
Spectrofotometer

Oscar Marchand

Tweede Bachelor Fysica en Sterrenkunde

30/11/2023

Groep 8

0.1 Abstract

In deze proef worden de transmissiespectra van bepaalde vloeistoffen onderzocht. Er wordt gevonden dat gekleurde vloeistoffen licht doorlaten wiens golflengte correspondeert met hun kleur. We kunnen dit ook gebruiken om concentraties van oplossingen te bepalen via hun extinctie. We vinden $c'_X = (0,18 \pm 0,04)g/ml$ en $c'_Y = (0,12 \pm 0,03)g/ml$. Verder bekijken we de emissiespectra van lampen om te vinden uit welke elementen deze bestaan. We vinden dat de 4 onderzochte lampen bestaan uit respectievelijk Cadmium, helium, zink en kwik.

1 Inleiding

De energie van een elektron in een atoom is in tegenstelling tot wat men verwacht niet continu, maar discreet (zie bron[1]). Dit betekent dat elektronen in een bepaald atoom enkel heel specifieke energiewaarden kunnen aannemen die karakteristiek zijn voor elk atoom. Wanneer de atomen op een bepaalde manier geëxciteerd worden zullen ze licht uitzenden die overeenkomt met deze energieniveaus. Door het bekijken van dit *emissiespectrum* kunnen we de samenstelling van de stof bepalen.

Als we echter licht met een gekende intensiteit door een vloeistof laten gaan kunnen we uit dit *transmissiespectrum* de concentratie van een bepaalde vloeistof berekenen.

2 Experimentele methode

2.1 Opstelling

In de opstelling hebben we een spectrofotometer type Ocean Optics Red Tide 650 waarvan het spectrum geanalyseerd wordt via SpectraSuite.

We hebben 9 verschillende cuvetten en een referentiecuvet. De referentiecuvet is gevuld met gedistilleerd water en wordt gebruikt om de extinctie van licht te bepalen die veroorzaakt wordt door de cuvet en het gedistilleerd water. De metingen worden telkens gerefereerd ten opzichte van deze referentiecuvet. Vervolgens hebben we een groene, rode en gele oplossing en 6 methyleenblauw oplossingen 1,2,3,4,X en Y zoals te zien op Figuur 2 met verschillende concentraties. Deze zijn: $c_1 = 0,025g/l$, $c_2 = 0,05g/l$, $c_3 = 0,1g/l$, $c_4 = 0,25g/l$. Daarnaast hebben we ook 4 verschillende lampen in opstellingen 1,2,3 en 6 met respectievelijke kleuren wit, appelblauwzeegroen, paars en oranje.



Figuur 1: Opstelling: spectrofotometer



Figuur 2: Opstelling: cuvetten

2.2 Fouten op de apparatuur

De dikte van de referentiecuvet wordt gemeten met een meetlat en we vinden $d = (1 \pm 0,1)\text{cm}$. Aangezien de cuvetten identiek zijn binnen deze fout, nemen we d als de dikte van elke cuvet. De spectrofotometer heeft inherent een donkerstroom. Dit zijn de gemeten waarden wanneer er totaal geen licht in de spectrofotometer komt en zorgt dus voor afwijkende meetresultaten door een systematische fout. Er wordt een zwart balkje in de spectrofotometer gestopt en de donkerstroom wordt opgemeten. Nu kunnen we SpectraSuite zo instellen dat deze donkerstroom automatisch wordt afgetrokken van de gemeten waarden. SpectraSuite geeft de intensiteit in de eenheid 'counts'. Dit komt doordat we met een CCD chip werken in de spectrofotometer. We moeten echter geen conversie maken naar W/m^2 aangezien we enkel de relatieve intensiteit nodig hebben, zoals straks aangetoond zal worden in de subsectie theorie.

2.3 uitvoering experiment

Doorheen het hele experiment is een integration time van 40ms gebruikt, tenzij anders vermeld. De donkerstroom wordt gemeten bij deze integration time en daarna wordt ze niet meer verandert. Als de integration time wel verandert, moet de donkerstroom opnieuw gemeten worden.

Eerst worden de gekleurde cuvetten in de spectrofotometer gestopt en wordt er gekeken naar de transmissiespectra.

Vervolgens bekijken we de transmissiespectra van cuvetten 1 t.e.m. 4 waarvan we de concentratie kennen. Hiermee kunnen we vervolgens uit de transmissiespectra van X en Y de concentratie van de oplossingen berekenen.

Ten slotte bekijken we de emissiespectra van 4 verschillende lampen, waaruit we de golflengtes kunnen deduceren die deze spectra opmaken en we dus kunnen bepalen uit welke elementen de lampen opgemaakt worden via:

Golflengte van de spectraallijnen (in nm) voor enkele elementen									
H	He	Li	Na	K	Rb	Cs	Zn	Cd	Hg
Violet (380 - 440 nm)									
410,3 (z) 434,2 (m)	388,9 (s) 396,5 (z) 402,6 (z) 412,1 (z) 414,4 (z) 438,8 (m)	413,3 (z)		404,4 (s) 404,7 (m)	420,2 (s) 421,6 (s)	387,6 (s) 388,9 (s)	429,3 (z) 429,8 (z)	441,5 (m)	404,7 (m) 407,8 (m) 435,8 (s)
Blauw (440 - 490 nm)									
486,3 (s)	447,1 (s) 471,3 (m)	460,4 (s)				455,5 (s) 459,3 (s)	468,0 (m) 472,2 (m) 481,1 (m)	467,8 (m) 480,0 (m)	
Groen (490 - 570 nm)									
	492,2 (m) 501,6 (s) 504,8 (z)	497,3 (m)		509,7 (z) 509,9 (z) 534,0 (z) 534,3 (z)	536,3 (z) 543,2 (m) 557,9 (m) 564,8 (m)		518,2 (m)	508,6 (s)	491,6 (z) 546,1 (s)
Geel - Oranje (570 - 620 nm)									
	587,6 (s)	610,5 (s)	589,0 (s) 589,6 (s)	578,3 (m)	565,4 (m) 572,4 (s) 607,1 (s) 616,0 (s)	601,0 (z) 603,4 (z)	577,7 (z) 589,4 (z)		577,0 (m) 579,1 (s)
Rood (620 - 710 nm)									
656,5 (s)	667,8 (m) 706,5 (z)	671 (s)		691,1 (m) 693,9 (s)	620,6 (s) 629,8 (s) 629,9 (s)	621,3 (m) 658,6 (s)	636,2 (s)	643,8 (s)	

Figuur 3: Lijst van spectraallijnen. Deze lijst geeft het verband tussen de golflengte en het element waaruit de lamp is gemaakt. 's' staat voor sterk signaal, 'm' voor een medium signaal en 'z' voor een zwak signaal van de golflengte in kwestie.

2.4 Theorie

Om de concentratie van de oplossingen X en Y te bepalen, bekijken we de hoe de intensiteit van het licht verandert wanneer het door de stof gaat. De wet van Lambert-Beer geeft ons het verband tussen de intensiteit van het uitgaande licht en de concentratie van de oplossing:

$$I = I_0 10^{-\epsilon_\lambda c x} \quad (1)$$

met ϵ_λ een constante, c de concentratie van de vloeistof en x een maat voor de dikte van de cuvet. De afleiding van deze formule alle komende formules (2),(3) en (4) wordt uitgelegd in bron [2]. De transmissiecoëfficiënt wordt gegeven door:

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (2)$$

met I_0 de intensiteit van het inkomende licht en I de intensiteit van het uitgaande licht. De extinctie wordt gegeven door:

$$E = \log\left(\frac{I_0}{I}\right) = -\log(T) \quad (3)$$

Verder vinden we ook een uitdrukking voor extinctie in termen van concentratie:

$$E = \epsilon_\lambda c x \quad (4)$$

We kunnen dus de extinctie van elke oplossing berekenen en hieruit de concentratie vinden. De relatieve fout op de intensiteit is $\pm 0,004$ volgens bron [6]. We berekenen dan de fout op de extinctie met behulp van [7] en vinden:

$$AF(E) = \frac{2RF(I)}{\ln(10)} = 0,003 \quad (5)$$

Aangezien er geen fout op de concentratie c gegeven is voor oplossingen 1 t.e.m. 4 kan de fout op ϵ_λ berekend worden via:

$$AF(\epsilon_\lambda) = \epsilon_\lambda \left(\frac{AF(E)}{E} + \frac{AF(x)}{x} \right) \quad (6)$$

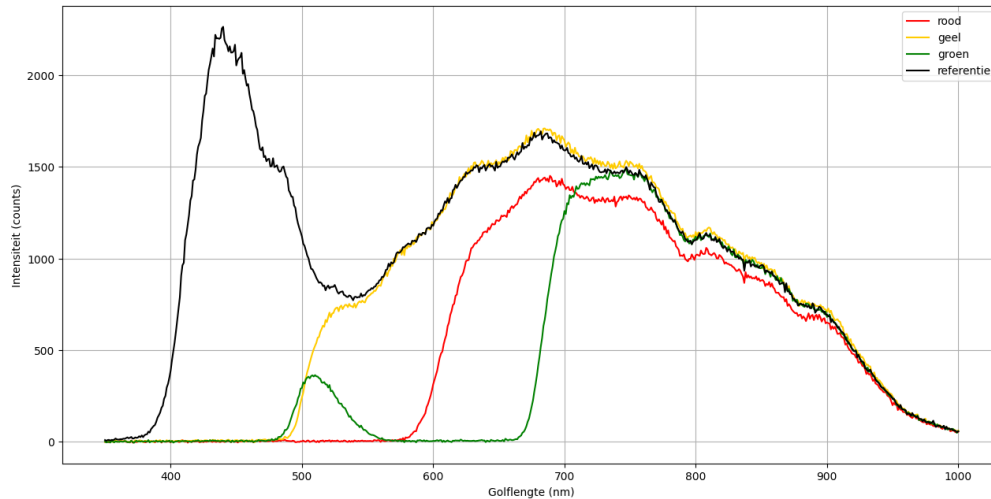
Verder vinden we dan de fout op de concentratie van oplossingen X en Y via:

$$AF(c) = c \left(\frac{AF(E)}{E} + \frac{AF(x)}{x} + \frac{AF(\epsilon_\lambda)}{\epsilon_\lambda} \right) \quad (7)$$

3 Resultaten

3.1 Gekleurde cuvetten

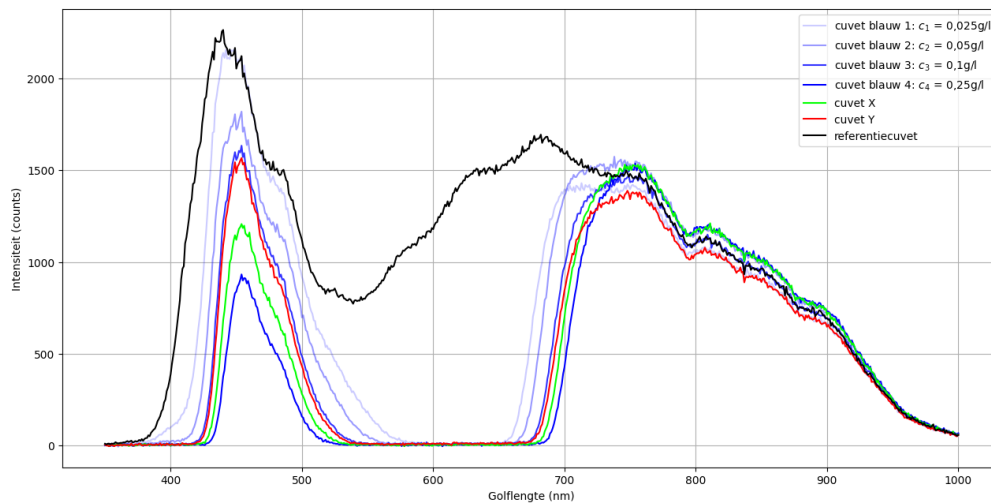
We bekijken de transmissiespectra van de gekleurde cuvetten. In figuur 4 worden de transmissiespectra voorgesteld van deze cuvetten samen met de referentiecuvet.



Figuur 4: Het transmissiespectrum van de drie gekleurde cuvetten: rood, groen en geel. Samen met het transmissiespectrum van de referentiecuve.

3.2 Blauwe cuvetten

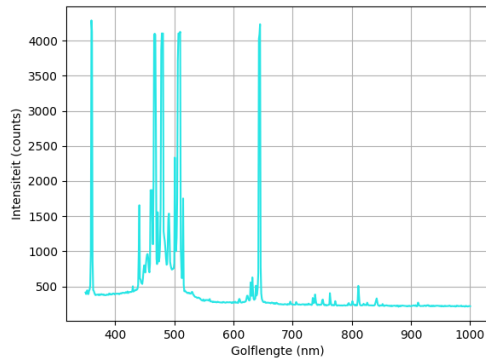
In deze subsectie worden de transmissiespectra van de 6 blauwe cuvetten getoond in figuur 5. We kennen de concentraties van cuvetten 1 t.e.m. 4 en willen vervolgens de concentraties van X en Y bepalen:



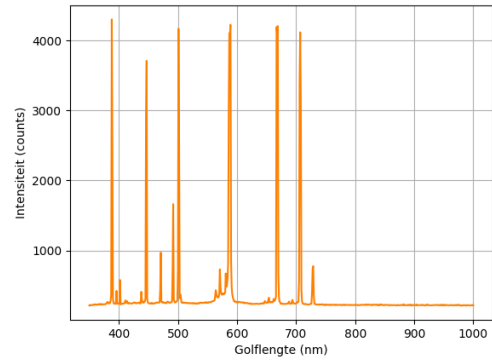
Figuur 5: Het transmissiespectrum van de zes verschillende methyleenblauw oplossingen. We weten: $c_1 = 0,025g/l$, $c_2 = 0,05g/l$, $c_3 = 0,1g/l$, $c_4 = 0,25g/l$ en we zoeken c_X en c_Y . 1 is de meest transparante oplossing en 4 de minste.

3.3 Lampen

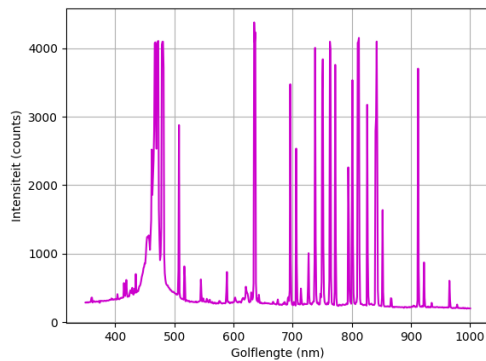
In figuur 6 t.e.m. 9 worden de emissiespectra van 4 verschillende lampen. De kleur van de plot komt grofweg overeen met de kleur van de lamp, behalve wit, want anders kan je de lijn niet zien. Voor de witte lamp is een zwarte lijn gekozen. Het bijschrift verteld in welke opstelling de lamp zat en of het de linker- of rechterlamp was. Voor de witte lamp is een integration time gekozen van 5ms, aangezien de pieken anders buiten het bereik lagen.



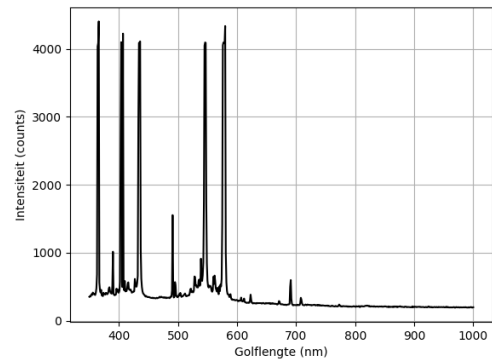
Figuur 6: Emissiespectrum van opstelling 2, rechterlamp. Deze lamp was appelblauwzee-groen.



Figuur 7: Emissiespectrum van opstelling 6, linkerlamp. Deze lamp was oranje.



Figuur 8: Emissiespectrum van opstelling 3, rechterlamp. Deze lamp was paars.



Figuur 9: Emissiespectrum van opstelling 1, rechterlamp. Deze lamp was wit. Hiervoor is een integration time van 5ms gebruikt.

4 Bespreking

4.1 Gekleurde cuvetten

Uit bron [3] weten we dat groen licht een golflengte heeft van 495–570 nm, rood licht 620–750 nm en geel licht 590–620 nm. Het zichtbaar spectrum van het menselijk oog ligt echter maar tussen 380-750nm (zie bron[5]). We bekijken de pieken dus enkel binnen dit zichtbaar spectrum, aangezien de notie van 'rood', 'geel' of 'groene' oplossing afhankelijk is van hoe de oplossing eruit ziet voor de waarnemer. Deze waarnemer kan niet zien hoe de oplossing eruitziet in het infrarood of ultraviolet.

We zien nu op figuur 4 dat groen een piek haalt bij 510nm en rood bij 690nm en daarbuiten geen andere golflengtes doorlaat. Dit betekent dus dat de oplossingen licht van andere golflengtes absorbeert en enkel hun eigen kleur doorlaat. Hierdoor hebben de oplossingen dus deze kleur voor een waarnemer.

Als we echter kijken naar de gele oplossing zien we dat deze rond 550nm al samenloopt met de referentiecuvet. Dit betekent dus dat de gele oplossingen alle golflengtes doorlaat van groen t.e.m. rood. Als we echter kijken naar bron [4] zien we dat geel licht bestaat uit de primaire kleuren groen en rood, wat dus overeenkomt met de waarnemingen. De gele oplossing laat duidelijk geen licht door in de range van 350-550nm wat overeenkomt met violet t.e.m. blauw en een stukje groen, wat dus ook overeenkomt met de theorie.

4.2 Blauwe cuvetten

We zien een piek in alle cuvetten bij 450nm wat overeenkomt met blauw licht volgens bron [3]. We zien echter dat de waarden voor cuvet 1 en de referentiecuvet daar heel dicht bij elkaar liggen, wat zal zorgen

voor minder nauwkeurige berekeningen. We berekenen nu de extinctie voor iedere cuvet via formule (3) bij 485nm, aangezien de waarden daar verder uit elkaar liggen en aangezien dit het midden is van het spectrum van blauw licht volgens bron [3]. Als I_0 nemen we de intensiteit gemeten bij de referentiecuvet, namelijk $I_0 = 1497,93$ counts. Zoals eerder vermeld maakt het niet uit dat de intensiteit in 'counts' gemeten wordt, aangezien we voor de extinctie enkel de relatieve intensiteit nodig hebben:

Tabel 1: De tabel geeft de berekende waarden voor de extinctie bij elke cuvet voor een golflengte van 485nm. Extinctie heeft geen eenheid en de fout op de extinctie is 0,003 zoals berekend in formule (5)

cuvet	E
1	0,036
2	0,121
3	0,219
4	0,533
X	0,380
Y	0,246

Aangezien we de concentraties van oplossingen 1 t.e.m. 4 kennen kunnen we deze gebruiken om ϵ'_λ te berekenen:

Tabel 2: De tabel geeft de berekende waarden voor de ϵ'_λ bij cuvetten 1 t.e.m. 4 berekend volgens formule (4). De fout hierop wordt berekend volgens formule (6)

cuvet	ϵ'_λ (l/g.cm)
1	$1,504 \pm 0,2704$
2	$2,42 \pm 0,302$
3	$2,193 \pm 0,2493$
4	$2,1304 \pm 0,225$

We zien dat deze waarden niet in elkaars foutenmarge liggen. Om een zo nauwkeurig mogelijke waarde te hebben nemen we een gewogen gemiddelde waarbij het gewicht van elke factor gegeven wordt door $1/AF$.

We vinden dit met de formule:

$$\overline{\epsilon'_\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^4 \frac{\epsilon'_{\lambda i}}{AF(\epsilon'_{\lambda i})}}{\sum_{i=1}^4 \frac{1}{AF(\epsilon'_{\lambda i})}} \quad (8)$$

En de absolute fout hierop wordt gegeven door:

$$AF(\overline{\epsilon'_\lambda}) = \frac{\sum_{i=1}^4 \frac{AF(\epsilon'_{\lambda i})}{AF(\epsilon'_{\lambda i})}}{\sum_{i=1}^4 \frac{1}{AF(\epsilon'_{\lambda i})}} = \frac{4}{\sum_{i=1}^4 \frac{1}{AF(\epsilon'_{\lambda i})}} \quad (9)$$

Wat ons geeft: $\overline{\epsilon'_\lambda} = (2,1 \pm 0,3) \frac{l}{g \cdot cm}$

Deze wordt gebruikt om vervolgens de concentratie van oplossingen X en Y te vinden via formule (4) en wordt weergegeven in tabel 3:

Tabel 3: De tabel geeft de berekende waarden voor de concentratie van oplossingen X en Y via formule (4) met een waarde $\overline{\epsilon'_\lambda} = (2,1 \pm 0,3) \frac{l}{g \cdot cm}$. De fout is berekend via formule (7)

cuvet	c' (g/ml)
X	$0,18 \pm 0,04$
Y	$0,12 \pm 0,03$

Als we kijken naar de grafiek zien we dat cuvet Y dicht bij de cuvet met concentratie 0,1g/ml ligt, wat ook mooi te zien is in ons resultaat. Het resultaat van cuvet X lijkt ook te kloppen aangezien we op de grafiek zien dat die tussen de 3e en 4e cuvet liggen met respectievelijk een concentratie van 0,1g/ml en 0,25g/ml.

4.3 Lampen

Het was geen goed idee om een integration time van 40ms te kiezen voor dit onderdeel van de proef. Dit komt omdat de pieken allemaal boven de bovengrens van de spectrofotometer gaan. Dit betekent dat er moeilijk onderscheidt te maken is tussen sterke en medium signalen, wat belangrijk is om te bepalen welk element die golflengte van licht uitstraalt. We kiezen er dus voor om medium en sterk als hetzelfde te beschouwen en enkel zwak te onderscheiden. In tabel 4 worden de golflengtes weergegeven van de pieken die voor elke lamp gevonden is:

Tabel 4: De tabel geeft de golflengtes van de pieken voor elke lamp. Deze zijn genummerd volgens opstelling zoals in figuren 6 t.e.m. 9. De golflengtes worden in intervallen weergegeven als er meerdere na elkaar zijn die in één categorie vallen. De sterkte van de pieken worden gedefinieerd volgens: zwak = [1000nm,3500nm[, medium/sterk = 3500nm+

opstelling	zwak (nm)	medium/sterk (nm)
2	440-441	360-361
	460-465	466-468
	469	479-481
	472-473	507-510
	476-478	643-645
	482-485	
	489-492	
	501-506	
	511	
	515	
6	389	388
	492	447
	586	501
		587-589
		667-669
3		706-708
	454-466	467-468
	469-470	471-473
	474-475	479-481
	478	635-637
	508	750-751
	706	763-764
	727	772
	739	801
	794-795	811-812
	826-827	842
	840-841	912
1	852	
	390	364-366
	491	404
		407
		434-436
		545-547
		576-580

Door dit te vergelijken met Figuur 3 vinden we:

- opstelling 2: Heel sterk Cadmium, met zwakke sporen van kwik en helium.
- opstelling 6: Zowel zwak als sterk heel duidelijk helium.
- opstelling 3: Sterk zink, met sporen van cadmium en helium
- opstelling 1: Zowel zwak als sterk heel duidelijk kwik

We zien echter op figuur 6 t.e.m. 9 dat de lijnen niet constant zijn bij verschillende golflengtes. Dit zouden we kunnen verklaren doordat elementen verschillende energieniveaus hebben. Bijvoorbeeld voor

Cadmium zien we dat er lijnen zijn voor 445nm, 467nm, 480nm, 508nm en 643nm. Door de specifieke structuur van het atoom zullen er bepaalde golflengten vaker uitgezonden worden dan andere, waardoor de intensiteit van bepaalde golflengten hoger is dan anderen.

5 Besluit

We besluiten dat gekleurde vloeistoffen licht met golflengtes die corresponderen met hun eigen kleur doorlaten en de andere absorberen. Samengestelde kleuren laten het licht van de kleuren waaruit ze samengesteld is ook door.

Voor de oplossingen X en Y kunnen we de concentratie berekenen via de spectrofotometer. We vinden hiervoor $c'_X = (0,18 \pm 0,04)g/ml$ en $c'_Y = (0,12 \pm 0,03)g/ml$.

Verder vinden we dat de samenstelling van de lampen kan bepaald worden door hun emissiespectrum. We vinden:

- opstelling 2: Heel sterk Cadmium, met zwakke sporen van kwik en helium.
- opstelling 6: Zowel zwak als sterk heel duidelijk helium.
- opstelling 3: Sterk zink, met sporen van cadmium en helium
- opstelling 1: Zowel zwak als sterk heel duidelijk kwik

6 Bronnen

[1]: Emissielijn. (2019, mei 12). Wikipedia, de vrije encyclopedie. Opgehaald 10:02, december 2, 2023 van <https://nl.wikipedia.org/w/index.php?title=Emissielijn&oldid=53812022>.

[2]: Theorie spectrofotometer. (z.d.). Ufora. https://ufora.ugent.be/content/enforced/854712-C004218A_2023/Theorie%20Spectrofotometer.pdf

[3]: Zichtbaar spectrum. (2023, juni 5). Wikipedia, de vrije encyclopedie. Opgehaald 12:49, december 2, 2023 van https://nl.wikipedia.org/w/index.php?title=Zichtbaar_spectrum&oldid=64420237.

[4]: Wikipedia contributors. (2023, November 28). RGB color model. In Wikipedia, The Free Encyclopedia. Retrieved 14:22, December 2, 2023, from https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=RGB_color_model&oldid=1187343018

[5]: Wikipedia contributors. (2023, November 7). Visible spectrum. In Wikipedia, The Free Encyclopedia. Retrieved 14:22, December 2, 2023, from https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Visible_spectrum&oldid=1183931912

[6]: Red Tide USB650 Fiber Optic Spectrometer Installation and Operation Manual. (z.d.). Ocean Optics. <https://www.oceaninsight.com/globalassets/catalog-blocks-and-images/manuals-instruction-ocean-optics/spectrometer/usb-650-red-tide-installation-and-operation-instructions.pdf>

[7]: Jachowicz, N. (2020, september). Experimenteren in de Fysica en de Sterrenkunde 1. CursusExperimenterenF&S. Geraadpleegd op 2 december 2023, van <https://ufora.ugent.be/d21/le/content/638066/viewContent/1457952/View>