

# AK MiniLabor

## 7.Kategorie: Auswerten & Simulieren



### AK MiniAnalytik (Internetversion)

Auswerten und Simulieren von Messreihen

**AK MiniAnalytik ist die Vorzeige-App des Teacher's Helper, weil jeder Schüler mit ihr die echten Messwerte online auf seinem iPad/Tablet/Handy verfolgen kann. Leider können mit der Internetversion keine Messdaten aufgenommen werden!**

### Inhalt

AK MiniAnalytik	Seite
Programmbeschreibung	A 02
Hauptmenü	A 03
Das Menü-Icon „Seitenleiste Ein-/Ausblenden“	A 04
Menü: Projekt	A 06
Arbeiten mit AK MiniAnalytik Zuhause	A 07
Menü Messen	
Messwerte manuell eingeben	A 07
Datenreihen importieren	A 07
Menü Auswerten	
X-Geradenmethoden	A 08
pKs-Wert, pH-Indikatoren	A 09
GC-Auswertungen	A 10
Kinetik	A 12
Werte umrechnen	A 12
Grafik beschriften	A 13
Menü Simulieren	
pH-Kurven / Leitfähigkeitskurven	A 14
Temperatur, Gaschromatogramme, Kinetik	A 15
Anhang: Laden einiger spezieller Messreihen	A 16

## Programmbeschreibung

Die **Internetversion des AK MiniAnalytik** bietet folgende Möglichkeiten:

### Menüpunkt Projekt

Hier können wie üblich Projekte (auch mit mehreren Datenreihen) gespeichert und wieder geladen werden. Eine besondere Art des Ladens wird noch im Anhang beschrieben.

**Achtung:** Die Möglichkeit mit den Mitschülern „Daten zu teilen“ bzw. „Geteilte Daten zu laden“ gibt es nur beim Teacher's Helper

### Menüpunkt Messen

Das Erkennen von angeschlossenen Messgeräten und die Übernahme von Daten fehlt in der Internetversion. Messdaten können allerdings per Hand eingegeben oder auch importiert werden.

### Menüpunkt Auswerten

Dies ist der wichtigste Punkt der Internetversion, weil die Schüler ihn auch zuhause durchführen können. Äquivalenzpunkte von Messreihen lassen sich nach den verschiedenen Geraden-Methoden bestimmen; so z.B. auch pKs-Werte. Auch pH-Indikatoren mit ihren Umschlagsbereichen lassen sich einblenden.

Quantitative Auswertungen von Gaschromatogrammen sind ebenso möglich wie Auswertungen unter kinetischen Gesichtspunkten.

### Menüpunkt Simulieren

Zur Kontrolle durch Überlagern lassen sich die eben angesprochenen Messreihen auch per Simulation erzeugen.

---

## Messen mit dem Teacher's Helper (TH)

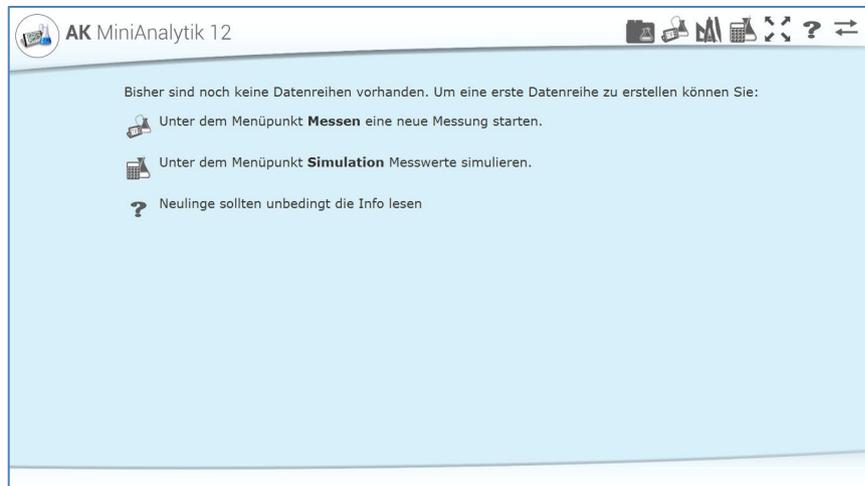
Haben Sie den Teacher's Helper angeschafft, können Sie ausgewählte Messgeräte des AK oder aus dem Lehrmittelhandel anschließen. Die Messungen mit diesen Geräten werden direkt an die Geräte der Schüler gesendet. Diese Messwerte werden von den Schülern ausgewertet und können wieder an den Lehrer gesandt werden. Bei Anschluss eines Beamers können sie von der Klasse diskutiert werden.

Nähere Einzelheiten zum Teacher's Helper und zu den benutzbaren Geräten finden Sie unter:  
[www.kappenberg.com](http://www.kappenberg.com) → Bildchen „Digitalisierung / Teacher's Helper“

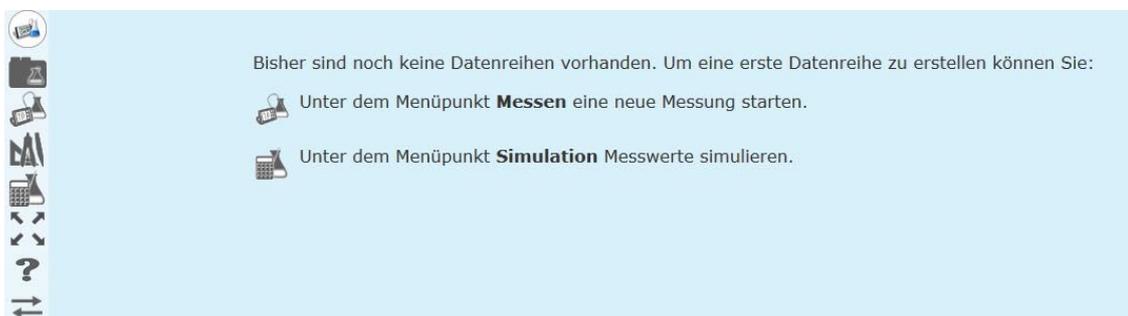
# Bedienung des Programms

## Hauptmenü

Man beginnt mit folgendem Bildschirm:



**Achtung:** Hat der Bildschirm (meist bei Smartphones) keine große Auflösung, so können die Menüicons auch an der linken Seite untereinander angeordnet sein.



## Bedeutung der Icons im Hauptmenü



**Projekt** (Neues Projekt anlegen, speichern, laden, löschen,.....)

**Messen** ( Werte manuell eingeben,.....)

**Auswerten** (Ein- und Mehrgeraden-Methode, Halbäquivalenzpunkt, GC Handintegration, Daten umrechnen etc.)

**Simulieren** (Datenreihen berechnen: pH-Kurven, potenziometrische Kurven, Temperaturkurven, Leitfähigkeitskurven etc....)

**Vollbilddarstellung** schaltet bei vielen Browsern in Vollbilddarstellung um oder wieder zurück

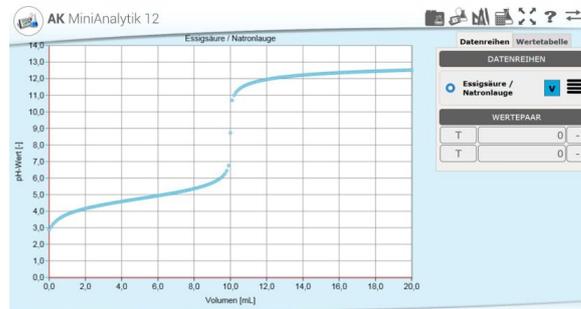
**Hilfe**

**Seitenleiste Ein-/Ausblenden**



## Das Menü-Icon: Seitenleiste Ein-/Ausblenden

Das letzte Menü-Icon wird vorab behandelt, weil es von sehr großer Bedeutung ist für **Smartphones mit kleiner Bildschirmauflösung**

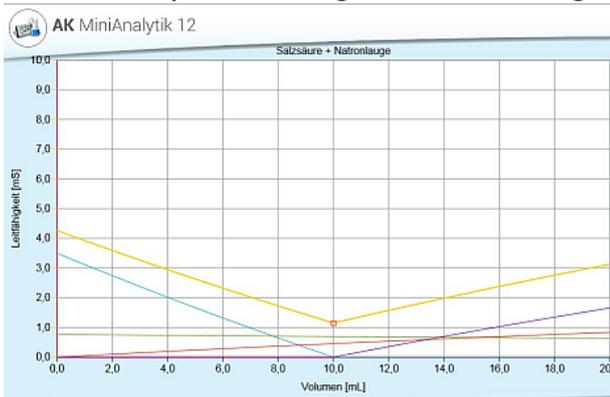


Abgesehen von zwischendurch eingeblendeten Fenstern besteht der Bildschirm von AK MiniAnalytik aus zwei Teilen, die manche Handys leider nicht gleichzeitig darstellen können:

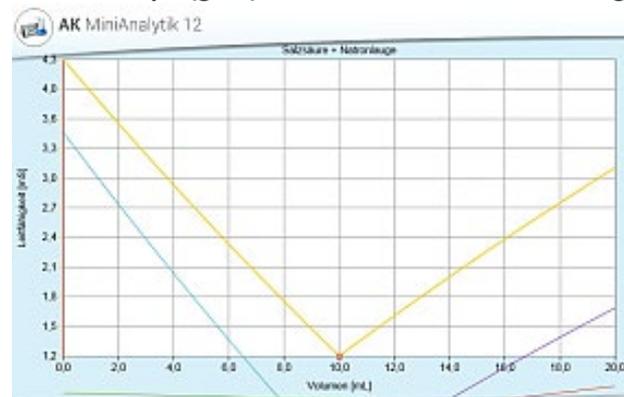
1. dem **Graphen** und
2. der **Seitenleiste**

Der Graph besitzt normalerweise zwei Skalierungsmöglichkeiten, zwischen denen man mit „**Doppeltippen**“ in das Koordinatensystem hin und her schalten kann:

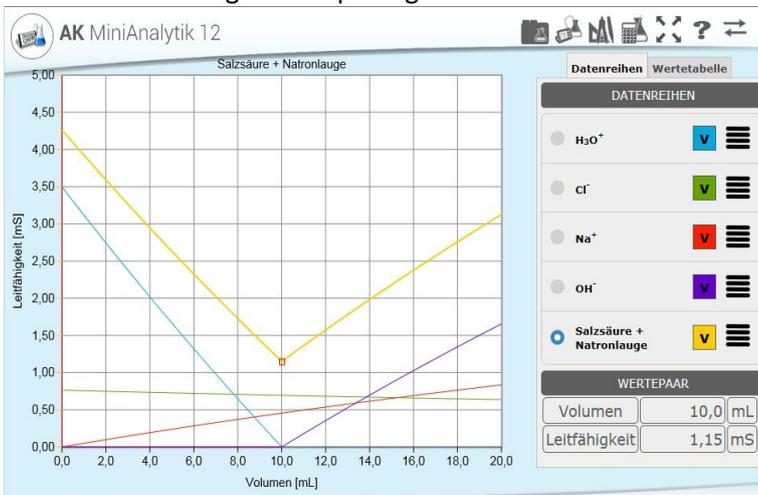
### 1. Graph mit voreingestellter Skalierung



### 2. Graph (gelb) mit automatischer Skalierung



Die weitere Steuerung des Graphen geschieht in der Seitenleiste:



Ein Kringel **vor** dem Namen der Datenreihe macht diese zur „**führenden Datenreihe**“: Alle anderen Reihen werden in der Skalierung der „führenden Datenreihe“ gezeichnet, auch wenn es nicht passt.

**Sämtliche Auswertungen lassen sich immer nur mit der „führenden Datenreihe“ durchführen.**

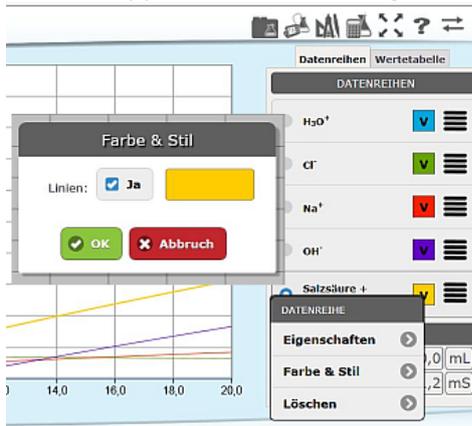


Mit Setzen oder Wegnehmen des Häkchens im farbigen Kasten **hinter** dem Namen der Datenreihe wird gesteuert, ob diese **eingezeichnet ist** oder nicht.

Tippt man in den Graphen, so werden bei „Wertepaar“ die Koordinaten des nächsten Punktes der „führenden Datenreihe“ angegeben.



Mit Tippen auf das **Hamburger Menü** (vier Striche übereinander) kann man Eigenschaften verändern.



Punkte verbinden (Ja anklicken) und Farbe mit Farbfeld wählen



Feste Voreinstellungen für den Graphen



Die Seitenleiste kann auch Anweisungen zu Auswertungen enthalten.

Mit Tippen auf den Reiter **Wertetabelle** erscheint diese.

Salzsäure + Natronlauge		
1	0,0	4,3
2	0,5	4,1
3	1,0	3,9
4	1,5	3,8
5	2,0	3,6
6	2,5	3,4
7	3,0	3,3
8	3,5	3,1
9	4,0	2,9
10	4,5	2,8
11	5,0	2,6
12	5,5	2,5
13	6,0	2,3
14	6,5	2,2
15	7,0	2,0
16	7,5	1,9

Enthält die Tabelle sehr viele Datenpaare, so sind diese in 50er Blöcken gestaffelt. Der jeweilige Block muss dann ausgewählt werden

Nach Antippen einer **Wertepaarnummer** lässt sich das Paar löschen, editieren (verändern) oder um ein weiteres ergänzen. Soll nur ein Wert des Paares geändert werden, kann dieser auch direkt angeklickt werden.



Bei kleiner Bildschirmauflösung z.B. bei einem Handy muss man dieses ICON häufiger benutzen.



Manchmal hilft häufig auch Drehen des Handys von Hoch- in Querformat und zurück.



„Aktualisieren“ **Achtung:** Dieses ICON gehört nicht zum Programm, sondern zu dem benutzten Browser und ist je nach Browser als Kreisbogen mit Pfeil oder auch etwas anders gestaltet.

Der Button bewirkt - wie bei vielen Browsern die Tastenkombination [Strg]+[F5] - im Prinzip ein Neuladen des Programmteils (mit Überschreiben des Cache).

Sie werden noch erkennen, wie nützlich dieser Button ist.

**Besonders beim Start einer Session empfiehlt es sich, das Icon sogar mehrmals zu drücken, um evtl. das "alte" Programm bzw. die alten Daten im Cache zu überschreiben.**



## Das Menü-Icon: Projekt

Klickt man auf das Icon **Projekt**, erscheint das folgende Menü:



Dieses dient der Verwaltung von Projekten.

Ein Projekt enthält Datenreihen und kann zusätzlich Graphen, Auswertungen etc. enthalten. Die Punkte sind Ihnen von Schreibprogrammen wie WORD etc. bekannt und brauchen nicht besonders erwähnt zu werden. Das Prinzip der Speicherung der Dateien ist allerdings je nach Gerät und benutztem Betriebssystem sehr unterschiedlich. Relativ bekannt ist die Projektebearbeitung denen, die WINDOWS benutzen.

**Neu:** Nur die aktuellen Datenreihen werden gelöscht.

**Löschen:** Die im Browserspeicher (Cache) abgelegten Datenreihen können ausgewählt und einzeln gelöscht werden.

**Speicher Löschen:** Die aktuellen und alle im Cache befindlichen Daten werden gelöscht.

### **Datenreihen exportieren** Eine weitere Spezialität (je nach Browser)

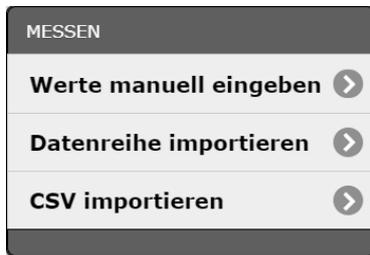


Unter diesem Menüpunkt lässt sich eine Datenreihe im CSV - Format speichern. Eine solche Reihe kann dann leicht von Tabellenkalkulationsprogrammen, z.B. EXCEL, geladen und bearbeitet werden.

Projekt-Icon  antippen, **Datenreihen exportieren**



## Das Menü-Icon: Messen



Das Menü heißt zwar Messen aber per Internet sind Messungen zur Zeit noch utopisch.

### Werte manuell eingeben

dient dazu Daten auszuwerten, die nicht mit dem Programm gemessen wurden.

Zunächst legt man die Eigenschaften der Datenreihe fest und gibt dann die Werte des ersten Datenpunktes ein:

Eigenschaften der Datenreihe	
Name	Überspannung
	X-Achse Y-Achse
Messgröße:	Spannung Stromstärke
Einheit:	V mA
Untergrenze:	0,00 0,0
Obergrenze:	5,00 200,0
Nachkommastellen:	2 1
Beschriftungen:	10 10
Gitter:	10 10
OK Abbruch	

Datenpunkt ändern	
X-Wert	Y-Wert
0,00	0,0
1 2 3	1 2 3
4 5 6	4 5 6
7 8 9	7 8 9
0 , -	0 , -
← C	← C
OK Abbruch	

Im Messbildschirm wird der erste Punkt eingetragen. In der Seitenleiste (evtl. nach dem Aufruf mit Icon ) Wertetabelle antippen und dann z.B. auf „2+“, um das nächste Wertepaar einzugeben, usw.

### Datenreihe importieren

Hier kann man aus einem bestehenden, gespeicherten Projekt eine einzelne Datenreihe auswählen und in das aktuelle Projekt als weitere Datenreihe einfügen.



## Das Menü-Icon: Auswerten



Manuelle Festlegung von Regressionsgeraden für beliebige Abschnitte zur Äquivalenzpunktbestimmung etc.

Nur nach Äquivalenzpunktbestimmung (siehe oben) möglich  
Indikatoren werden nach Anwahl in die pH-Kurve eingeblendet

Auswertehilfen für die Gaschromatografie:  
Drift- und Nullpunktkorrektur einer Messung  
Integration der Peakflächen manuell bzw. automatisch

Doppeltabelle mit 1. den Integrationen und 2. Referenzgase mit ihren Retentionszeiten und Responsefaktoren für die Zuordnung und Korrektur mit den Wärmeleitfähigkeiten.

Chromatogramme parallel zur x-Achse verschieben oder in x-Richtung strecken oder stauchen.

Rechenoperationen zur Auswertung nach kinetischen Modellen.

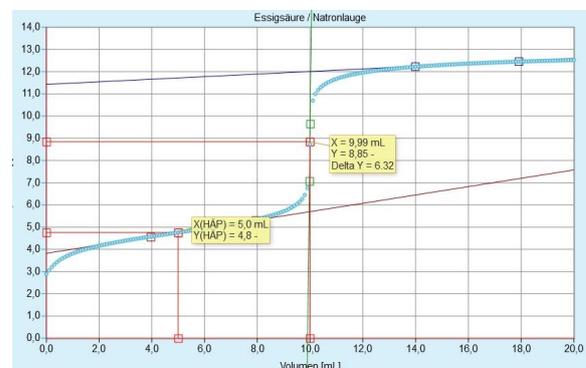
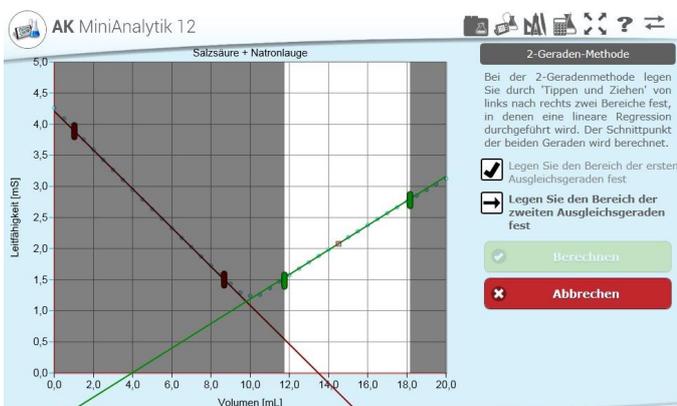
Veränderung der Datenreihen:  
x-Werte werden wieder aneinandergereiht.

Umrechnen der Werte: Logarithmus, Kehrwert, mit einem Faktor multiplizieren oder Offset addieren etc.

Eingebender Text wird in einen gelben Kasten zu Grafik hinzugefügt.

### Die X-Geraden-Methode (X= 1, 2 oder 3) (Achtung: erfordert ein wenig Übung!)

Alle 3 Methoden dienen der manuellen Auswertung mit Hilfe von linearen Regressionsgeraden durch gemessene Datenpunkte. Die Festlegung, in welchem Bereich die Regression gerechnet werden soll, erfolgt (von links nach rechts) durch Antippen, (unbedingt!) gedrückt Halten, Ziehen und Loslassen.



Hat man Bereiche aus Versehen falsch markiert, können diese noch durch Antippen der entsprechenden (roten, grünen oder blauen) Markierungen nachträglich geändert werden, bis man **Berechnen** tippt. Wenn die Operation beim ersten Mal nicht gelungen ist, kann man nach Tippen auf das Menüicon „Auswerten“ und **Auswertungen löschen** einen neuen Versuch starten.

## Halbäquivalenzpunkt

Dieser Punkt ist sinnvoll nur anwendbar, wenn man vorher die Drei-Geraden-Methode durchgeführt hat. Dann tippt man im Grafen irgendwo in die Mitte zwischen dem "Null"- und dem Äquivalenzpunkt und das Programm gibt direkt den Halbäquivalenzpunkt aus. Die Position des gelben Ergebniskästchens kann geändert werden.

## pH-Indikatoren

**pH-Indikatoren**

Wählen Sie aus, welche pH-Indikatoren  
als Referenz eingezeichnet sein sollen:

<input type="checkbox"/> <b>Thymolblau</b> (2.5-8.5)	<input type="checkbox"/> <b>Thymolphthalein</b> (9.3-10.5)
<input type="checkbox"/> <b>Methylorange</b> (3-4.4)	<input type="checkbox"/> <b>Alizarin</b> (9.5-11.5)
<input type="checkbox"/> <b>Bromkresolgrün</b> (3.2-4.5)	<input type="checkbox"/> <b>Dimethylgelb</b> (2.9-4)
<input type="checkbox"/> <b>Methylrot</b> (4.4-6.2)	<input type="checkbox"/> <b>Kongorot</b> (3-5.2)
<input type="checkbox"/> <b>Lackmus</b> (5-7.5)	<input type="checkbox"/> <b>p-Nitrophenol</b> (5-7)
<input type="checkbox"/> <b>Bromthymolblau</b> (5.6-7.6)	<input type="checkbox"/> <b>Alizarin</b> (5.5-6.8)
<input type="checkbox"/> <b>Phenolphthalein</b> (8.2-10)	<input type="checkbox"/> <b>Neutralrot</b> (6.8-8)

**OK**     **Abbruch**

Hat man z.B. die Titrationskurven von Salz- und Essigsäure mit Natronlauge vorliegen, kann man dazu Indikatoren einblenden.

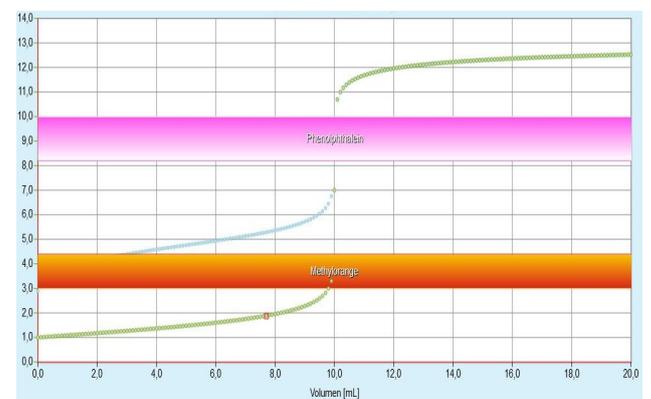
Nach Aufruf des Menüpunktes wählt man z.B. aus:

**Methylorange** und

**Phenolphthalein**

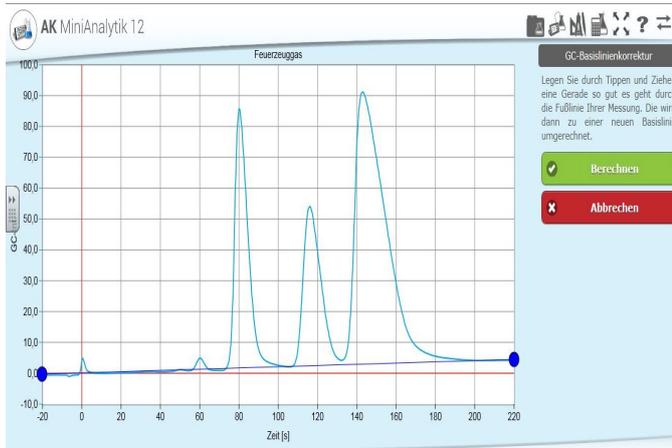
und tippt evtl. nach Scrollen auf **OK**

Man erhält unten stehende Darstellung:



## Bearbeiten von Gaschromatogrammen (GC)

### GC Basislinienkorrektur



Da in einer nachfolgenden Integration numerisch nur die y-Werte addiert werden, ist es notwendig, dass die Werte ohne Ausschlag (Basislinie) möglichst dicht bei  $y=0$  liegen. Dies gilt auch, wenn das Chromatogramm einen Drift enthält. Auch hier legt man durch Tippen, gedrückt Halten und Ziehen eine Linie längs des Chromatogramms (in der Abbildung blau) fest.

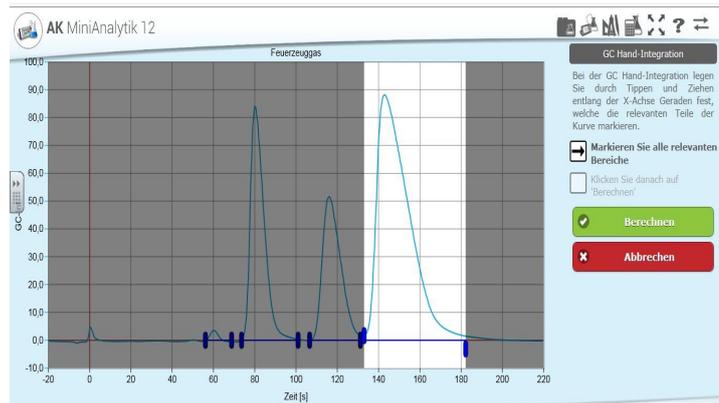
Mit **Berechnen** wird die Basislinie des Chromatogramms neu berechnet. (siehe folgende Abbildung)

### GC Handintegration

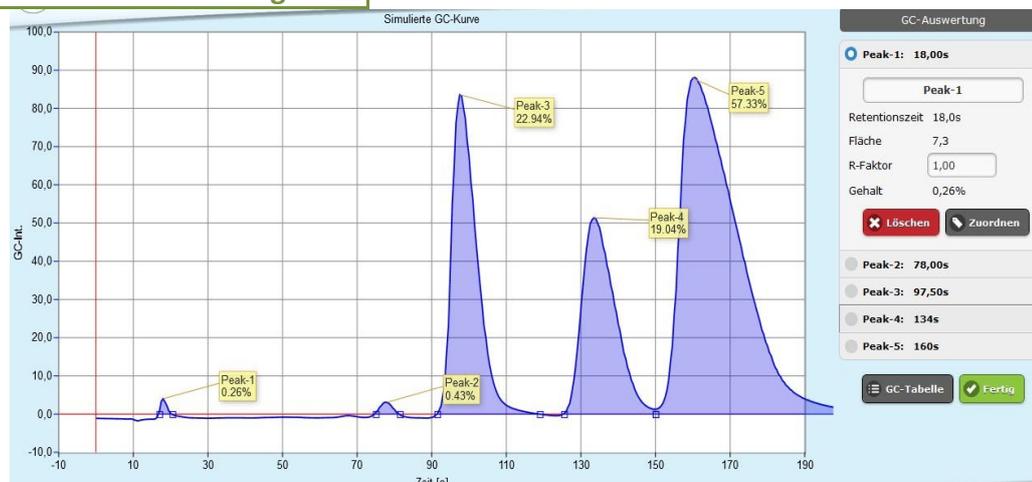
Der Text auf dem Bildschirm erläutert das Vorgehen:

Den linken Rand des ersten Peaks (nicht Einspritzpeak) antippen, gedrückt halten und bis zum rechten Rand ziehen. Die Grenzen kann man nachträglich korrigieren mit Tippen auf die Markierungen des Peaks.

Für jeden Peak nach rechts die Schritte wiederholen und dann **Berechnen**



### GC Automatische Integration



Dieser Punkt entspricht dem vorherigen - nur dass der Computer die Festlegung der Peaks übernimmt. Aber Achtung: Hier wird der Einspritzpeak in die Integration mit einbezogen!

## GC/Referenztabelle anzeigen

Nach der Integration müssen die Peaks noch zugeordnet werden.

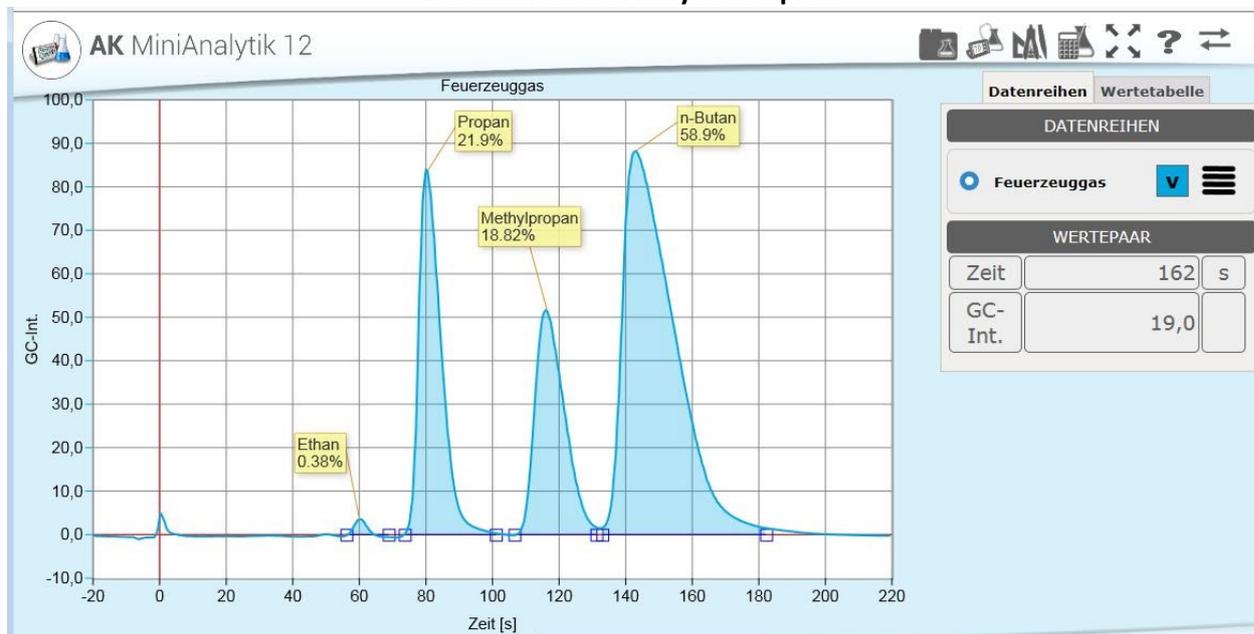
In der oberen Tabelle stehen die Ergebnisse der Untersuchung, denen aus der unteren Tabelle durch **Peak Zuordnen** Name und R-Faktor (Berücksichtigung der Einzelwärmeleitfähigkeiten, Responsefaktoren) zugeteilt werden müssen.

**Erst wenn alle Peaks erfasst sind, ist die Analyse quantitativ!**

Achtung: Bei automatischer Integration muss der erste Peak (Einspritzpeak) gelöscht werden.



## Erst dann ist die Analyse komplett

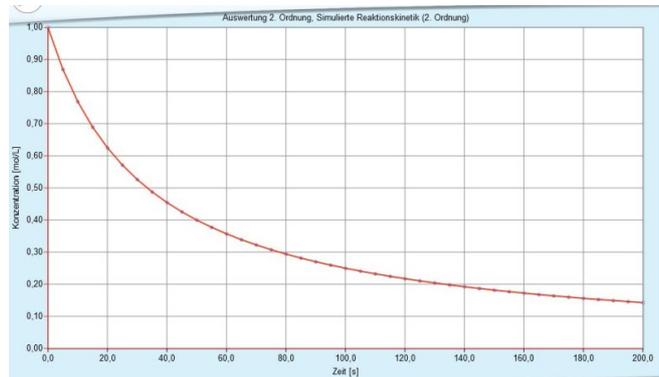
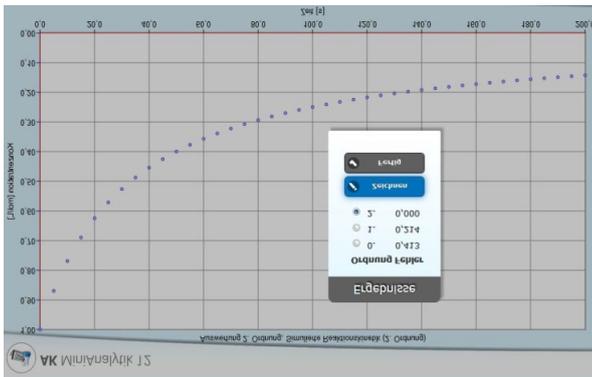


## GC Peaks verschieben

Dieser Menüpunkt ist geeignet, um Gaschromatogramme zu vergleichen, die nicht unter denselben Bedingungen aufgenommen wurden: Sie lassen sich parallel in x-Richtung verschieben, stauchen und strecken.

## Automatik Kinetik

Hier wird eine Kurve nach kinetischen Gesichtspunkten untersucht und für jede Ordnung eine Korrelation angegeben.



## x-Werte uniformieren

Die x-Werte können äquidistant gerechnet werden, wenn zur Korrektur Wertepaare gelöscht oder hinzugefügt wurden. Dazu muss der Startwert und das Intervall eingegeben werden

## Werte umrechnen (oder einfacher Taschenrechner)

Dieser Punkt dient zur Umrechnung aller Werte (Verschieben, Stauchen und Strecken). Bei „beliebiger Funktion“ muss man den Punkt und **OK** anklicken, um die Funktion einzugeben oder einfach mit dem ‚Taschenrechner‘ arbeiten zu können.

## Grafik beschriften

Text einfügen

*einzufügender Text,  
kann im Anschluss verschoben werden*

! " § \$ % & / ( ) = ? ←

Nach dem Eingeben kann der entsprechende Text im gelben Kasten in der Grafik positioniert werden.



## Das Menü-Icon: Simulieren

SIMULATION	
pH-Kurve	➤
Leitwert-Kurve	➤
Potentiometrische Kurve	➤
Temperaturkurve	➤
Gaschromatogramm Fl.Gas	➤
Kinetik	➤

### pH-Kurven

Tippt man in das Feld für Säure oder das der Base, kann man die entsprechenden Stoffe scrollen und auswählen. Nachdem die gewünschten Daten eingetragen sind, wird bei **OK** die Simulationskurve sofort ausgegeben, bzw. in einen schon vorhandenen Graphen dazu gezeichnet (hier: Essigsäure/Natronlauge zum Graph Salzsäure/Natronlauge).

**pH-Simulation**

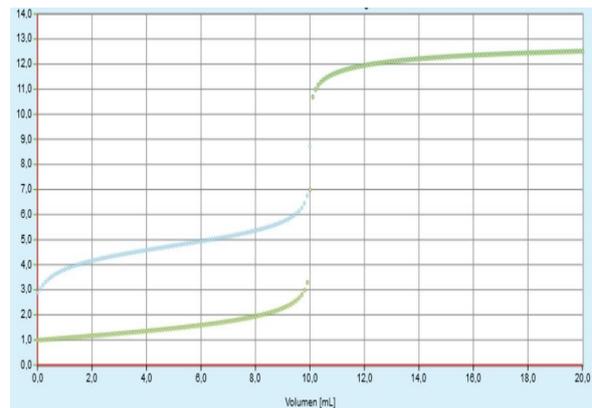
Vorlage: **Säure** Base

**Vorlage:** Säure:  Base:

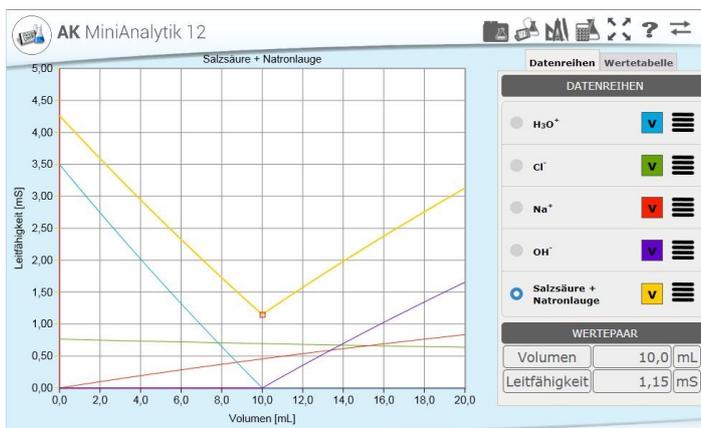
Konzentration:  mol/L Konzentration:  mol/L

Volumen:  mL Volumen Anfang:  mL

Volumen Ende:  mL



### Leitfähigkeits-Kurven



Man kann verschiedene Titrationen rechnen lassen:

**Salzsäure + Natronlauge,  
Essigsäure + Natronlauge und  
Natriumchlorid + Silbernitrat**

Wählt man Einzelleitfähigkeiten gibt es schöne Kurven, mit denen man die Gesamtleitfähigkeit als Summe der Einzelleitfähigkeiten erklären kann.

### Potentiometrische Kurven

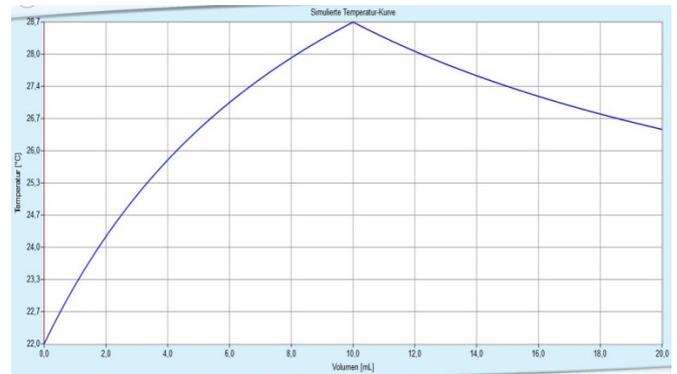
Es können argentometrische Titrationen (Vorlage von ein bis drei Halogeniden) mit Silber-Ionen-Lösung durchgeführt werden. Entsprechend kann bei der Cerimetrie (Vorlage: Eisenionen) mit Cer-Ionen titriert werden.

## Temperaturkurven

Man kann die Temperatur bei Neutralisationstiteration einer Säure mit einer Base verfolgen, **wenn die Konzentrationen hoch genug sind.**

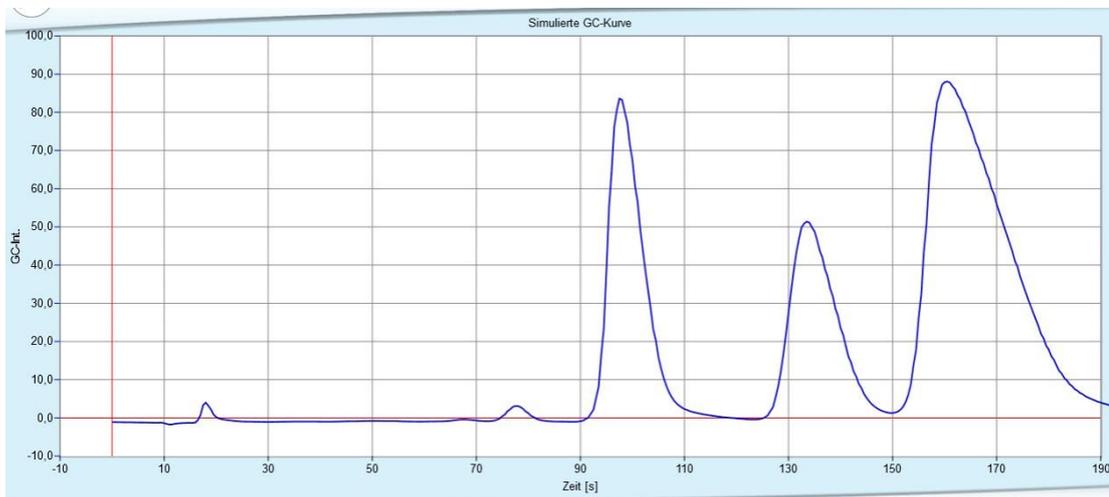
Simulation Temperaturkurve

<b>Vorlage: Säure</b>	<b>Titrator: Base</b>
Konzentr. (mol/L) <input type="text" value="1"/>	Konzentr. (mol/L) <input type="text" value="1"/>
Temperatur (°C) <input type="text" value="22"/>	Temperatur (°C) <input type="text" value="22"/>
Volumen (mL) <input type="text" value="10"/>	Volumen (mL) <input type="text" value="20"/>
	Intervall (mL) <input type="text" value="0.1"/>



## Gaschromatogramm Fl. Gas

Klickt man auf „Gaschromatogramm Fl. Gas“, erhält man eine fertige Kurve, an der man Auswertungen „üben“ kann.



## Kinetik

Kinetik: Bei Klick auf „Kinetik“ kann man eine Reaktionsordnung, die Anfangskonzentration, die Geschwindigkeitskonstante, das Zeitintervall und das Gesamtintervall auswählen.

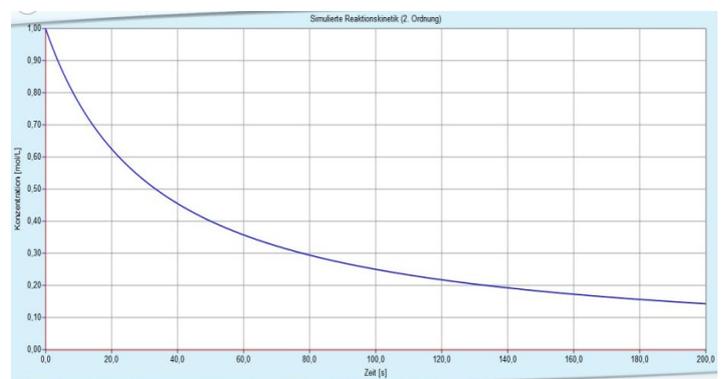
Simulation: Kinetik

**Reaktionsordnung**

- 0. Ordnung
- 1. Ordnung
- 2. Ordnung
- 3. Ordnung

**Parameter**      **Simulationsbereich**

Anfangs-Konzentr. (mol/L) <input type="text" value="1"/>	Zeitintervall (s) <input type="text" value="0.5"/>
Geschw.-Konstante (mol/L*s) <input type="text" value="0.03"/>	Gesamtintervall (s) <input type="text" value="200"/>



## Anhang

### Laden einiger spezieller Messreihen

Im Internet befinden sich einige wenige Datenreihen, die man beim Aufruf der AK MiniAnalytik mit einem angehängten Datenlade-Befehl einladen kann:

z.B.: <https://kappenberg.com/akminianalytik/minianalytik.html?load=xx.csv>

**Achtung:** Man sollte allerdings nach dem Laden mit dem „Hamburger Menü“ und „Eigenschaften“ die Ober- und Untergrenzen der Achsen und die Einteilung der Skalierungen (z.B. bei pH 14) anpassen.

Dies ist in z.B. folgendem Link eingebaut: [AK MiniAnalytik \(kappenberg.com\)](https://kappenberg.com/akminianalytik/minianalytik.html?load=xx.csv)

Weitere Beispiele:

[Neutralisationsenthalpie](#)

[Kinetik](#)

Hier ist zum Beispiel ein Video von der bergischen Universität Wuppertal:

Starke Säure mit starker Base:  8:49

Dazu das Arbeitsblatt MA01 