Određivanje koncentracije obojanih otopina pomoću pametnog telefona

Šeba, Tino

Undergraduate thesis / Završni rad

2015

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Department of Chemistry / Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Odjel za kemiju**

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:182:210875

Rights / Prava: In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: **2024-03-29**

Repository / Repozitorij:

Repository of the Department of Chemistry, Osijek







Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku

Odjel za kemiju

Preddiplomski studij kemije

Tino Šeba

Određivanje koncentracije obojanih otopina pomoću pametnog telefona

(Colored solutions concentration determination using smartphone)

Završni rad

Mentor: doc. dr. sc. Nikola Sakač

Osijek, 2015.

SAŽETAK

Određivanje koncentracije obojanih otopina pomoću pametnog telefona

Otapanjem soli prijelaznih metala u vodi dobivaju se obojane otopine. Obojanost se javlja zbog apsorbiranja dijela vidljivog spektra. Fotoni valnih duljina koji prođu neapsorbirani kroz otopinu uzrokuju obojanost.

Određivanje nepoznate koncentracije obojanih otopina vrši se spektrofotometrijski; pripremom serije otopina poznatih koncentracija, mjerenjem apsorbancija tih otopina i konstrukcijom kalibracijskog pravca ovisnosti apsorbancije o koncentraciji.

Svaki pametni telefon koji ima kameru može se koristiti kao fotoaparat. Kamere na pametnim telefonima mogu se razlikovati po broju megapiksela, kvaliteti senzora, kvaliteti leće, stabilizaciji slike itd. Dostupnost pametnih telefona tijekom posljednjih godina se iznimno povećala. Osim njihove primarne funkcije, kao sredstvo za komunikaciju, imaju i velik potencijal na različitim područjima tehnologije, marketinga, znanosti, itd.

Cilj rada bio je utvrditi može li se pametni telefon koristiti za određivanje nepoznate koncentracije obojanih otopina. Određivane su koncentracije otopina $CuSO_4$ i $KMnO_4$ u rasponu koncentracija od $2 \cdot 10^{-3}$ M do 1 M za $CuSO_4$, te od $2 \cdot 10^{-5}$ M do 10^{-2} M za $KMnO_4$. Dobiveni rezultati pokazuju da je metoda pogodna za određivanje nepoznate koncentracije $KMnO_4$ u rasponu koncentracija od $2 \cdot 10^{-5}$M do $1.5 \cdot 10^{-3}$ M koristeći intenzitete zelene za računanje apsorbancije. Za određivanje nepoznate koncentracije $CuSO_4$ moguće je koristiti intenzitete crvene u rasponu koncentracija od $2 \cdot 10^{-3}$ M do 1 M. Za otopinu $KMnO_4$ bolji je kalibracijski pravac bez korištenja širokokutne leće sa intenzitetima plave i zelene. Korištenje širokokutne leće rezultira boljim kalibracijski pravcima za obje otopine (intenziteti crvene). Metoda je brza, dostupna i jeftina te se može koristiti kao preliminarna metoda za neka jednostavna određivanja koncentracije obojanih otopina.

KLJUČNE RIJEČI: obojane otopine, pametni telefon

ABSTRACT

Concentration determination of colored solutions using a smartphone

Colored solutions are obtained by dissolving transition metal salts in water. Coloration occurs due to partial absorption of visible light spectrum. Fotons that pass unabsorbed cause the coloration.

Concentration determination of colored solutions is performed by spectrophotometry. Preparing solutions of known concentration and measuring absorbance leads to the construction of calibration curve. Unknown concentration of solution can be found by measuring apsorbance and using absorbance in linear equatation.

Any smartphone that has a camera can be used for taking pictures. Cameras can differ by megapixel count, sensor quality, lens quality, image stabilization. Availability of smartphones has increased over the last few years. In addition to their primary function as a means of communication smartphones have great potential in various areas of technology, marketing, science etc.

The aim of this experiment was to determine whether smartphones can be used for concentration determination of colored solutions. Solutions that were used for determination of concentration are $KMnO_4$ with concentration range from $2 \cdot 10^{-5}$ M to 10^{-2} M and $CuSO_4$ from $2 \cdot 10^{-3}$ M to 1M . The results show that the method is suitable for determining concentration of $KMnO_4$ in concentration range from $2 \cdot 10^{-5}$ M to $1.5 \cdot 10^{-3}$ M using the intensity of green to calculate absorbance. Intensities of red were used to determine unknown concentration of $CuSO_4$ in concentration range from $2 \cdot 10^{-3}$ M to 1M. By using the wide-angle lens calibration curve tends to be better for both solutions if the intensity of red is used for calculation of absorbance. The calibration curve obtained for $KMnO_4$ is better without using wide-angle lens if the intensity of green or blue is used for calculation of absorbance. The method is fast, cheap and can be preliminary method for basic determination of colored solutions unknown concentration.

KEY WORDS: colored solutions, smartphone

SADRŽAJ

SAŽETAK

ABSTRACT

1. Uvod 1

2. Opći dio 2

2.1. UV-VIS spektroskopija 2

2.1.1. Spektrofotometar 2

2.1.2. Lambert-Beerov zakon 4

2.2. Boje i njezine karakteristike 6

2.3. Mjerenje apsorbancije pametnim telefonom 6

3. Eksperimentalni dio 9

3.1. Korištene kemikalije 9

3.2. Aparatura 9

3.3. Priprema otopina 10

3.4. Postupak 10

4. Rezultati i rasprava 12

4.1. Spektrofotometrijsko određivanje apsorbancija otopina $KMnO_4$ 12

4.2. Određivanje apsorbancija otopina $KMnO_4$ pametnim telefonom 13

4.3. Spektrofotometrijsko određivanje apsorbancija otopina $CuSO_4$ 17

4.4. Određivanje apsorbancija otopina $CuSO_4$ pametnim telefonom 19

4.5. Određivanje nepoznate koncentracije otopina KMnO4 21

4.6. Određivanje nepoznate koncentracije otopina CuSO4 21

5. Zaključak 22

6. Literatura 22

1. UVOD

Današnji mobiteli posjeduju vrlo kvalitetne digitalne kamere. Rezolucija digitalnih kamera izražava se u megapikselima. Piksel na monitoru se sastoji od 3 subpiksela; jedan crvene, drugi zelene i treći plave boje. Svaki subpiksel može svijetliti drugačijim intenzitetom te se njihovom kombinacijom može producirati oko 16.7 milijuna boja.[4]

Bijela svjetlost piksela posljedica je podjednakih intenziteta sva tri subpiksela. Obojanost piksela pojavljuje se kada su intenziteti subpiksela različiti. Analogno tome obojanost otopine pojavljuje se kada je jedan dio spektra apsorbiran, a drugi dio spektra propušten. Propušteni dio spektra odgovoran je za obojanost otopine.[4]

Otapanjem soli prijelaznih metala javlja se obojenost otopine zbog apsorbiranog jednog dijela vidljivog spektra. Kako se koncentracija soli prelaznih metala povećava, povećava se intenzitet obojanosti otopine. Međutim intenziteti RGB spektra se smanjuju. Baš zbog tih promjena intenziteta nam je omogućeno računanje apsorbancija obojanih otopina, konstrukcija kalibracijskog pravca i pronalaženje nepoznate koncentracije obojanih otopina.[4]

Cilj rada je istražiti mogućnost korištenja pametnog telefona za određivanje nepoznate koncentracije obojanih otopina te točnost i praktičnost ove metode.

2. OPĆI DIO

2.1. UV-VIS SPEKTROSKOPIJA

UV-VIS molekularna apsorpcijska spektroskopija je vrlo korisna metoda za kvantitativnu analizu, koristili smo je za pronalaženje nepoznate koncentracije obojenih otopina. Ovu metodu odlikuje široka primjenjivost, velika osjetljivost i selektivnost, jednostavnost i točnost. Veliki broj anorganskih i organskih specija apsorbira elektromagnetsko zračenje u UV-VIS spektru elektromagnetskog zračenja te se veoma lako kvantitativno određuju. U slučaju da neke specije ne apsorbiraju u tom području, mogu se kemijskom reakcijom prevesti u oblik koji apsorbira.

2.1.1. SPEKTROFOTOMETAR

Spektrofotometri su uređaji koji mjere apsorbanciju kao funkciju valne duljine svjetlosti. Glavni dijelovi spektrofotometra su:

a) Izvor zračenja

   Žarulja koja daje bijelu svjetlost podjednakih intenziteta za cijelo područje valnih duljina. Uglavnom se koriste halogena i deuterijeva žarulja kao izvor vidljivog, odnosno ultraljubičastog zračenja.

b) Monokromator

   Kao disperzni elementi koriste se optička rešetka ili prizma.

c) Spremnik za uzorke

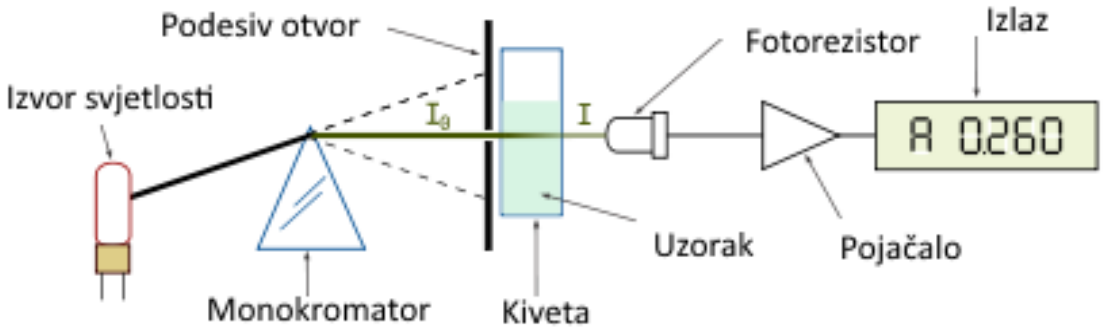
   Tekući se uzorci stavljaju u kivete, čija je debljina 1 cm. Kako je potrebno izmjeriti intenzitet zrake prije i poslije prolaska kroz uzorak, to se može postići na dva načina. Kao referentan uzorak služi čisto otapalo (voda u našem slučaju) koje se nalazi u kiveti od istog materijala i debljine kao kiveta sa uzorkom. Tako postoje jednosnopni i dvosnopni spektrofotometri. Kod jednosnopnih spektrofotometara prvo se izmjeri intenzitet zračenja koji je prošao kroz referentan uzorak, a nakon toga se mjere intenziteti propuštenog zračenja kroz ostale uzorke. Kod dvosnopnog spektrofotometra se zraka monokromatskog zračenja razdvaja na dva snopa od kojih jedan snop prolazi kroz referent, a drugi kroz uzorak od interesa.

d) Detektor zračenja i pretvornik

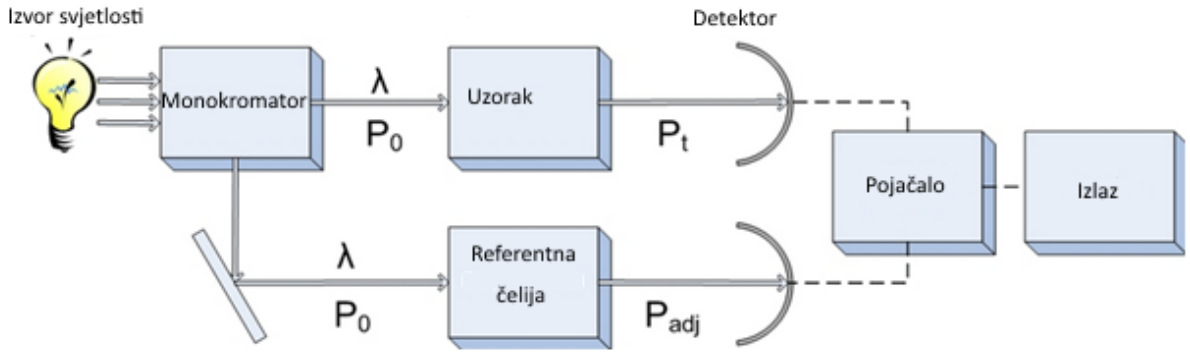
Sastoji se od fotoćelije koja služi kao senzor. Fotoćelija daje električni signal proporcionalan intenzitetu zračenja, koji se pojačava i preračunava u apsorbanciju.

e) Procesor signala i uređaj za njegovo očitavanje

Procesor signala je obično elektronička naprava koja pojačava električni signal iz detektora, a uređaj za njegovo očitavanje je monitor računala s kojim je spektrofotometar povezan.



Slika 1. Shematski prikaz jednosnopong spektrofotometra



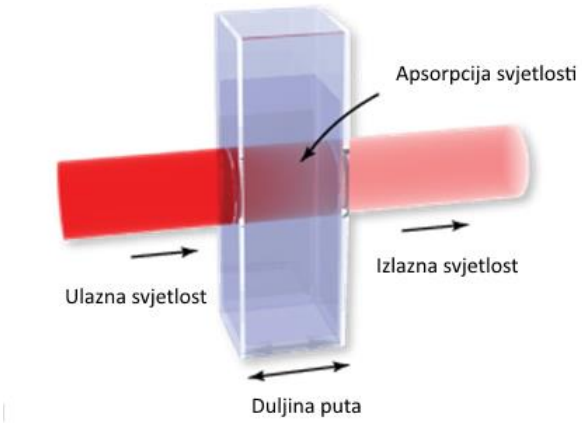
Slika 2. Shematski prikaz dvosnopnog spektrofotometra

2.1.2. Lambert-Beerov zakon

Zakon apsorpcije, odnosno Lambert-Beerov zakon nam kvantitativno pokazuje kako apsorbancija ovisi o koncentraciji. Kako elektromagnetsko zračenje putuje kroz medij koji sadrži analit koji se određuje, intenzitet elektromagnetskog zračenja se smanjuje jer analit prelazi u pobuđeno stanje. Za analit dane koncentracije, količina apsorbiranog zračenja bit će veća ako je put kroz koji elektromagnetsko zračenje prolazi duži. Isto tako će količina apsorbiranog zračenja biti veća kod uzorka veće koncentracije. Ako je put koji prolazi elektromagnetsko zračenje jednak, veća količina tvari koja apsorbira zračenje rezultira većim smanjenjem intenziteta elektromagnetskog zračenja.[1]

Kod UV-VIS spektroskopije mjeri se intenzitet upadnog zračenja I_0 i intenzitet propuštenog zračenja I. Omjer intenziteta propuštenog zračenja I i intenziteta upadnoga zračenja I_0 naziva se transmitancija (T), jednadžba (1):

$$T=I/I_o \tag{1}$$



Slika 3. Smanjenje intenziteta upadnog zračenja prolaskom kroz uzorak kao rezultat apsorpcije elektromagnetskog zračenja

Transmitancija je eksponencijalno ovisna o koncentraciji pa da bi se prikazala kao linearna funkciju koncentracije, uvodi se pojam apsorbancije (A) koji se definira kao logaritam recipročne vrijednosti transmitancije:

$$A=log(1/T)=log(I_0/I)= \varepsilon bc \tag{2}$$

gdje je ε molarni apsorpcijski koeficijent ($dm^3mol^{-1}cm^{-1}$), b je duljina puta svjetlosti kroz uzorak (cm), a c je koncentracija otopljene tvari u otopini.[5]

Molarni apsorpcijski koeficijent je apsorpcijski koeficijent podijeljen sa koncentracijom tvari koja apsorbira u otopini. Ovisi o temperaturi, koncentraciji, valnoj duljini i naravno o speciji koja je otopljena. SI jedinica je m^2mol^{-1}, ali se češće koristi oblik $dm^3cm^{-1}mol^{-1}$. Ako bi se otopina koncentracije 1 M nalazila u kiveti duljine 1 cm, mjerenjem apsorbancije pri određenoj valnoj duljini odredio bi se molarni apsorpcijski koeficijent pri toj valnoj duljini i temperaturi izražen u jedinici $dm^3cm^{-1}mol^{-1}$ za otopljenu speciju. Kod spektrofotometrijskog određivanja nepoznate koncentracije obojanih otopina nije praktično koristiti literaturne podatke za molarni apsorpcijski koeficijent baš zbog toga što se mijenja s temperaturom, osim kod mjerenja u kojima se točno namješta temperatura.

Apsorpcija svjetlosti odstupat će od Lambert-Beerovog zakona ako se promjenom koncentracije promijeni molekulsko stanje tvari, odnosno ako dođe do disocijacije, asocijacije, stvaranja kompleksa i slično jer to utječe na promjenu molarnog apsorpcijskog koeficijenta. Drugim riječima Lambert-Beerov zakon vrijedi samo za otopine niskih koncentracija. Također, taj zakon vrijedi samo za monokromatsko elektromagnetsko zračenje.[4]

Apsorbancija uzorka uglavnom se mjeri kod jedne valne duljine; kod valne duljine u kojoj je apsorbancija najveća za dani uzorak. Ako Lambert-Beerov zakon vrijedi dobit će se linearna ovisnost apsorbancije pri valnoj duljini maksimalne apsorbancije o koncentraciji uzorka.

Beer-Lambertov zakon se može koristiti na više načina. Mjerenjem apsorbancije možemo izračunati molarnu apsortivnost ako je poznata koncentracija uzoraka. Ako je poznata molarna apsorptivnost, mjerenjem apsorbancije uzorka se može izračunati nepoznata koncentracija analita. Molarna apsorptivnost ovisi u uvjetima pa se najčešće koristi niz standardnih otopina kako bi se konstruirala kalibracijska krivulja ovisnosti apsorbancije pri određenoj valnoj duljini o koncentraciji analita. [1]

Kod prisutnosti više specija u otopini Lambert-Beerov zakon poprima oblik:

$$A_{ukupno}=A_1+A_2+...+A_n= \varepsilon_1 bc_1+ \varepsilon_2 bc_2+...+\varepsilon_n bc_n \quad (3)$$

Pri čemu su 1, 2, ... , n specije koje apsorbiraju elektromagnetsko zračenje u otopini.

UV-VIS apsorpcijski spektri se mogu primijeniti za utvrđivanje prisutnosti nekih skupina u spoju, no spektri ne daju dovoljno informacija da bi se mogli primijeniti za kvalitativnu analizu.

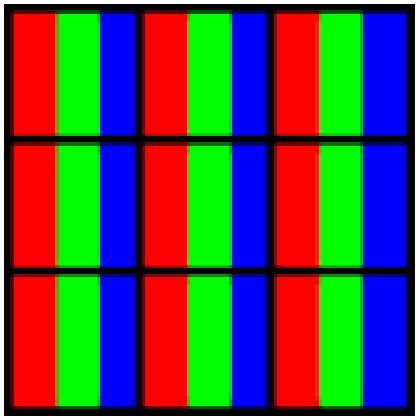
2.2. Boje i njezine karakteristike

Prijelazni metali sadrže djelomično popunjenu d-podljusku te mogu formirati katione s djelomično popunjenom d-podljuskom. Kompleksni spojevi prijelaznih metala nastaju spajanjem prijelaznih metala s jednom ili više neutralno ili negativno nabijenom nemetalnom specijom, takozvanim „ligandom“. Bez tih veza sve d-orbitale su na jednakoj energiji, međutim kada su te veze prisutne neke d-orbitale poprimaju višu energiju dok druge poprimaju nižu energiju. Zbog te razlike u energiji elektroni apsorpcijom fotona mogu prijeći u orbitale više energije. Valna duljina apsorbiranog fotona ovisi o energetskoj razlici između tih dviju orbitala. Fotoni valnih duljina koji prođu neapsorbirani kroz otopinu uzrokuju obojenost.

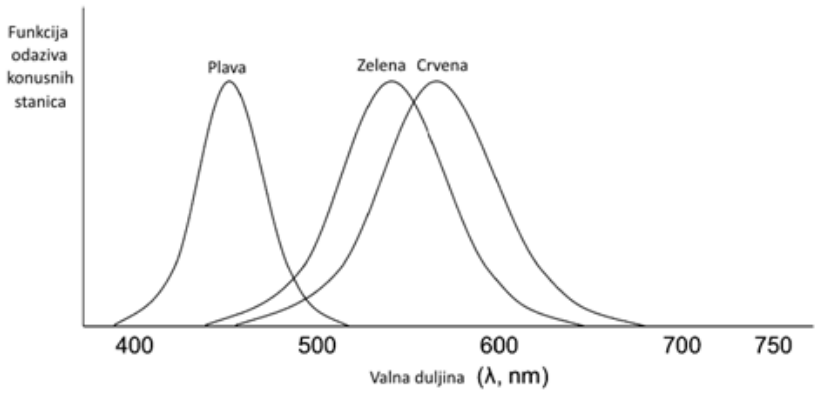
2.3. Mjerenje intenziteta i apsorbancije pametnim telefonom

Današnji mobiteli posjeduju vrlo kvalitetne digitalne kamere. Rezolucija digitalnih kamera se izražava u megapikselima. Piksel je osnovni element slike, tipično je pohranjen u 24-bitnoj rezoluciji koji se dalje dijeli u tri 8-bitne grupe. Svaka od tih 8-bitnih grupa odgovara jednoj boji; crvenoj, zelenoj i plavoj. Ljudsko oko posjeduje 3 vrste konusnih stanica koje prepoznaju samo tri različite boje: crvenu, zelenu i plavu. Ta se pojava naziva trobojnim vidom, stoga je podjela u tri osnovne boje dovoljna umjesto pohranjivanja cijelog vidljivog spektra. 8-bitna rezolucija omogućuje $2^8 = 256$ različitih intenziteta crvene, zelene i plave; intenziteti se kreću od 0-255. Svaki piksel ima mogućnost proizvesti 2^{24} različitih boja, što je oko 16.7 milijuna boja. Ako bi sve tri boje (crvena, zelena i plava) imale podjednake intenzitete, ljudsko oko bi to percipiralo kao bijelu svjetlost. Ako su intenziteti različiti, ljudsko oko to percipira kao neku boju, npr. ako je intenzitet plave mnogo manji od intenziteta crvene i zelene, ljudsko oko bi tu boju percipiralo kao neku boju između crvene i zelene, odnosno kao žutu boju. [4]

Kad bi se voda nalazila na bijeloj podlozi, slikanjem i digitalnom obradom primijetili bi smo kako su intenziteti crvene, zelene i plave podjednaki. Otapanjem soli prijelaznih metala javlja se obojanost otopine. Kako se koncentracija soli prelaznih metala povećava, povećava se intenzitet obojanosti otopine. Međutim, intenziteti boja RGB spektra se smanjuju. Upravo zbog tih promjena intenziteta, omogućeno nam je računanje apsorbancija obojanih otopina, konstrukcija kalibracijskog pravca i pronalaženje nepoznate koncentracije obojanih otopina.[4]

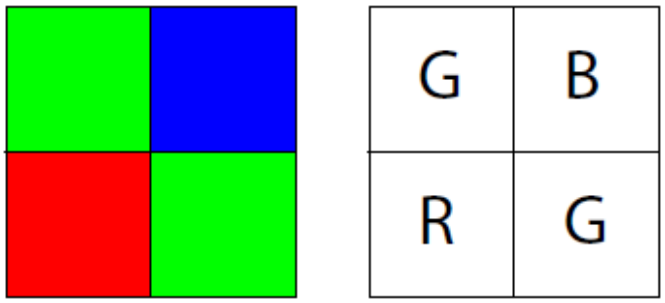


Slika 4. Prikaz piksela i subpiksela



Slika 5. Krivulja funkcije odaziva ljudskih konusnih stanica

CCD je visoko senzitivan detektor fotona koji podijeljen u veliki broj malih područja, odnosno piksela koji su korišteni za izgradnju slike. Svjetlo koje pada u područje piksela razvija naboj koji će biti proporcionalan intenzitetu svjetla. Senzor mjeri relativne intenzitete crvene, zelene i plave komponente upadnog svjetla. Svaki piksel je prekriven sa dva zelena filtera, jednim crvenim i jednim plavim filterom. Ovakva metoda prostornog uređenja filtera preko fotodioda naziva se Bayerov raspored (Slika 6).



Slika 6. Bayerov raspored filtera

Apsorbancija se mjeri na sličan način kao i spektrofotometrom. Da bi se izmjerila apsorbancija nekog uzorka prvo treba izmjeriti intenzitete referentnog uzorka (vode). Aplikacija koju smo koristili za očitavanje RGB intenziteta je *ON Collor Measure* koja se može besplatno preuzeti sa Google Play Store internet trgovine. Kad su poznati intenziteti referenta, potrebno je izmjeriti intenzitete uzorka. Slično kao i kod mjerenja spektrofotometrom, gdje se apsorbancija može mjeriti samo kod određene valne duljine, tako i kod mjerenja apsorbancije pametnim telefonom možemo izračunati apsorbanciju samo za crveni (*red*), zeleni (*green*) ili plavi (*blue*) dio spektra. Formule koje smo koristili su:

$$A_{(red)}=log(I_{0(red)}/I_{(red)}) \quad (4),$$

$$A_{(green)}=log(I_{0(green)}/I_{(green)}) \quad (5),$$

$$A_{(blue)}=log(I_{0(blue)}/I_{(blue)}) \quad (6),$$

pri čemu je I_0 intenzitet referenta, a I intenzitet uzorka.

3. EKSPERIMENTALNI DIO

3.1. Korištene kemikalije

Tijekom istraživanja korištene su kemikalije:

- $CuSO_4 \cdot 5\ H_2O$,p.a. (Acros Organics)
- $KMnO_4$,p.a. (Kemig)
- deionizirana voda

3.2. Aparatura

Za snimanje apsorpcijskih spektara korišten je spektrofotometar Avantes 2800 u području valnih duljina od 170 nm do 1100 nm. Svi spektri snimljeni su upotrebom plastičnih kiveta debljine 1 cm. Program Avasoft 7.1 korišten je za prikupljanje i obradu dobivenih podataka.

Kivete se nakon svakog mjerenja ispreru otopinom čiji će apsorpcijski spektar biti mjeren kako bi se izbjegla promjena koncentracije, a time i greška u mjerenju. Pametan telefon korišten za slikanje uzoraka je Samsung Galaxy S3 sa i bez širokokutne leće.



Slika 7. Samsung Galaxy S3 [9]



Slika 8. Širokokutna leća

3.3. Priprema otopina

Priprema otopine $CuSO_4 \cdot 5\ H_2O$ koncentracije 1 M

Za pripremu 200 mL te otopine potrebno je izvagati 49.936 g $CuSO_4 \cdot 5\ H_2O$. Lađica u koju su izvagani kristali dobro se ispere deioniziranom vodom tako da se svi kristali prebace u odmjernu tikvicu od 200 mL, odmjerna se tikvica nadopuni do oznake. Mućkanjem se pripremi otopina.

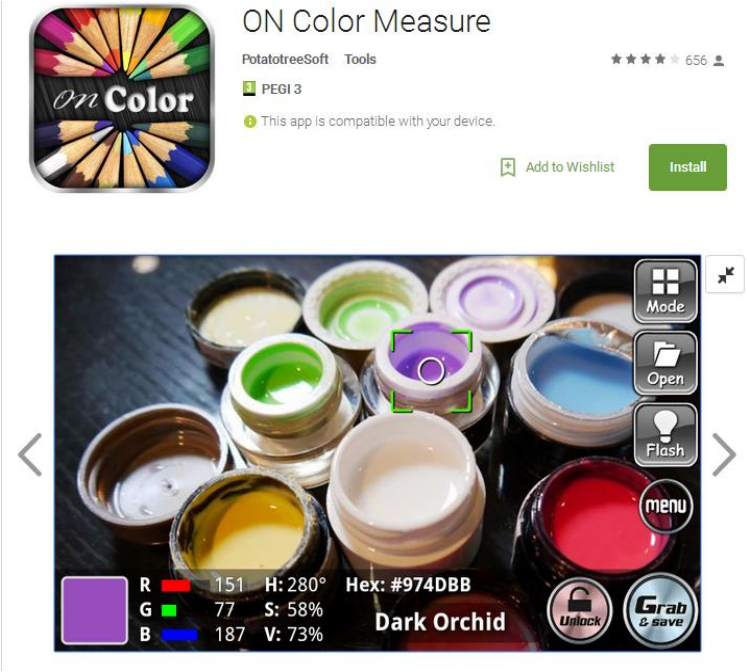
Priprema otopine $KMnO_4$ koncentracije 0.01 M

Za pripremu 200 mL te otopine potrebno je izvagati 0.316 g $KMnO_4$. Lađica u koju su izvagani kristali ispere se deioniziranom vodom tako da se svi kristali prebace u odmjernu tikvicu od 200 mL, lađica se dobro ispere deioniziranom vodom i odmjerna tikvica se nadopuni do oznake. Mućkanjem se pripremi otopina.

3.4. Postupak

Za spektrofotometrijska mjerenja priređene su otopine $CuSO_4$ i $KMnO_4$. Koncentracije otopina $CuSO_4$ korištene u ovom istraživanju su u rasponu od 1 M do $2 \cdot 10^{-3}$ M. Koncentracije otopina $KMnO_4$ korištene za spektrofotometrijsko istraživanje kreću se između $1 \cdot 10^{-2}$ M i $2 \cdot 10^{-5}$ M. Kad se izmjeri apsorbancija za svaku koncentraciju ovih otopina, konstruira se graf ovisnosti apsorbancije pri određenoj valnoj duljini (pri 690 nm za $CuSO_4$, pri 525 nm za $KMnO_4$) o koncentraciji.

Iste otopine koje su korištene za spektrofotometrijska mjerenja (po tri serije otopina) stave se u jažice, po 100 µL uzorka u svaku jažicu i slikaju se pametnim telefonom. Nakon slikanja određuju se intenziteti aplikacijom *ON Collor Measure* tako da se izmjeri RGB intenziteti onog piksela koji se nalazi na sredini jažice, uzimajući u obzir da na tom dijelu nema nikakve refleksije koje bi ometale mjerenje. Kod mjerenja treba uzeti u obzir nekoliko nedostataka: sve kapi nisu identične, nije moguće sve slikati pod kutom od 90 stupnjeva, a na auto-fokus i auto-optimizacij svjetlina ne možemo utjecati. Nakon obrade slika napravi se graf ovisnosti apsorbancije o koncentraciji za sva tri intenziteta RGB spektra te za obje otopine.

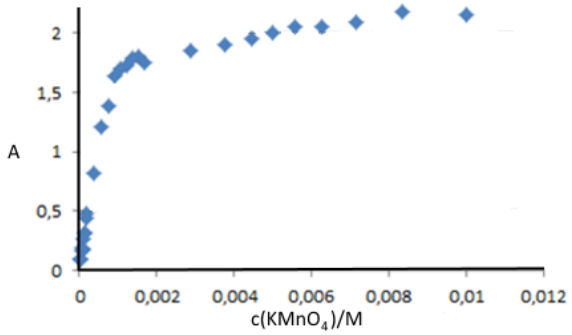


Slika 9. Prikaz sučelja aplikacije ON Collor Measure

4. Rezultati i rasprava

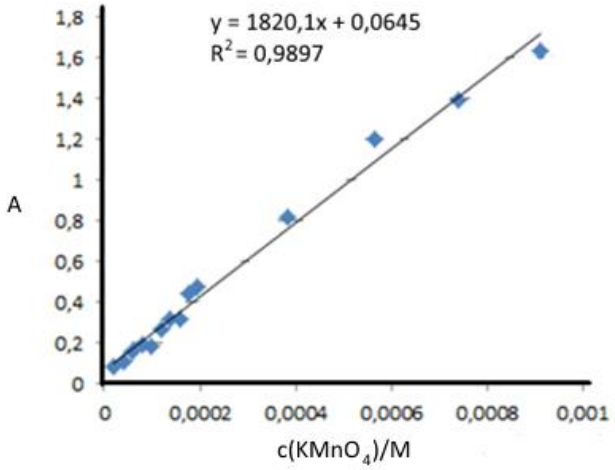
4.1. Spektrofotometrijsko određivanje apsorbancija otopina $KMnO_4$

Koncentracije otopina $KMnO_4$ korištene za konstrukciju kalibracijskog pravca su u rasponu od $1 \cdot 10^{-2}$ M do $2 \cdot 10^{-5}$ M.



Slika 10. Spektrofotometrijsko određivanje ovisnosti apsorbancije o koncentraciji $KMnO_4$ pri 525 nm.

Iz priloženih rezultata vidljivo je da se apsorbancija mijenja sa koncentracijom prema Lambert-Beerovom zakonu sve do određene koncentracije. Kod visokih koncentracija ne vrijedi Lambert-Beerov zakon. Za određivanje jednadžbe pravca korišteni su rezultati apsorbancija otopina niskih koncentracija, do 10^{-3} M (Slika 11).

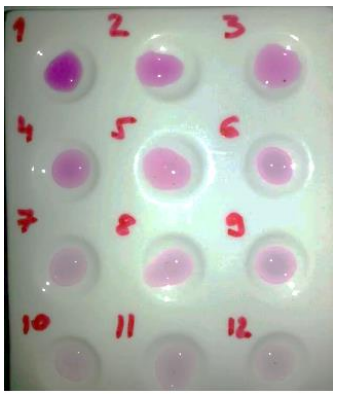


Slika 11. Spektrofotometrijsko određivanje ovisnosti apsorbancije o koncentraciji KMnO4 pri 525 nm.

Iz slike 11 je vidljivo da se apsorbancija linearno mijenja sa koncentracijom. Mjerenjem apsorbancije uzorka nepoznate koncentracije može se odrediti koncentracija tog uzorka korištenjem jednadžbe pravca.

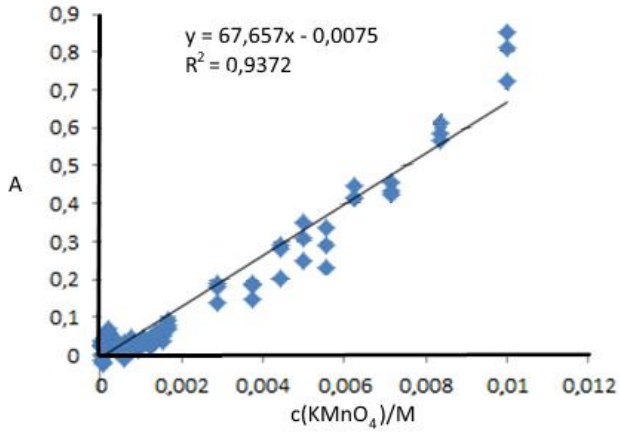
4.2. Određivanje apsorbancije otopina $KMnO_4$ pametnim telefonom

Izmjeren je niz otopina na jažicama. Slika 12 prikazuje fotografiju jažica sa uzorcima koja je korištena za daljnju obradu.

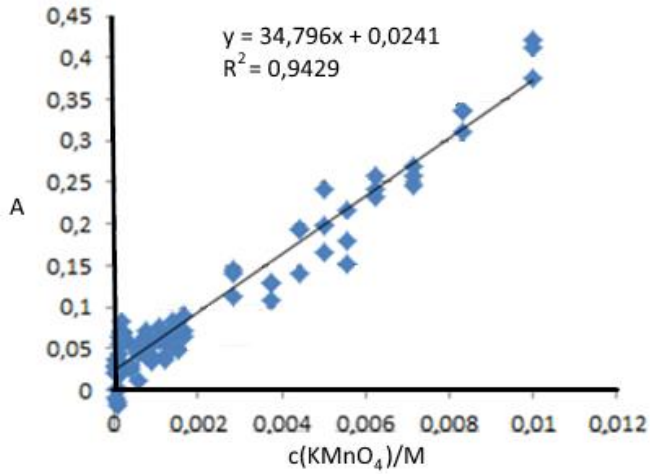


Slika 12. Prikaz jažica sa otopinama $KMnO_4$ različičitih koncentracija

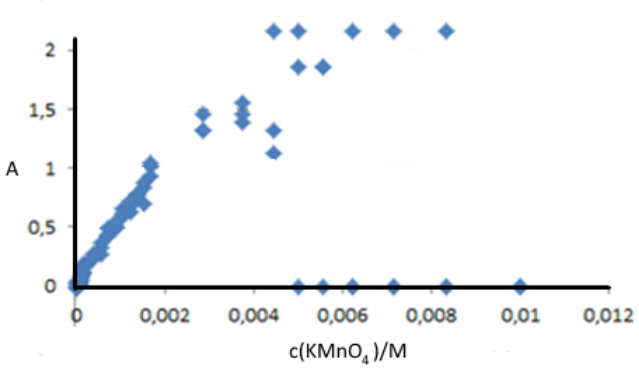
Za konstrukciju kalibracijskih pravaca korištene su apsorbancije dobivene računanjem iz intenziteta crvene, zelene i plave boje (Slika 13-15)



Slika 13. Ovisnost A(red) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopina $KMnO_4$ pametnim telefonom

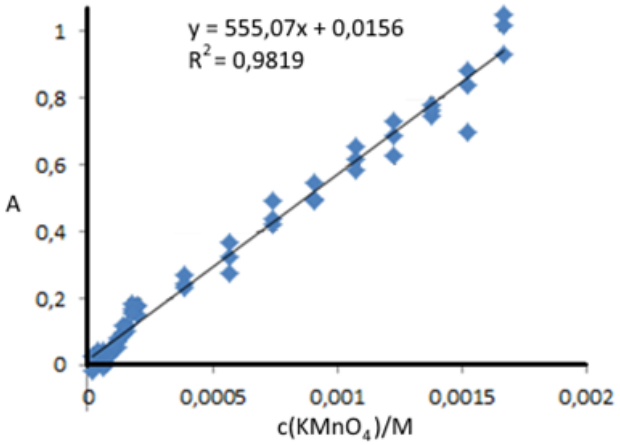


Slika 14. Ovisnost A(blue) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopina $KMnO_4$ pametnim telefonom



Slika 15. Ovisnost A(green) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopina $KMnO_4$ pametnim telefonom

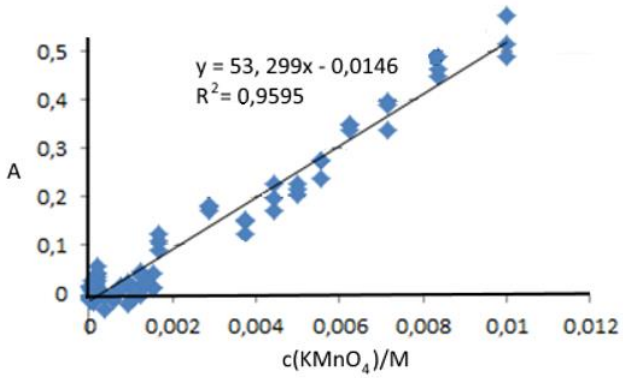
Iz ovih rezultata može se zaključiti da se intenziteti crvene i plave mogu koristiti u većem rasponu koncentracija prilikom konstruiranja kalibracijske krivulje za određivanje nepoznate koncentracije $KMnO_4$. Međutim, kod nižih koncentracija bolje je koristiti intenzitet zelene za računanje apsorbancije i konstruiranje kalibracijskog pravca (Slika 15).



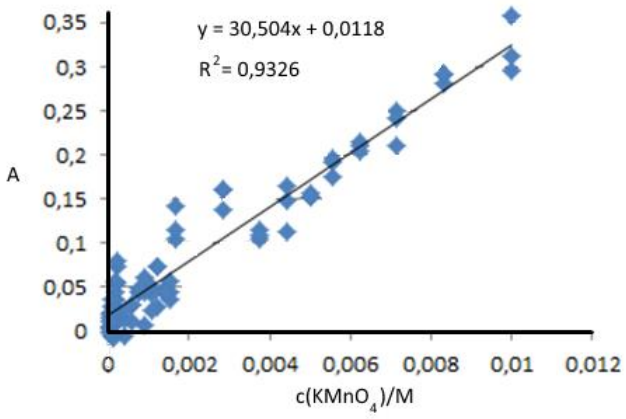
Slika 16. Ovisnost A(green) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopna $KMnO_4$ niskih koncentracija pametnim telefonom.

Apsorpcijski maksimum kod otopina $KMnO_4$ nalazi se na 525 nm, a elektromagnetsko zračenje valnih duljina bliskih toj valnoj duljini su zelene boje. Zbog toga je za računanje apsorbancije najbolje koristiti intenzitet zelene.

Za slikanje uzoraka korištena je i širokokutna leća. Grafovi ovisnost A(*red*), A(*blue*) i A(*green*) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopina $KMnO_4$ pametnim telefonom i širokokutnom lećom prikazani su na Slikama 17-19.

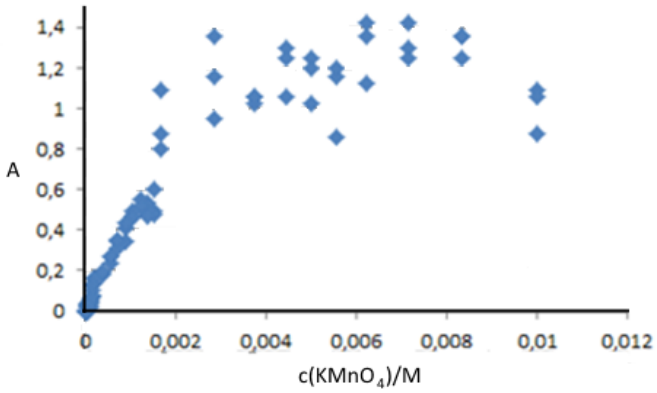


Slika 17. Ovisnost A(red) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopina $KMnO_4$ pametnim telefonom i širokokutnom lećom.



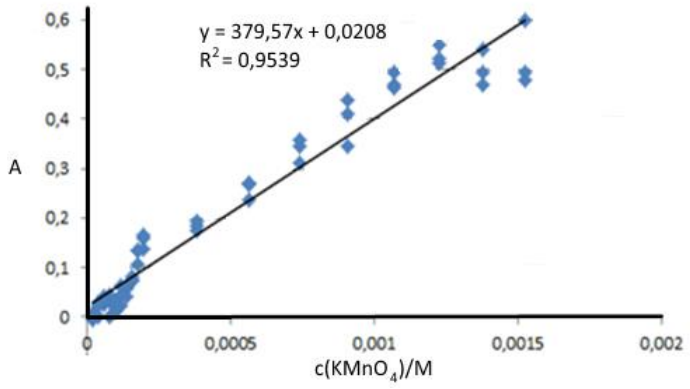
Slika 18. Ovisnost A(blue) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopina $KMnO_4$ pametnim telefonom i širokokutnom lećom.

Usporedbom grafova za A(*red*), A(*blue*) i A(*green*) sa i bez upotrebe širokokutne leće vidljivo je da mjerenje apsorbancije u plavom području spektra rezultira vrlo sličnim kalibracijskih krivulja neovisno o tome je li slikano sa ili bez leće. Međutim, rezultati slikanja uzoraka sa širokokutnom lećom vidno se bolji za crveni dio spektra.



Slika 19. Ovisnost A(green) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopina $KMnO_4$ pametnim telefonom i širokokutnom lećom.

Kod grafa ovisnosti apsorbancije o koncentraciji za zeleni dio spektra (Slika 19) otopine $KMnO_4$ opet je vidljiv linearni rast apsorbancije sa koncentracijom do vrijednosti $c(KMnO_4) = 1.5 \cdot 10^{-3}$ (Slika 20), iznad koje više nema linearne ovisnosti.

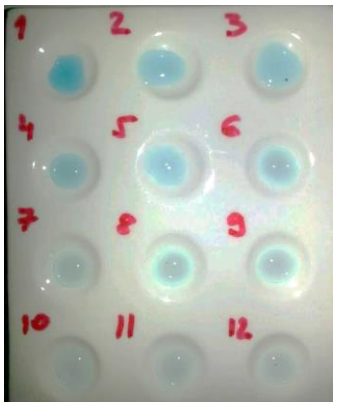


Slika 20. Ovisnost A(green) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopina niskih koncentracija $KMnO_4$ pametnim telefonom i širokokutnom lećom.

Kalibracijski pravac koji smo dobili mjerenjem apsorbancija zelenog dijela spektra bolji je u odnosu na mjerenja kada nije korištena širokokutna leća.

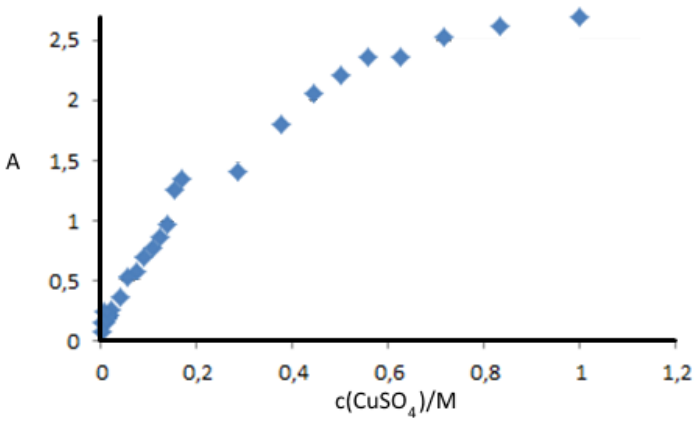
4.3. Spektrofotometrijsko određivanje apsorbancija otopina $CuSO_4$

Izmjeren je niz otopina na jažicama. Slika 21 prikazuje fotografiju jažica sa uzorcima koja je korištena za daljnju obradu.



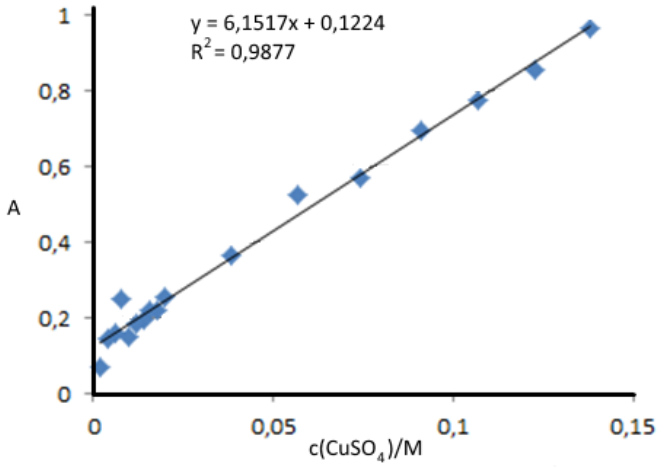
Slika 21. Prikaz jažica sa otopinama $CuSO_4$ različitih koncentracija.

Koncentracije otopina $CuSO_4$ koje smo koristili za konstrukciju kalibracijskog pravca kreću se između 1 M i $2 \cdot 10^{-3}$ M (Slika 22).



Slika 22. Spektrofotometrijsko određivanje ovisnosti apsorbancije o koncentraciji $CuSO_4$ pri 690 nm.

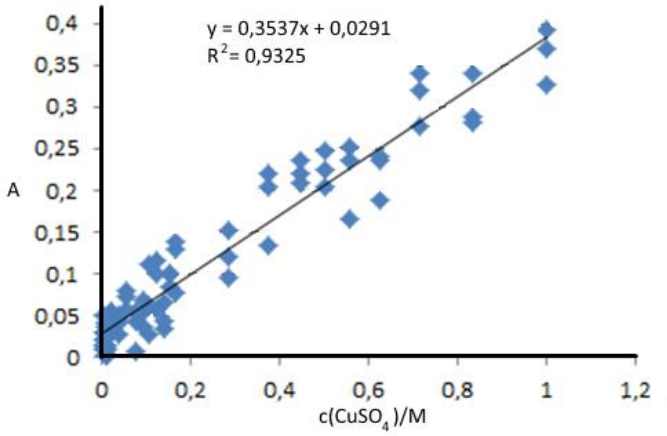
Iz dobivenih rezultata vidljivo je da se apsorbancija mijenja sa koncentracijom prema Beer-Lambertovom zakonu samo kod niskih koncentracija, do $c(CuSO_4) = 1.5 \cdot 10^{-3}$ M (Slika 23) . Pojavu da Beer-Lambertov zakon ne vrijedi kod visokih koncentracija bila je već vidljiva kod otopina $KMnO_4$ iznad $c(KMnO_4) = 1.5 \cdot 10^{-3}$ M.



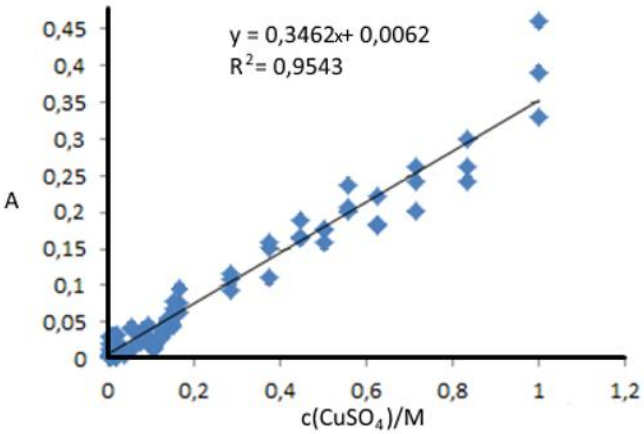
Slika 23. Spektrofotometrijsko određivanje ovisnosti apsorbancije o koncentraciji $CuSO_4$ niskih koncentracija pri 690 nm.

4.4. Određivanje apsorbancije otopina $CuSO_4$ pametnim telefonom

Za izradu kalibracijskog pravca korištena je samo apsorbancija dobivena računanjem intenziteta crvenog dijela RGB spektra jer apsorbancije koje smo dobili preračunavanjem intenziteta plave i zelene su vrlo male vrijednosti i grafovi koje smo dobili su neupotrebljivi za daljnja mjerenja i istraživanja.

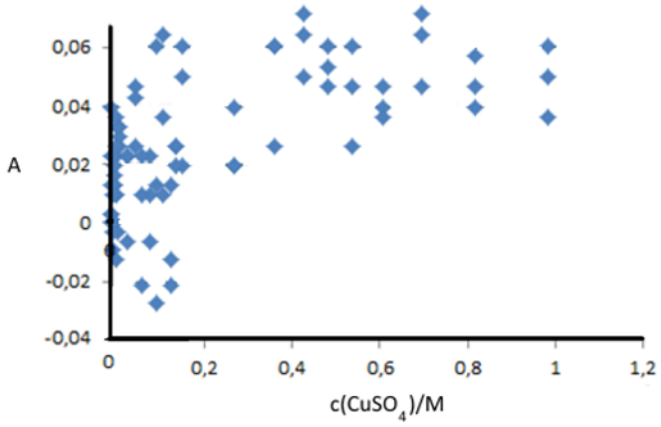


Slika 24. Ovisnost A(red) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopina $CuSO_4$ pametnim telefonom.

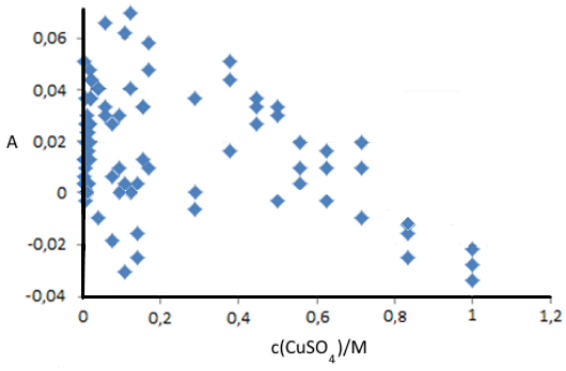


Slika 25. Ovisnost A(red) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otpina $CuSO_4$ pametnim telefonom i širokokutnom lećom.

Usporedbom rezultata vidljivo je da je korištenje širokokutne leće rezultiralo boljim rezultatima u odnosu na ona mjerenja bez širokokutne leće. Korištenje širokokutne leće omogućava ulazak više svjetlosti u senzor kamere, što je rezultiralo boljim rezultatima.



Slika 26. Ovisnost A(green) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopina $CuSO_4$ pametnim telefonom.



Slika 27. Ovisnost A(blue) o koncentraciji pri određivanju apsorbancija otopina $CuSO_4$ pametnim telefonom.

Intenziteti zelene i plave, RGB spektra ne mogu se koristiti za određivanje nepoznate koncentracije otopine $CuSO_4$. Apsorbancije koje su dobivene imale su vrlo niske vrijednosti i nisu pokazivale linearnu ovisnost ovisnost (Slika 26, 27). Apsorpcijski maksimum korišten kod spektrofotometrijskog mjerenja nalazi se na 690 nm, a elektromagnetskog zračenje valne duljine 690 nm je crvene boje i to je razlog dobivanja precizne kalibracijske krivulje korištenjem apsorbancije dobivene preračunavanjem intenziteta crvenog dijela spektra.

4.5. Određivanje nepoznate koncentracije otopina $KMnO_4$

Za određivanje nepoznate koncentracije uzorka $KMnO_4$ najbolje je koristiti intenzitete zelene jer iznos R^2 najveći kod grafa ovisnosti apsorbancije$_{(green)}$ o koncentraciji $KMnO_4$.

Tablica 1. Određivanje nepoznate koncentracije otopina $KMnO_4$

Uzorak $KMnO_4$	**A(uzorka nepoznate koncentracije, green)**	**Nađeno(nepoznati uzorak)/M**	**Uzeto c(nepoznati uzorak)/M**	**% pogreške**
1	0,503	$8{,}78 \cdot 10^{-4}$	$9.09 \cdot 10^{-4}$	3,41
2	0,212	$3.54 \cdot 10^{-4}$	$3{,}85 \cdot 10^{-4}$	8,05
3	0,111	$1{,}72 \cdot 10^{-4}$	$1{,}58 \cdot 10^{-4}$	8,86

Iz Tablice 1 vidljivo je da je postotak greške za tri nezavisna uzorka u rasponu koncentracija od $1{,}58 \cdot 10^{-4}$ M do $9.09 \cdot 10^{-4}$ M ispod 10%.

4.6. Određivanje nepoznate koncentracije otopina $CuSO_4$

Za određivanje nepoznate koncentracije uzorka jedino je moguće koristiti intenzitete crvene, jer grafovi ovisnosti apsorbancije$_{(green,\ blue)}$ o koncentraciji $CuSO_4$ ne pokazuju linearnu ovisnost.

Tablica 2. Određivanje nepoznate koncentracije otopina $CuSO_4$

Uzorak $CuSO_4$	**A(uzorka nepoznate koncentracije, green)**	**Nađeno c(nepoznati uzorak)/M**	**Uzeto c(nepoznati uzorak)/M**	**% pogreške**
1	0,170	0,474	0,5	5,2
2	0,106	0,287	0,286	0.35
3	0,197	0,552	0,625	11,68

Iz Tablice 2 vidljivo je da je postotak greške za tri nezavisna uzorka u rasponu koncentracija od 0,286M do 0,625 M ispod 12%.

5. *Zaključak*

- Pametni telefon može koristiti za određivanje nepoznate koncentracije obojanih otopina.
- Kod određivanja nepoznate koncentracije otopina $KMnO_4$ mogu se koristit sva tri dijela RGB spektra. Za šire koncentracijsko područje od $2 \cdot 10^{-5}$ M do $1 \cdot 10^{-2}$ M crveni i plavi. Za uže, ali i niže koncentracijsko područje od $2 \cdot 10^{-5}$ M do $1.5 \cdot 10^{-3}$ M zeleni dio RGB spektra.
- Kod određivanja nepoznate koncentracije otopina $CuSO_4$ može se koristit crveni dio RGB spektra u rasponu koncentracija otopine od $2 \cdot 10^{-3}$ M do 1 M.
- Korištenje širokokutne leće rezultiralo je boljim kalibracijskim grafovima, ali to ne utječe na drastično poboljšanje rezultata.
- Metoda je i brza, dostupna i jeftina, te se može koristiti kao preliminarna metoda za neka jednostavna određivanja koncentracije obojanih otopina.

6. LITERATURA

1. D. A. Skoog, D. M. West, F. J. Holler, Osnove analitičke kemije, Školska knjiga, Zagreb, 1999.
2. Peter. Atkins, Julio de Paula, Physical chemistry, W.H. Freeman and Company, New York, 2002.
3. Filipović, S. Lipanović, Opća i anorganska kemija, Školska knjiga, Zagreb, 1995.
4. Jeong-Yeol Yoon, Biosensors: From Electric Circuits to Immunosensors, Springer Science+Business Media, New York, 2013
5. http://teaching.shu.ac.uk/hwb/chemistry/tutorials/molspec/beers1.htm (09.05.2015)
6. http://ww.chemguide.co.uk/analysis/uvvisible/beerlambert.html (09.05.2015.)
7. Colorimetrix.com (17.05.2015)
8. http://webs.anokaramsey.edu/chemistry/chem1061/Labs/SampleReport/Sample%20Lab%20Report-S13.pdf (17.05.2015)
9. Samuel Schaefer, Colorimetric Water Quality Sensing with Mobile Smart Phones, The University of British Columbia, 2012 (18.07.2015.)
10. Seoyeon Choi, Soocheol Kim, Jung-Sik Yang, Jung-Hyun Lee, Chulmin Joo, Hyo-Il Jung, Real-time measurement of human salivary cortisol for the assessment of psychological stress using a smartphone (18.07.2015.)
11. Christina Holly Tyrrell, A Lateral Flow Smart Phone Image Analysis Diagnostic, Faculty of California Polytechnic State University, San Luis Obispo (18.07.2015.)
12. Byoung-Yong Chang, Smartphone-based Chemistry Instrumentation: Digitization of Colorimetric Measurements, Department of Chemistry, Pukyong National University (18.07.2015.)
13. Miroslav Pohanka, Photography by Cameras Integrated in Smartphones as a Tool for Analytical Chemistry Represented by an Butyrylcholinesterase Activity Assay, Faculty of Military Health Sciences, University of Defense, Czech Republic (18.07.2015.)
14. Li Shen, Joshua A. Hagenb, Ian Papautsky, Point-of-care colorimetric detection with a smartphone (18.07.2015.)