

## Abstract

### Deutsch

In einer chemischen Reaktion werden Substanzen produziert oder zerstört. Die spezifischen Eigenschaften der Ausgangsstoffe verschwinden, weil die der neu entstandenen Stoffe anders sind. Wir haben die Aufgabe erhalten, die Reaktion von Natron und Zitronensäure zu studieren, zu analysieren und zu simulieren. Mithilfe des Messprogramms Logger-Pro haben wir Daten über pH-Wert, Temperatur und Masse gesammelt, wenn die Reaktion der beiden Stoffe abläuft. Da die Stoffe nur in einem Lösungsmittel miteinander reagieren, ist es nötig den Versuch in zwei Teile zu teilen. Als Erstes haben wir die Zitronensäure in Wasser dissoziiert. Während diesem Vorgang, haben wir die Temperatur und den pH-Wert beobachtet. Im zweiten Schritt haben wir den Stoff Natron hinzugefügt, wobei die eigentlich zu beobachtende Reaktion stattfindet. Dabei wurde die Masse, der pH-Wert und die Temperatur beobachtet. Um den Verlauf der Reaktion zu beschreiben haben wir mithilfe des Simulationsprogramms Berkeley Madonna ein dynamisches Modell erstellt und auf die gemessenen Daten angepasst. Dieses Modell ermöglicht es, die Eigenschaften der Reaktion verständlicher zu machen, sowie den Verlauf der Temperatur, und die Abnahme der Reaktionsstoffe zu simulieren.

### Englisch

In a chemical reaction substances can be produced or destroyed. The specific characteristics of the educt disappear, because those of the product are different. Our assignment was to study, to analyse and to simulate the reaction of soda and citric acid. We collected some data about pH-value, mass and temperature with Logger Pro, while the reaction ran. We divided the experiment into two parts. First we observed how the temperature changed after we added citric acid to the water. Then we observed the mass, pH-Value and temperature after we added soda to the solution. In order to describe the process of the reaction we created a dynamical model with the simulation software Berkeley Madonna. This model makes it easier for us to understand the characteristics of the reaction. Our model simulates the reaction, which means, that we can observe the temperature and the decrement of the substance.

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b> .....	<b>1</b>
1.1	<b>Motivation und Ziele</b> .....	<b>1</b>
1.2	<b>Inhalt</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theorie</b> .....	<b>2</b>
2.1	<b>Beteiligte Stoffe</b> .....	<b>2</b>
2.2	<b>Anwendung</b> .....	<b>2</b>
2.3	<b>Reaktion</b> .....	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Praktischer Versuch</b> .....	<b>4</b>
3.1	<b>Versuchsaufbau</b> .....	<b>4</b>
3.2	<b>Durchführung</b> .....	<b>4</b>
3.3	<b>Resultate</b> .....	<b>4</b>
<b>4</b>	<b>Modelle und Simulation</b> .....	<b>7</b>
4.1	<b>Dissoziation von Zitronensäure</b> .....	<b>7</b>
4.2	<b>Reaktion von Zitronensäure und Natron</b> .....	<b>9</b>
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b> .....	<b>12</b>
<b>6</b>	<b>Referenzen</b> .....	<b>12</b>
<b>7</b>	<b>Anhang</b> .....	<b>13</b>
7.1	<b>Wärmeleitwert des Gefässes</b> .....	<b>13</b>
7.2	<b>Verzögerung des Thermometers</b> .....	<b>14</b>

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Strukturformel Zitronensäure.....	2
Abbildung 2:	Strukturformel Natriumhydrogencarbonat .....	2
Abbildung 3:	Versuch 1: Verlauf der Temperatur und des pH-Werts.....	4
Abbildung 4:	Versuch 2: Verlauf der Temperatur und des pH-Werts.....	5
Abbildung 5:	Versuch 3: Verlauf der Temperatur und des pH-Werts.....	5
Abbildung 6:	Versuch 4: Verlauf der Masse.....	6
Abbildung 7:	Modell zur Bestimmung der Reaktionsgeschwindigkeit.....	7
Abbildung 8:	Modell „Zitronensäure“, Verlauf der Temperatur der Lösung.....	8
Abbildung 9:	Verlauf der Temperatur bei der Dissoziation.....	8
Abbildung 10:	Zeitliche Abnahme der Zitronensäure durch Dissotiation .....	9
Abbildung 11:	Modell zur Bestimmung der Reaktionsgeschwindigkeiten.....	9
Abbildung 12:	Modell für den Verlauf der Temperatur der Lösung.....	10
Abbildung 13:	Verlauf der Temperatur bei der Reaktion.....	10
Abbildung 14:	Abnahme der Stoffmengen bei der Reaktion.....	11
Abbildung 15:	Verlauf der Temperatur bei der Reaktion, Überprüfung des Modells .....	11

# 1 Einleitung

## 1.1 Motivation und Ziele

Um unsere gewonnenen Kenntnisse der Chemie im Fach Physik anwenden und vertiefen zu können, schreiben wir diese Arbeit. Als Thema wählten wir die Reaktion von Natron und Zitronensäure, dies schien uns ideal für unsere Ambitionen. In diesem praktischen Versuch können wir unsere erworbenen Chemiekennnisse anwenden und unseren Horizont erweitern, indem wir die Reaktion analysieren und als dynamisches System modellieren.

Hauptsächliche Zielsetzung unserer Arbeit ist die Reaktion praktisch durchzuführen und diese dabei zu beobachten, also Daten zu sammeln. Damit soll die Reaktion besser verstanden werden. Aufgrund der experimentellen Daten ist ein dynamisches Modell zu erstellen, mit welchem die Reaktion nachgebildet werden kann. Dabei soll die Temperatur des Lösungsmittels im Vordergrund stehen, aber auch die Mengen der beteiligten Stoffe sollen bilanziert werden können.

## 1.2 Inhalt

Das erste Kapitel dieses Berichts, beinhaltet die theoretischen Grundkenntnisse, die wir über den Vorgang bei der Reaktion von Zitronensäure und Natron erworben haben. Es werden kurz die Eigenschaften und Verwendungszwecke der beiden Stoffe beschrieben. Zusätzlich wird hier auf die chemische Reaktion eingegangen.

Der zweite Teil beinhaltet das Beobachten der Reaktion in einem praktischen Versuch. Diesen haben wir dreimal, mit verschiedenen Mengen der Ausgangsstoffe durchgespielt und dabei Daten über Temperatur, pH-Wert und Masse aufgezeichnet. Somit haben wir gesehen welche Unterschiede bei veränderten Anfangsbedingungen resultieren. Die Reaktion muss in zwei Phasen durchgeführt werden, zuerst wird destilliertem Wasser der Stoff Zitronensäure zugefügt, welche dort dissoziiert. Nach Abschluss dieses Vorganges, wird der zweite Stoff Natron hinzugefügt. Die zwei Stoffe reagieren unter Aufnahme von Energie aus dem Lösemittel miteinander.

Aufgrund der gewonnenen Kenntnisse über das Thema schreiben wir das dritte und letzte Kapitel. Dieses zeigt Schritt für Schritt wie die Modelle zur Nachbildung der Reaktion entwickelt wurden, welche Schwierigkeiten aufgetreten sind und wie diese gelöst wurden. Schliesslich zeigen Graphiken die Ergebnisse, welche dann kritisch diskutiert werden.

## 2 Theorie

### 2.1 Beteiligte Stoffe

#### Zitronensäure $C_6H_8O_7$

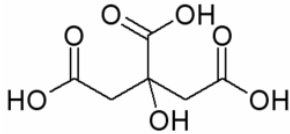


Abbildung 1: Strukturformel Zitronensäure.

„Zitronensäure (auch, besonders fachsprachlich: Citronensäure), nach IUPAC als 3-Carboxy-3-hydroxypentan-1,5-disäure bezeichnet, ist ein farbloser, wasserlöslicher Feststoff.

Dichte:  $1.665 \text{ g/cm}^3$

Molmasse  $192.125 \text{ g/mol}$

Mit dem Begriff Citrat bezeichnet man ein Salz der Zitronensäure. In der Biochemie spricht man auch oft von Citrat, wenn die im wässrigen Milieu einer Zelle vorkommende dissoziierte Ionenform der Zitronensäure gemeint ist.

Neben der wasserfreien Variante existiert das Zitronensäuremonohydrat ( $C_6H_8O_7 \cdot H_2O$ , CAS-Nr.: 5949-29-1), das pro Molekül Zitronensäure ein Molekül Kristallwasser enthält.“<sup>1</sup>

#### Natriumhydrogencarbonat (Natron) $NaHCO_3$

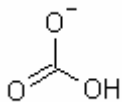


Abbildung 2: Strukturformel Natriumhydrogencarbonat.

„Natriumhydrogencarbonat, chemisch  $NaHCO_3$ , wird auch mit den Trivialnamen Natriumbicarbonat, Bikarbonat, doppeltkohlensaures Natron oder kurz Natron bezeichnet. Im Handel erhält man es unter der Bezeichnung „Kaiser-Natron“, „Speisesoda“ oder auch „Bullrichsalz“. Es ist ein feines weisses Pulver und zersetzt sich oberhalb einer Temperatur von  $65 \text{ }^\circ\text{C}$  unter Abspaltung von Wasser und Kohlenstoffdioxid zu Natriumcarbonat. Es ist ein Natriumsalz der Kohlensäure.

Dichte:  $2.159 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$

Molmasse  $84.01 \text{ g/mol}$ “<sup>2</sup>

### 2.2 Anwendung

#### Zitronensäure

Einsatzgebiete der Salze der Zitronensäure:

- Citrate werden als Wasserenthärter eingesetzt.
- Natriumcitrat wird in der Medizin verwendet, um die Gerinnung einer Blutprobe zu verhindern. Als Lebensmittelzusatzstoff E 331 bildet es einen Bestandteil von Brausepulver.
- Calciumcitrat-haltige Präparate werden von der Wellness-Industrie als Nahrungsergänzungstoff angepriesen. Ähnliche Präparate werden auch Hunden verabreicht, weil man erwartet, dass die darin enthaltenen Calcium-Ionen ein kräftiges Gebiss und starke, gesunde Knochen erzeugen.
- Die Nahrungsergänzung Magnesiumcitrat soll den Magnesiumspiegel im Körper erhöhen.
- Die Salze Trinatriumcitrat und Trilithiumcitrat werden in der Bauchemie - je nach zugesetzter Menge - als Verzögerer oder Beschleuniger für zementäre Massen eingesetzt.
- Sildenafil-Citrat ist der Wirkstoff des Potenzmittels Viagra.

<sup>1</sup> <http://de.wikipedia.org/wiki/Zitronensäure>, 30. Juni 2006

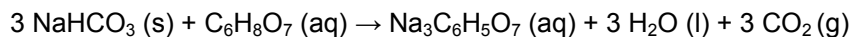
<sup>2</sup> <http://de.wikipedia.org/wiki/Natron>, 30. Juni 2006

## Natriumhydrogencarbonat

- In der Lebensmitteltechnik
  - Bestandteil von Backpulvern
  - Bestandteil von Brausepulvern
- In der Medizin
  - Als Mittel gegen Sodbrennen (Bullrichsalz) wegen der Neutralisationswirkung unter Bildung von ungiftigen Reaktionsprodukten (CO<sub>2</sub> und Wasser); gilt heute als obsolet (siehe Antacidum, Protonenpumpenhemmer)
  - Zur Behandlung von Vergiftungen durch Barbiturate und Salicylate.
  - Als Infusion zur Behandlung der metabolischen Azidose.
  - als Zusatz bei der Dialyse verwendet.
- Bestandteil von Feuerlöschpulvern
- Zum Strecken von synthetischen Drogen wie Amphetamin sowie zur Herstellung von Crack aus Kokain
- Im Haushalt

## 2.3 Reaktion

Sobald das Pulver mit Wasser in Berührung kommt, wird das doppeltkohlensaure Natron durch die Zitronensäure zersetzt, die letztere verbindet sich mit dem Natron, und die Kohlensäure entweicht gasförmig unter lebhaftem Schäumen und Brausen. Die Reaktion ist endotherm, für die Reaktion nimmt sie Energie des Lösungsmittels auf, die Temperatur nimmt folglich ab. Zitronensäure löst folgende Reaktion aus:



### 3 Praktischer Versuch

#### 3.1 Versuchsaufbau

Wir möchten herausfinden wie verschiedene Mengen Natron die Reaktion mit Zitronensäure beeinflussen. Die erhaltenen Erkenntnisse sollen uns ermöglichen ein Modell für die Reaktion von Natron mit Zitronensäure zu erstellen. Deshalb messen wir während des Vorganges die Temperatur, sie zeigt uns wie viel Entropie die Reaktion als gesamt benötigt. Der pH-Wert und das Gewicht liefern uns einen Hinweis über den Zeitverlauf der Reaktion. Wir führten zum Vergleichen vier Versuche durch, mit folgenden, anhand des Buches „Chemistry with Computers“ von Vernier Software, gewählten Startwerten:

Versuch #	Wasser [ml]	Zitronensäure [g]	Natron [g]	pH-Wert	Temperatur [°C]
1	50	10	5	6.5	22.6
2	50	10	15	6.4	22.2
3	50	10	10	6.05	21.6
4	50	10	10	-	-

Tabelle 1: Gewählte Stoffmengen.

#### 3.2 Durchführung

In einem Glasbehälter befindet sich destilliertes Wasser worin die Reaktion stattfindet. Mit LoggerPro Sensoren messen wir den pH-Wert und die Temperatur während der Reaktion. Zu Beginn wird die gewünschte Menge Zitronensäure im Wasser aufgelöst und gerührt, bis keine Partikel mehr sichtbar sind, also die gesamte Menge dissoziiert ist. Anschliessend fügen wir das Natron hinzu und sammeln so lange Daten, bis die Reaktion vollständig abgelaufen ist bzw. sich der pH-Wert und die Temperatur nicht mehr verändern. In einem vierten Versuch misst eine elektronische Waage das Gewicht während des Versuches, die Zitronensäure ist zu Messbeginn bereits aufgelöst. Das Gewicht nimmt ab weil  $\text{CO}_2$  entweicht. Diese Daten liefern uns zusätzliche Information über den zeitlichen Verlauf der Reaktion.

#### 3.3 Resultate

##### Versuch 1

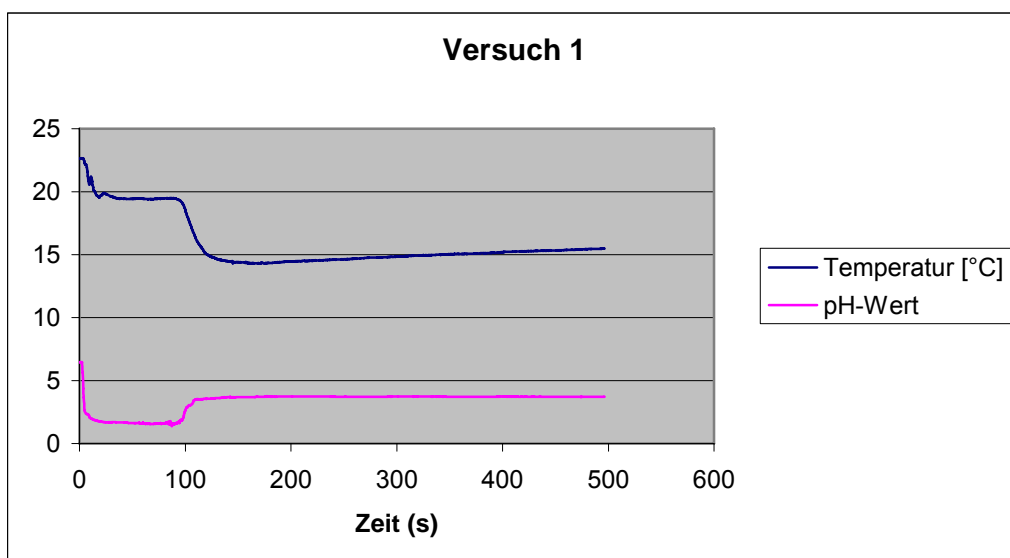


Abbildung 3: Versuch 1: Verlauf der Temperatur und des pH-Werts.

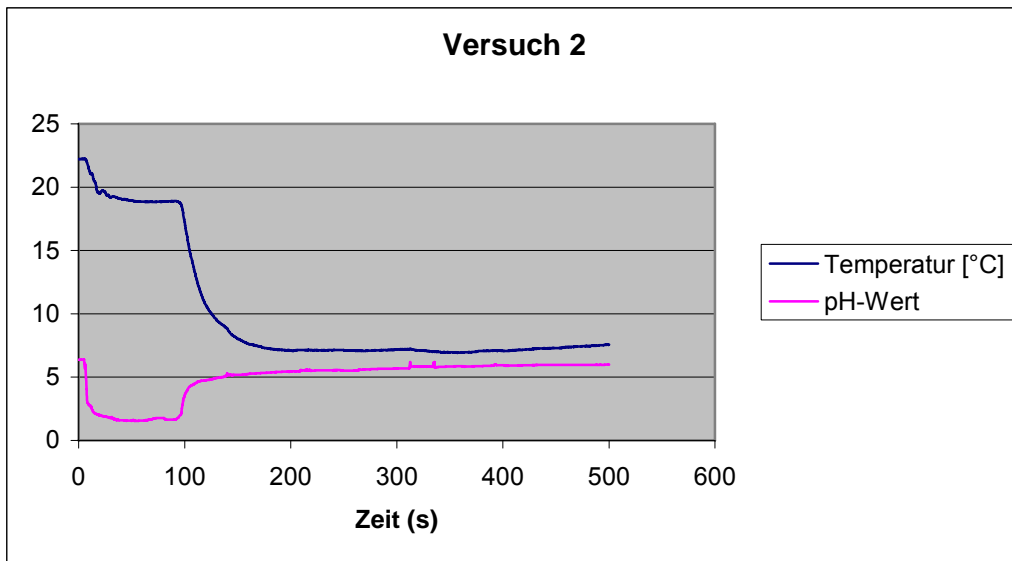
**Versuch 2**

Abbildung 4: Versuch 2: Verlauf der Temperatur und des pH-Werts.

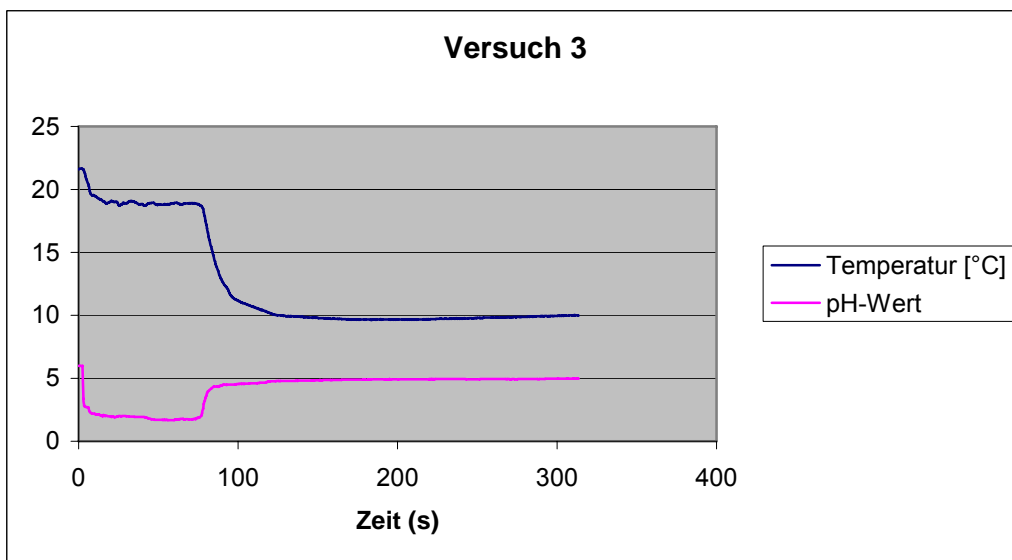
**Versuch 3**

Abbildung 5: Versuch 3: Verlauf der Temperatur und des pH-Werts.

## Versuch 4

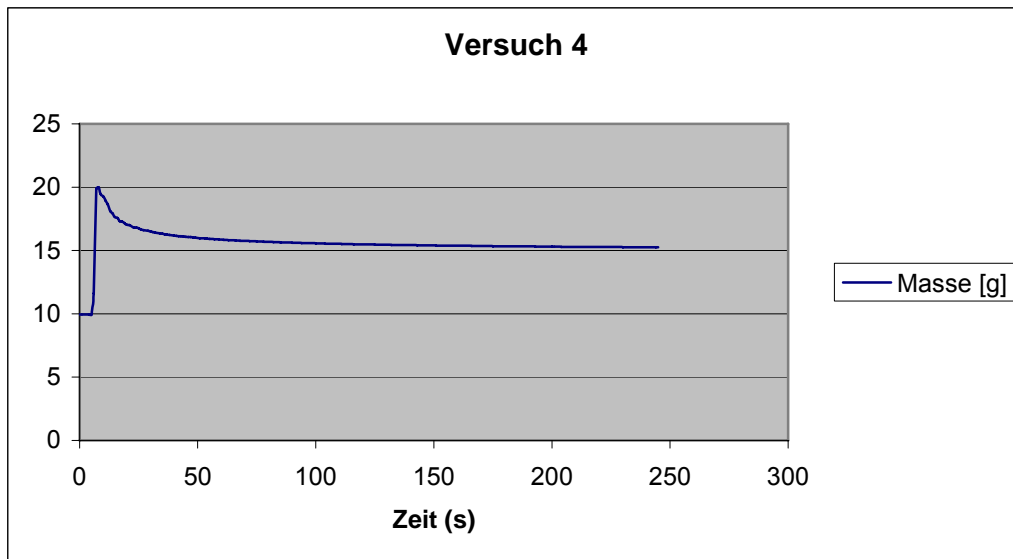


Abbildung 6: Versuch 4: Verlauf der Masse.

Aus den Graphen ist ersichtlich, dass sich die erarbeitete Theorie bestätigt. Es handelt sich um eine endotherme Reaktion, da die Temperatur des Wassers auf einen tieferen Wert sinkt. Je länger die Reaktion stattfindet desto kühler wird das Wasser, dies hängt wiederum von den Stoffmengen ab. Wenn entweder alles Natron oder die gesamte Zitronensäure verbraucht ist, ist die Reaktion beendet. Wir beobachteten bei der Temperatur, dass diese zu Beginn etwas langsam abnimmt, bevor sie in eine negative Exponentialkurve übergeht. Das gleiche Phänomen stellten wir aber nicht beim Gewicht fest, woraus wir schliessen, dass die Reaktion bereits am Anfang voll in Gange ist. Die Beobachtung zu Beginn führen wir auf das Thermometer zurück, es ist ein thermisches Speicherelement, welches einer Verzögerung ersten Grades entspricht. Der pH-Wert-Graph zeigt, ob die Lösung sauer, neutral oder alkalisch ist bzw. ob die Zitronensäure neutralisiert wurde. Im zweiten Versuch erhalten wir am Ende fast denselben pH-Wert wie am Anfang, daher ist die Lösung fast neutral. 1 Mol Zitronensäure wird durch 3 Mol Natron neutralisiert, wenn die Anfangswerte der beiden Stoffe vergleichen, sehen wir dass ungefähr die dreifache Molmenge Natron (15g - > 0.18 Mol) als von Zitronensäure (10g -> 0.56 Mol) in der Reaktion beteiligt ist.



## 4 Modelle und Simulation

Wie wir in der Theorie und unserem praktischen Versuch festgestellt haben, handelt es sich bei der Reaktion von Natron und Zitronensäure um eine endotherme Reaktion. Sie läuft zwar selbständig ab, nimmt dazu aber Energie in Form von Entropie aus ihrer Umgebung auf. Diesen Temperaturabfall des Wassers, möchten wir mit einem Modell nachbilden.

Da wir die Zitronensäure und das Natron nacheinander in das Wasser gegeben haben, laufen im Prinzip zwei Reaktionen ab. Zuerst dissoziiert die Zitronensäure im Wasser, dann reagieren die zwei Stoffe miteinander. Somit benötigen wir zwei verschiedene Modelle.

Als gemessene Daten, um das Modell anzupassen und zu vergleichen, dient unser Versuch 3. Dieser wurde mit jeweils 10g Zitronensäure und Natron in 50ml destilliertem Wasser durchgeführt.

### 4.1 Dissoziation von Zitronensäure

Die Änderung der Temperatur ist auf hauptsächlich drei Dinge zurückzuführen:

- Entropieproduktion der Reaktion
- Entzug von Entropie aus dem Wasser, damit die Reaktion abläuft
- Entropiezufuhr aus der Umgebung

Die ersten beiden Punkte sind schwer voneinander zu unterscheiden. Da wir davon ausgehen, dass beide proportional zu der Reaktionsgeschwindigkeit sind, können wir diese Entropieströme zusammenfassen.

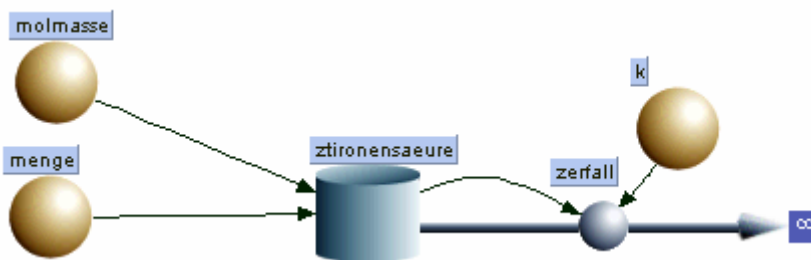
Das Modell besteht also aus einem Tank, welcher für den Entropieinhalt des Wassers steht, mit einem ersten Strom fließt Entropie aus der Umgebung hinzu und ein weiterer Strom stellt die abfließende Entropie dar. Diese Besteht wie oben beschrieben, aus Produktion und Entzug. Aus dieser Entropieänderung kann die Temperatur der Lösung bestimmt werden.

Bereits gesagt, gibt es mit der Temperatur durch das Thermometer eine Verzögerung, somit benötigt das Modell einen dritten Tank welcher die gemessene Temperatur verzögert darstellt.

Das Gesamte Modell besteht aus zwei Untermodellen:

#### Reaktionsgeschwindigkeit

Als erstes bestimmen wir die Rate, mit welcher die Reaktion abläuft, mit einem Modell, welches auf der Theorie der chemischen Reaktionen basiert.



Int Zitronensäure =  
menge/molmasse  
Zerfall =  $k \cdot \text{Zitronensäure}$

Abbildung 7: Modell zur Bestimmung der Reaktionsgeschwindigkeit

Wir gehen davon aus, dass die Reaktion fertig abgelaufen ist, wenn sich die Temperatur, sowie der pH-Wert nicht mehr verändert. Der Wert von  $k$  wurde also so angepasst, bis die Bedingung erfüllt ist.

$$k = 0.225$$

**Temperaturverlauf**

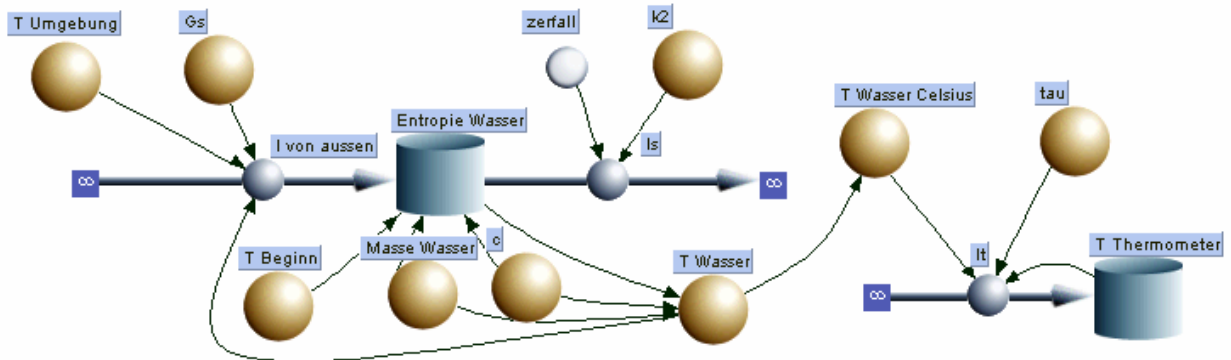


Abbildung 8: Modell „Zitronensäure“, Verlauf der Temperatur der Lösung

$$\text{Init Entropie Wasser} = \text{Masse\_Wasser} * c * \text{LOGN}(T\_Beginn / 273.15)$$

$$T \text{ Wasser} = 273.15 * e^{(\text{Entropie\_Wasser} / (\text{Masse\_Wasser} * c))}$$

$$T \text{ Wasser Celsius} = T\_Wasser - 273.15$$

Der Entropiestrom, welcher von aussen hinzukommt, ist durch das „Modell des Wärmeleitwertes“, siehe Anhang, einfach zu bestimmen.  $I \text{ von aussen} = G_s * (T\_Wasser - T\_Umgebung)$ ;  $G_s = 3.42846e-4 \text{ J/K}$

Der Strom, welcher Entropie abführt, ist bestimmt durch unsere Annahmen und die modellierte Reaktionsrate.  $I_s = \text{zerfall} * k_2$

Hierbei steht die Konstante  $k_2$  für die Addition von zwei verschiedenen Parameter, derjenige für die Produktion von Entropie und derjenige für den Entzug an Entropie. Da beide einen Proportionalitätsfaktor für die Reaktionsgeschwindigkeit darstellen, können wir sie in einem Zusammenfassen.

$$I_t = (T\_Wasser\_Celsius - T\_Thermometer) / \tau; \tau = 2.4s$$

Um diesen Wert abzuschätzen, ist es notwendig das Thermometer alleine zu beobachten. Wir haben ein Thermometer in kochendes Wasser getan und die Verzögerung betrachtet, siehe Anhang.

Mittels der Funktion Curve-Fit wird, wird der Parameter  $k_2$  an die Daten angepasst, damit der Temperaturverlauf übereinstimmt.  $k_2 = 39.406$

**Ergebnis und Diskussion**

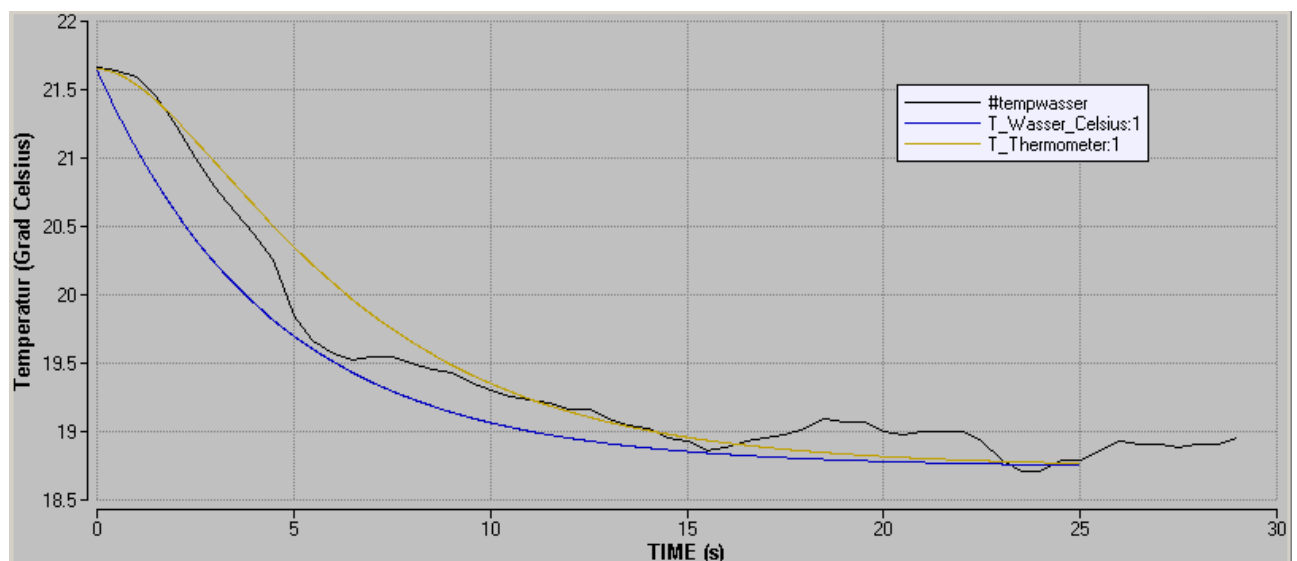


Abbildung 9: Verlauf der Temperatur bei der Dissoziation

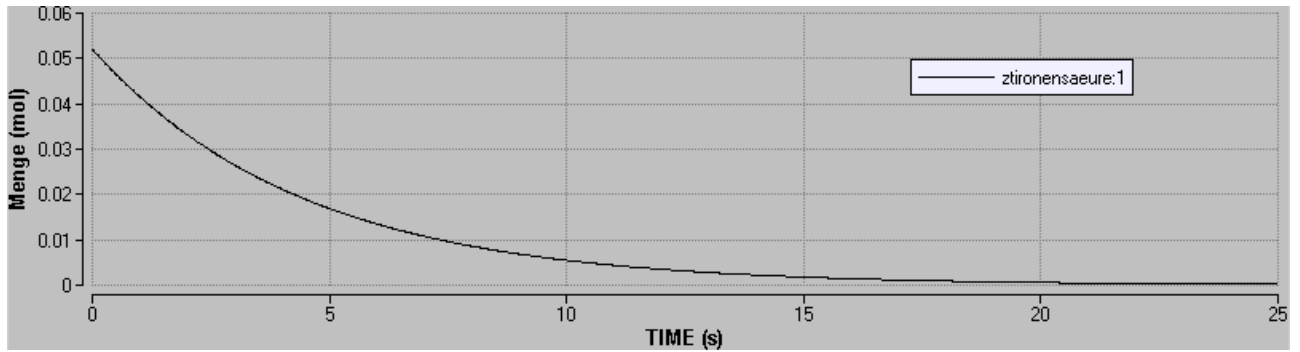


Abbildung 10: Zeitliche Abnahme der Zitronensäure durch Dissoziation

Durch das Rühren der Lösung, damit die Zitronensäure dissoziiert, schwankt die Temperatur sehr stark und hat Unreinheiten. Der Verlauf der simulierten Temperatur wird durch das Modell trotzdem gut nachgebildet. Es kann somit als gültig betrachtet werden.

Ebenfalls zu erkennen ist unsere Annahme der richtigen Temperatur der Lösung. Da das Thermometer das Ergebnis verfälscht, gehen wir davon aus, dass die Temperatur so verläuft.

Den Wert für c, haben wir von normalem Wasser übernommen, theoretisch ist das nicht ganz richtig. Da es sich bei der Lösung hauptsächlich um Wasser handelt und auch die Simulation ein sehr gutes Resultat geliefert hat, behalten wir diesen bei.

Leider ist es mit dem Modell nur möglich, einen gemeinsamen Entropiestrom für die Produktion der Reaktion selbst und die Entnahme aus dem Wasser zu simulieren. Interessant wäre natürlich die getrennte Beobachtung. Aufgrund unserer Bildung in Chemie, können wir dies jedoch nicht unterscheiden. Für das Modell stellt dies aber eine Vereinfachung dar. Wir haben zwei Ströme zusammengefasst, da die Daten gut nachgebildet werden, ist unsere Annahme als gültig zu betrachten.

## 4.2 Reaktion von Zitronensäure und Natron

Dieses Modell ist sehr nahe Verwandt mit dem vorherigen. Wiederum gibt es die selben drei Prozesse, welche die Entropie und somit auch die Temperatur der Lösung beeinflussen.

### Reaktionsgeschwindigkeit

Zuerst bestimmen wir die Reaktionsgeschwindigkeit, gleichermassen wie zuvor. Jedoch gibt es den Unterschied, dass wir zwei Ausgangsstoffe haben. Weshalb es auch zwei verschiedene Reaktionsgeschwindigkeiten gibt. Das Natron wird mit der dreifachen Geschwindigkeit verbraucht wie die Zitronensäure, da aus der Reaktionsgleichung hervorgeht, dass pro Mol Zitronensäure drei Mol Natron benötigt werden.

zerfall z = zitronensaure\*natron\*k;      zerfall n = zitronensaure\*3\*natron\*k\*3  
Wir erhalten k = 0.645

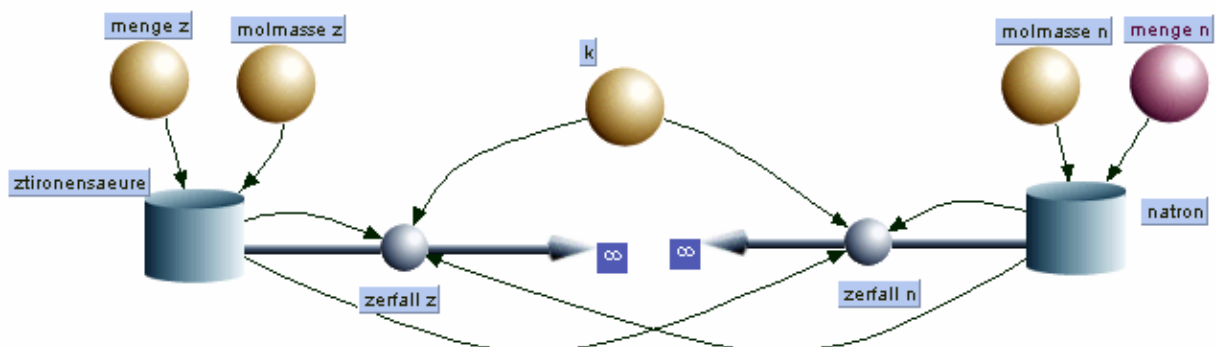


Abbildung 11: Modell zur Bestimmung der Reaktionsgeschwindigkeiten

**Temperaturverlauf**

Auch dieses Modell ist vom vorherigen abgeleitet, es muss lediglich der abfließende Entropiestrom neu bestimmt werden, da wir nun zwei verschiedene Reaktionsgeschwindigkeiten haben. Der produzierte Entropiestrom, sowie der Strom, mit welchem der Flüssigkeit Entropie entzogen wird, ist nun proportional zur Summe der beiden Reaktionsgeschwindigkeiten.

$$I_s = (\text{zerfall n} + \text{zerfall z}) \cdot k_2$$

Der Rest bleibt gleich, wie im vorherigen Modell. Mittels der Funktion Curve-Fit, wird der Parameter  $k_2$  an die Daten angepasst, damit der Temperaturverlauf übereinstimmt.  $k_2 = 45.5719$

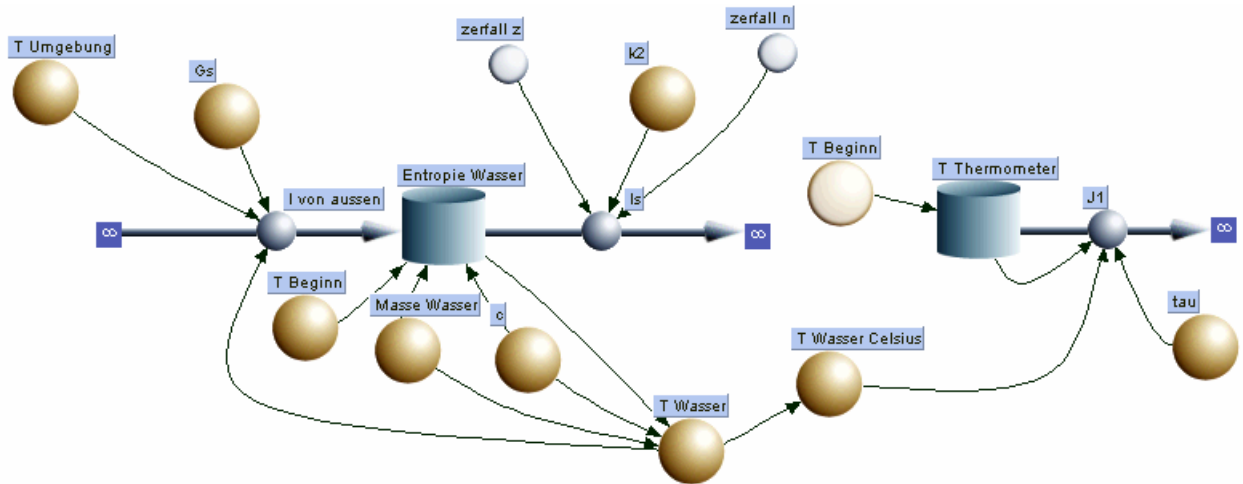


Abbildung 12: Modell für den Verlauf der Temperatur der Lösung

**Ergebnis und Diskussion**

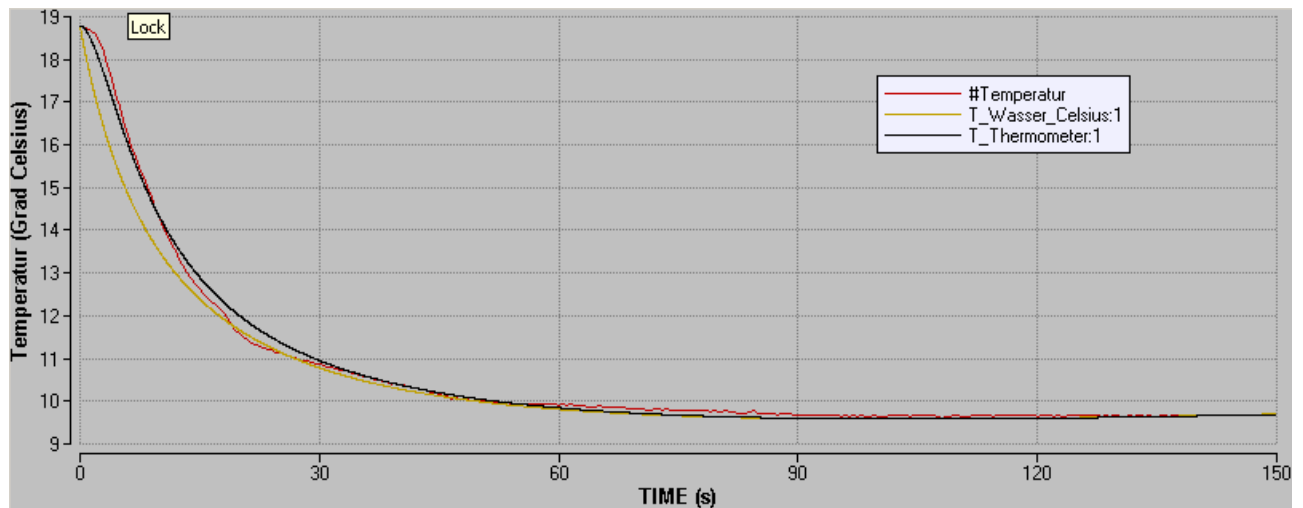


Abbildung 13: Verlauf der Temperatur bei der Reaktion

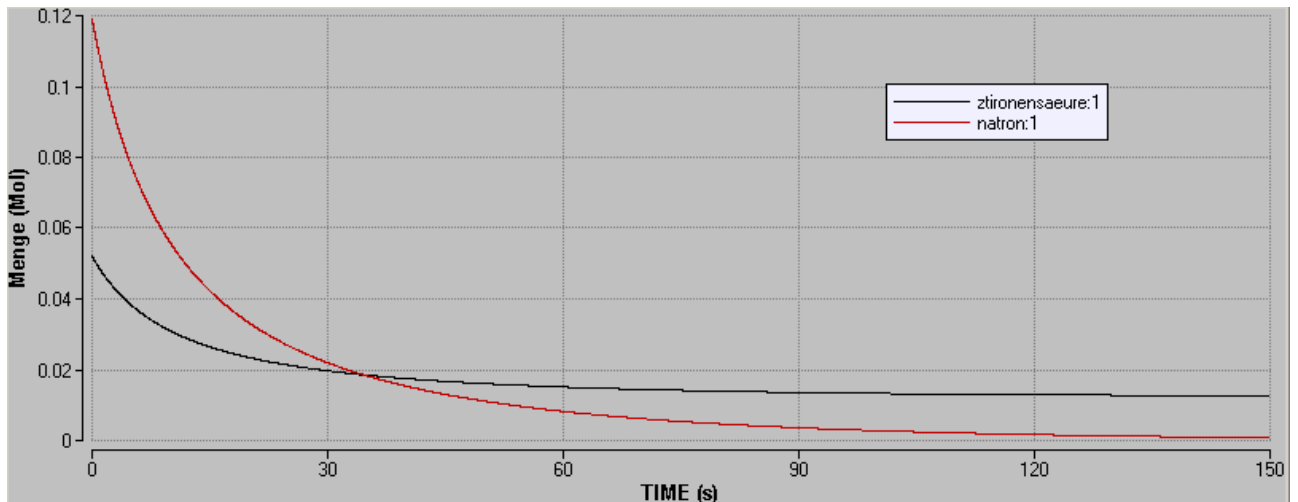


Abbildung 14: Abnahme der Stoffmengen bei der Reaktion

Durch die gute Anpassung an die Daten und keine vorhandenen Residuen, können wir das Modell als gültig betrachten. Ebenfalls ist die am Thermometer gemessene, sowie die wahre Temperatur dargestellt.

Zu kritisieren sind erneut die Annahme von  $c = 4180$  und die nicht getrennte Entropieproduktion und Entropieaufnahme.

Zur Überprüfung des Modells, lassen wir die Simulation noch mit den Parametern und Daten aus dem ersten Versuch (10g Zitronensäure und 5g Natron) laufen. Wie aus der Graphik ersichtlich ist, stimmt der Temperaturverlauf sehr gut überein.

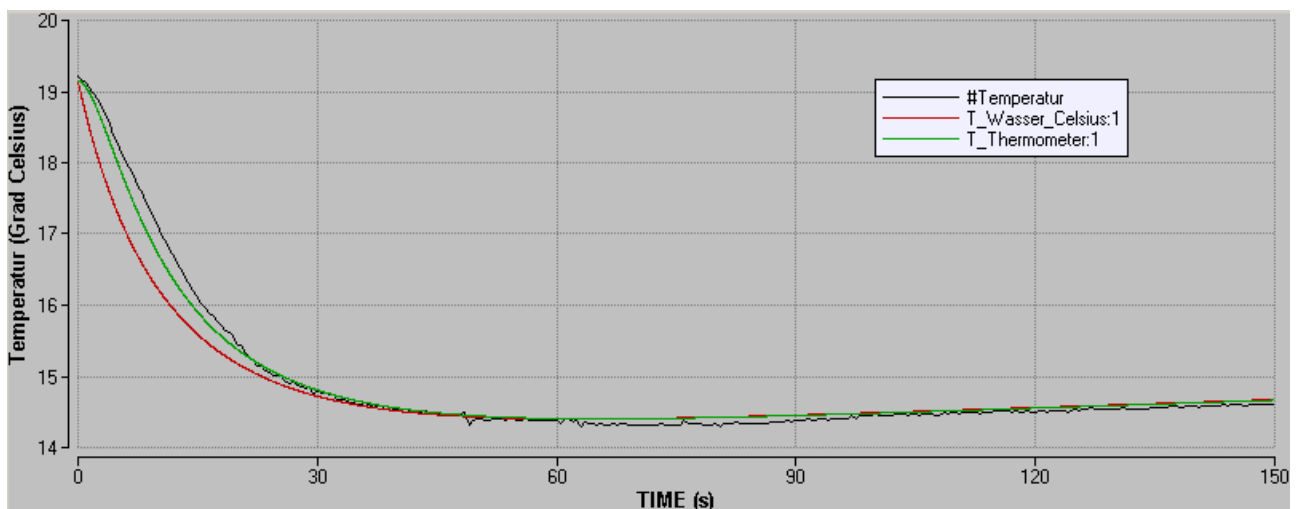


Abbildung 15: Verlauf der Temperatur bei der Reaktion, Überprüfung des Modells

## 5 Zusammenfassung

Der Versuch und die Analyse der Reaktion von Natron und Zitronensäure, war für uns neu und darum sehr interessant. Alle unsere Hauptziele konnten erreicht werden.

Wir haben unser Allgemeinwissen über chemische Reaktionen und Stoffe erweitert und daraufhin die zu untersuchende Reaktion theoretisch betrachtet und uns überlegt, wie wir den praktischen Versuch durchführen sollen.

Die Durchführung des praktischen Versuches, hat uns dann neue Einblicke gezeigt. Wir haben gesehen wie sich endotherme Reaktionen verhalten. Wir haben die Reaktion zunächst in zwei geteilt, da die Reaktion nur in einer Lösung stattfinden kann. Zuerst gaben wir das Zitronensäurepulver in destilliertes Wasser, dieses dissoziiert dann dort. Somit war der Grundstein für die betrachtete Reaktion gelegt. Im zweiten Schritt konnten wir das Natron hinzufügen. Dieses reagiert mit Zitronensäure unter starkem Schäumen.

Die Beobachtung der unterschiedlichen Entwicklung der Anfangsstadien der Temperatur und der Masse, brachte uns zum Schluss, dass das Thermometer die eigentlich richtige Temperatur verfälscht, da es wie ein verzögerndes Element erster Ordnung wirkt. Da es ebenfalls einen thermischen Speicher besitzt.

Zuletzt erfolgte die Simulation. Sie umfasst mehrere Modelle, welche gekoppelt sind, entweder über Parameter oder Reaktionsgeschwindigkeiten. Wir konnten also ein etwas grösseres Projekt als bis anhin lancieren. Der Aufbau erfolgte Schritt um Schritt, zuerst überlegten wir uns welche Prozesse einen Einfluss darstellen, diese galt es dann zu simulieren. Zuerst erfolgte die Entwicklung des Modells zur Dissoziation der Zitronensäure. Dies setzt die Abschätzung des Wärmeleitwertes und die verzögernde Wirkung des Thermometers voraus. Die Reaktionsgeschwindigkeit, welche den antreibenden Prozess für die freigesetzte und aufgenommene Energie darstellt, muss auch bestimmt werden. Dieses Teilmodell konnte aus dem Fach Prozess- und Datenlabor übernommen werden.

Die Simulation der betrachteten Reaktion stellte dann nur noch eine Weiterentwicklung des ersten Modells „Dissoziation von Zitronensäure“ dar. Im Wesentlichen, ist nur die Reaktionsgeschwindigkeit unterschiedlich. Schlussendlich stimmten die gemessenen Temperaturen ziemlich genau mit den modellierten überein. Wir konnten sogar die Werte genauer bestimmen, als dies die gemessenen zulassen, da im praktischen Versuch das Thermometer als verzögerndes Glied nicht weggelassen werden kann.

Aus diesen Gründen empfinden wir unsere Arbeit als erfolgreich und schliessen die Arbeit nun mit diesem Bericht ab.

Zu kritisieren ist unsere Annahme des verwendeten Wertes für  $c$ , welchen wir von Wasser übernommen haben, obwohl die Lösung die anderen zwei Stoffe beinhaltet. Dies hat aber fast keinen Einfluss, da hauptsächlich Wasser im Gefäss vorhanden ist. Das kann man auch an den guten simulierten Werten erkennen. Um den Wert von  $c$  genauer abschätzen zu können, hätten wir einen erneuten Versuch durchführen müssen, dafür reichte dann aber die Zeit nicht aus.

Des Weiteren konnte nicht zwischen der von der Reaktion erzeugten und aufgenommenen Entropie unterschieden werden. Dafür fehlt uns das chemische Wissen. Wir empfinden diesen Punkt aber nicht als sehr schlimm, da wir den Verlauf der Reaktion nachbilden konnten.

## 6 Referenzen

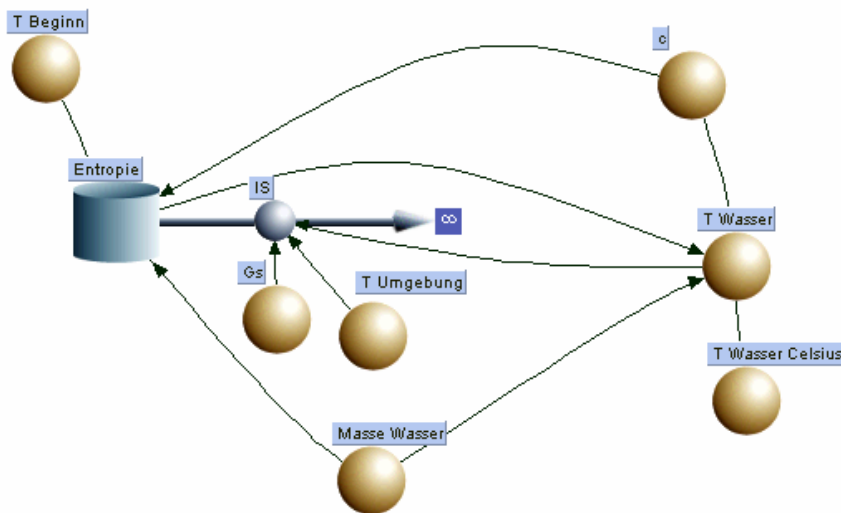
Skript: Hans. U. Fuchs (2006): Chapter 4 Chemical Processes, Winterthur.

Buch: Dan D. Holmquist, Donald L. Volz (2003): Chemistry with Computers (Third Edition), Vernier Software & Technology, Beaverton USA.

## 7 Anhang

### 7.1 Wärmeleitwert des Gefässes

Die Reaktion entzieht dem Wasser Entropie, dadurch wird die Temperatur im Gefäss tiefer als in der Umgebung. Diese Differenz hat wiederum zur Folge, dass von Aussen wieder Entropie in das Gefäss fliesst. Nach der vollständig abgelaufenen Reaktion haben wir die Temperaturzunahme der Flüssigkeit gemessen. Mit der Theorie der Thermodynamik und diesen Daten, können wir den Leitwert des Gefässes bestimmen.



$$\text{Entropie der Lösung} = \text{Masse\_Wasser} * c * \text{LOGN}(T\_Be\text{ginn}/273)$$

$$IS = G_s * (T\_Wasser - T\_Umgebung)$$

$$T\_Wasser = 273 * e^{(\text{Entropie} / (\text{Masse\_Wasser} * c))}$$

$$c = 4180$$

Abbildung 16: Modell zur

Bestimmung des Wärmeleitwertes.

Nun können wir die Daten in Berkeley Madonna einlesen und mittels Curve-Fit  $G_s$  bestimmen:  
 $G_s = 3.42846e-4 \text{ J/K}$

### Ergebnis und Diskussion

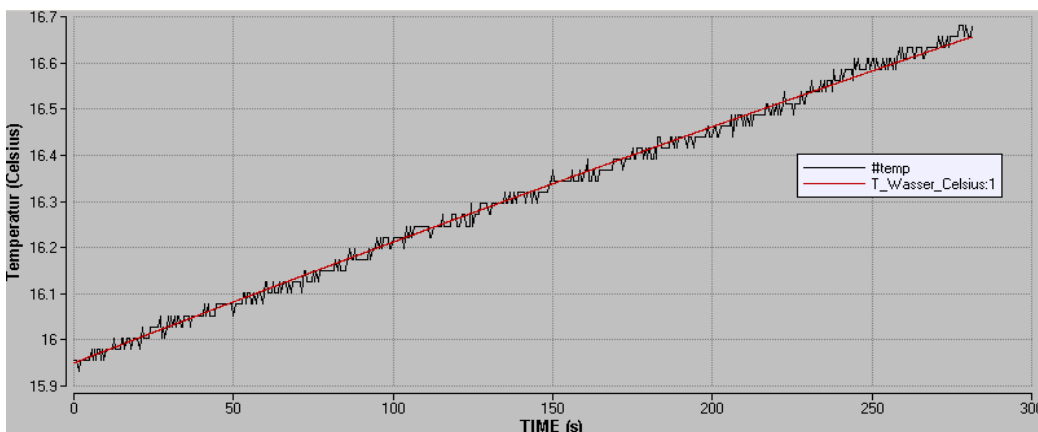


Abbildung 17: Simulation der Verlauf von der Temperatur nach der Reaktion

Den Wert für  $c$ , haben wir von normalem Wasser übernommen, theoretisch ist das nicht ganz richtig. Da es sich bei der Lösung hauptsächlich um Wasser handelt und auch die Simulation ein sehr gutes Resultat geliefert hat, behalten wir diesen bei.

## 7.2 Verzögerung des Thermometers

Um diese Verzögerung bestimmen zu können, haben wir das verwendete Thermometer in kochendes Wassers getan und haben die Messdaten aufgezeichnet. Kochend darum, weil sich da die Temperatur nicht verändert.

Die Messdaten haben wir mit einem Verzögerungsmodell erster Ordnung nachgebildet:

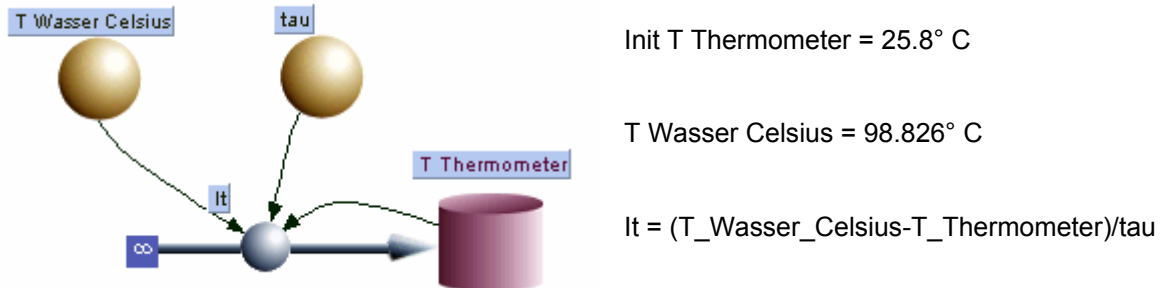


Abbildung 18: Modell zur Bestimmung von tau

Diese Modell wird nun mit dem tau an die Daten angepasst. Tau = 2.4s

### Ergebnis und Diskussion

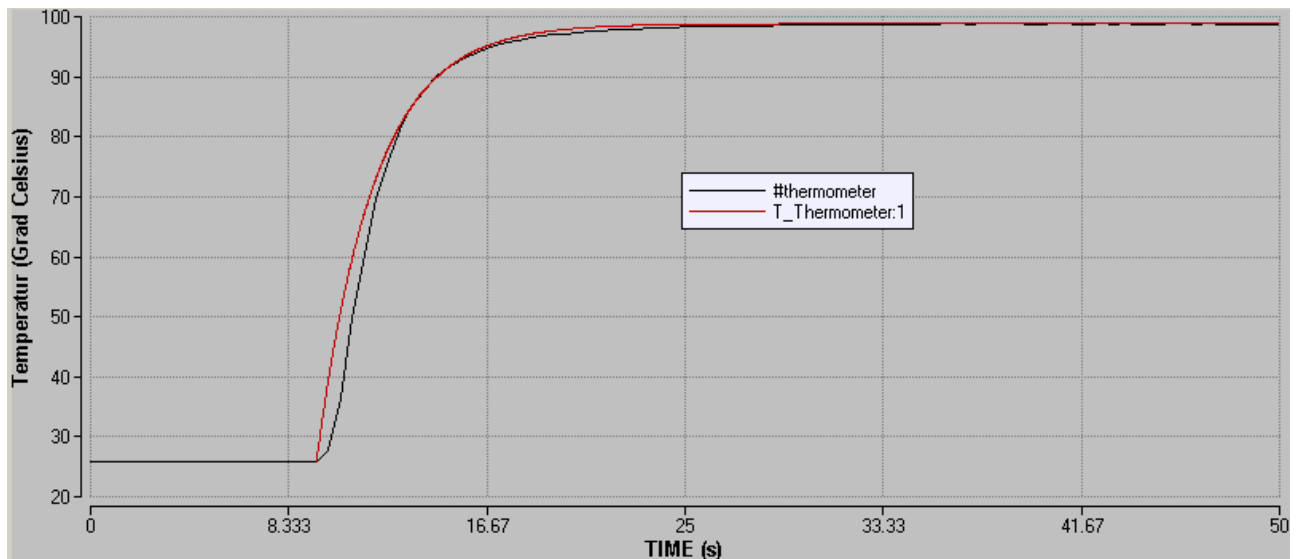


Abbildung 19: Simulation der Verlauf der Verzögerung der Temperatur durch das Thermometer

Das Modell simuliert das System sehr gut nach. Einzig ganz zu Beginn, scheint eine Abweichung vorhanden zu sein. Der Grund dafür ist, dass es sich eigentlich um eine Verzögerung zweiter Ordnung handelt, da jedoch der Nachgebilde „Bogen“ der grössere und wichtiger ist, genügt das für unser Modell. Die Zeit in der die Temperatur nicht ganz stimmt, ist ziemlich klein. Im Modell zur Simulation der Reaktionen, ist dieser gar nicht erkennbar.