

# Untersuchung der Größe und strukturellen Eigenschaften von Farbstoffaggregaten

*Richárd Péter Szopkó*

*Department Chemie, Fakultät für Naturwissenschaften, Universität Paderborn*

## Zusammenfassung

Struktur und Größe von Aggregaten des Azofarbstoffs "Gelb GA" in wässriger Lösung bei Konzentrationen von 0.7 bis 30 mM und Temperaturen von 10 bis 70 °C wurde mit Protonen-NMR-Spektroskopie und NMR untersucht. Die starke Temperatur- und Konzentrationsabhängigkeit der NMR-Linienbreiten und chemischen Verschiebungen zeigt, dass die Aggregate mit steigender Konzentration und abnehmender Temperatur an Größe zunehmen. Die Hochfeldverschiebung der NMR-Signale mit zunehmender Aggregatgröße deutet auf ein p-Stacking der Moleküle hin. Insbesondere bei tiefen Temperaturen und hohen Konzentrationen ist die gemessene Signalstärke niedriger als theoretisch erwartet, was auf die Existenz sehr großer Aggregate hinweist, deren Größe die Nachweisgrenze der Lösungs-NMR überschreitet. Mit gepulster-Feldgradienten-NMR wurden die Diffusionskoeffizienten der "NMR-sichtbaren" Fraktion der Aggregate bestimmt. Die mit der Stokes-Einstein-Gleichung erhaltenen hydrodynamischen Radien ( $R_h$ ) stimmen hervorragend mit Abschätzungen basierend auf den Linienbreiten überein. Die Werte von  $R_h$  reichen von 0.7 nm für das Monomer bis 1.9 nm für die größten Aggregate. Der letztgenannte Wert entspricht einer Aggregationszahl von 22 bzw. 37, je nachdem ob man lose gepackte oder kompakte Aggregate annimmt.