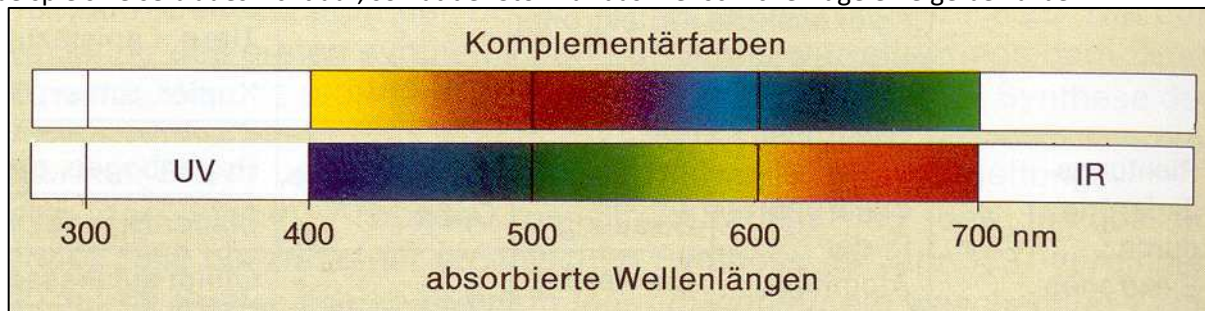


# Farbigkeit und Theorien

von  
*Dinah Shafry*

## Farbigkeit

Licht ist elektromagnetische Strahlung, bei der jede Farbe eine einzelne Wellenlänge besitzt, die als unterschiedliche Farben vom Menschen wahrgenommen wird, sobald diese von einem Gegenstand reflektiert wird. Weißes Licht enthält alle Farben und, wenn dieses auf eine Oberfläche trifft, wird ein Teil der Farben reflektiert, andere können absorbiert werden. Bei Schwarz hingegen werden alle Lichtstrahlen absorbiert. Wenn Farben absorbiert werden, erscheint die Oberfläche in der Farbe der jeweiligen Komplementärfarbe. Nimmt ein Stoff beispielsweise blaues Licht auf, so hat der Stoff für das menschliche Auge eine gelbe Farbe.

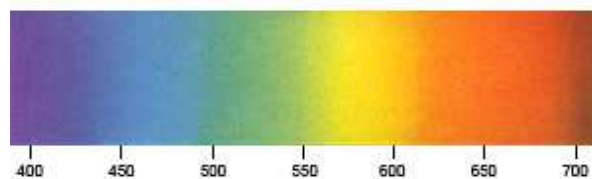


Durch die Energie der absorbierten Farben wird das Schwingen der Moleküle angeregt: Es entsteht Wärme. Umso kürzer die Wellenlängen sind, desto mehr Energie wird umgesetzt und die Strahlen werden gefährlicher. Das menschliche Auge vermischt Farbeindrücke, wenn mehrere Wellenlängen reflektiert werden. Der Mensch kann ein Farbspektrum von 400-700 nm wahrnehmen.

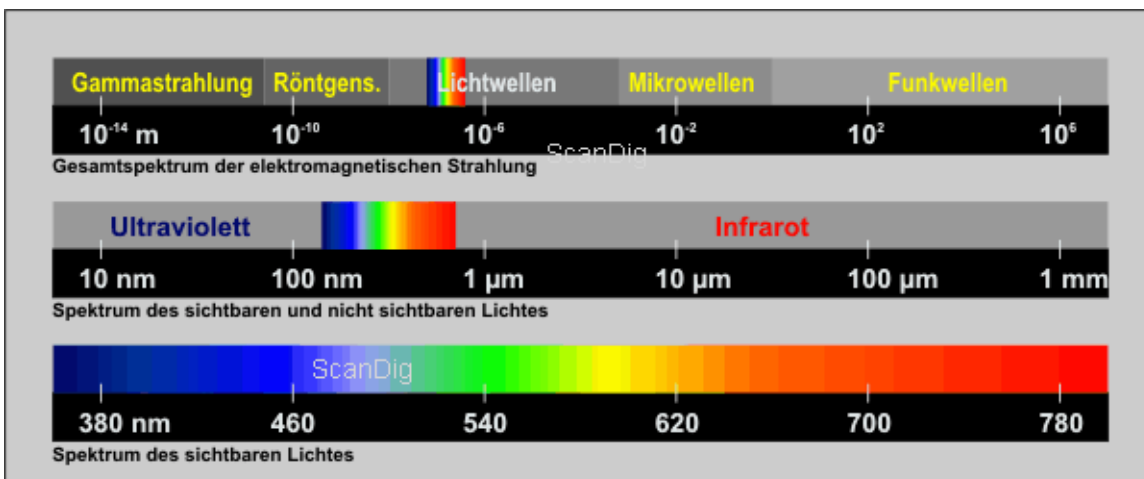
In einem Farbspektrum sind alle Spektralfarben enthalten, d.h. alle Farben eines Regenbogens.



Spektralfarben des Regenbogens



für das Auge sichtbare Wellenlängen des Lichts



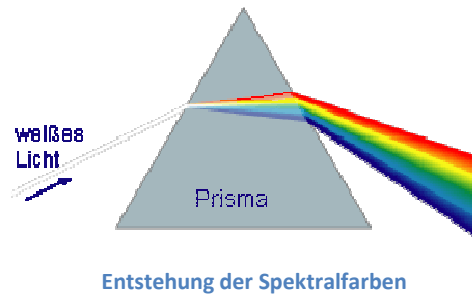
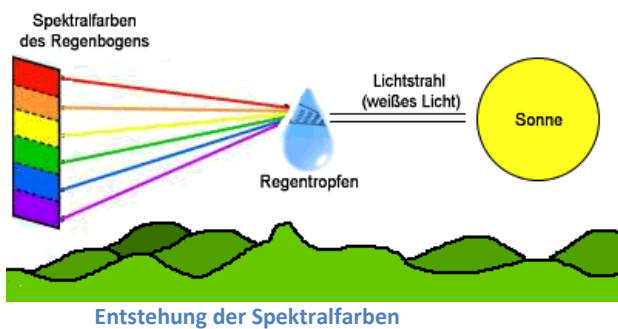
Einordnung des sichtbaren Farbspektrums in das Gesamtspektrum der elektromagnetischen Strahlung

## Entstehung eines Farbspektrum durch die Lichtbrechung eines Prismas

Ein Farbspektrum kann auch durch die Lichtbrechung eines Prismas entstehen. Dieser Vorgang funktioniert folgendermaßen:

Wenn ein Lichtstrahl durch ein Prisma (Glasprisma) fällt, wird dieser zweimal gebrochen. Erstens beim Übergang vom optisch dünneren zum optisch dichteren Medium, d.h. von der Luft zum Glas hin, und zweitens beim Übergang vom optisch dichteren zum optisch dünneren Medium. D.h. der Lichtstrahl wird gebrochen, sobald er auf das Glas des Prismas trifft, scheint dann auf dieser Bahn durch das Glas hindurch und wird ein zweites Mal an der Stelle gebrochen, wo der Lichtstrahl das Glas wieder „verlässt“. Allgemein gilt, dass verschiedene Wellenlängen auch unterschiedlich gebrochen werden. Bei theoretischen Erklärungen bzw. Berechnungen geht man von Sonnenlicht aus, welches dann oft auch als „weißes Licht“ bezeichnet wird. Die Brechung des Sonnenlichts durch ein Prisma lässt ein kontinuierliches Spektrum entstehen, welches ungefähr 300 unterschiedliche Farbnuancen beinhaltet. Diese lassen sich jedoch optisch nicht weiter aufspalten, deshalb nennt man sie spektralrein.

Wie diese Spektralfarben entstehen, lässt sich anhand folgender Abbildung verdeutlichen:



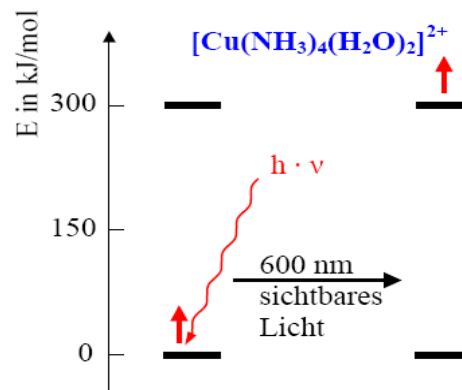
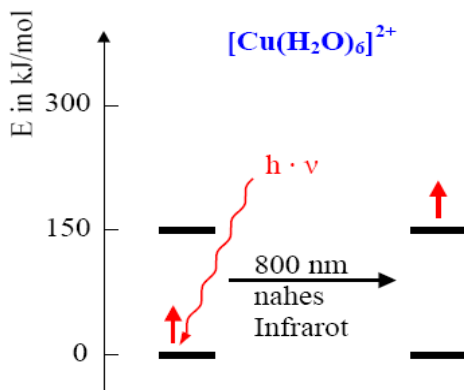
## Wittsche Farbstofftheorie

Nach der Wittschen Farbstofftheorie werden Farbstoffmoleküle in verschiedene funktionelle Bereiche eingeteilt: „Chromophore“ Teile (Teile, die den Farbstoff tragen) und „auxochrome“ Gruppen (farbhelfende Gruppen). Bei dieser Theorie unterscheidet man zwischen Hypsochromen und Bathochromen Effekten.

Der **hypsochrome Effekt** bezeichnet die Verschiebung der Absorption in den kurzwelligeren, energiereicheren Bereich des elektromagnetischen Spektrums.

Der **bathochrome Effekt** beschreibt die Verschiebung eines Absorptionsspektrums in Richtung größerer Wellenlängen und somit in den energieärmeren Bereich des Lichtspektrums.

## Verschiebung des Absorptionsmaximums



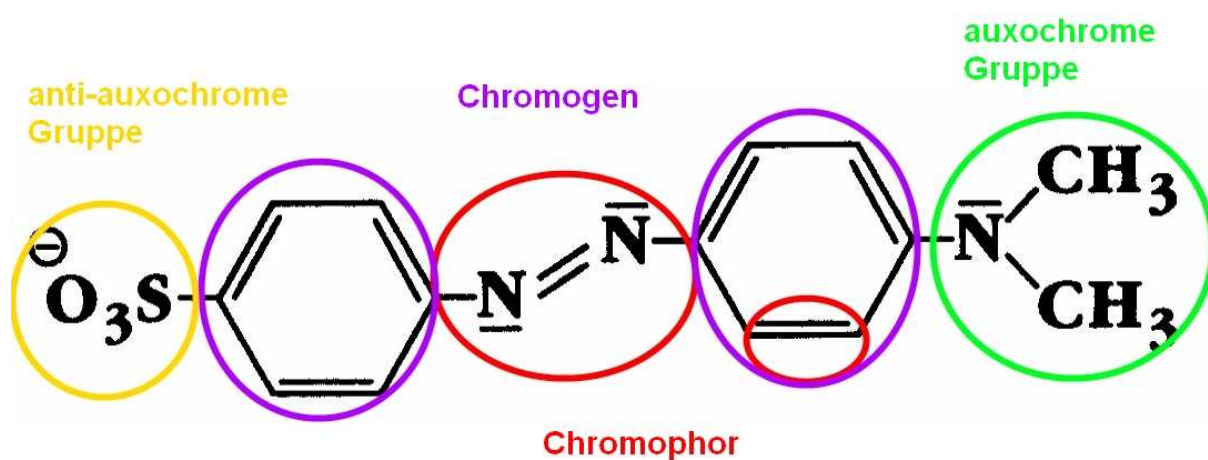
kurzer Abstand = geringe Anhebung des Elektrons = energiearmes Licht mit langer Wellenlänge wird absorbiert (800 nm)

größerer Abstand = stärkere Anhebung des Elektrons = energiereicheres Licht mit kürzerer Wellenlänge wird absorbiert (600 nm)

Die **auxochromen Gruppen** sind an den Phenylringen hängende Reste, die die Farbgebung beeinflussen. Die auxochrome Gruppe kann einen +M-Effekt auf die aromatischen Ringe ausbilden. Wenn sich jedoch ein Substituent an der auxochromen Gruppe anlagert, wird der +M-Effekt verhindert. Es nimmt am konjugierten Doppelsystem teil und vergrößert das  $\pi$  – Elektronensystem, das heißt, es findet ein bathochromer Effekt statt. Ihre Wirkung beruht auf ihrer Elektronendonatoreigenschaft, die die Delokalisierung im Chromophor erhöht und unterstützt die Farbigkeit. Je wirksamer ein auxochromer Rest ist, desto weiter verschiebt er die Lichtaufnahme in den längeren Wellenbereich.

Eine weitere Möglichkeit zur Steigerung der Delokalisierung von  $\pi$  - Elektronen im Chromophor ist zusätzlich zur auxochromen Gruppe eine **anti-auxochrome Gruppe**. Diese kann einen –M-Effekt auf das  $\pi$  – Elektronensystem ausbilden und kann freie Elektronenpaare aufnehmen, die durch den +M-Effekt der auxochromen Gruppe in das System gegeben werden.

Weil das zentrale  $\pi$  - Elektronensystem immer gleich ist, kommt den auxochromen und anti-auxochromen hier eine entschiedene Bedeutung zu: Sie können in der richtigen Stellung zueinander einen „Push and Pull-Mechanismus“ entwickeln und damit zu einer Bathochromie führen.



#### Einteilung von Methylorange nach der Wittschen Farbstofftheorie

Das **Chromophor** ist der Teil eines Farbstoffes, der für das Vorhandensein der Farbe sorgt, da er das zentrale Bindungsatom darstellt. Man versteht darunter im Allgemeinen ungesättigte Verbindungen, welche leicht bewegliche  $\pi$  - Elektronen enthalten. Das Chromophor enthält delokalisierte Elektronen und kann Farbton und Farbtiefe eines Farbstoffes beeinflussen. Er muss allerdings  $\text{sp}^2$  hybridisiert sein, um Farbe zu ermöglichen. Durch die Mesomerie sind die Elektronen sogar noch weiter delokalisiert, wodurch der chromophore Charakter noch weiter verstärkt wird, da sich HOMO (highest occupied molecular orbital) und LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) Orbital noch weiter annähern. (MO-Theorie, s.u.)

Das **Chromogen** verlängert das  $\pi$  – Elektronensystem oder ermöglicht die Mesomerie, wodurch die Farbigkeit entsteht.

## Valenzbindungstheorie

Die Valenzbindungstheorie (VB-Theorie) erklärt den Aufbau und die Geometrie von Molekülen anhand der Bindungen zwischen den in ihnen enthaltenen Atomen. Die VB-Theorie ist die in der Schule am intensivsten unterrichtete Theorie. Man unterscheidet 1-fach, 2-fach und in manchen Fällen auch 3-fach Bindungen. Am Beispiel des Kohlenstoffs soll dies kurz erklärt werden:

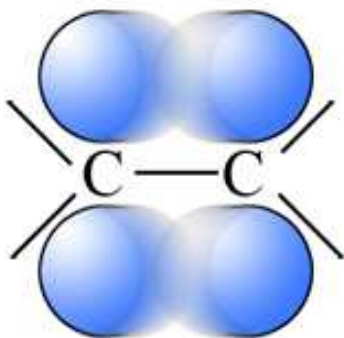
Kohlenstoff (Formelzeichen C) besitzt vier "eigene" Elektronen in seiner äußeren Schale. Im Zustand größter Stabilität befindet es sich allerdings nur, wenn es sich Elektronen mit einem anderen Atom "teilt", also eine Bindung eingeht, da es danach strebt, nicht nur seine vier freien Elektronen zur Verfügung zu haben, sondern diese zu einer vollen äußeren Schale mit insgesamt acht Elektronen zu ergänzen (Oktett- bzw. Edelgas-Regel). Bei einer solchen sogenannten Valenzbindung, die aus jeweils (mindestens) einem Elektron jedes Bindungspartners besteht, werden die Elektronen also quasi "doppelt genutzt": Jedes der beiden Atome erreicht dadurch einen Zustand größerer Stabilität (acht Außenelektronen).

Zusätzlich zu diesen sogenannten Einfach-Bindungen, bei denen sich nur zwei Elektronen pro Bindung kombinieren, gibt es auch noch sogenannte Zweifach-Bindungen bzw Doppelbindungen. Diese kommen zum Beispiel sehr häufig bei Kohlenstoff vor. Bei einer Doppelbindung steuert jeder Bindungspartner 2 Elektronen zur Bindung bei, wodurch diese also aus insgesamt 4 Elektronen besteht. Sie sind dadurch in ihrer "Bewegungsfreiheit" weniger stark eingeschränkt und können deshalb angeregt werden.

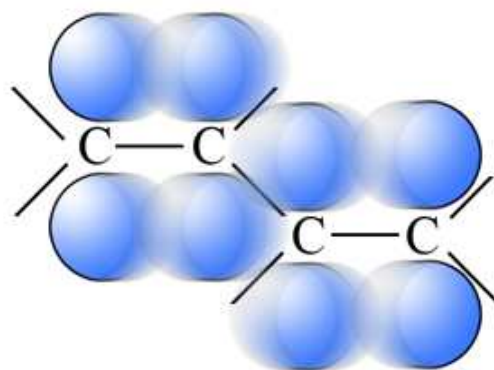
Dies ist der entscheidende Punkt beim Thema Farbigkeit. Wird einem Molekül mit einer Doppelbindung Energie (z. B. durch Absorption von Licht) Energie hinzugefügt, so können ein oder auch mehrere Elektronen angeregt werden, wodurch sie in eine höhere Schale springen. Fallen sie in ihre ursprüngliche Schale zurück, so geben sie dabei genau die Energiemenge in Form von Licht (Photonen) ab, die jeweils nötig war, um sie anzuregen. Da diese Energie je Molekül und Atom unterschiedlich ist, emittieren sie auch unterschiedliches Licht, da die Wellenlänge des Lichts nach Heisenberg direkt von der Energie des emittierten Photons abhängig ist.

Mithilfe der Valenzbindungstheorie kann man anhand des Wissens um die Bindungen zwischen den Atomen in einem Molekül zwar relativ einfach Schlüsse auf die Geometrie des Moleküls ziehen, für die Erklärung der Farbigkeit ist sie jedoch etwas ungenau, weswegen man besser auf die Molekülorbitaltheorie zurückgreift.

Man geht davon aus, dass die Doppelbindungselektronen sich in konjugierten Doppelbindungen, also jeweils übernächste Doppelbindungen, durch Mesomerie beliebig frei bewegen können. Je größer das Doppelbindungssystem ist, desto länger sind die Wellen, die zur Resonanz des schwingenden Elektrons passen und von diesem absorbiert werden: Je länger das Doppelbindungssystem ist, desto länger ist auch die Wellenlänge des absorbierten Lichts.



$sp^2$ -hybridisierte C-Atome  
einer C=C-Doppelbindung

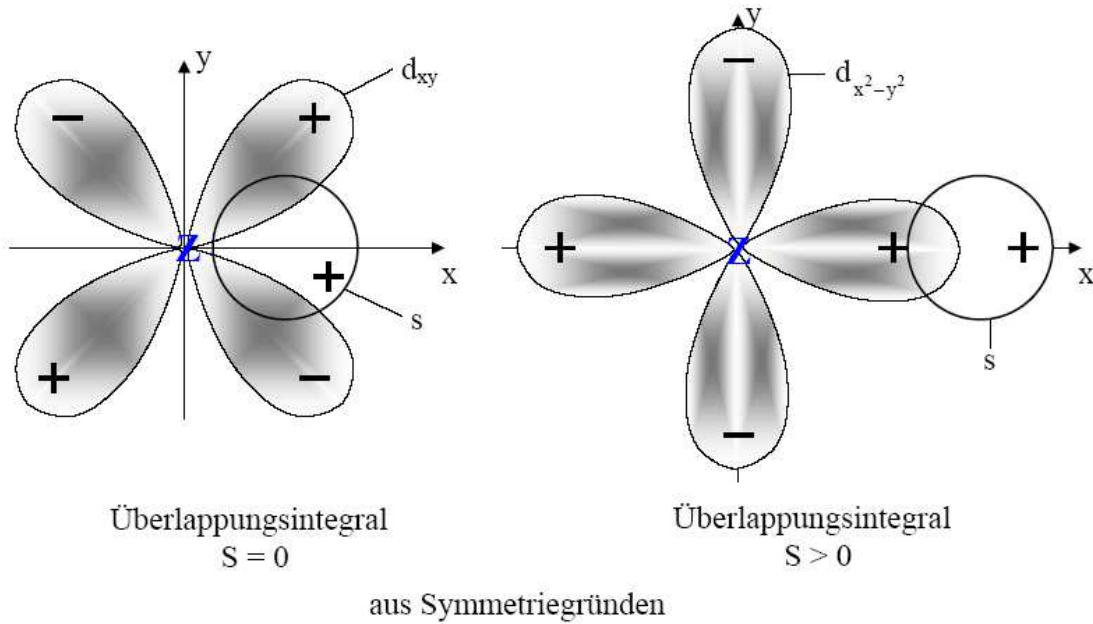


Konjugierte Doppelbindungen

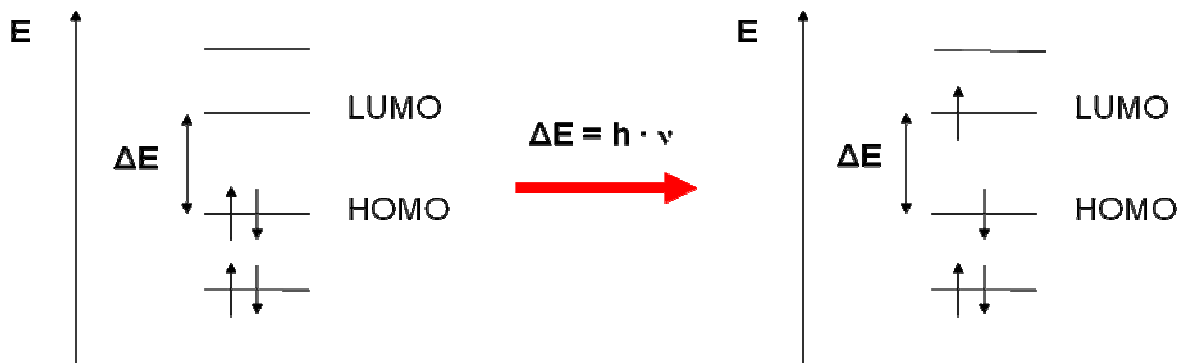
## Molekülorbitaltheorie

Neben der Valenzbindungstheorie ist die Molekülorbitaltheorie (MO-Theorie) ein wichtiges Hilfsmittel zur Beschreibung der chemischen Bindung. Die bindenden Elektronenpaare werden hierbei nicht als lokalisiert betrachtet, sondern man stellt sich die Bindungselektronen als auf verschiedene Molekülorbitale diskreter Energie verteilt vor. Diese Orbitale können sich über das gesamte Molekül erstrecken. Die Grundlage der MO-Theorie ist die Schrödinger-Gleichung. Die Wellenfunktion beschreibt die Wechselwirkung des Elektrons mit den anderen Elektronen und Atomkernen im Molekül.

Die MO-Theorie beschreibt mit Hilfe von komplementären Möglichkeiten den Aufbau von Atombindungen. Die Struktur des Moleküls nach dem MO-Modell ist ausschlaggebend für die Farbigkeit. Bei dieser Theorie hängt es von den Symmetrieeigenschaften der Einzelorbitale ab, welche Kombinationen bindende bzw. antibindende oder nichtbindende Molekülorbitale bilden.



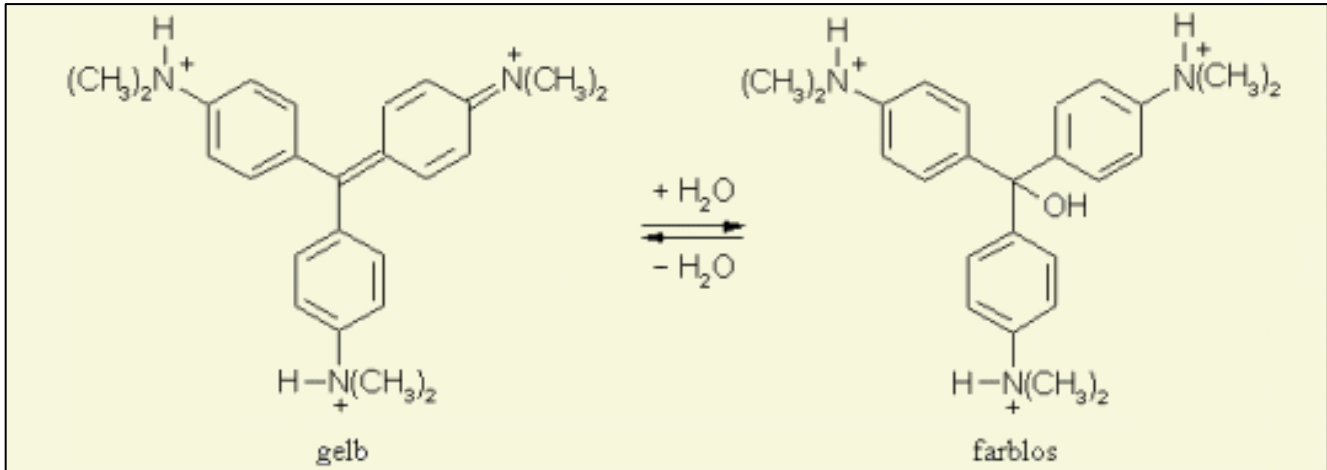
Je größer die Moleküle sind, desto mehr Energie wird für die Hybridisierung der  $\pi$  – Elektronenwolke benötigt. Die Energie die im Licht enthalten ist, bringt die Elektronen in dem  $\pi$  – Molekülorbital dazu, in das nächst höhere Energielevel, dem  $\pi^*$  - Molekülorbital aufzusteigen. Das heißt von dem HOMO (highest occupied molecular orbital) zu dem LUMO (lowest unoccupied molecular orbital). Dabei muss die Energie des Lichts genau mit der Energie übereinstimmen, die benötigt wird, damit die Elektronen aufsteigen können. Anschließend fallen die Elektronen wieder runter und die Energie wird als Wärmeenergie freigesetzt.



## Anwendung und Vergleich der Theorien anhand des Farbstoffes Kristallviolett

Kristallviolett zeigt bei einer Titration mit Natronlauge (NaOH, Base) eine Entfärbung von gelb zu farblos, es geht also in den UV-Bereich. Dieser Vorgang kann auch nicht mehr umgekehrt werden: Ist der Stoff einmal farblos, bleibt er dauerhaft in diesem Zustand. Bei der Zugabe von Salzsäure (HCl, Säure) nimmt der Stoff Farbe an: Er wechselt von blau zu grün und gelb. Durch zusätzliche Zugabe von Natronlauge kann der Stoff anders als bei der ersten Reaktion farblos gemacht werden.

Entfärbung bei Kristallviolett:



Farbstofftheorie	Base (NaOH)	Säure (HCl)
<b>Wittsche Farbstofftheorie</b>	Das OH-Anion lagert sich an dem zentralen Chromophor an, wodurch sich die Farbigekeit auflöst bzw. in einen kürzerwelligen UV-Bereich verschoben wird: Hypsochromie.	Durch die Zugabe von Salzsäure entsteht ein hypsochromer Effekt. Der +M-Effekt der auxochromen Gruppen wird durch Anlagerung des Protons verhindert und die Wellenlänge verkürzt sich.
<b>Molekülorbitaltheorie</b>	Durch die Anlagerung des OH-Anions (Nucleophil) an zentralen Kohlenstoff verändert sich die $sp^2$ -Hybridisierung zu $sp^3$ und das $\pi$ – Elektronensystem verkürzt sich zu drei kleineren, isolierten Systemen. Alleine absorbieren sie nur noch das Licht im UV-Bereich, da der Abstand zwischen HOMO und LUMO durch weniger p-Orbitale größer und damit energiereicher wird.	Durch die Anlagerung des Protons an den $sp^2$ -hybridisierten Stickstoff wird dieser $sp^3$ -hybridisiert und besitzt keine p-Orbitale mehr. Das $\pi$ – Elektronensystem verkürzt sich und die Absorption erfolgt in einem energiereicheren kürzerwelligen Bereich.
<b>Valenzbindungstheorie</b>	Der zentrale Kohlenstoff ist durch die zusätzliche OH-Gruppe nicht mehr in der Lage, ein chinoides Doppelbindungssystem zu bilden. Der Kohlenstoff kann nicht mehr an einer Mesomerie teilnehmen und das konjugierte Doppelbindungssystem verkürzt sich.	Die Säure bindet das freie Elektronenpaar der Amino-Gruppe durch die Bindung zum Proton, wodurch die Mesomerie nicht mehr möglich ist. Das konjugierte Doppelbindungssystem wird verkleinert und damit verkürzt sich die absorbierte Wellenlänge.

### Literaturverzeichnis

<http://www.iac.uni-stuttgart.de/Vorlesungen/AllgAnorgChemII/Bindungsmodelle.pdf>

<http://www.bautschweb.de/chemie/kristallviolett/kristallviolett.htm>

[http://www.kkgwhv-schule.kwe.de/kkg\\_chem/ag\\_allg/kviolett/kviframe.htm](http://www.kkgwhv-schule.kwe.de/kkg_chem/ag_allg/kviolett/kviframe.htm)

<http://www.versuchschemie.de/intern/files/Facharbeit.pdf>

<http://www.poenitz-net.de/Chemie/4.Makromolekuele/4.6.S.Farbstoffe.pdf>

Material aus dem Unterricht