

Mladi za napredek Maribora

34. srečanje

UPORABA PAMETNEGA TELEFONA ZA SPEKTROSKOPSKE RAZISKAVE
V VIDNEM DELU ELEKTROMAGNETNEGA VALOVANJA

Raziskovalno področje: Kemija in kemijska tehnologija

Inovacijski predlog

Avtor: BLAŽ REŽONJA

Mentor: ZDENKA KEUC

Šola: II. GIMNAZIJA MARIBOR

Maribor, februar 2017

Mladi za napredek Maribora

34. srečanje

UPORABA PAMETNEGA TELEFONA ZA SPEKTROSKOPSKE RAZISKAVE
V VIDNEM DELU ELEKTROMAGNETNEGA VALOVANJA

Inovacijski predlog : KEMIJA IN kemijska TEHNOLOGIJA

Maribor, februar 2017

POVZETEK

Inovacijski predlog obravnava uporabo aplikacije za zajem barv, imenovane Color Grab (za operacijski sistem Android), za namen spektrofotometričnega določanja koncentracij znanih snovi v različnih vzorcih, in sicer v vzorcih bakrovih(II) ionov, deležu salicilne kisline v vzorcih aspirina, koncentracijo skupnih fenolnih spojin ter antocianov v vzorcih rdeče pese. Rezultati meritev kažejo, da lahko aplikacijo uporabljamo hitro in z veliko zanesljivostjo, če med delom z izbrano snovjo ne pride do spremembe barve. Natančnost meritev (primerjava s kolorimetrom ali spektrofotrom) kaže, da v dobrih pogojih meritev z aplikacijo Color Grab naredimo do 5 % napako. Izjema so zelo nizke koncentracije (barvno zelo svetli odtenki) ali če barva ni enotna (primer rdeče pese). Takšna napaka meritev je za redno šolsko delo sprejemljiva, zato nameravamo v nadaljevanju razviti poskuse/kratke raziskave, ki bi bili primerni za delo v osnovni in srednji šoli. Poskusi, ki smo jih izvedli, so ponovljivi in v kolikor ne spreminjamo pogojev meritev (oddaljenost objekta, ki ga merimo, ter postavitev telefonske kamere) tudi zelo natančni. Umeritvene premice imajo visok faktor ujemanja (R^2). Ker je aplikacija brezplačna in zanjo ne potrebujemo dodatne opreme, je delo z njo enostavno ter široko uporabno in lahko nadomesti delo z mnogo dražjimi aparaturami, kot so spektrofotometri ali kolorimetri.

VSEBINA

1 UVOD	6
1.1 Namen inovacijskega predloga	7
1.2 Hipoteze	7
2 TEORETIČNO OZADJE	7
2.1 Programi za zajem barv	8
2.2 Osnovni principi barvnega modela HSV	9
2.3 Osnovni principi barvnega modela HSL	10
2.4 Slovarček osnovnih pojmov	11
3 KVALITATIVNE RAZISKAVE O UPORABI MOBILNE TEHNOLOGIJE V SREDNJIH ŠOLAH	12
4 PREDSTAVITEV DELOVANJA APLIKACIJE Color Grab in korelacija z delovanjem spektrofotometra	13
4 PRAKTIČNI DEL	15
4.1 Načrt dela	15
4.2 Kemikalije in laboratorijski pribor	16
4.2.1 Opis dela z aplikacijo Color Grab	17
4.3 Določanje koncentracije Cu^{2+} ionov v odpadni vodi	18
4.3.1 Razprava	20
4.4 Določitev skupnih fenolnih spojin	21
4.4.1 Razprava	23
4.5 Določitev skupnih betacianinov v vzorcih rdeče pese	23
4.5.1 Razprava	25
4.6 Določitev koncentracije salicilne kisline v aspirinu, sintetiziranem v šolskem laboratoriju	26
4.6.1 Razprava	28
5 Zaključki	29
5.1 Družbena odgovornost	31
6 UPORABLJENI VIRI	32

Kazalo slik

Slika 1 – Barvni krog RGB (Marošević, 2015) in prikaz aditivnega mešanja barv (Kolak, 2016)	8
Slika 2 – Zajem zaslona za <i>GTK+</i> (levo), <i>Qt</i> (sredina) in <i>GUMP</i> (desno) programov za zajem barv	8
Slika 3 – HSV GEOMETRIJA (Joblove in Greenberg's (1978))	9
Slika 4 – Stožec kot način prikaza HSV geoetrije (Hanbury, 2008)	10
Slika 5 – Rungova <i>Farbenkugel</i> , 1810, in (desno) Munsellova uravnotežena barvna sfera 1900, iz barvne notacije 1905 (Nickerson, 1976)	10
Slika 6 – Predstavitev HSL barvnega prostora z dvojnimi storžem (levo) in barvni krog z odtenki, razdeljen na 360 delov (desno) (Kolak, 2016).	11
Slika 7 – Kolorimeter in spektrofotometer, uporabljena v raziskavi	17

Slika 8 – Delo z aplikacijo Color Grab na androidnem telefonu.....	17
Slika 11– Standardne raztopine galne kisline.....	22
Slika 12 – Ekstrakti rdeče pese	24
Slika 13 – Sinteza aspirina iz salicilne kisline in anhidrida etanojske kisline	26
Slika 14 – Modrovijoličen kompleks Fe ³⁺ in salicilne kisline.....	26

Kazalo preglednic

Preglednica 1 – Priprava standardnih raztopin za določanje koncentracije bakrovih(II) ionov	18
Preglednica 2 – Podatki za umeritveno premico (bakrovi(II) ioni).....	19
Preglednica 3 – Meritve koncentracije bakrovih ionov v »realnem« vzorcu	20
Preglednica 4 – Galna kislina kot standard za izračun skupne količine fenolnih spojin v ekstraktih rdeče pese...	21
Preglednica 5 – Koncentracije skupnih fenolnih spojin v ekstraktih (E od 1 do 5) rdeče pese	23
Preglednica 6 – Standardne raztopine betacianinov in spektrofotometrične meritve absorbanca pri $\lambda_{600,3}$ nm ter meritev z aplikacijo Color Grab.....	24
Preglednica 7 – Meritve betacianinov v vzorcih rdeče pese, določenih z aplikacijo Color Grab in spektrofotometrično	25
Preglednica 8 – Priprava standardnih raztopin salicilne kisline	27
Preglednica 9 – Meritve absorbance in nasičenosti za standardne raztopine salicilne kisline	27
Preglednica 10 – Izračun deleža salicilne kisline v vzorcu aspirina.....	28
Preglednica 11 – Prednosti in slabosti uporabe aplikacije Color Grab	30

Kazalo grafov

Graf 1 – Umeritvena premica (shematični prikaz).	15
Graf 2 – Umeritvena premica za bakrove(II) ione, določena z merjenjem barvne nasičenosti z aplikacijo Color Grab	19
Graf 3 – Umeritvena premica za bakrove(II) ione, določena spektrofotometrično.....	20
Graf 4 – Umeritvena premica za skupno vrednost fenolnih spojin v ekstraktu rdeče pese (določena spektrofotometrično).....	22
Graf 5 – Umeritvena premica za skupno vrednost fenolnih spojin v ekstraktu rdeče pese (Color Grab).....	22
Graf 6 – Umeritvena premica za betacianine (spektrofotometrično).....	24
Graf 7 – Umeritvena premica za betacianine (Color Grab).....	25

Organigram 1 – Predstavitev preučevanih vzorcev.....	16
---	----

1 UVOD

Laboratorijsko delo na različnih področjih naravoslovja velikokrat zahteva uporabo spektroskopije¹, tako v kvalitativnem kot kvantitativnem smislu. Poznamo več spektroskopskih metod, s katerimi lahko preučujemo lastnosti snovi preko njihove interakcije z različnimi področji elektromagnetnega valovanja (v nadaljevanju EMV) in na ta način pridobimo podatke o elektronskih, vibracijskih in rotacijskih stanjih ter o strukturi in simetriji molekul. Na ravni osnovne in srednje šole se največ uporablja molekularna spektrometrija, ki temelji na absorpciji vidne svetlobe (UV-VIS spektroskopija), torej območju EMV, ki ga lahko zaznamo z očmi (380 nm–720 nm) (Kolak, 2016). Identifikacija snovi temelji na primerjavi absorpcijskega spektra neznanega vzorca z referenčno snovjo oz. standardom, kvantifikacija pa običajno na uporabi Beer-Lambertovega zakona, ki pravi, da je delež absorbirane svetlobe eksponentna funkcija koncentracije in dolžine poti svetlobnega žarka skozi vzorec (Brodnjak Vončina, 2006). Naprava, ki jo v ta namen potrebujemo, se imenuje spektrofotometer. Poizvedba na Zavodu za šolstvo republike Slovenije (2016) je pokazala, da je večina srednjih šol opremljena z vsaj enim (Vernierjevim²) spektrofotometrom (običajno SpectroVIS), na osnovnih šolah pa te opreme praviloma ni. Osnovni razlog je cena (dostopnost) ter seveda učni načrti, ki ne predvidevajo uporabe te opreme. Cenovna nedostopnost je velikokrat ovira pri nakupu ali širši uporabi opreme v šolah. V kolikor je na šoli le ena aparaturna, se ta običajno ne uporablja za samostojno delo učencev/dijakov in služi le demonstracijskim poskusom. Na tej točki je vzniknila osnovna ideja za ta inovacijski predlog.

Zelo težko bi v osnovni šoli, kaj šele v srednji šoli, našli učenca/dijaka, ki nima t. i. pametnega telefona. Slednji zaradi bogate grafike vsebujejo tudi programe, s katerimi lahko odkrivamo/prepoznamo posamezne dele slik oz. njihove barve. Oblikovalci in umetniki ta orodja uporabljajo že dolgo, nisem pa zasledil, da bi se pametni telefoni (z operacijskim sistemom Android) uporabljali tudi pri laboratorijskih raziskavah. Zato me je zanimalo, ali bi program, ki je dostopen brezplačno, imenovan Color Grab, ki preko telefonske kamere omogoča zajemanje in prepoznavanje barv, lahko bil uporaben pri šolskem laboratorijskem delu in v kašnem obsegu?

¹Spektroskopija – veda, ki preučuje interakcije med materijo in elektromagnetnim valovanjem.

Spektrometrija – kvantitativno merjenje intenzitete elektromagnetnega valovanja.

² Podjetje Vernier je bilo pred 30 leti ustanovljeno z enim samim ciljem – izdelati programsko opremo in strojno opremo, s katero bi učencem in dijakom po vsem svetu omogočili sodoben raziskovalni pristop k učenju in poučevanju, in sicer na način, da s pomočjo računalnikov in vmesnikov ter z ustreznimi merilniki učenci/dijaki podatke zbirajo, jih analizirajo in interpretirajo (Vernier Software & Technology, 2017). Njihova oprema je namenjena šolam in je zato primerno oblikovana ter cenovno precej bolj dostopna kot običajna raziskovalna oprema oz. profesionalni UV-VIS spektrofotometri.

1.1 NAMEN INOVACIJSKEGA PREDLOGA

Namen tega inovacijskega predloga je razviti metodo, s katero bi lahko izkoristiti možnosti, ki jih ponujajo pametni telefoni z vgrajeno kamero. S pomočjo izbrane aplikacije, imenovane Color Grab³, jih lahko uporabimo kot merilne instrumente (spektrofotometre ali kolorimetre) pri laboratorijskem delu kemije, biologije in tudi fizike oz. celotnega naravoslovja.

1.2 HIPOTEZE

H1. Program za digitalni zajem barv Color Grab omogoča dovolj natančen zajem barv za izvajanje osnovnih spektrofotometričnih meritev, to je določanje koncentracije znane snovi. Na osnovi umeritvene premice bo mogoče izračunati koncentracijo snovi v vzorcu kot pri klasičnih UV-VIS spektrofotometričnih meritvah.

H2. Natančnost meritev bo slabša kot z referenčnim spektrofotometrom/kolorimetrom, vendar dovolj zanesljiva (ponovljivost dovolj velika), da so meritve veljavne.

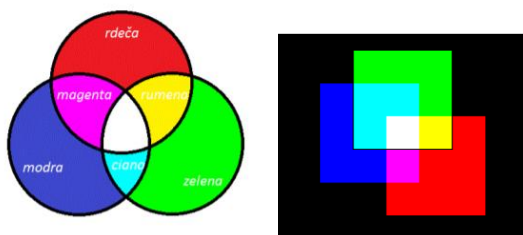
H3. Delo z aplikacijo Color Grab je enostavno in cenovno ugodnejše od klasičnih spektroskopskih meritev.

2 TEORETIČNO OZADJE

Barvni prostor, imenovan CIE XYZ, so leta 1931 potrdili v Mednarodnem zveznem odboru za barve (Potočnik, 2014). Aditivni barvni krog, ki se uporablja v ekranih računalnikov, televizorjev in tudi telefonih, kot osnovne barve pozna rdečo (**red**), zeleno (**green**) in modro (**blue**) – (**RGB**); vse ostale barve dobimo z aditivnim⁴ mešanjem teh. Če vse barve zmešamo, dobimo belo barvo.

³ Na spletu obstajajo številni podobi programi, npr.: Adobe Capture CC, Adobe Photo shop, Photo Studio PRO, Photo Suite 4 Pro, AMazing Fashing itd. (opomba avtorja).

⁴ Poznamo še subtraktivno mešanje barv, pri čemer kot osnovne barve nastopajo cian, magenta in rumena (Kolak, 2016).

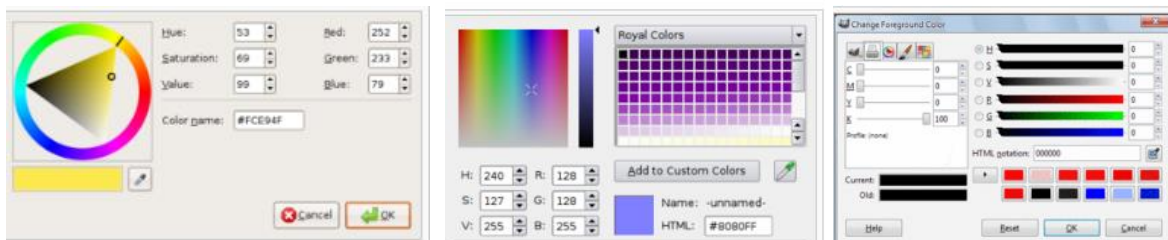


SLIKA 1 – BARVNI KROG RGB (MAROŠEVIČ, 2015) IN PRIKAZ ADITIVNEGA MEŠANJA BARV (KOLAK, 2016)

Poleg RGB ustvarjanja barv je v praksi pogost način uporabe 3D koordinatnega sistema, ki upošteva odtenke (X os), nasičenost (Y os) in svetlost (Z os). To pomeni, da barvni prostor ponazorimo s podmnožico 3D kartezičnega koordinatnega sistema, ki ji rečemo barvni model. Tako lahko določeno barvo opišemo s števkami ali besedami (Kolak, 2016). Ta način prikazovanja vključuje dva najpogostejša formata za izbiro barv, to sta HSL in HSV, ki sta predstavljena v nadaljevanju.

2.1 PROGRAMI ZA ZAJEM BARV

Orodje za barvo, izbirnik oz. selektor barv v aplikaciji, je pripomoček, ki je običajno vključen v grafično programsko opremo ali dostopen na spletu. Uporablja se za izbiro določene barve ali pa da ustvari barvne sheme (Feisner s sodel., 2014). V najpreprostejši obliki nam ponuja tri drsnike, ki nadzorujejo posamezne attribute neke barve. Večina nam ob tem ponuja še dvodimenzionalni model (prerez) z drsnikom, ki nadzoruje, kateri del prereza se kaže. Nekaj takšnih primerov je prikazanih na sliki 2.



SLIKA 2 – ZAJEM ZASLONA ZA *GTK+* (LEVO), *QT* (SREDINA) IN *GUMP* (DESNO) PROGRAMOV ZA ZAJEM BARV

Dandanes skoraj vsak računalniški selektor barve uporablja format **HSL** (H – hue (barvni odtenek); S – saturation (nasičenje) in L – lightnes (osvetlitev) ali **HSV** (H – hue (barvni odtenek); S – saturation (nasičenje) in V (value) – vrednost). Nekatere bolj zapletene različice so zasnovane tako, da nam omogočajo izbiro celotnih kompletov barv, svoje predloge pa osnujejo na kompatibilnih barvah v formatih HSV ali HSL in odnosu med njimi (Tenders, 2008). Večina spletnih aplikacij uporablja formata HSL in HSV (Tanek s sodelavci, 2008).

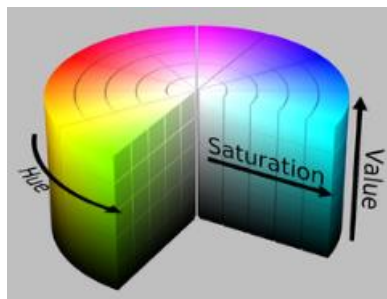
HSL in HSV formata se lahko uporabljata tudi za definiranje gradientov pri vizualizaciji podatkov, kot npr. v zemljevidih ali medicinskih slikah. Kot primer navajamo popularen GIS (geografski informacijski sistem), program, ki uporablja po meri izbrane HSV gradiente za številčne geografske podatke (ESRI, 2010).

Osnovni namen sistema HSV in podobnih sistemov za analizo barv, pa tudi njegov trenutno najpogostejši način uporabe, so orodja za izbiro barve, kot je npr. program *Slikar*.

2.2 OSNOVNI PRINCIPI BARVNEGA MODELA HSV

HSV barvni model je bil ustvarjen leta 1987 in predstavlja nelinearno transformacijo RGB barvnega kroga. Uporablja se predvsem v grafičnih programih (Kolak, 2016).

HSV format predstavlja cilindrično geometrijo modela, kjer se odtenek (*hue*), ki je kotna dimenzija, začne na rdeči osnovni barvi (pri 0°), nadaljuje skozi zeleno osnovno barvo (pri 120°) in modro osnovno barvo (pri 240°) in se nato vrne do rdeče (pri 360°).

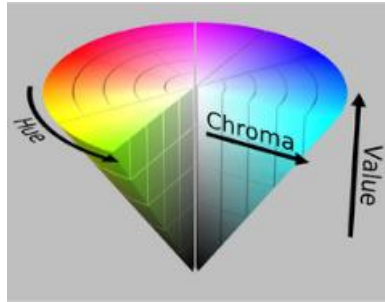


SLIKA 3 – HSV GEOMETRIJA (JOBLOVE IN GREENBERG'S (1978))

S – nasičenje predstavlja delež sivine v barvi. Manjša kot je nasičenost, več je sivine v barvi. V – vrednost predstavlja svetlost in lahko zavzema vrednosti od 1 do 100 %.

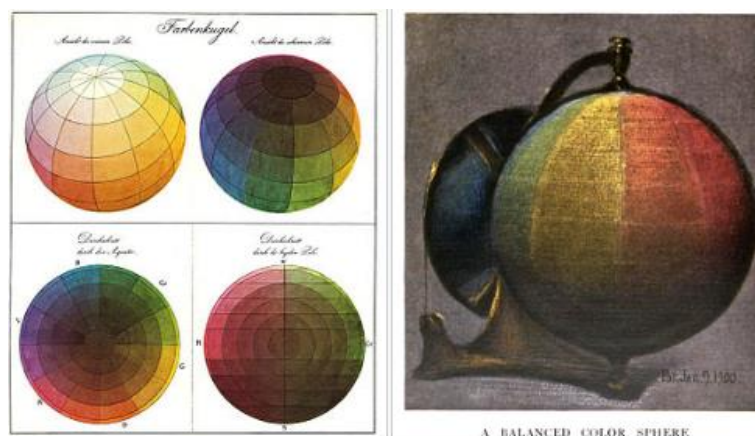
Osrednja vertikalna os vsebuje nevtralne, akromatične oz. sive barve, ki obsegajo črno (pri svetlosti 0 oz. vrednosti 0) na dnu, pa vse do bele (svetlost 1 oz. vrednost 1) na vrhu. Aditivne primarne in sekundarne barve – rdeča, rumena, zelena, cian, modra in magenta – in linearne mešanice med sosednjimi pari barv, včasih imenovanih tudi čiste barve, so razporejene okoli zunanjega roba cilindra s nasičenostjo 1. V tem formatu dobimo pri mešanju teh barv z belo t. i. *tinte*, pri čemer se zmanjša nasičenost, pri mešanju s črno pa dobimo t. i. *odtenke*, pri čemer se nasičenost ne spremeni. Ker so te definicije nasičenosti vedno sprejete kot popolnoma nasičene, so sprte z intuitivnimi načini prikazovanja barvne čistosti, zato se

pogosto kot model nariše stožec (Slika 4), pri katerem za radialno (kotno) dimenzijo vzamemo t.i. kromo namesto nasičenosti (saturacije). Da je zmeda še večja, tovrstni modeli zmotno označujejo to kotno dimenzijo za saturacijo, s čimer zabrišejo razliko oz. mejo med saturacijo (nasičenost) in kromo. HSV format zaradi te specifične prikaza standardnega modela imenujemo »heksakonalni model« (Hanbury, 2008).



SLIKA 4 – STOŽEC KOT NAČIN PRIKAZA HSV GEOMETRIJE (HANBURY, 2008)

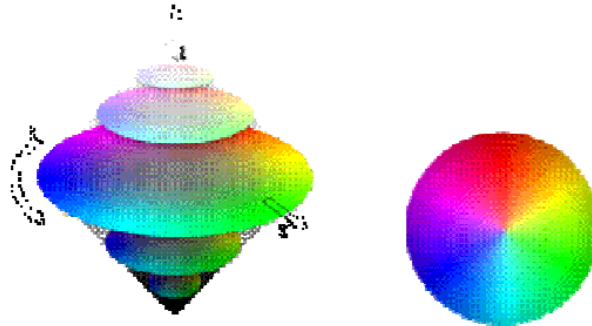
Avtorji formata HSV še zdaleč niso bili prvi, ki so si zamisli prikaz barv v konični oz. sferični obliki, z nevtralnimi barvami, ki potekajo od črne do bele po centralni osi, in odtenki, ki ustrezajo kotom okoli te glavne osi. Podobne ureditve obstajajo že od 18. stoletja. Dva izmed najvplivnejših starejših modelov sta Farbenkugel (barvna krogla) Philippa Otta Runga (leta 1810) in Munsellov barvni sistem iz zgodnjega 20. stoletja. Albert Munsell je sferične modele prvič predstavil v knjigi iz leta 1905 z naslovom Barvna notacija, vendar je barvo-tvorne attribute želel razvrstiti v ločene dimenzije, ki jih je poimenoval odtenek, vrednost in kroma. Po natančnih meritvah zaznavnih odzivov je spoznal, da nobena simetrična oblika ne bi bila ustrezna, zato je svoj sistem preoblikoval v nerazpoznavni madež (Landa in Fairchild, 2005).



SLIKA 5 – RUNGOVA FARBENKUGEL, 1810, IN (DESNO) MUNSELLOVA URAVNOTEŽENA BARVNA SFERA 1900, IZ BARVNE NOTACIJE 1905 (NICKERSON, 1976)

2.3 OSNOVNI PRINCIPI BARVNEGA MODELA HSL

HSL prostor lahko opišemo kot barvni storž. Gre za nelinearno predstavitev, kjer vrh storža predstavlja belo barvo, spodnji del pa črno barvo. Parameter kota predstavlja barvni odtenek, razdalja od osi ustreza nasičenju, razdalja med vrhovi pa svetlost (Slika 6).



SLIKA 6 – PREDSTAVITEV HSL BARVNEGA PROSTORA Z DVOJNIM STORŽEM (LEVO) IN BARVNI KROG Z ODTENKI, RAZDELJEN NA 360 DELOV (DESNO) (KOLAK, 2016).

Vrednosti osnovnih barv (Hue) v barvnem krogu so:

- ✓ Rdeča: 0 (360)
- ✓ Zelena: 120
- ✓ Modra: 240

Nasičenje (v %) predstavlja količino sivine, ki je prisotna v barvi. 100 % je čista barva. Svetlost barve se izraža v odstotkih – 0 % črna in 100 % bela.

2.4 SLOVARČEK OSNOVNIH POJMOV

ODTENEK

Je atribut vidnega zaznavanja, zaradi katerega je opazovano območje na videz podobno eni izmed zaznanih osnovnih barv (rdeča, rumena, zelena in modra) ali pa kombinaciji dveh od teh barv (Smith in Ray, 1978).

NASIČENOST

Je »barvitost stimulanta relativno na njegovo svetlost«. Svetlost in barvitost sta absolutni meritvi, ki običajno opredeljujeta spektralno porazdelitev svetlobe ob vstopu v oko. Medtem sta barvna svetlost barve in krome merjeni relativno na neko belo točko in sta zato posledično uporabljeni za opisovanje barvnih površin. Kljub potencialnim spremembam v svetlosti in barvitosti zaradi različnih osvetlitev ostaneta dokaj konstantni. Nasičenost je lahko definirana kot razmerje med barvitostjo in svetlostjo ali razmerje med kromo in barvno svetlostjo (Smith in Ray, 1978).

SVETLOST

Je definirana z deležem sivine v barvi.

3 KVALITATIVNE RAZISKAVE O UPORABI MOBILNE TEHNOLOGIJE V SREDNJIH ŠOLAH

Žnidaršičeva in Bohova (2014, v zborniku Mednarodne konferenca EDUvision) v svoji pilotni raziskavi, ki je vključevala tudi vprašanje, ali dijaki samostojno e-učenje v kemiji sprejemajo kot primerno za gimnazijsko izobraževanje, ugotavljata, da na zadovoljnost dijakov s samostojno e-učno uro najmočnejše vpliva računalniška pismenost dijakov oz. njihova predhodna računalniška znanja, ostali dejavniki pa imajo manjši vpliv.

Tomac Stanojeva (2014, v zborniku Mednarodne konferenca EDUvision) v svoji pilotni raziskavi ugotavlja, da so dijaki navdušeni nad uporabo mobilnih naprav pri pouku, kar pa ne velja za učitelje, ki so še vedno skeptični ali zadržani.

Rožič (2014, v zborniku Mednarodne konferenca EDUvision) navaja način merjenja in shranjevanja emisijskih spektrov plinov s prosto dostopnim programom Spectral Workbench v kombinaciji s spektroskopom na optično prizmo in spletno kamero kot zelo uporabno orodje pri pouku fizike, še posebej astronomije.

Maroševićeva v svojem diplomskem delu (2015) predstavlja možnosti uporabe doma izdelanega spektrometra⁵ pri pouku fizike in izbirnih predmetov, ki ga lahko povežemo z računalnikom ali pametnim telefonom. Slabost njenega pristopa je dejstvo, da lahko podatke shranjujemo le v programu, dostopnem preko spleta. Umeritev je narejena s programom Spectral Workbench⁶. Vendar lahko podatke kadarkoli spreminjamo ali primerjamo z drugimi meritvami. Maroševićeva (2014) navaja še nekaj težav pri uporabi doma izdelanih spektrofotometerov, in sicer težave z izrisovanjem spektra (povezane z virom svetlobe) ter občutljivostjo in ločljivostjo kamere, ki jo je potrebno uporabljati.

⁵ Navodila za izdelavo najdemo na spletni strani: <https://publiclab.org/dashboard> (dostopno: 5. 11. 2016).

⁶ Več na: <https://spectralworkbench.org/> (dostopno: 5. 11. 2016).

Savec Ferkova (2014, v zborniku Mednarodne konferenca EDUvision) ugotavlja, da ima bistven pomen za uporabo IKT podporno šolsko okolje, predvsem učitelji. Njihov interes in njihova prepričanja so bistvena za integracijo IKT v redni pouk. Kako zelo pomembno je to, v svoji raziskave pove Jurič (2015), ki navaja, da je porast napredne, zmogljive in cenovno dostopne mobilne tehnologije v zadnjih letih vodil v številne inovacije na področju medicine, javnega zdravja in druga področja človekovega dela.

4 PREDSTAVITEV DELOVANJA APLIKACIJE COLOR GRAB IN KORELACIJA Z DELOVANJEM SPEKTROFOTOMETRA

Aplikacijo Color Grab je ustvarilo podjetje Loomatix (ustanovljeno leta 2012), ki se ukvarja izključno z izdelavo aplikacij za prepoznavo barv. Njihov namen je pomoč malim in srednje velikim podjetjem, ki se ukvarjajo z notranjim oblikovanjem, grafičnim dizajnom, znanstvenimi raziskavami, izdelavo barv in lakov, razvojem programske opreme ter s pomočjo barvno slepim ljudem.

Aplikacija Color Grab nam omogoča zajemanje in digitaliziranje barv iz okolice na preprost način, saj uporabimo le kamero, ki jo telefoni že imajo, in jo namerimo na objekt, ki ga analiziramo. S programom posnamemo barvno sliko objekta. V nasprotju z mnogimi podobnimi programi nam ta aplikacija zagotavlja učinkovito zajemanje z vseh površin (npr. računalniški zaslon, oddaljeni objekti in tekočine), ne le s preprostih enotnih, trdnih površin. Obenem lahko barve zajemamo tudi iz fotografij. Shranimo lahko izjemno veliko število vzorcev. Aplikacija uporablja patentirane algoritme, ki kar najbolje izkoristijo obstoječo opremo (predvsem kamero) pametnega telefona, nato pa zajete barvne vzorce definira po različnih formatih definiranja barv, kot so že predstavljeni RGB, HSV, HSL in mnogi drugi.

Zakaj je takšna aplikacija lahko uporabna za spektrofotometrične meritve?

Absorpcijski spektrofotometer je naprava, ki meri intenziteto žarka, ki gre skozi vzorec, ter jo primerja z intenziteto vpadnega žarka. Valovno dolžino merimo na filtru (fotometru), monokromatorju, uklonski mrežici in prizmi. V stekleno ali plastično kiveto damo vzorec za merjenje spektra. Detektor pretvori EMV v impulz, primeren za detekcijo. Fotonski detektorji (fotocelice, fotopomnoževalke, silicijeve fotodiode itd.) so detektorji, ki omogočajo sočasno merjenje absorbance pri vseh valovnih dolžinah.

Absorpcijski zakon ali Beer-Lambertov zakon opisuje absorpcijo svetlobe pri prehodu skozi obarvano raztopino oz. ne povsem prozorno snov. Oslabitev vpadnega žarka (dI) v tanki plasti je premo sorazmerna debelini te plasti (dx) in jakosti vpadle svetlobe (I); sorazmernostni koeficient imenujemo absorpcijski

koeficient (μ). Absorpcijski koeficient določene raztopine je odvisen od valovne dolžine svetlobe (λ) in koncentracije topjenca (c) (Vončina Brodnjak, 2006):

$$dI = -\mu(\lambda, c)I dx.$$

Za nizke koncentracije obarvanih snovi v transparentnem topilu velja, da je absorpcijski koeficient premo sorazmeren koncentraciji snovi, ki povzroča obarvanost (c):

$$\mu = k(\lambda)c.$$

Beer-Lambertov zakon velja le za nizke koncentracije (velikostni razred $\approx 10^{-3}M$), saj pri večjih koncentracijah zaradi spremembe lomnega količnika in medmolekulskih interakcij zveza ni več linearna. Pri nizkih koncentracijah velja (Vončina Brodnjak, 2006):

$$A = \log(I_0/I) = a * b * C = -\log T$$

$$T = (I / I_0)$$

Legenda:

A = absorbanca

a = absorptivnost [L/(cm·g)]

b = dolžina svetlobne poti [cm]

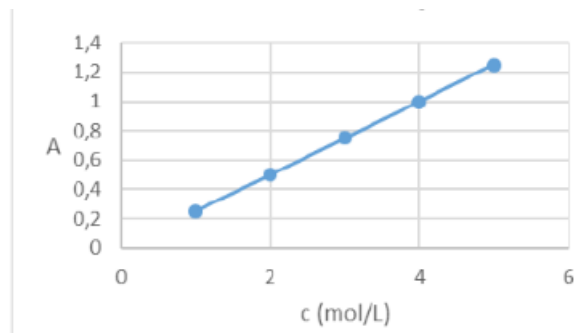
C = koncentracija [g/L]

I_0 = intenziteta vpadne svetlobe

I = intenziteta izhodne svetlobe

T = prepustnost (transmitanca)

V kolikor bi zajem barve (ene od treh vrednosti) dopuščal, da barvo opišemo številčno, bi lahko (tako kot pri spektrofotometričnih meritvah) narisali umeritveno premico (absorbanca proti koncentraciji oziroma ena od HSL vrednosti proti koncentraciji) in na ta način določili koncentracijo vzorca, ki ga preučujemo. Če v grafu 1 absorbanco (A) zamenjamo za S (saturation=nasičenost), bi graf številčno izgledal drugače, vendar bi ujemanje med točkami še vedno moralo biti linearno.



GRAF 1 – UMERITVENA PREMICA (SHEMATIČEN PRIKAZ).

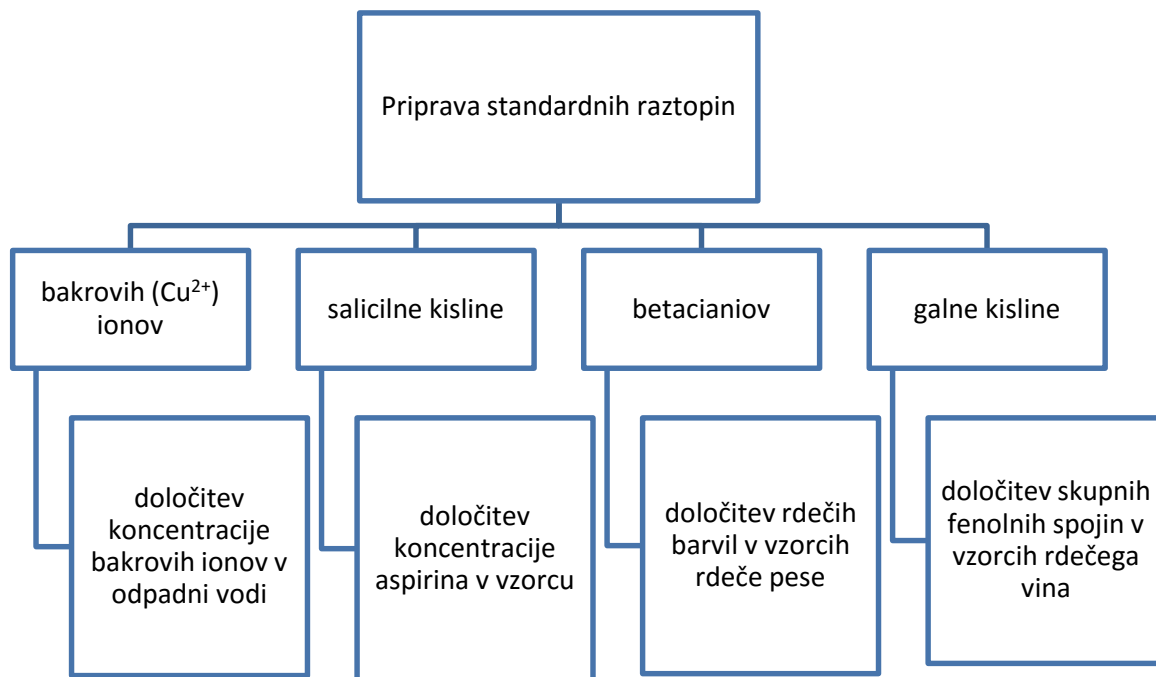
4 PRAKTIČNI DEL

Praktični del smo si zamisli kot serijo poskusov, kjer je potrebna priprava umeritvene premice in na tej osnovi določanje koncentracije izbrane snovi v vzorcu. Izbrali smo poskuse, v katerih so bile vključene:

- a) modelne raztopine (raztopina bakrovih(II) ionov),
- b) analize produktov šolskih laboratorijskih sintez (analiza aspirina),
- c) raziskave dijakov naše šole, ki so vključevale uporabo spektrofotometra (določanje skupnih fenolnih spojin v vzorcih vina in betacianinov v vzorcih rdeče pese).

V vseh poskusih smo uporabili za določanje koncentracij snovi spektrofotometer ali kolorimeter (Veriner) ter vzorce v kivetah izmerili še s pametnim telefonom in aplikacijo Color Grab. Največ časa smo porabili za prvo serijo meritev, saj je bilo potrebno optimizirati koncentracijsko območje za dve povsem različni merilni napravi in seveda metodo dela s Color Grab izvesti na način, da se je istočasno spreminjalo čim manj parametrov.

4.1 NAČRT DELA



ORGANIGRAM 1 – PREDSTAVITEV PREUČEVANIH VZORCEV

Vse meritve smo izvajali s pomočjo Verinerjevega spektrofotometra (SpectroVIS) ali kolorimetra (Vernier), ki sta služila kot kontrolna in primerjalna metoda za aplikacijo Color Grab.

4.2 KEMIKALIJE IN LABORATORIJSKI PRIBOR

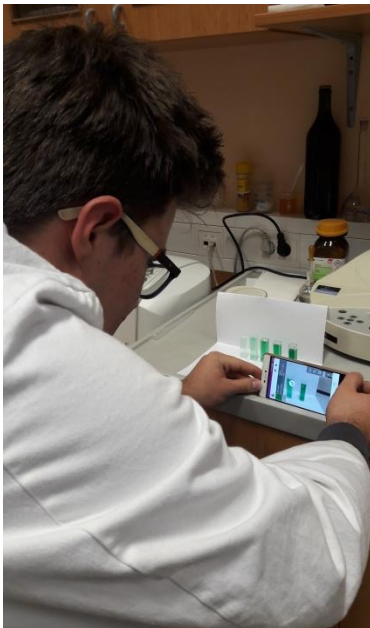
- prenosni računalnik s programsko opremo LoggerPro (4.10.1)
- vmesnik Vernier (za kolorimeter)
- plastične kivete s pokrovčki ($l=1\text{cm}$)
- 250 mL čaše (2x)
- 100 mL merilne bučke (6x)
- 10 mL polnilne pipete ($\pm 0,04\text{ mL}$)
- 50mL polnilne pipete ($\pm 0,1\text{ mL}$)
- salicilna kislina ($\text{C}_6\text{H}_4(\text{OH})\text{CO}_2\text{H}$ (Aldrich; >99 %)
- galna kislina (Sigma, >99 %)
- raztopina $0,025\text{ molL}^{-1}\text{ Fe}(\text{NO}_3)_3$ (Sigma-Aldrich; >98 %)
- deionizirana voda (šolski laboratorij)
- nekaj kristalov aspirina, ki so ga sintetizirali pri redni šolski vaji dijaki 3. letnikov
- birete, 50 mL ($\pm 0,05\text{ mL}$)
- metanolni vzorci ekstraktov rdeče pese

- vzorci rdečih vin
- F-C reagent za določanje skupnih fenolnih spojin (Sigma Aldrich, 99 %)



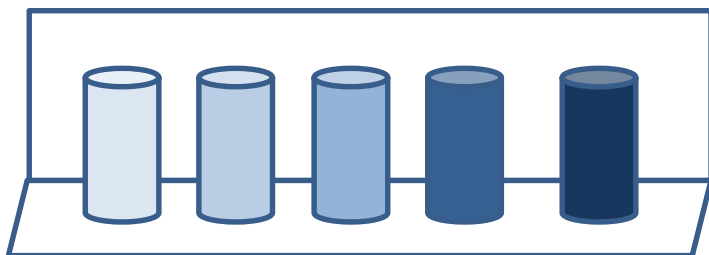
SLIKA 7 – KOLORIMETER IN SPEKTROFOTOMETER, UPORABLJENA V RAZISKAVI

4.2.1 OPIS DELA S COLOR GRAB APLIKACIJO



SLIKA 8 – DELO S COLOR GRAB APLIKACIJO NA ANDROIDNEM TELEFONU

Za meritve z aplikacijo Color Grab smo si pripravili ustrezno belo podlago. Kivete za umeritveno premico postavimo na belo podlago (označena mesta), kot je prikazano na sliki 9.



SLIKA 9 – POSTAVITEV KIVET ZA IZVAJANJE MERITEV Z APLIKACIJO COLOR GRAB

V razdalji 10 cm od kivete (kjer se konča bela podlaga) pod kotom 90° držimo telefon in vključimo program



Color Grab. V sredini zaslona se pojavi okence s krožcem. Če temu ni tako, pritisnemo na ikono s kamero. Ta del usmerimo v sredino kivete in pridržimo. Opazimo kolesce, ki se vrti, dokler program ne določi barve, njen odtenek in nasičenost (nekaj sekund). Nato se pojavi kljukica in zvok, da je slika zajeta. Pomaknemo se na naslednjo kiveto in postopek ponovimo. Ko zaključimo z vsemi meritvami, pritisnemo na ikono lončka s pisali in odčitamo HSV vrednosti. Vrednosti S (*saturation*) vpišemo kot meritev. Vsako meritev smo ponovili 3x in kot rezultat zapisali srednjo vrednost vseh treh meritev.

4.3 DOLOČANJE KONCENTRACIJE Cu^{2+} IONOV V ODPADNI VODI

Pet epruvet smo označili s števkami od 1 do 5 ter s pomočjo biret vanje natančno odmerili reagente, navedene v Preglednici 1.

PREGLEDNICA 1 – PRIPRAVA STANDARDNIH RAZTOPIN ZA DOLOČANJE KONCENTRACIJE BAKROVIH(II) IONOV

Oznaka epruvete	0,40 molL ⁻¹ CuSO ₄ (mL) ±0,05	Destilirana voda, mL, ±0,05	Koncentracija (molL ⁻¹)
1	2,00	8,00	0,080
2	4,00	6,00	0,16
3	6,00	4,00	0,24
4	8,00	2,00	0,32
5	10,00	0,00	0,40

Kolorimeter smo priključili na vmesnik, ki je ustrezno priključen na računalnik, in s programom Logger Pro (verzija 4.10.1) obdelali rezultate. Kolorimeter smo najprej kalibrirali z destilirano vodo in za nadaljnje

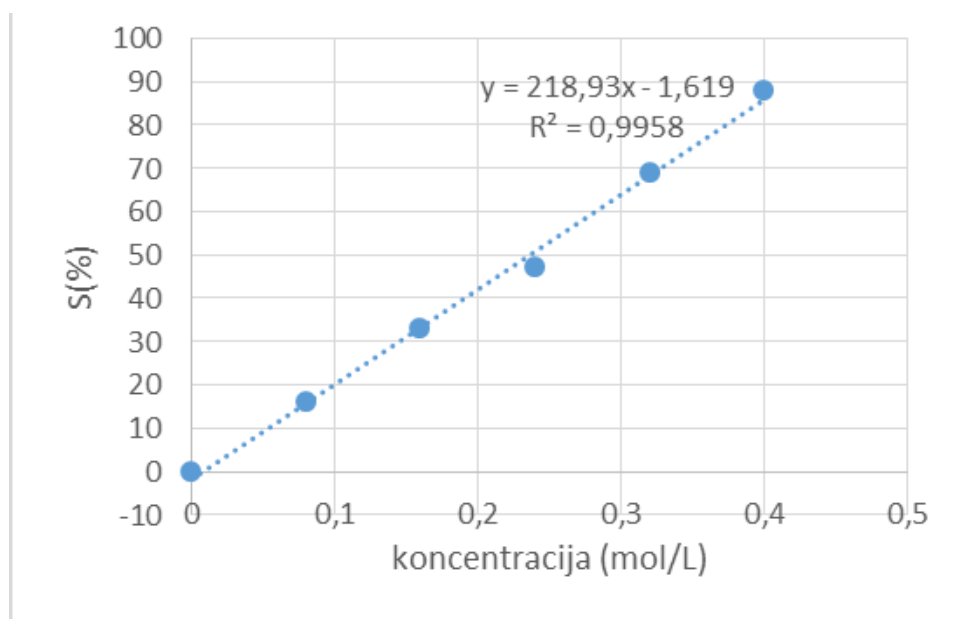
izvajanje meritev izbrali valovno dolžino 635 nm, kjer je raztopina pokazala najvišjo absorbanco. Nato smo izmerili absorbance vsem standardnim raztopinam iz Preglednice 1 in izrisali umeritveno premico.

Vse meritve smo ponovili še z aplikacijo Color Grab.

Sledila je meritev koncentracije bakrovih ionov v odpadni vodi⁷. Kiveto smo nekajkrat sprali z vzorcem, jo napolnili do 2/3 ter najprej izmerili absorbanco (kolorimeter) in nato še barvno nasičenost (z aplikacijo Color Grab). Na osnovi enačb umeritvenih premic smo izračunali koncentracijo bakrovih ionov v odpadni vodi.

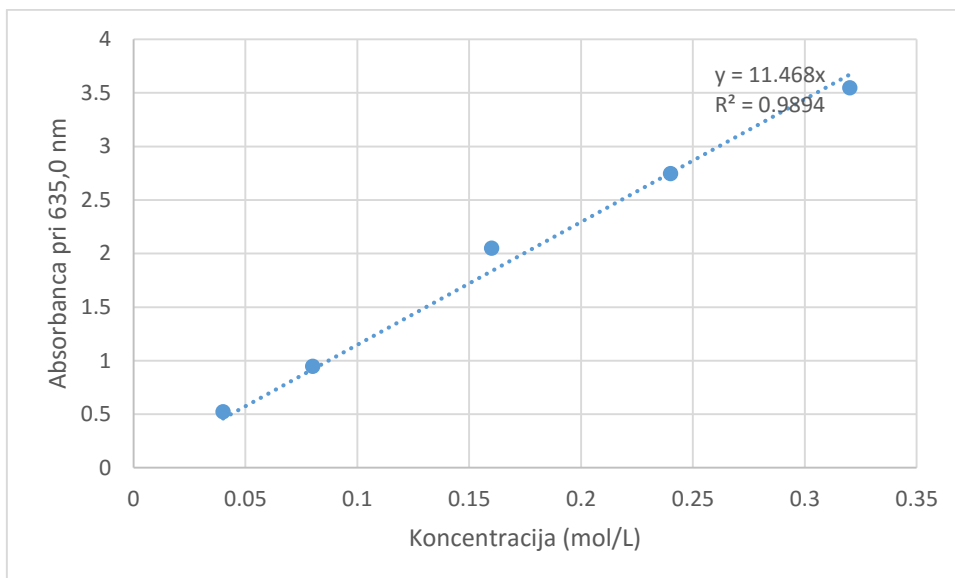
PREGLEDNICA 2 – PODATKI ZA UMERITVENO PREMICO (BAKROVI(II) IONI)

Koncentracija	S (nasičenost) (%)	A (λ_{635} nm)
0	0	0,524
0,08	16	0,948
0,16	33	2,050
0,24	47	2,748
0,32	69	3,550
0,40	88	Ni bilo mogoče izmeriti



GRAF 2 – UMERITVENA PREMICA ZA BAKROVE(II) IONE, DOLOČENA Z MERJENJEM BARVNE NASIČENOSTI Z APLIKACIJO COLOR GRAB

⁷ Odpadna voda je bila »umetno« pripravljena, ker na začetku nismo želeli imeti težav z interakcijami različnih ionov in snovi v odpadnih vodah.



GRAF 3 – UMERITVENA PREMICA ZA BAKROVE(II) IONE, DOLOČENA SPEKTROFOTOMETRIČNO

Meritve absorbance in barvne nasičenosti za odpadno vodo so prikazane v preglednici 3.

PREGLEDNICA 3 – MERITVE KONCENTRACIJE BAKROVIH IONOV V »REALNEM» VZORCU

Vzorec odpadne vode	Absorbanca, A (λ635nm)	S (%)
	0,850	16,3
Koncentracija Cu (II) ionov, (mol/L)	0,0741	0,0744

4.3.1 RAZPRAVA

Koncentracija bakrovih(II) ionov, ki smo jih pripravili, smo najprej želeli izmeriti spektrofotometrično, vendar Vernierjev spektrofotometer ni omogočal meritev nad koncentracijo 0,32 mol/L. Izmerjene absorbance so bile prevelike. Zato smo sprva pripravljene raztopine razredčevali do tistega koncentracijskega območja, ki je še omogočalo linearno soodvisnost med koncentracijo in absorbanco. Vendar se je izkazalo, da so koncentracije pod 0,04 mol/L problematične za meritve z aplikacijo Color Grab, saj je bil delež sivine v barvi previsok in zato ločljivost zelo slaba. Da bi rešili to težavo, smo namesto spektrofotometra uporabili Vernierjev kolorimeter, ki omogoča meritve le pri štirih valovnih dolžinah (430 nm, 470 nm, 565 nm in 635 nm). Ustrezno valovno dolžino izberemo tako, da pogledamo, kje je za dano raztopino absorbanca najvišja. Tako smo izbrali kot ustrezno valovno dolžino 635 nm in kolorimeter je omogočal meritve absorbanc tudi pri višjih koncentracijah bakrovih ionov, kar je bilo za uporabo aplikacije Color Grab primernejše. Obe umeritveni krivulji imata (za šolske pogoje) visok faktor ujemanja točk na premici (R^2), to je 0,996 za uporabo telefona in 0,989 pri uporabi kolorimetra. Posledično so bile tudi

meritve bakrovih ionov v vzorcu odpadne vode v istem velikostnem razredu in napaka meritev zelo majhna. Izračunana absolutna napaka meritve je $\pm 0,0003$ mol/L.

Uporaba pametnega telefona pri meritvah koncentracije bakrovih ionov je torej zagotovo primerna metoda določanja koncentracije v območju od 0,040 do 0,40 mol/L. Rezultati primerjalnih meritev s kolorimetrom kažejo na zanemarljivo majhna odstopanja. Pri tem je treba opozoriti, da smo vse meritve s telefonom izvajali z raztopinami, ki so bile v kivetah (plastične kivete za kolorimeter oz. spektrometer), kar pomeni, da je zunanja površina posod, v katerih so raztopine, ki so predmet opazovanja, ravna, gladka in povsem prosojna. Telefon je bil od kivet oddaljen 10 cm in postavljen v pravokotno pozicijo. Okvirček na kameri za zajem barve je pokrival celotno površino kivete, zato je program izmeril samo nasičenost barve v kiveti brez motenj okolice. Uporaba bliskavice ni potrebna. Običajna dnevna svetloba je dovolj za precej natančne meritve.

4.4 DOLOČITEV SKUPNIH FENOLNIH SPOJIN

Določitev skupnih fenolnih spojin je pogosta analitska metoda pri določanju antioksidativnih snovi v različnih vzorcih. Ena od naših raziskovalnih ekip je po metodi Singletona in Rossija (1965) določala skupne fenolne spojine v ekstraktih rdeče pese z Folin-Ciocalteuevim reagentom in druga skupne fenole v vzorcih vina. Obe raziskovalni skupni sta kot standard uporabili galno kislino. Kot je razvidno na sliki 11, so vse standardne raztopine obarvane od svetlo modre do temno modre barve. Izjema je kontrola – brez reagenta, kar je pomenilo, da je aplikacijo Color Grab smiselno uporabiti tudi za takšne primere meritev.

Vsi rezultati so podani kot ekvivalent galne kisline na liter vzorca, izmerjeni pri valovni dolžini 735,9 nm. Osnova za izris umeritve premice so podatki v Preglednici 4.

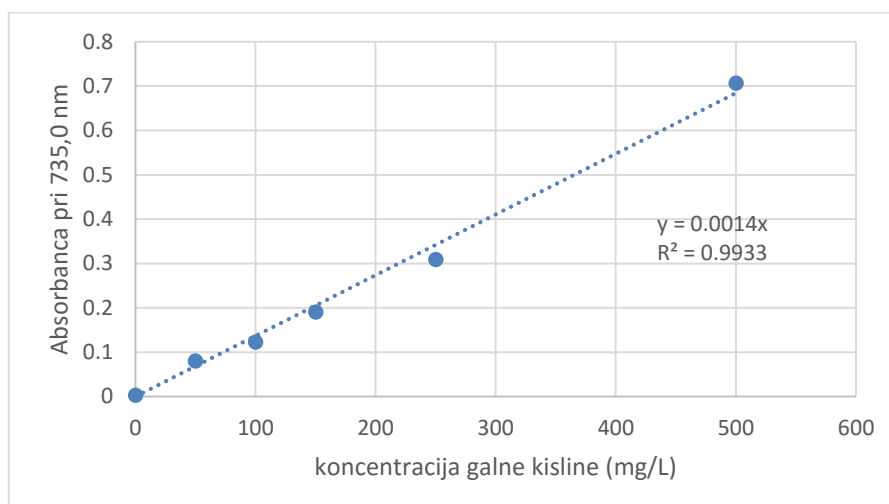
PREGLEDNICA 4 – GALNA KISLINA KOT STANDARD ZA IZRAČUN SKUPNE KOLIČINE FENOLNIH SPOJIN V EKSTRAKTIH RDEČE PESE.

Koncentracija (mg/L)	Absorbanca pri 753.8 nm (λ_{max})	HSV (S, %) ⁸
0	0,003	0
50	0,080	9
100	0,123	20
150	0,191	34
250	0,309	48
500	0,707	94

⁸ Povprečje treh meritev (opomba avtorja).

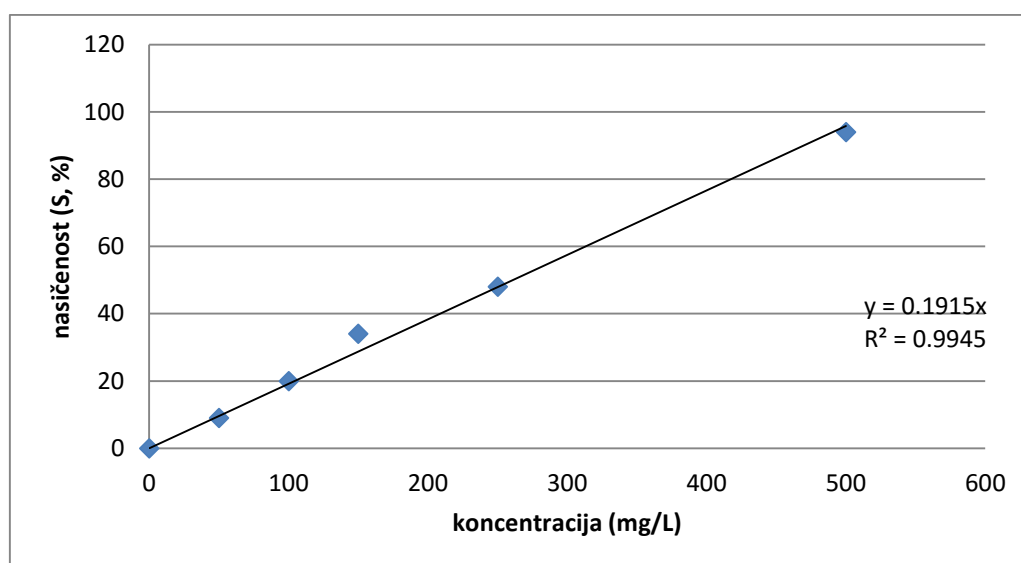


SLIKA 9– STANDARDNE RAZTOPINE GALNE KISLINE



GRAF 4 – UMERITVENA PREMICA ZA SKUPNO VREDNOST FENOLNIH SPOJIN V EKSTRAKTU RDEČE PESE (DOLOČENA SPEKTROFOTOMETRIČNO)

S pomočjo enačbe: $y = 0,0014x$ smo izračunali vsebnost vseh fenolnih spojin v ekstraktih rdeče pese. Rezultati so podani v Preglednici 2. Rezultate smo primerjali z izračunom podatkov, pridobljenih z aplikacijo Color Grab.



GRAF 5 – UMERITVENA PREMICA ZA SKUPNO VREDNOST FENOLNIH SPOJIN V EKSTRAKTU RDEČE PESE (COLOR GRAB)

PREGLEDNICA 5 – KONCENTRACIJE SKUPNIH FENOLNIH SPOJIN V EKSTRAKTIH (E OD 1 DO 5) RDEČE PESE

Oznaka vzorca ekstrakta	A ($\lambda_{735\text{nm}}$)	Koncentracija (mg/L)	S(%) ⁹	Koncentracija (mg /L)	Razlika v koncentraciji (%)
E1	0,0741	52,9	10,2	53,3	0,8
E2	0,0120	8,6	1,7	8,9	3,0
E3	0,0490	35,0	6,7	35,0	0
E4	0,0510	36,4	7,0	36,5	0,3
E5	0,0721	51,5	9,7	50,7	1,5
kontrola	0,0030	0,0	0,0	0,0	0

4.4.1 RAZPRAVA

Meritve koncentracije skupnih fenolnih skupin v ekstraktih rdeče pese smo pridobivali s pomočjo Vernierjevega spektrofotometra, za katerega smo kot maksimalno valovno dolžino izbrali 735,0 nm. Aplikacijo Color Grab smo uporabljali v istih delovnih pogojih, torej raztopine vzorcev v standardnih plastičnih kivetah, ki so bile postavljene na čisto belo ozadje; telefon je bil odmaknjen 10 cm in postavljen pod pravim kotom, z merilnim okvirčkom pa smo pazili, da smo zajemali le barvo raztopine in ne okolice. Vrednost R^2 je bila znova zelo visoka, kar potrjuje, da so bile standarde raztopine dobro pripravljene in da oba merilna instrumenta nista imela težav z natančnostjo meritev. Pri uporabi spektrofotometra je bila vrednost $R^2=0,993$, program Color Grab je dosegel vrednost 0,995.

Izračun napak pokaže, da se razlike v izračunanih koncentracijah skupnih fenolnih spojin v ekstraktih rdeče pese (izražene kot ekvivalent galne kisline) gibljejo v območju od 0,3 % do 3,0 %, kar ocenjujemo kot izjemno dobro ujemanje. Poudariti velja, da je ves čas šlo za isti odtenek modre barve, kar je pripomoglo k popolni rabi programa Color Grab.

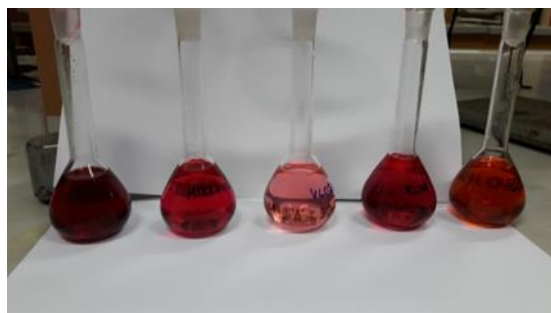
Opazili smo namreč, da sprememba odtenka barve (svetlo zelena → svetlo modra; zelena → rumena; rdeča → rjava itd.) zelo moti meritve. Aplikacija Color Grab deluje odlično le, če je barvni odtenek (*hue*) isti.

4.5 DOLOČITEV SKUPNIH BETACIANINOV V VZORCIH RDEČE PESE

Naslednji praktični preizkus aplikacije Color Grab je bil poskus določitve skupnih betacianinov (rdečih barvil v rdeči pesi). Raziskovalna skupina je pripravila različne ekstrakte in jih izpostavila različnim vrednostim pH. Vse to z namenom, da ugotovijo, kako se spreminja količina posameznih rdečih barvil v ekstraktih. V tem primeru aplikacija Color Grab ni bila več primerno orodje, saj so se barve betalainov v odvisnosti od pH preveč spreminjale. Isti barvni odtenek je bilo mogoče opazovati le pri pH 4 do pH 8. V

⁹ Povprečje treh meritev (opomba avtorja).

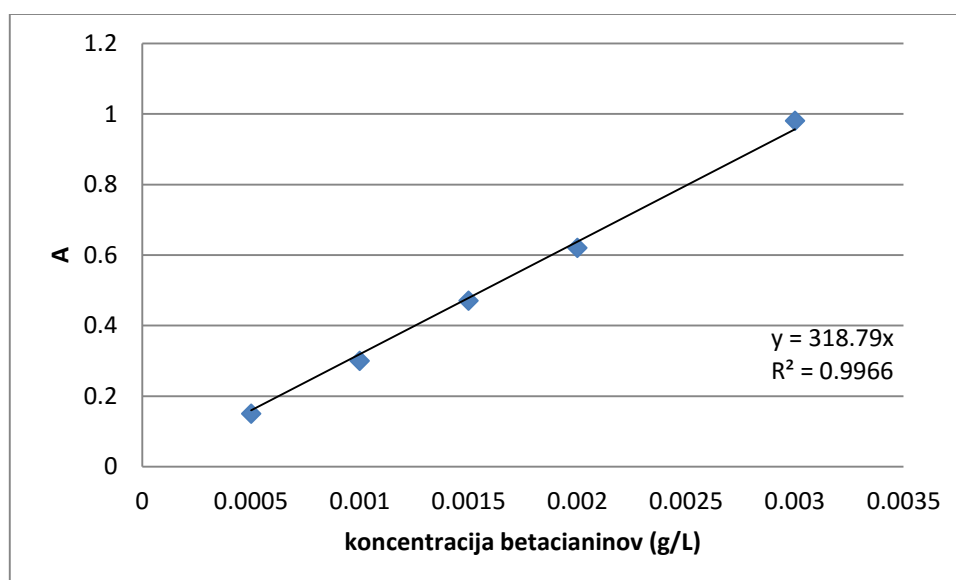
tem območju je aplikacija Color Grab delovala dobro, izjema so bile meritve na realnih vzorcih, pri katerih najnižjih koncentracij nismo mogli več določiti (5×10^{-4} g/L).



SLIKA 10 – EKSTRAKTI RDEČE PESE

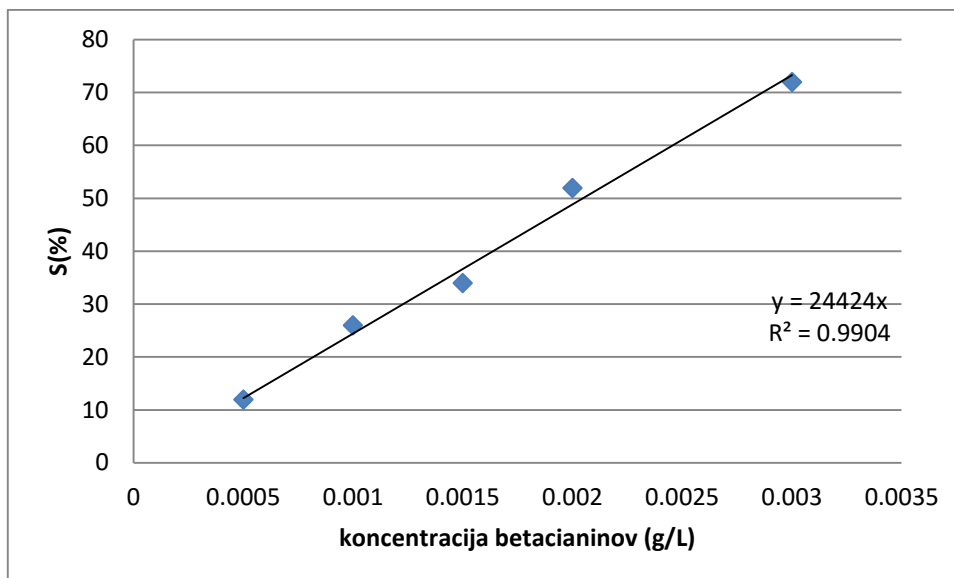
PREGLEDNICA 6 – STANDARDNE RAZTOPINE BETACIANINOV IN SPEKTROFOTOMETRIČNE MERITVE ABSORBANC PRI $\lambda_{600,3}$ nm ter MERITEV Z APLIKACIJO COLOR GRAB

STANDARDNA RAZTOPINA betacianina (koncentracija, g/L)	A ($\lambda_{600,3}$ nm) spektrofotometer	S(%) ¹⁰ Color Grab
0,0005	0,15	12
0,0010	0,30	26
0,0015	0,47	34
0,0020	0,62	52
0,0030	0,98	72



GRAF 6 – UMERITVENA PREMICA ZA BETACIANINE (SPEKTROFOTOMETRIČNO)

¹⁰ Povprečje treh meritev (opomba avtorja).



GRAF 7 – UMERITVENA PREMICA ZA BETACIANINE (COLOR GRAB)

PREGLEDNICA 7 – MERITVE BETACIANINOV V VZORCIH RDEČE PESE, DOLOČENIH Z APLIKACIJO COLOR GRAB IN SPEKTROFOTOMETRIČNO

Oznaka vzorca ekstrakta	S(%) ¹¹	Koncentracija (g/L)	A	Koncentracija (g/L)	Razlika v izračunanih meritvah (%)
E1	1	0,0004	0	0 (prenizko)	-
E2	28	0,0011	0,32	0,0010	9,0
E3	36	0,0015	0,40	0,0013	13,3
E4	48	0,0020	0,54	0,0017	1,0
E5	66	0,0027	0,81	0,0025	7,4

4.5.1 RAZPRAVA

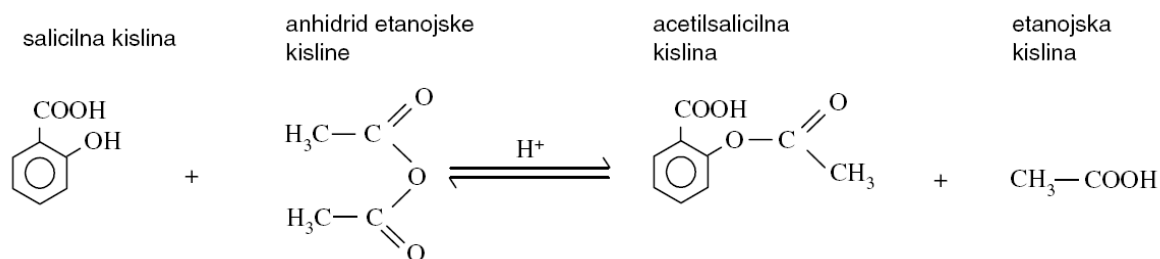
Meritve betacianinov v rdeči pesi so bile opravljene spektrofotometrično, torej s pomočjo Vernierjevega spektrofotometra. Meritev absorbanc standardnih raztopin pri valovni dolžini 600,3 nm so dale visoko vrednost R^2 (0,990) in tudi meritve z aplikacijo Color Grab so dale zelo dobro umeritveno premico (R^2 znaša 0,997). Tudi tukaj smo vse meritve izvajali v plastičnih kivetah, ki so dale veliko večjo ponovljivost kot epruvete. Predvidevamo, da je k temu pripomogel drugačen lom svetlobe. Pomembno je dejstvo, da se pri nizkih vrednostih pH (<2) barva ekstrakta spremeni, in sicer v našem primeru iz rdeče preko rjave v rumeno, kar pomeni, da meritve s programom Color Grab niso več primerne. Ta program lahko daje ustrezne rezultate le pri barvnih odtenkih, ki izhajajo iz iste barvne družine. To je ena od največjih omejitev uporabe aplikacije Color Grab. Pri tem poskusu smo opazili, da meritev z aplikacijo Color Grab dosega

¹¹ Povprečje treh meritev (opomba avtorja).

tudi do 13,3 % napako, kar je najvišje odstopanje, izmerjeno v seriji poskusov, ki v tem inovacijskem predlogu niti niso objavljeni v celoti.

4.6 DOLOČITEV KONCENTRACIJE SALICILNE KISLINE V ASPIRIN, SINTETIZIRANEM V ŠOLSKEM LABORATORIJU

Aspirin, kar je splošno ime za acetilsalicilno kislino, je zdravilo iz družine salicilatov in pogosto rabljeno kot analgetik (proti bolečinam), antipiretik (proti vročini) in protivnetno sredstvo. Deluje tudi kot antikoagulant (proti strjevanju krvi), dolgoročno uživanje manjših količin aspirina pa preprečuje srčni infarkt. V prometu je od leta 1899, čeprav so ga za zniževanje telesne temperature že dolgo pred tem uporabljali tudi Indijanci, ki so izvleček pridobivali iz skorje vrbe. Sinteza aspirina, prvič objavljena 1893 (Felix Hoffman), je tipična ravnotežna reakcija estrenja, zato jo izvajamo tudi v šolskem laboratoriju.



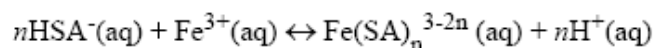
SLIKA 11 – SINTEZA ASPIRINA IZ SALICILNE KISLINE IN ANHIDRIDA ETANOJSKE KISLINE

Znanih je več postopkov pridobivanja aspirina, vendar smo pri redni šolski vaji uporabili zgoraj predstavljeno sintezo. Da bi se prepričali, kako čist aspirin smo dejansko pridobili, smo sintetiziranemu produktu z uporabo kolorimetra in telefona (Color Grab) določili delež nezreagirane salicilne kisline. Salicilna kislina (SA) daje z železovimi(III) ioni v kislem mediju modrovijolično obarvan kompleks, ki je predstavljen na sliki 12.



SLIKA 12 – MODROVIJOLIČEN KOMPLEKS Fe³⁺ IN SALICILNE KISLINE

Bolj kot je pH nevtralen, bolj rdeč je kompleks; v bazičnem postane oranžen. V kolikor sintetiziran aspirin še vsebuje primesi salicilne kisline, se bo obarvan kompleks pojavil tudi v primeru, ko produktu (aspirinu) dodamo železove(III) ione. S pomočjo Beer-Lambertovega zakona in meritev absorbance standardnim raztopinam salicilne kisline lahko natančno določimo delež nezreagirane salicilne kisline v vzorcu aspirina.



Tudi tukaj smo si najprej pripravili standardne raztopine salicilne kisline, kot je opisano v Preglednici 8.

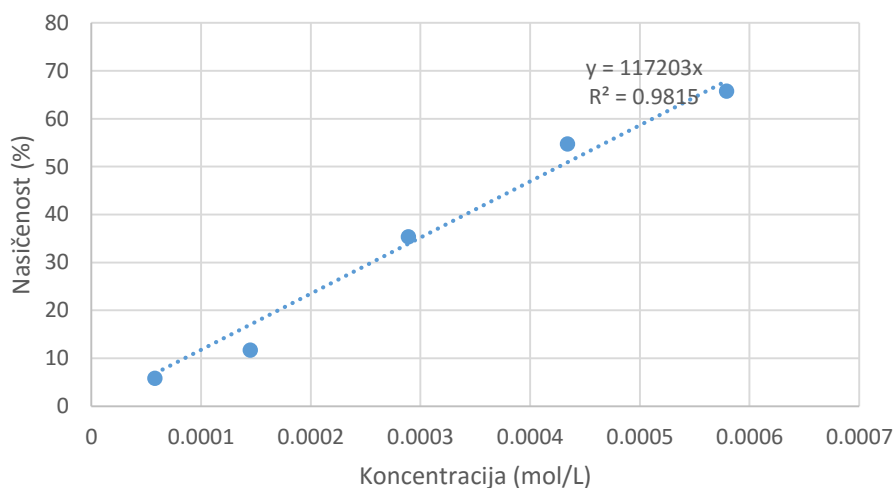
PREGLEDNICA 8 – PRIPRAVA STANDARDNIH RAZTOPIN SALICILNE KISLINE

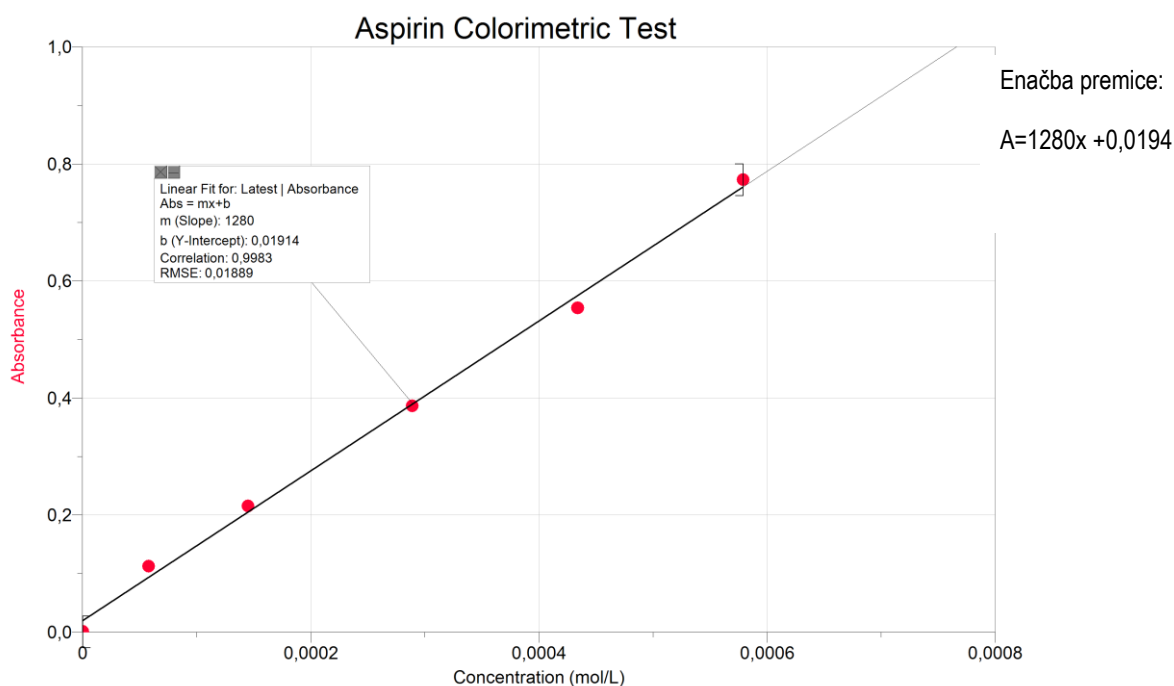
oznake	Standardna raztopina salicilne kisline (mL)	Destilirana voda (mL)	Koncentracija (molL ⁻¹)
1	10,00	0	0,000579 (5,79 x 10 ⁻⁴)
2	7,50	2,50	0,000434 (4,43 x 10 ⁻⁴)
3	5,00	5,00	0,000289 (2,89 x 10 ⁻⁴)
4	2,50	7,50	0,000145 (1,45 x 10 ⁻⁴)
5	1,00	9,00	0,000058 (5,8 x 10 ⁻⁵)

Sledila je kalibracija kolorimetra (Vernier) z destilirano vodo ter meritve absorbanc vseh pripravljenih raztopin. Meritve izvajamo v področju najvišje absorbance, to je pri 565 nm. Določitev koncentracije salicilne kisline z aplikacijo Color Grab je potekala tako kot pri vseh prejšnjih meritvah.

PREGLEDNICA 9 – MERITVE ABSORBANCE IN NASIČENOSTI ZA STANDARDNE RAZTOPINE SALICILNE KISLINE

Meritev	Koncentracija (molL ⁻¹)	Absorbanca(λ ₅₆₅ nm)	S (%)
1	0,000579 (5,79 x 10 ⁻⁴)	0,773	65,7
2	0,000434 (4,43 x 10 ⁻⁴)	0,554	54,7
3	0,000289 (2,89 x 10 ⁻⁴)	0,386	35,3
4	0,000145 (1,45 x 10 ⁻⁴)	0,215	11,7
5	0,000058 (5,8 x 10 ⁻⁵)	0,112	5,8





Testiranje vzorca aspirina je potekalo tako, da smo natehtali približno 0.40 gramov aspirina in ga prenesli v 250 mL merilno bučko. Dodali smo 10 mL 95 % etanola in raztopili aspirin. Zatem smo merilno bučko napolnili do oznake z destilirano vodo. 5 mL tako pripravljene raztopine smo prenesli v drugo 100 mL merilno bučko in do oznake dopolnili z 0,025M raztopino $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$. Raztopino smo dobro premešali in tako pripravljene raztopine izmerili absorbanco ter izračunali koncentracijo (Preglednica 10). Meritve smo nato ponovili še z aplikacijo Color Grab.

PREGLEDNICA 10 - IZRAČUN DELEŽA SALICILNE KISLINE V VZORCU ASPIRINA

	Meritev	
Masa vzorca aspirina (g)	0,400	0,400
Absorbanca /S (%) vrednost za vzorec aspirina	0,081	54
Množina salicilne kisline v vzorcu aspirina (mol)	$4,8 \times 10^{-5}$	$4,6 \times 10^{-5}$
Masa salicilne kisline v vzorcu (g)	0,066	0,064
Masa aspirina v vzorcu (g)	0,393	0,395
Odstotek aspirina v vzorcu (%)	98,3%	98,8%

4.6.1 RAZPRAVA

Analiza aspirina s spektrofotometrom in aplikacijo Color Grab je dala izjemno visoko ujemanje, vendar smo se ponovno soočili s problemom barve; barva vzorca, v katerem je bila koncentracija salicilne kisline nizka, je imela preveč rumenega odtenka (prevladujejo Fe(III) ioni) in spektrofotometer je tukaj v veliki prednosti. Ko smo vzorec aspirina zamenjali z neprečiščenim (večja vsebnost salicilne kisline), so bili rezultati z aplikacijo Color Grab mnogo boljši (natančnejši).

5 ZAKLJUČKI

Trenutna cena osnovnega Vernierjevega spektrofotometra za šolsko uporabo je 557 \$ (brez DDV) in kolorimetra 167 \$ (brez DDV). Cene proizvajalcev podobne opreme, namenjene za šolsko rabo, so praviloma višje. Vernierjevi spektrofotometri in kolorimetri so senzorji, ki za svoje delovanje potrebujejo programsko opremo (Logger Pro) in prikazovalnik podatkov (računalnik ali LabQuest). Vse to ceno te opreme le dviguje.

Aplikacija Color Grab potrebuje le pametni telefon (android) in deluje. Podatke lahko obdelamo ročno ali s pomočjo računalnika. S tega vidika je to eden najcenejših načinov, kako si izdelati umeritveno premico in preko nje izračunati koncentracijo znane snovi v vzorcu. Vendar bi bilo hudo pretirano, če bi trdil, da lahko na osnovi izvedenih poskusov enačimo kolorimetre/spektrofotometre in aplikacijo Color Grab. Aplikacija ima številne prednosti, vendar tudi zelo resne omejitve uporabe. Nekaj teh je navedenih v Preglednici 11.

V nalogi sem izbral poskuse, s katerimi sem želel prikazati širino možnih uporab te aplikacije. Povsod tam, kjer med delom z izbrano snovjo ni prišlo do spremembe barve, sem lahko aplikacijo uporabljal hitro in z veliko zanesljivostjo. Predvidevam, da bi z mešalnikom barv, ki ga aplikacija ima, lahko v prihodnje rešili tudi ta problem.

Natančnost meritev (primerjava s kolorimetrom ali spektrofotometrom) kaže, da v dobrih pogojih meritev z aplikacijo Color Grab naredimo do 5 % napako. Izjema so zelo nizke koncentracije (barvno zelo svetli odtenki) ali če barva ni enotna (primer rdeče pese). Takšna napaka meritev je za redno šolsko delo sprejemljiva, zato nameravamo v prihodnje razviti poskuse (kratke raziskave), ki bi bili primerni za delo v osnovni in srednji šoli.

Zaključim lahko, da aplikacija za digitalni zajem barv Color Grab omogoča dovolj natančen zajem barv za izvajanje osnovnih spektrofotometričnih meritev, to je določanje koncentracije znane snovi. Na osnovi umeritvene premice je mogoče (kot pri klasičnih UV-VIS spektrofotometričnih meritvah) izračunati koncentracijo snovi v vzorcu in s tem je prva hipoteza potrjena.

Natančnost meritev ni nujno slabša kot z referenčnim spektrofotometrom/kolorimetrom; odvisna je od spremembe barve, ne pa od njene nasičenosti. V primeru, da spremembe barve ni, je ta metoda zanesljiva, ponovljiva in omogoča visoko natančnost. V kolikor so raztopine blizu brezbarvnim, natančnost meritev drastično upade, zato je druga hipoteza le delno potrjena.

Delo z aplikacijo Color Grab je enostavno in cenovno izjemno ugodno, s čimer smo potrdili tudi 3. hipotezo.

PREGLEDNICA 11 – PREDNOSTI IN SLABOSTI UPORABE APLIKACIJE COLOR GRAB

Prednosti	Slabosti
Brezplačna aplikacija.	Uporabna le na androidnih napravah; iPhoni imajo druge aplikacije, ki jih je treba še preizkusiti.
Povezava z internetom ni potrebna, razen pri namestitvi aplikacije.	V zelo razredčenih obarvanih raztopinah (pod 10^{-3}) je delež sivine prevelik in meritve postanejo zelo nenatančne.
Hitre meritve, ki ne potrebujejo predhodne kalibracije aparature.	Močno koncentrirane raztopine prehitro dosežejo 100 % nasičenost in določitev koncentracije je mogoča le z razredčevanjem (podobna težava se pojavi tudi pri spektrofotometričnih meritvah).

Podatki se shranjujejo na grafično kartico telefona in jih lahko kadarkoli prenesemo in obdelamo.	Meritev je natančna le, če je barvni odtenek isti, kar ugotovimo z izpisom barve.
Primerljiva natančnost s šolskimi spektrofotometri ali kolorimetri.	Meritev je ponovljiva le, če je telefon postavljen pod pravim kotom in vedno v enaki oddaljenosti od snovi, ki ji določamo barvo.
Posebni svetlobni pogoji niso potrebni (običajna dnevna svetloba in bela podlaga).	
Potrebujemo zelo malo vzorca (cca 1cm ³).	
Uporabniku zelo prijazna tehnologija, saj ne zahteva nobenih posebnih znanj.	
Primerna oprema za terensko delo (npr. določanje barve kamnin).	
Podatke lahko delimo s potencialnimi uporabniki preko vseh medijev, ki jih telefoni omogočajo (e-mail, facebook, instagram ...).	

5.1 DRUŽBENA ODGOVORNOST

V razmerah, ko opremljanje laboratorijev in izobraževanje mladih pesti problem financ, je vsaka rešitev, ki za nižjo ceno ali celo zastonj prinese napredek, več kot dobrodošla. Opremljanje osnovnih in srednjih šol s sodobno didaktično opremo je v zadnjih letih zaradi slabše gospodarske situacije zastalo, zato je način dela s pametnim telefonom, ki ima naloženo aplikacijo Color Grab, priložnost z veliko potenciala. S svojo (omejeno) natančnostjo lahko nadomesti precej dražjo opremo. Aplikacija Color Grab je brezplačna, podatki pa neposredno shranjeni na telefonu. Izjemno majhno število otrok (podatkov nismo zasledili) nima telefonov in s tem do uporabe te aplikacije nima dostopa. Večini drugih so meritve dostopne povsod, tako v šoli kot pri terenskem delu. Zato menim, da sem z navedenimi primeri uporabe in metodo dela, ki sem jo predstavil, ne samo pokazal, kako lahko pametne telefone uporabimo za čisto redne laboratorijske meritve, ampak spodbudil tudi kreativnost potencialnih uporabnikov.

6 UPORABLJENI VIRI

- Feisner, I., Reed, T. (2015): "Digital Color Media and Technology", Glossary: "Color picker".
- Feisner, I., Anderson, R., Reed, R. (2014). *Color Studies*, New York: Fairchild Books.
- ESRI (2008). "Working with color ramps". ArcGIS 9.2 Help. Accessed February 2010.
- Hanbury, A. (2008). "Constructing cylindrical coordinate colour spaces". *Pattern Recognition Letters*. 29 (4): 494. doi:10.1016/j.patrec.2007.11.002.
- Joblove, G. H.; Greenberg, D. (1978). "Color spaces for computer graphics". *Computer Graphics*. 12 (3): str. 20–25.
- Jurič, S. (2014). Bližje-IR spektroskopija na standardni računalniški mobilni napravi za zaznavo in vizualizacijo podkožnih ven. Doktorska disertacija, medicinska fakulteta, Univerza v Mariboru.
- Kolak, N. (2016). Barvni modeli. NTF, Univerza V Ljubljani. Seminarska naloga, Golnik, 16.11. 2016
- Landa, E., Fairchild, M. (2005). "Charting Color from the Eye of the Beholder". *American Scientist* 93(5): str.436
- Marošević, I. Spektrometrija v osnovni šoli. Pedagoška fakulteta, Univerza v Ljubljani. Diplomsko delo (2014).
- Mednarodna konferenca EDUvision (2014) »Sodobni pristopi poučevanja prihajajočih generacij«. Ljubljana, 27.–28. november 2014
- Nickerson, N (1976). "History of the Munsell Color System". *Color Research and Application*. 1: str. 21–130.
- Potočnik, M. (2014). Kalibracija in analiza barv na digitalnih fotografijah kamnin. Diplomsko delo. Univerzitetni študijski program računalništvo in informatika. Univerza v Ljubljani.
- Runge, P. O. (1810). *Die Farben-Kugel, oder Construction des Verhaeltnisses aller Farben zueinander*. Hamburg, Germany: Perthes.
- Munsell, A. H. (1905). *A Color Notation*. Boston, MA: Munsell Color Company. Smith, A. R. (1978). "Color gamut transform pairs". *Computer Graphics*. 12 (3): str. 12–19.

Stržinar, T. 2011. Določanje primerne zrelosti izbranih sort sliv (*Prunus doemstica* L.). Diplomaska naloga. Ljubljana, Biotehnoška fakulteta, str. 27–28.

Tantek, C., Chris, L., Baron, L. (2008). "CSS3 Color Module". W3C.

Zakotnik, M. 2007. Zunanja in notranja kakovost klonov jablane sorte »Fuji«. Diplomaska naloga. Ljubljana, Biotehnoška fakulteta, str. 58.

Vernier Software & Technology, 2017. Dostopno na: <https://www.vernier.com/> (23. 1. 2017)

Vončina Brodnjak, M. (2006). Vaje iz analizne kemije II. FKKT, Univerza v Mariboru.