

nome: Stefani Cp m. Nogueira

nº USP 10292990

Experimento 8 - Espectroscopia de estados eletrônicos

Resumo:

Este experimento consistiu em caracterizar compostos químicos do azul de metileno, acridina laranja e da água tônica, por meio de espectroscopia de absorção e emissão, para obter os valores da concentração, absorvância e a (~~absorvância~~) absorvidade molar de cada composto ou mistura utilizado neste experimento.

Introdução

Espectroscopia é um fenômeno físico químico, que estuda os espectros eletromagnéticos de uma amostra. Estes espectros podem ser de absorção, emissão ou de espalhamento.

Cada elemento possui a propriedade de absorver energia em um comprimento de onda específico, a quantidade de energia luminosa absorvida nesse comprimento de onda depende da concentração da substância e do caminho óptico pelo qual a luz vai passar, bem como da absorvidade molar de cada composto.

A relação entre ~~esse~~ esses valores é dada por

$$I = I_0 e^{-\epsilon c x} \quad (I)$$

em ϵ é a constante de proporcionalidade chamado de absorvidor de molar. Onde a absorvância de molar é dada por

$$A = \log \frac{I_0}{I} = \epsilon c x \quad (II)$$

Esta equação mostra que A tem uma relação linear com a concentração dos compostos.

Na espectroscopia de fluorescência estão relacionados os estados eletrônicos e vibrações de um dado composto. Para a fluorescência é necessário excitar ~~uma~~ a substância, ~~por~~ a qual irá absorver um fóton, e para voltar ao seu estado fundamental esse átomo precisa perder esse energia, parte dessa energia é perdida por meio de relaxação não radiante, para posteriormente emitir o restante da energia em forma de luz.

- materiais e métodos

Utilizando 5 amostras com concentrações diferentes de azul de metileno e de acridina laranja, fez-se o espectro de absorção de cada ^{amostra},

do mesmo modo foi feito o espectro de absorção de duas misturas com concentrações diferentes de azul de metileno e de ácido laranja. Fez-se também o espectro de absorção para uma amostra de água tônica.

Na segunda parte relatou-se o espectro de excitação e fluorescência para o ácido laranja e para o azul de metileno.

Objetivo

Correlacionar as variáveis envolvidas no processo de absorção e determinar o valor da absorvidade molar. É estudar o fenômeno de transições eletrônicas radiativas (das ~~substâncias~~) da água tônica, azul de metileno e o do ácido laranja.

Resultados e discussões

O diagrama ^{dos componentes} utilizado neste experimento é o seguinte

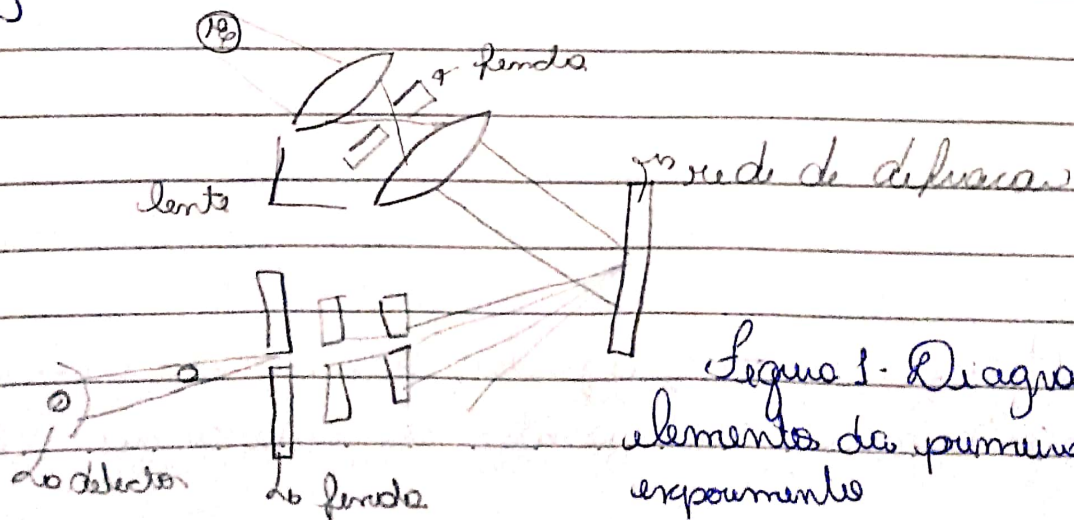
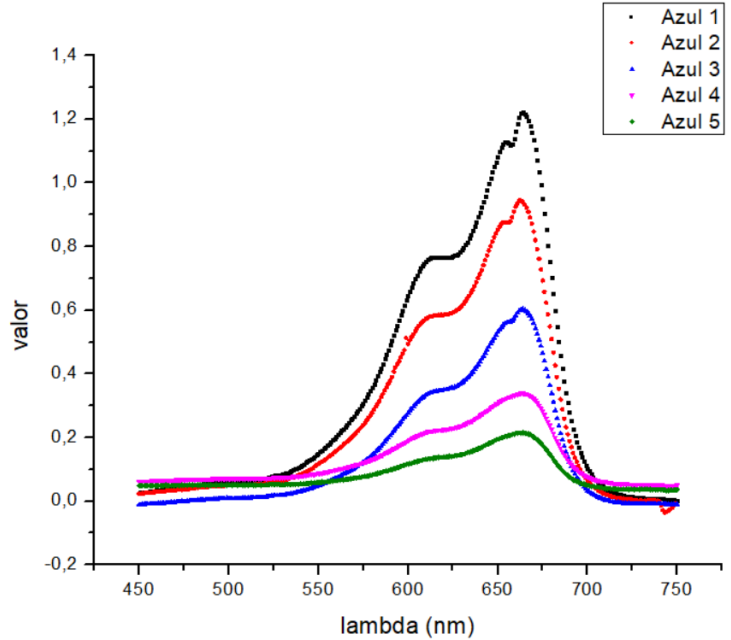
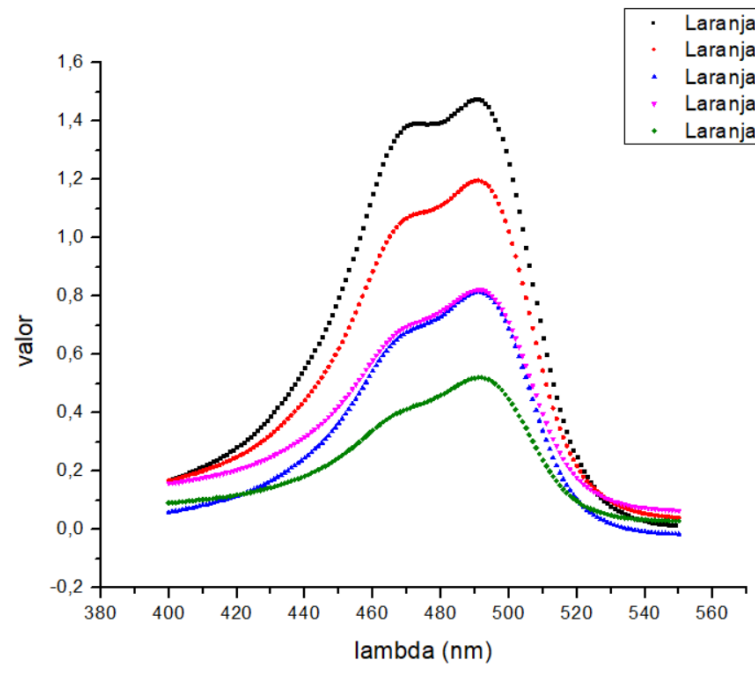


Figura 1 - Diagrama dos elementos da primeira parte do experimento

Utilizando os dados fornecidos ^{foram} (fe) feitos os seguintes graficos



Garfico 1 - espectroscopia de absorção azul de metileno



Garfico 2 - espectroscopia de absorção acridina laranja

Com utilizando os gráficos, coletar-se as a valores da absorbancia, nos pontos de máximas absor-

cão. Com este dado montou-se a tabela abaixo

Azul de metileno			
amostra	Concentração	Absorbância	$\epsilon(L/(mol \cdot cm))$
1	1,37E-05	1,221	8,91E+04
2	9,43E-06	0,944	1,00E+05
3	7,09E-06	0,603	8,50E+04
4	4,35E-06	0,339	7,79E+04
5	1,65E-06	0,215	1,30E+05
média			9,65E+04

Tabela 1 - dados espectroscopia de absorção azul de metileno

Acridina Laranja			
amostra	Concentração	Absorbância	$\epsilon(L/(mol \cdot cm))$
1	4,04E-05	1,476	3,65E+04
2	3,24E-05	1,196	3,69E+04
3	2,47E-05	0,821	3,32E+04
4	2,29E-05	0,815	3,56E+04
5	1,54E-06	0,521	3,38E+05
média			9,61E+04

Tabela 2 - dados espectroscopia de absorção acridina laranja

Utilizando os valores de absorvância e da concentração das amostras plotou-se os gráficos abaixo para obter o valor da absorvidade molar para o azul de metileno e para a acridina laranja

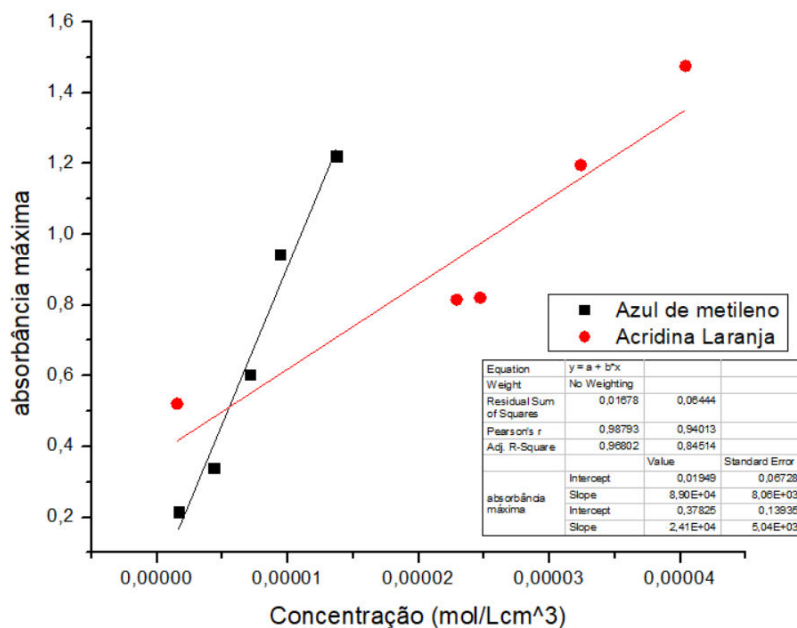


Gráfico 3 - Absorbância x Concentração molar para o azul de metileno e para a acridina laranja

Os valores encontrados graficamente para cada amostra foi

Azul de metileno $\epsilon = 8,9 \times 10^4 \pm 8,06 \times 10^3 \text{ L/mol cm}$
 Acidino laranja $\epsilon = 2,41 \times 10^4 \pm 5,04 \times 10^3 \text{ L/mol cm}$

Comparando os valores típicos esperados para o azul de metileno obtidos analiticamente e graficamente, temo:

amostra	comparando		valor teórico
	$\epsilon(\text{L}/(\text{mol} \cdot \text{cm}^3))$ cálculos	$\epsilon(\text{L}/(\text{mol} \cdot \text{cm}^3))$ graficamente	
Azul de metileno	9,61E+04	8,90E+04	7,00E+04
erro relativo	27,17	21,37	

Tabela 3 - comparando valores experimentais com os valores teóricos

A ~~propaga~~ incertezas propagada para a absorvidade das amostras, foi representada pela seguinte equação

$$\sigma_{\epsilon} = \sqrt{\left(\frac{1}{c \cdot l} \cdot \sigma_A\right)^2 + \left(\frac{-A}{c^2 \cdot l} \cdot \sigma_c\right)^2} \quad (\text{III})$$

Fazendo o mesmo procedimento para determinar a absorvância a partir do ponto de máxima absorção, foi plotado o gráfico para as misturas 1 e 2.

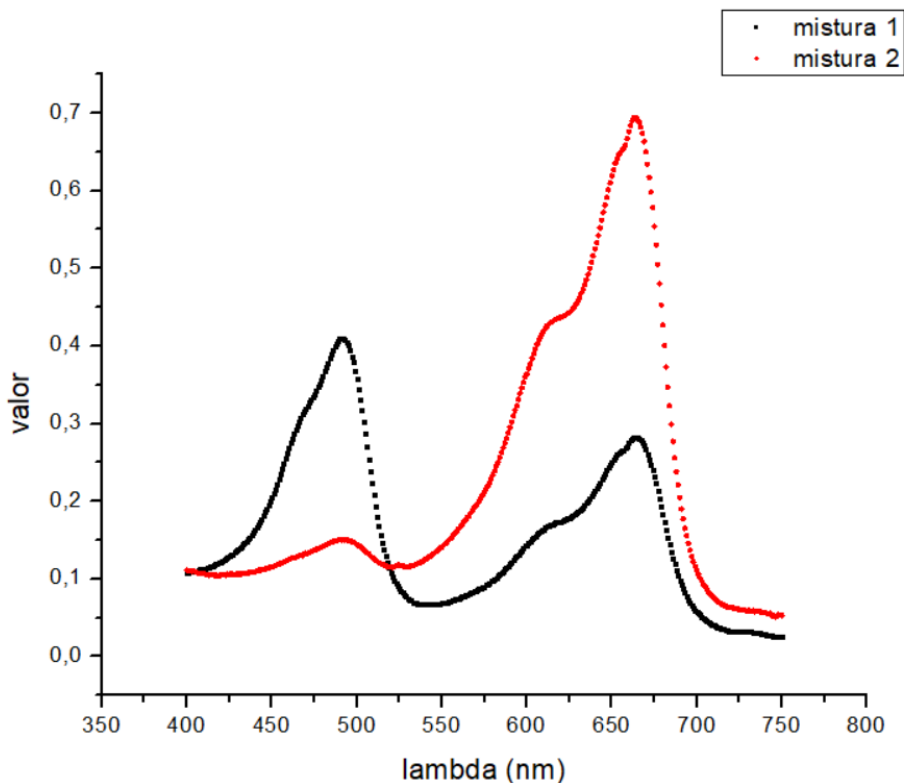


Gráfico 4 - espectroscopia de absorção das misturas 1 e 2

Com o valor de absorção encontrado graficamente e utilizando as absorvidades encontradas para o azul de metileno e para a acridina laranja anteriormente, encontrou-se os seguintes valores de concentração para cada mistura.

Mistura			
amostra	Absorbância	ϵ (L/(mol*cm))	Concentração
1	0,41	2,41E+04	1,70E-05
1	0,282	8,90E+04	3,17E-06
2	0,151	2,41E+04	6,27E-06
2	0,694	8,90E+04	7,80E-06

Tabela 4 - dados espectroscopia de absorção das misturas 1 e 2

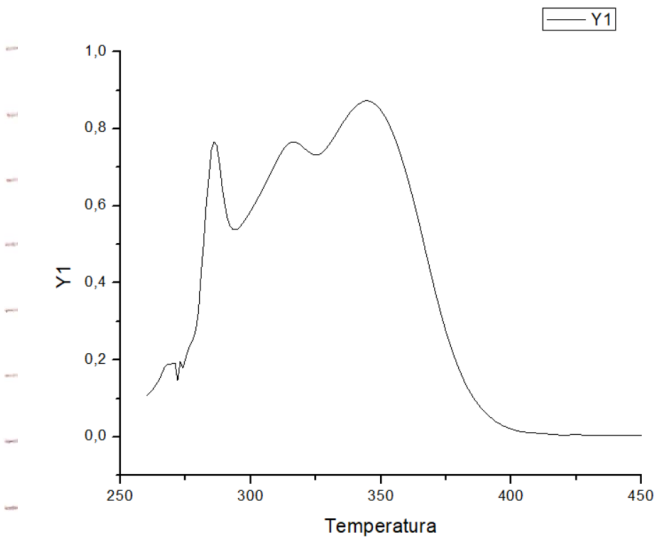


Gráfico 5 - espectroscopia de fluorescência da água tônica

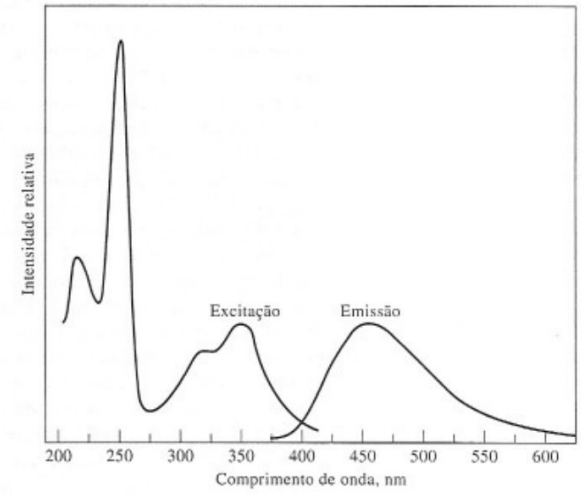


Figura 15-2 Espectros de excitação e emissão de fluorescência de uma solução de quinino.

Gráfico 6 - espectroscopia de excitação e emissão de quinino

Comparando este gráfico com o gráfico do sulfato de quinino observa-se uma semelhança entre os espectros indicando que este é o composto responsável pela fluorescência da água tônica, o deslocamento na região de absorção pode ser devido ao uso de sulfato de quinino na água tônica e não a quinino puro.

Conclusão

Por meio deste experimento foi possível observar as características intrínsecas de cada substância de absorver energia em comprimentos de ondas diferentes, bem como verificar a relação entre as variáveis da Lei de Beer-Lambert, ~~em~~ este experimento também possibilitou observar que a uma diferença entre o valor da energia de excitação e a energia de emissão, devido a qual ocorre devido a relação não radiante.