauwoplossingen en lambda een welbepaalde golflengte, deze wordt gekozen nabij een piek van de transmissiespectra van de verschillende oplossingen, deze delen namelijk allemaal dezelfde pieken en dalen, dit omdat ze dezelfde oplossing hebben, maar in andere concentraties. Zo kunnen we de extinctie-coëfficient bepalen die gegeven wordt door $E = -\log(T)$. Deze is evenredig aan dc waarbij d = 1 cm de dikte van de cuvet is en c de concentratie van de oplossing. Zo geeft de wet van Lambert-Beer ons:

$$E = -\log(T) = \varepsilon_{\lambda} \cdot c \cdot d \tag{2}$$

Met ε_{λ} de evenredigheidsfactor. We hebben de concentraties van oplossingen 1,2,3 en 4 gekregen. Zo kunnen we een gemiddelde waarde van de evenredigheidsfactor ε_{λ} verkrijgen en dus de onbekende concentraties van oplossing X en Y bepalen.

2.3 Emissiespectra van spectraallampen

Ten slotte voeren we onderzoek uit naar het emissiespectrum van enkele spectraallampen. Via verdere analyse zal men kunnen waarnemen dat er slechts enkele pieken voorkomen in desbetreffend spectrum. Men kan deze pieken t.o.v. elkaar analyseren en vergelijken met [2]. Deze bron supplementeert de situering van karakteristieke pieken per element. Zo kunnen we per spectraallamp het spectrum vergelijken met [2] en het gaselement bepalen.

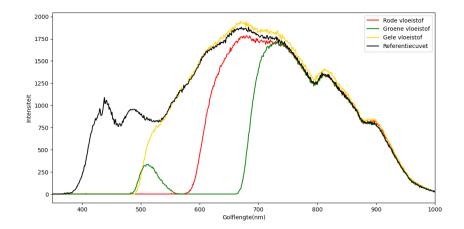
3 Meetdata

Voor praktische redenen gaan we de data gegeven door de spectrofotometer hier niet uiteenzetten in tabellen, maar eerder illustreren.¹

3.1 Transmissiespectra gekleurde vloeistoffen

De meetdata i.v.m. de transmissiespectra van de gekleurde vloeistoffen en die van de referentiecuvet zijn geïllustreerd in Figuur 2.

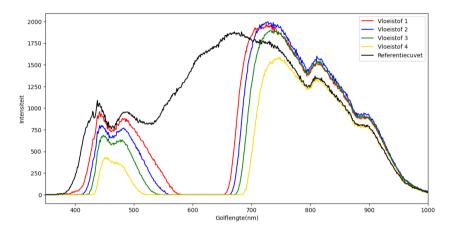
¹De intensiteit wordt gemeten in counts via de CCD-detector. Deze eenheid is echter irrelevant omdat we relatieve conclusies nemen t.o.v. de referentiecuvet, of in het onderzoek naar de spectraallampen, t.o.v. andere pieken.



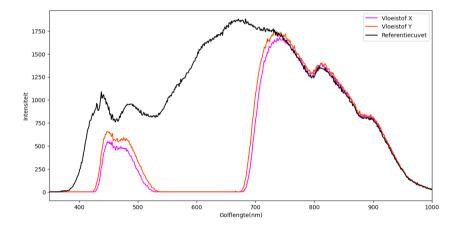
Figuur 2: Transmissiespectra van de referentiecuvet, rode, groene en gele oplossing

3.2 Transmissiespectra methyleenblauwoplossingen

De meetdata i.v.m. de tranmissiespectra van de resterende oplossingen, zijnde oplossing 1,2,3,4,X,Y en wederom van de referentiecuvet zijn gerepresenteerd in Figuur 3 en Figuur 4.



Figuur 3: Transmissiespectra van de referentie
cuvet en oplossingen 1,2,3 en $4\,$

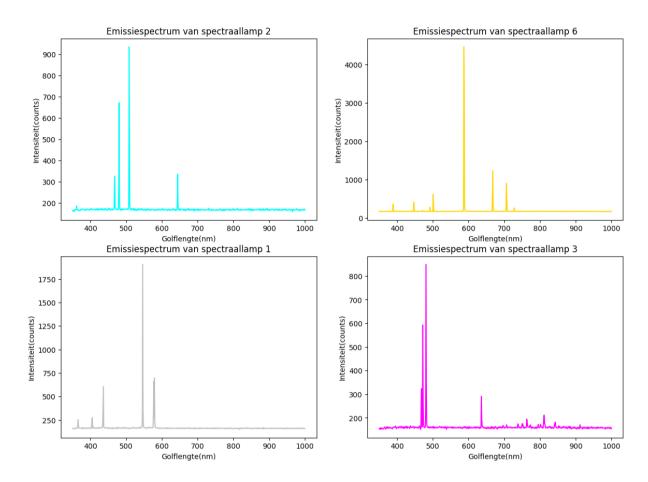


Figuur 4: Transmissiespectra van de referentiecuvet en oplossing X en Y

3.3 Emissiespectra van spectraallampen

De meetdata i.v.m. de emissiespectra van de spectraallampen zijn vertegenwoordigd in Figuur 5. Er viel additioneel waar te nemen dat spectraallamp 2 een voornamelijk cyaankleurige schijn had, spectraallamp

6 een gele schijn had, spectraallamp 1 een wit-gele schijn had en dat de schijn van spectraallamp 3 magenta-kleurig was.

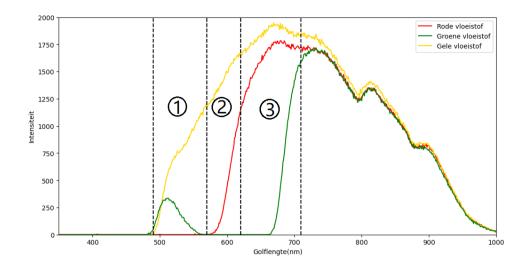


Figuur 5: Emissiespectra van spectraallampen 1,2,3 en 6

4 Bespreking en verwerking

4.1 Transmissiespectra gekleurde vloeistoffen

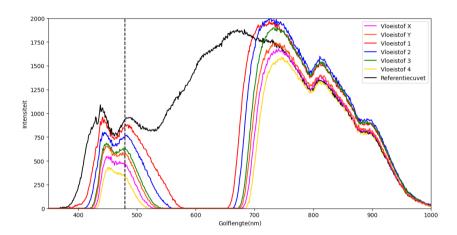
Uit [2] kan men volgende relevante associaties verwerven: groen kan geassocieerd worden met golflengtes 490-570nm, geel-oranje met 570-620nm en rood met 620-710nm. Figuur 2 zonder het spectrum van de referentiecuvet inclusief voorgaand besproken grenzen zijn geïllustreerd in Figuur 6(zie deze voor referenties). In deze illustratie kan men zien dat voor bv. het spectrum van de groene vloeistof enkel een deel van de inkomende groene golflengtes(1) wordt getransmitteerd. Voor het spectrum van de tweede vloeistof kan men waarnemen dat deze verder strekt dan het geassocieerde golflengtegebied(2), dit omdat geel een samengestelde kleur is. Voor het spectrum van de rode vloeistof zien we ook een piek bij het geassocieerd gebied(3). We zien echter dat elk spectrum terug piekt en zelfs samenvalt met het spectrum van de referentiecuvet na het rode golflengtegebied(3). Dit is te wijten aan de geproduceerde infraroodstraling van de lamp, die dus niet gereflecteerd wordt door de onderzochte vloeistoffen. Zo transmitteren onze vloeistoffen enkel selecte waarden van de golflengte, er is bv. geen enkele onderzochte vloeistof die elektromagnetische straling met een golflengte lager dan ≈ 500 nm doorlaat, en dus wordt desbetreffend licht gereflecteerd.



Figuur 6: Tranmissiespectra van de rode, groene en gele vloeistof, met daarop de gebieden van golflengtes geassocieerd met groen(1), geel(2) en rood(3) aangeduid.

4.2 Tranmissiespectra methyleenblauwoplossingen

We kiezen voor onze optimale golflengte $\lambda = 480 \text{nm}$, weergeven in Figuur 7.



Figuur 7: Transmissiespectra van oplossingen 1, 2, 3, 4, X en Y, de gekozen golflengte $\lambda=480\mathrm{nm}$ is aangeduid met een zwarte stippenlijn

Uit vergelijking 1 kunnen we de tranmissiecoëfficienten bepalen van elke oplossing, deze zijn uitgezet in Tabel 1. Uit [1] volgt er dat de signaal tot ruis verhouding 250:1 is, implicerende dat we op elke meting van intensiteit een relatieve fout hebben van de grootte RF(I) = 0,004. Zo wordt de fout op T gegeven door:

$$AF(T) = T \cdot (RF(I) + RF(I_0)) = 0,008 \cdot T$$
 (3)

Oplossing	T	AF(T)
1	0,93	0,008
2	0,81	0,007
3	0,68	0,006
4	0,36	0,003
X	0,50	0,005
Y	0,62	0,005

Tabel 1: Transmissiecoëfficiënt per oplossing en zijn fout

Via vergelijking 2 kunnen we nu ook de extinctie-coëfficiënt bepalen per oplossing, deze zijn uitgezet

in Tabel 2. Ook kunnen we uit oplossing 1,2,3 en 4 lineaire regressie² toepassen om een waarde voor de evenredigheidsfactor ε_{λ} te bekomen omdat voor desbetreffende oplossingen de concentratie gekend is. Via deze factor kunnen we dan ook de concentratie bepalen van oplossing X en Y. De fout op E wordt gegeven door:

$$AF(E) = \left(\frac{d}{dx}\log\left(\frac{1}{x}\right)\right)_{x=T} \cdot AF(T) = \frac{1}{\ln(10)T} \cdot 0,008 \cdot T = 0,004 \tag{4}$$

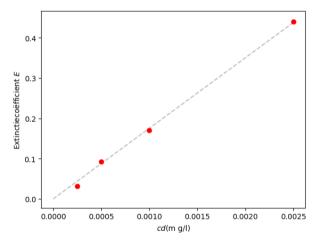
Oplossing	E	AF(E)
1	0,032	0,004
2	0,092	0,004
3	0,17	0,004
4	0,44	0,004
X	0,30	0,004
Y	0,21	0,004

Tabel 2: Extinctiecoëfficiënt per oplossing en zijn fout

Zoals voorgaand besproken kunnen we nu E uitzetten i.f.v. cd en lineaire regressie toepassen, geïllustreerd in Figuur 8. Deze procedure levert ons een waarde voor $\varepsilon_{\lambda} = (175, 1 \pm 9, 9) \frac{1}{m \cdot g}$. Nu kan men via vergelijking 2 de concentraties van oplossingen X en Y bepalen. Hierbij wordt de fout gegeven door:

$$AF(c) = c \cdot (RF(E) + RF(\varepsilon_{\lambda}d))$$
(5)

Er volgt een concentratie van X: $c_X=(17,13\pm1,2)\mathrm{mg}/100\mathrm{ml}$ en van Y: $c_Y=(12,00\pm0,91)\mathrm{mg}/100\mathrm{ml}$



Figuur 8: Extinctie-coëfficiënten E van oplossing 1,2,3 en 4 i.f.v. cd met een gefitte rechte via lineaire regressie

4.3 Emissiespectra van spectraallampen

Uit Figuur 5 en [2] kan men afleiden dat lamp 2 een Cadmium (Cd) lamp is, men kon ook waarnemen dat deze lamp cyaankleurig licht emitteerde, wat karakteristiek is aan Cadmium lampen. Verder konden we afleiden dat lamp 6 een Helium (He) lamp is, dat lamp 1 een Kwik (Hg) lamp is en dat lamp 3 een waterstof(H) lamp is.

4.4 Besluit

Uit de eerste subproef konden er enkele conclusies gemaakt worden: een vloeistof met een bepaalde kleur, bv. groen zal enkel straling waarvan de golflengte gelijk is aan de golflengte geassocieerd met die kleur transmitteren. Ook vonden we, onafhankelijk van de kleur van een vloeistof,dat deze vloeistof infraroodstraling zal transmitteren i.p.v. reflecteren. Uit de tweede subproef kon men via de wet van

 $^{^2\}mathrm{Methodiek}$ inclusief fout op richtingscoëfficiënt van gefitte rechte via 'Cursus Experimenteren in de Fysica en Sterrenkunde 1'

Lambert-Beer twee onbekende concentraties bepalen, gegeven hun emissiespectra(en enkele referentiespectra om de evenredigheidsfactor te bepalen). Ten slotte konden we de vier onbekende elementen in de spectraallampen identificeren aan de hand van hun emissiespectra: cadmium in lamp 2, helium in lamp 6, kwik in lamp 1 en waterstof in lamp 3.

Referenties

- [1] Ocean Optics. Red tide usb650 fiber optic spectrofotometer installation and operation manual, 2023. [Geraadpleegd op 22 november 2023].
- [2] B. Van Waeyenberge. Ufora experimenteren in de fysica en sterrenkunde 2 practica spectrofotometer documentatie spectrofotometer lijst van spectraallijnen, 2023. [Geraadpleegd op 21 november 2023].