

Das Unsichtbare sichtbar machen Chemie lehren mit Simulationen auf der Teilchenebene



JÜRGEN SCHNITKER

Computerbasierte molekulare Modelle, die wissenschaftlich fundiert und daher manipulierbar sind und eine überzeugende dreidimensionale Darstellungen einschließen, erlauben es Lernenden aller Klassenstufen und Semester, Chemie auf der Teilchenebene zu erleben und zu verstehen. Dieser Artikel stellt ein Computerprogramm vor, das diese pädagogische Idee in einer interaktiven, erforschbaren Lernumgebung umsetzt. Nach einem Überblick über die Rolle der Modellierung auf der Teilchenebene in der schulischen Ausbildung werden die Grundlinien des Programms skizziert. Verschiedene Beispiele zu Standardunterrichtsthemen werden gegeben.

1 Einführung

Eines der Hauptprobleme für das Verständnis von Chemie bei Lernenden ist die Tatsache, dass Atome, Moleküle und Ionen unsichtbare Gebilde sind. Obwohl heutzutage durch Rastertunnelmikroskopie Abbildungen von bestimmten Molekülen und Atomen im Prinzip erhältlich sind, gewähren derartige Bilder bestenfalls einen flüchtigen Blick in die unglaublich reichhaltige und komplexe Teilchenwelt. Entsprechend basieren Deutungen für Prozesse auf der Teilchenebene eher auf der Vorstellungskraft als auf direkten Beobachtungen.

Nichtsdestotrotz gibt es einen einzigartigen Weg, submikroskopische Prozesse direkt sichtbar zu machen. Er wird durch die überragende Rechenleistung ermöglicht – eine Milliarde

Operationen pro Sekunde oder mehr –, die heutzutage von jedem handelsüblichen Computer erbracht wird. Dieser Ansatz umfasst die dreidimensionale molekulare Visualisierung, eine Technik die zumindest rudimentär seit drei Dekaden zur Verfügung steht. Die kumulativ erzielten Fortschritte im Bereich der Computerhardware und -software in dieser Zeitspanne erlauben heute eine gründliche und wissenschaftlich validierte Art der Visualisierung und Simulation auf der Teilchenebene (FRENKEL & SMIT, 2001; LEACH, 2001; YOUNG, 2001; HEHRE, 2003; CRAMER, 2004; SCHLICK, 2010; BLADON, GORTON & HAMMOND, 2011; LEWARS, 2016). Infolgedessen können wir nicht nur Abbildungen von Atomen, Ionen und Molekülen erzeugen, wir befähigen außerdem Lernende wortwörtlich zu sehen und zu erfahren, was auf der Teilchenebene geschieht: Das Unsichtbare wird sichtbar.

Es gibt einen zweiten Grund, warum eine Visualisierung und Simulation auf der Teilchenebene mit einer dezidierten wissenschaftlichen Basis so reizvoll ist. Pädagogen und Kognitionswissenschaftler wissen, dass Visualisierung ein sehr gutes Hilfsmittel zur Unterstützung des Lernprozesses ist, vielleicht sogar das beste. Es liegen jedoch Beweise vor, dass die Art der Visualisierung eine große Bedeutung hat. Nicht-interaktive, zweidimensionale Visualisierungen (Animationen, Videos, usw.) scheinen bei den Lernenden wenig zu bewirken (GEELANN, MUKHERJEE & MAHAFFY, 2004). Interaktive Visualisierungen, bei denen die Lernenden das vorgegebene Modell selbst sondieren, beeinflussen und sogar damit spielen können, sind weitaus effektiver. All dies wird möglich, wenn elementare Computerchemie für die Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen den Teilchen eines Modells genutzt wird. Dies räumt Schüler/innen und Student/innen die Möglichkeit ein, die Reaktion des untersuchten Systems auf veränderte physikalische Parameter zu beobachten. Es wird also ein vollwertiges Computerexperiment generiert, und aktives Lernen auf der Teilchenebene wird Realität.

Im Folgenden wird zuerst JOHNSTONES berühmtes erkenntnistheoretisches Dreieck verwendet, um den Stellenwert der Visualisierung der Teilchenebene im größeren Kontext der chemischen Bildung darzustellen. Anschließend zählen wir vier Themenbereiche auf, die zentral sind für die Teilchenstruktur der Materie (Infokasten 1) und auf die wissenschaftlich fundierte Modellierung erfolgreich Bezug nehmen kann.

- **Die diskrete Natur der Materie:** Materie ist nicht kontinuierlich, sondern besteht aus Atomen, Ionen und Molekülen.
- **Die quantenmechanische Natur der Materie:** Auf der atomaren und subatomaren Ebene zeigt Materie Eigenschaften, auf die uns die makroskopische Erfahrung nicht vorbereitet.
- **Die dynamische Natur der Materie:** Die Teilchen der molekularen Ebene sind nicht statisch, sondern in ständiger Bewegung.
- **Die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen der Materie:** Viele Prozesse reflektieren nicht die Eigenschaften einzelner (isolierter) Teilchen, sondern die Eigenschaften von Teilchen, die miteinander wechselwirken.

Infokasten 1. Vier zentrale Konzepte zur Teilchenstruktur der Materie

Das nachfolgende Kapitel beschäftigt sich mit der Skizzierung eines spezifischen Typs von Software zur Modellierung auf der Teilchenebene (Odyssey, o. J.), die von uns entwickelt wurde.

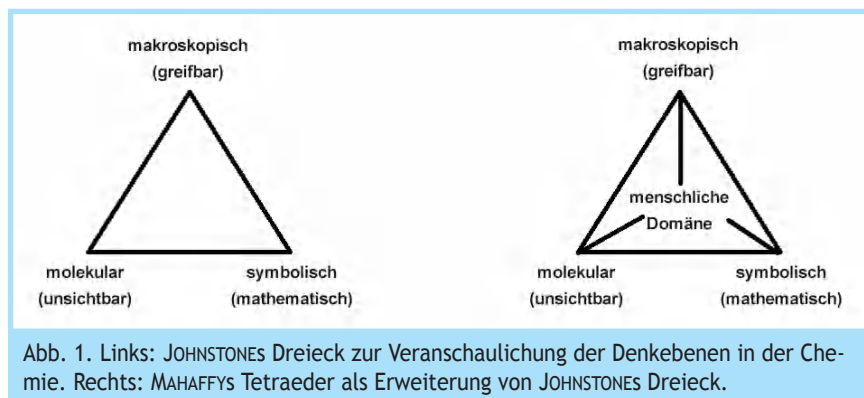


Abb. 1. Links: JOHNSTONES Dreieck zur Veranschaulichung der Denkebenen in der Chemie. Rechts: MAHAFFYS Tetraeder als Erweiterung von JOHNSTONES Dreieck.

Ein zentraler Punkt ist, dass die Software neben Visualisierungsroutinen auch physikalische Berechnungsroutinen für echte chemische Substanzen einschließt. Weiterhin beschäftigen wir uns in diesem Artikel mit Unterrichtsbeispielen, bei denen die Software eingesetzt wird, um die aufgelisteten Konzepte zu illustrieren. Einige Anmerkungen zum derzeitigen Einsatz der Software in allen Phasen des Chemieunterrichts runden diesen Beitrag ab.

2 Chemieunterricht und Teilchenebene

JOHNSTONE postulierte als erster in den frühen 80er Jahren, dass Chemie eine einzigartige, fachspezifische Herausforderung für den Lernenden darstellt (JOHNSTONE, 1982; JOHNSTONE, 2000). Der zugrundeliegende Sachverhalt hierfür besteht darin, dass vom Lernenden gleichzeitig drei grundverschiedene Ebenen des Denkens beherrscht werden müssen. Dies sind die makroskopische (greifbare) Domäne, die submikroskopische (unsichtbare) Domäne auf der Teilchenebene und die symbolische (mathematische) Domäne (Abb. 1, links). Diese Klassifikation ist mittlerweile ein weithin akzeptiertes Paradigma in der Chemiedidaktik. MAHAFFY erweiterte später das Dreieck von JOHNSTONE zu einem Tetraeder (Abb. 1, rechts), wobei der zusätzliche Eckpunkt die menschliche Domäne (der Alltagsbezug) ist (MAHAFFY, 2004; MAHAFFY, 2015). Es ist nicht übertrieben zu behaupten, dass jegliches Lernen von Chemie auf einem Umherschweifern innerhalb dieses abstrakten Tetraeders beruht. Die effektivste Trajektorie ist dabei unbekannt und sehr wahrscheinlich von Lernendem zu Lernendem sowie von Lehrendem zu Lehrendem verschieden. Sicher ist jedoch, dass mangelnde Bewegung innerhalb des Tetraeders zu einem mangelhaften Lernergebnis führt. MAHAFFY schrieb in diesem Kontext »chemistry is all about multiple representations« (MAHAFFY, 2006), was prinzipiell bedeutet, dass die Chemie buchstäblich von den vielfältigen Darstellungen eines Sachverhalts lebt (»Multiperspektivität«).

Materialien und unterstützende Werkzeuge sind für alle vier Domänen verfügbar:

- Online-Lernplattformen (wie z. B. AK MiniLabor, o. J.; oder im englischsprachigen Raum MasteringChemistry, o. J.; Owl, o. J.; Connect, o. J.; Webassign, o. J.; und Sapling Learning, o. J.) bieten eine weitreichende Abde-

ckung der symbolischen (mathematischen) Domäne in der Chemie. Als automatisierte und vollständig computerbasierte Systeme sind diese Plattformen unabhängig von der Klassengröße und dadurch allgegenwärtig in Hochschulkursen. In der Sekundarschulbildung hingegen sind die Klassengrößen kleiner und der traditionelle Lösungsansatz mit Papier, Stift, Tafel, Kreide oder Powerpoint-Präsentation ist noch weit verbreitet.

- Die menschliche Domäne wird in einigen moderneren Lehrbüchern abgedeckt. Zu diesen Büchern gehören z. B.: »Chemie im Kontext« (DEMUTH, PARCHMANN & RALLE, 2006), »Salters Chemie« (Salters Chemie, 2012) oder im englischsprachigen Raum »Chemistry in the Community« (für gymnasiale Oberstufen; American Chemical Society, 2011), »Chemistry in Context« (für Studenten der Geisteswissenschaften in Hochschulen; American Chemical Society, 2014) und »Chemistry: Human Activity, Chemical Reactivity« (für allgemeine Chemie mit Hochschulniveau; MAHAFFY, TASKER, BUCAT, KOTZ & WEAVER, 2014). Diese Bücher versuchen mühevoll, die traditionelle Vermittlung von Inhalten der Chemie in einen neuartigen, interessanten Kontext einzubetten, der Erfahrungen eines jeden Lernenden aus der realen Welt widerspiegelt. Nichtsdestotrotz gibt es immer noch viele traditionelle Lehrbücher, die eben im Bestfall nicht mehr als einen motivierenden Einstieg am Anfang eines jeden Kapitels aufweisen.
- (Nass-) chemische Experimente, seien sie traditionell aufgebaut oder im (Halb-) Mikromaßstab, gelten als Königsweg, um Lernende die makroskopische (greifbare) Domäne der Chemie erfahren zu lassen. Unglücklicherweise haben Sicherheitsbedenken, der benötigte Zeitaufwand und sicher auch die Kosten zu einer deutlichen Abnahme des Stellenwertes dieses Teils des Chemieunterrichts geführt.
- Traditionelle Werkzeuge wie Molekülbaukästen und sogar einfache Hilfsmittel wie Ballons zur Darstellung des Valenzschalen-Elektronenpaar-Abstoßungs-(VSPEA-)Modells, magnetische Wassermolekülmodelle zur Veranschaulichung von Wasserstoffbrückenbindungen oder komplementär eingeschnittene Holzteile zur Repräsentation der DNA-RNA-Basenpaarung erlauben es, den Lernenden zumindest in einem gewissen Rahmen die submikroskopische (unsichtbare) Teilchen-Domäne zu visualisieren. Computerbasiertes molekulares Modellieren, wie in dieser Veröffentlichung beschrieben, bietet eine attraktive und viel flexiblere Alternative, ist aber immer noch nicht weit verbreitet. Langfristig gesehen werden in diesem Bereich vermutlich Techniken der virtuellen Realität Einzug halten, aber es ist unwahrscheinlich, dass dies in der absehbaren Zukunft eine Option für den durchschnittlichen Chemieunterricht sein wird.

Zusammenfassend kann man sagen, dass es viele Hilfsmittel für die symbolische Domäne gibt, dass Materialien für die menschliche Domäne sicherlich verfügbar sind (auch wenn sie nicht hinreichend genutzt werden), und dass die makroskopische Domäne zunehmend unter Kosten und Sicherheitsaspekten leidet. In der submikroskopischen Domäne ist es lediglich der Mangel

an Bewusstsein in Bezug auf moderne Techniken, der einer verbesserten Lernerfahrung von Schülern und Studenten im Wege steht.

3 Molekulares Modellieren und die Konzepte der Teilchenstruktur der Materie

Modellieren auf der Teilchenebene auf einer fundierten wissenschaftlichen Basis besitzt das Potential, direkt und gezielt auf die oben erwähnten Konzepte einzugehen:

- Die diskrete Natur der Materie: Während Lehrkräfte und Lehrbücher seit vielen Jahren betonen, dass Materie aus Atomen, Ionen und Molekülen besteht, verdeutlicht die Bildungsforschung, dass die naive Vorstellung eines vorherrschenden Kontinuums hartnäckig bestehen bleibt (TSARPALIS & SEVIAN, 2013).
- Die quantenmechanische Natur der Materie: Während zeitgemäße Unterrichtsmethoden nicht mehr das Bohrsche Atommodell betonen, führen künstlerische Zeichnungen von Atomen, typischerweise im Kontext von Elektronenkonfigurationen, erneut zu stark irreführenden Ansichten (mit Elektronenpaaren, die wie geostationäre Satelliten den Atomkern umgeben, usw.). Die Visualisierung von Elektronendichteverteilungen kann auf direkte Weise illustrieren, dass das Teilchenmodell für die Beschreibung molekularer Prozesse *nicht* ausreichend ist (SHUSTERMAN & SHUSTERMAN, 1997; SHUSTERMAN & HOISTAD, 2001).
- Die dynamische Natur der Materie: Die meisten traditionellen Unterrichtsmaterialien vermitteln ein sehr statisches Bild von Teilchen und ihren Wechselwirkungen. In Wirklichkeit liegt Materie meistens *nicht* bei Temperaturen am absoluten Nullpunkt vor. Moleküle bewegen sich ununterbrochen, was tiefgreifende Konsequenzen für die physikalischen als auch chemischen Eigenschaften eines Systems hat.
- Die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen der Materie: Der Einfachheit halber tendiert der einleitende Chemieunterricht dazu, praktisch alle Phänomene anhand der Struktur von einzelnen Teilchen zu erklären. Intermolekulare Kräfte werden zwar in einer speziellen Unterrichtseinheit oder dem entsprechenden Lehrbuchkapitel eingestanden, aber anschließend wird zügig zu Erklärungen zurückgeschwenkt, die auf den Eigenschaften einzelner Teilchen basieren. Faktisch gesehen ist die Chemie einzelner Moleküle (d. h. die Chemie hochverdünnter Gase) eher eine Seltenheit. In realen Systemen spielen intermolekulare Wechselwirkungen und Lösungsmittelleffekte eine wichtige Rolle.

Nur der erste dieser Punkte, die diskrete Natur der Materie, wird von elementarer Visualisierungssoftware für Moleküle angesprochen (z. B. Jmol, o. J.; Molecules, o. J.). Für dynamische Phänomene gibt es Java Applets, drehbuchartige Animationen und manchmal auch Simulationen (PhET, o. J.; Molecular Workbench, o. J.; TANG & ABRAHAM, 2016), aber kaum etwas im Sinne eines allgemeinen Programms, das mit 3D-Modellen wirklicher

Substanzen arbeitet. Im Prinzip könnten forschungsorientierte Programme der Computerchemie genutzt werden, insbesondere auch für die Behandlung der quantenmechanischen Aspekte. Diese Programme gehen jedoch praktisch immer mit technischem Fachjargon und einem hohen Lernaufwand einher, ganz abgesehen von der Tatsache, dass sich die typische Benutzerschnittstelle kaum für den Klassenraumgebrauch eignet. Eine Alternative ist in Form der nachfolgend beschriebenen Software verfügbar.

4 Wissenschaftlich fundierte Software zur Teilchen-Modellierung im Chemieunterricht

Die Lehranwendung *Odyssey* ermöglicht 3D-Visualisierung auf der Teilchenebene und anspruchsvolles, physikalisches Modellieren, um Lernende mit der Teilchenwelt vertraut zu machen (Odyssey, o. J.). Im Grunde genommen generiert sie ein gigantisches Mikroskop, das die Betrachtung von Proben im Nanometermaßstab erlaubt (SCHNITKER, 2008). Fast alle Modelle in Odyssey werden mit Methoden der professionellen Computerchemie beschrieben, was sie »realistisch« erscheinen lässt. Eine kleine Anzahl der Modelle wird zweidimensional anstatt dreidimensional präsentiert, aber mehr oder weniger willkürliche Darstellungen, wie sie in fast allen anderen elektronischen Unterrichtsmaterialien vorherrschen, sind nicht vorhanden. Odyssey ist so konzipiert, dass es einen reichhaltigen Inhalt bietet und dem Nutzer »grenzenlos« erscheint, insoweit die Erstellung neuer Modelle und Simulationen ohne weiteres möglich ist. Das Programm läuft auf jedem im Handel erhältlichen Windows- oder Mac OS X-Rechner. Ausgewählte Lerneinheiten (für Ionenbindungen, VSPEA Theorie, usw.) sind auch als iPad-Apps erhältlich.

Odyssey ermöglicht dynamische Simulationen mit bis zu einigen tausend Atomen durch numerische Lösung (Integration) von NEWTONS klassischen Bewegungsgesetzen. Durch automatisierte Lösung der Schrödinger-Gleichung können auch Elektronendichteverteilungen für Moleküle mit bis zu 30 Atomen auf der Stelle berechnet und gezeigt werden. Alle Modelle werden interaktiv mit einem »Stop/Go«-Schalter für Simulationen und einem einfachen »Electrons«-Symbol für die Anfrage einer Elektronendichteverteilung gesteuert. Während die physikalischen Bedingungen (Partikelpositionierung, Temperatur und Systemvolumen) vom Benutzer einfach eingestellt werden können, ist die Spezifikation von technischen Details (wie z. B. die numerischen Parameter für die Wechselwirkung zwischen den Atomen, der Typ des statistisch-mechanischen Ensembles, die Größe des Zeitschrittes für die Integration, usw.) nie erforderlich. Dies unterscheidet Odyssey drastisch von anderen Programmen für Simulationen auf der Teilchenebene und die Quantenchemie. Das Abschicken einer Rechnung

(traditionell als »Job« bezeichnet) und das anschließende Sichten einer Unmenge an Ausgabedaten entfallen vollständig.

Modelle können in Odyssey entweder von Grund auf erstellt werden oder aus einem Archiv mit mehr als 3000 vorentwickelten Modellen entnommen und modifiziert werden. Das Archiv enthält Modelle von sowohl kleinen als auch großen Molekülen sowie von Systemen im festen, flüssigen, gasförmigen oder gelösten Zustand (typischerweise aus mehreren zehn oder hundert Molekülen bestehend). Systeme verschiedenster Art wie z. B. Wasserstoffgas, ionische wässrige Lösungen, Graphit oder DNA können alle mit der gleichen Benutzerschnittstelle simuliert und untersucht werden.

Odyssey enthält mehrere hundert unabhängige Lerneinheiten, sogenannte virtuelle Teilchenlabore (engl.: »molecular labs«), wobei jede Einheit die Erforschung einer gewissen Anzahl von Hypothesen erlaubt. Abbildung 2 zeigt einen beispielhaften Schnappschuss des virtuellen Teilchenlabors für die Messung des Gasdrucks. Links im Bild sieht man das Teilchenmodell. Die meisten Labore haben eine Vielzahl mit ihnen verknüpfter Modelle, entweder, weil verschiedene Aspekte beleuchtet werden sollen oder um dem Nutzer eine Wahlmöglichkeit zu bieten. Die rechte Seite des Bildes enthält das Aktivitätsprotokoll. Es besteht typischerweise aus einer kurzen Sachanalyse, Knöpfen für das Navigieren im Satz von Modellen, Hinweisen/Anweisungen für das Sammeln von Daten und entsprechend sortierten Kommentaren. In vielen Fällen folgt auf das Aktivitätsprotokoll eine Anzahl von Fragen mit frei ausfüllbaren Antwortbereichen, die nach Beendigung des Programms erhalten bleiben. Die Antworten können ausgedruckt oder als eine HTML-Datei gespeichert werden. Ein »Clear«-Knopf ermöglicht anschließend das Löschen aller auf dem Computer eingegebenen Antworten. In einer Version für die Lehrkräfte (engl.: »Instructor's Edition«) sind für die einzelnen Labore jeweils eine Liste von typischen nicht-belastbaren Vorstellungen (»misconceptions«) zum aktuellen Thema und die Antwortschlüssel für die zugehörigen Fragen integriert.

Während Odyssey bestimmte fundamentale Themengebiete der Chemie tiefgehend abdeckt, ist der Nutzer nicht auf die bereit-

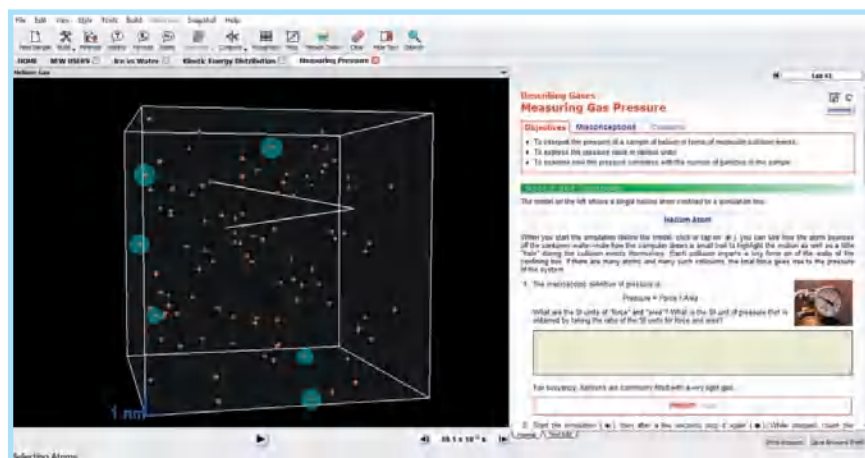


Abb. 2. Desktop-Schnappschuss des molekularen Labors für die Messung des Gasdrucks.

gestellten Bereiche beschränkt. Mit allgemeinen Werkzeugen für die Erstellung von Objekten auf der Teilchenebene und mit universell einsetzbaren Routinen für klassische Simulationen und quantenmechanische Rechnungen können die vielfältigsten Ideen und Hypothesen verfolgt werden.

Im Folgenden werden wir einige Themengebiete ansprechen, bei denen die Kombination aus molekularer Visualisierung und physikalischem Modellieren genutzt wird, um das Lernen von Teilchenkonzepten zu unterstützen.

5 Unterrichtsbeispiele

5.1 Kinetische Gastheorie und Aggregatzustände

Die Teilchenstruktur der Materie stellt ein Basiskonzept der Chemie dar. Viele Studien haben bewiesen, dass viel zu oft nicht-belastbare Vorstellungen über die kinetische Gastheorie und die molekulare Natur der Aggregatzustände vorherrschen (GABEL, SAMUEL & HUNN, 1987; BODNER, 1991; HORTON, 2007; TSAPARLIS & SEVIAN, 2013). Hier sind einige Beispiele (siehe auch Online-Ergänzung):

- Alle Teilchen eines Gases bewegen sich mit gleicher Geschwindigkeit, die in Abhängigkeit von der Temperatur berechnet werden kann.
- Große Teilchen beinhalten mehr translatorische kinetische Energie als kleine Teilchen bei gleicher Temperatur.
- Die Teilchen in Gasen haben eine andere Beschaffenheit als die in Flüssigkeiten, und die Partikel von Flüssigkeiten haben andere Eigenschaften als die in Feststoffen.
- Teilchen in Flüssigkeiten bewegen sich langsamer als Teilchen in Gasen bei gleicher Temperatur.
- Die Teilchen in Feststoffen bewegen sich nicht.

Um diesen Vorstellungen entgegenzuwirken, ermöglicht Odyssey Simulationen von Teilchen verschiedener Verbindungen bei unterschiedlichen Temperaturen und bei unterschiedlichem Aggregatzustand. Die kinetischen und energetischen Haupteigenschaften (Geschwindigkeit, Temperatur, totale kinetische Energie etc.) können numerisch abgefragt und dargestellt werden (Abb. 3). Oft reicht es aber bereits, die aufschlussreichen Simulationen einfach anzuschauen. Eine Vielzahl an Anzeigeoptionen ist verfügbar, um verschiedene Eigenschaften der Teilchenbewegung hervorzuheben:

- Kollisionen mit Wänden des Simulationsraums (Abb. 2) oder mit anderen Molekülen können visuell und (optional) mit einem akustischen Signal hervorgehoben werden. (Der Lehrer sollte hervorheben, dass diese Signale künstlich sind und von dem Computer nur zur

Illustration erzeugt werden. Um den rechnerischen Aufwand in Schranken zu halten und den Lernenden nicht mit visueller Information zu überwäligen, werden auch die »Wände« ohne molekulares Detail simuliert und gezeigt.)

- Der Weg eines Teilchens (Abb. 2 und Abb. 3) oder mehrerer Moleküle kann verfolgt werden, was die dramatischen Unterschiede der Bewegung in der Gasphase (ballistisch) und in flüssigkeitsähnlichen Zuständen (Brownsche Molekularbewegung) hervorhebt.
- Moleküle können entsprechend ihrer aktuellen translatorischen Energie farbkodiert dargestellt werden (Abb. 3).

Zwei Modelle können auch nebeneinander angezeigt werden, wie in Abbildung 4 für Eis und flüssiges Wasser dargestellt. Die zwei Systeme können einzeln oder gleichzeitig simuliert werden, so dass die Zeit mit der gleichen Geschwindigkeit verstreicht. Es ist bemerkenswert, wie offen die Struktur von Eis im linken Modell der Abbildung 4 ist. Der Beobachter kann geradewegs durch die kanalartigen Hohlräume des Molekülgitters schauen. Dies ist bei Feststoffen normalerweise nicht der Fall und liefert so ein Bild auf der Teilchenebene, bei dem der Lernende die alltägliche Beobachtung, dass Eis auf dem Wasser schwimmt, nachvollziehen und deuten kann.

5.2 Die Elektronenwolke der Atome und die Polarität von Molekülen

Sobald ein molekulares Labor in Odyssey eine Elektronendichteverteilung zeigt, ist die quantenchemische Natur der Materie vorherrschend. Betrachtet man die grundlegenden Bausteine der Materie, existieren viele nicht-belastbare Vorstellungen bezüglich der atomaren Struktur, trotz der intensiven Behandlung in jedem Chemiebuch (siehe auch Online-Ergänzung):

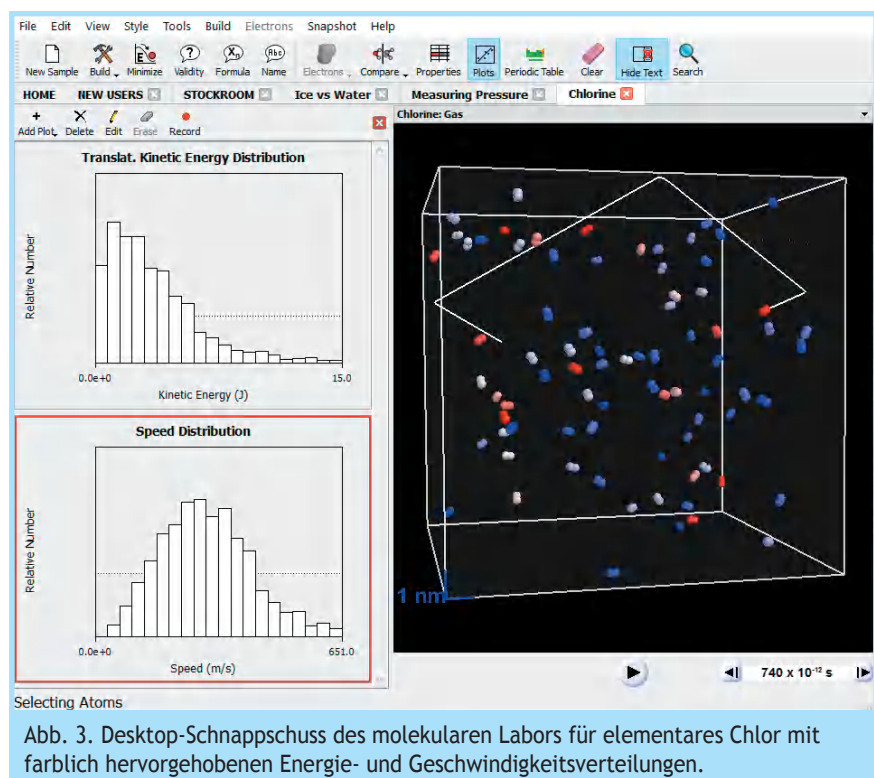


Abb. 3. Desktop-Schnappschuss des molekularen Labors für elementares Chlor mit farblich hervorgehobenen Energie- und Geschwindigkeitsverteilungen.

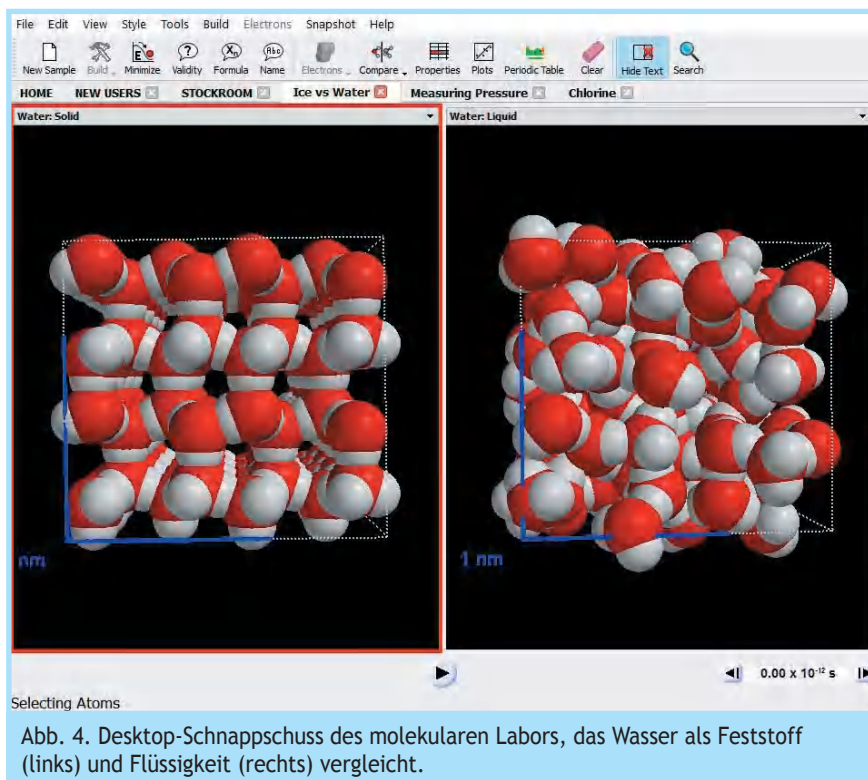


Abb. 4. Desktop-Schnappschuss des molekularen Labors, das Wasser als Feststoff (links) und Flüssigkeit (rechts) vergleicht.

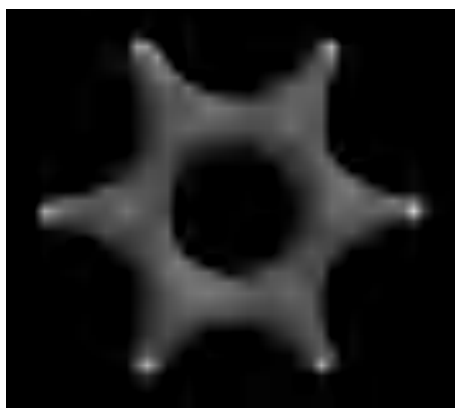


Abb. 5. Isoflächen: Darstellung der Elektronenwolke von Benzol bei einem hohen Isowert.

- Atome haben Eigenschaften vergleichbar mit massiven Billardkugeln.
- Die Elektronenwolke umgibt den Nukleus wie eine Sphäre in einem bestimmten Abstand zum Kern.
- Elektronen sind am wahrscheinlichsten in einer bestimmten Distanz um den Kern kreisend anzutreffen.

Odyssey enthält eine Lerneinheit »Examining an Argon Atom«, bei der die Nutzer die Elektronenwolke von Argon untersuchen können, so wie sie ausgehend von grundlegenden Prinzipien berechnet wird (in diesem Fall handelt es sich nicht um eine Rechnung in Echtzeit, sondern um die Visualisierung von vorgerechneten

ten und im Programm hinterlegten Daten). Die entscheidende Eigenschaft ist die Elektronendichte (Elektronen/pm³), die durch die Fläche im Raum visualisiert wird, die Punkte mit der gleichen Elektronendichte verbindet (Isofläche). Es sind 20 dieser Isoflächen verfügbar, die sich im Elektronendichtewert (Isowert) unterscheiden. Beim Durchlaufen der Isoflächen für allmählich steigende Isowerte sieht der Lernende automatisch, wo die Elektronendichte am höchsten ist. Das Maximum der Elektronendichte ist am Atomkern und nicht bei irgendeiner Distanz Δy vom Kern entfernt. Mit zunehmender Entfernung vom Kern sinkt die Elektronendichte. Der Lernende erkennt, dass es bei Atomen keine wohldefinierte Grenze gibt.

Isoflächen der Elektronendichte sind auch für die Illustration von kovalenten Bindungen in Molekülen nützlich. Abbildung 5 zeigt die Elektronenwolke von Benzol bei einem hohen Isowert für die Elektronendichte. Lernende können die

kovalenten Bindungen sehen, ohne auf die mysteriöse Darstellungsoption in Form von Stäbchen zurückzugreifen zu müssen, bei der die Atome ad hoc durch eine Linie miteinander verbunden sind.

Ein Folgeschritt ist die Farbkodierung der Elektronendichte-Isoflächen in Abhängigkeit von der Polarität. Bereiche die effektiv einer positiven Ladung entsprechen, sind blau gefärbt und Bereiche mit einer effektiv negativen Ladung rot. Abbildung 6 zeigt ein Wassermolekül als ein konventionell raumfüllendes Modell (links: Atome als Kalottenmodell dargestellt), mit seiner Polaritätskarte (Mitte: strukturelle Eigenschaften basierend auf quantenchemischen Berechnungen) und mit einer Cartoon-Darstellung der freien Elektronenpaare (rechts: eine unrealistische, aber hermeneutisch nützliche Darstellung).

5.3 Reaktive Kollisionen zwischen Molekülen

Die dynamische Natur von Materie ist sowohl in der kinetischen Gastheorie als auch in dem, was Chemie ausmacht, nämlich der

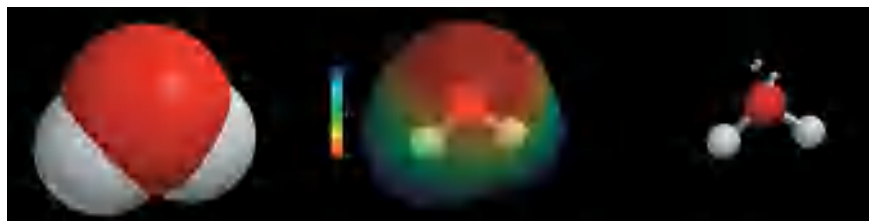


Abb. 6. Wassermolekül in verschiedenen Darstellungen. Links: Sphärische Darstellung (Kalottenmodell). Mitte: Mit Polaritätskarte und strukturellen Daten aus quantenchemischen Rechnungen. Rechts: Quantenchemische Struktur erweitert um Cartoon-Darstellung der freien Elektronenpaare.

Stoffumwandlung auf der Basis von real dargestellten Reaktionen, offensichtlich. Auch hier gibt es wieder klassische nicht-belastbare Vorstellungen (siehe auch Online-Ergänzung):

- Reaktionen basieren auf dem Vorhandensein eines aktiven Reaktionspartners und eines passiven Substrats.
- Teilchen reagieren immer, wenn sie miteinander kollidieren.
- Reaktionen schreiten nur in einer Richtung fort.

Echtzeitsimulationen des Bindungsbruches und die Neubildung von kovalenten Bindungen in einer frei wählbaren chemischen Reaktion würden das Lösen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung während der Simulation erfordern. Das ist eine Mammutaufgabe, die weit über die Leistung selbst der schnellsten heutigen Rechner hinausgeht. Durch das Wählen eines spezifischen Beispiels, nämlich die Bildung von NO_2F aus Stickstoffdioxid (NO_2) und elementarem Fluor (F_2), und die Approximation der quantenchemischen Beschreibung mit einer komplizierten, parameterreichen klassischen Beschreibung, ist es Odyssey möglich, eine detaillierte Studie der Dynamik einer realen chemischen Reaktion zu erzeugen.

Abbildung 7 zeigt überlagerte Schnappschüsse der elementaren Schritte der gerade genannten Reaktion ($\text{NO}_2 + \text{F}_2 \rightleftharpoons \text{NO}_2\text{F} + \text{F}$). Odyssey ist dabei in der Lage, die Reaktion in beide Richtungen des Gleichgewichts darzustellen. Der Nutzer hat die Möglichkeit, die NO_2 - und F_2 -Moleküle aufeinander zu »schießen«. Das Besondere ist, dass ein reaktives Ereignis nur stattfindet, wenn beide Reaktionspartner eine

- spezifische gemeinsame Ausrichtung und
- ausreichend große kinetische Energie besitzen.

Das zugehörige molekulare Labor beinhaltet zwar Anweisungen, wie die beiden Faktoren zu kontrollieren sind, aber nicht, was die exakten Bedingungen für eine erfolgreiche Reaktion sind. Dies ermöglicht den Lernenden den sterischen Einfluss und die Aktivierungsenergie einer realen chemischen Reaktion empirisch zu bestimmen.

5.4 Die treibende Kraft beim Lösen von Salzen

Viele physikalische und chemische Eigenschaften können nur wirklich verstanden werden, wenn die Wechselwirkungen der Teilchen der Materie in Betracht gezogen werden. Vorgänge wie der Lösungsprozess, der Unterschied zwischen Lösen und Schmelzen (EILKS, 2003) und das generelle Thema der Mischbarkeit sind von vielen nicht-belastbaren Vorstellungen geprägt (siehe auch Online-Ergänzung):

- Ionen in Lösungen treten in Paaren auf.
- Eisartige Strukturen umgeben die gelösten Ionen in Lösung.
- Öl und Wasser vermischen sich nicht aufgrund der Abstoßung der verschiedenen Moleküle.

Abbildung 8 zeigt einen Schnappschuss der Solvatationshülle von Na^+ in wässriger Lösung von Natriumchlorid. Das simulierte System enthält mehr als hundert Wassermoleküle, es wurde aber eine »Schnittstellensphäre« aktiviert, um die lokale Umgebung des Solvats und somit nur einige wenige Moleküle zu

visualisieren. Gut zu erkennen ist, wie die mit gelben Pfeilen kenntlich gemachten Polaritäten der Wassermoleküle mit den Spitzen tendenziell in Richtung des Kations weisen und somit die starken Ion-Dipol-Kräfte, die in diesem System wirken, aufzeigen. Genau diese Wechselwirkung ist der Grund, dass die Gitterenergie des Natriumchlorid-Gitters überwunden wird, wenn das Salz solvatisiert wird. Wird die Ladung des Kations erhöht – was eine Standardeinstellungsmöglichkeit für Versuche an Rechnern darstellt, aber in einem normalen Experiment niemals möglich wäre – kann der Nutzer sehen, wie die Lösungsmittelmoleküle sich aufgrund ihrer Dipoleigenschaften enger anordnen.

5.5 Korrekturmöglichkeiten von nicht-belastbaren Vorstellungen mit Hilfe von Odyssey

Siehe Online-Ergänzung.

6 Abschließende Bemerkungen

Forschungsergebnisse zeigen, dass viele nicht-belastbare Vorstellungen sich unerwartet hartnäckig halten und das auch im Angesicht von widersprechenden Beweisen (HORTON, 2007; TSARPALIS & SEVIAN, 2013). Der Verstand des Lernenden denkt

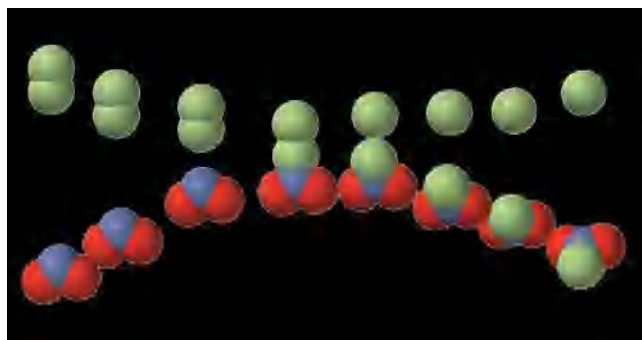


Abb. 7. Überlagerte Schnappschüsse der elementaren Reaktion von Stickstoffdioxid (NO_2) und elementarem Fluor (F_2) zu NO_2F und F .

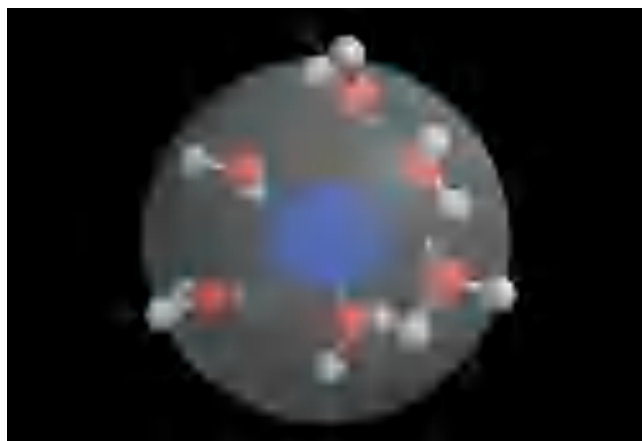


Abb. 8. Schnappschuss der Solvatationshülle von (Na^+) in wässriger Lösung von Natriumchlorid.

sich eher kunstvolle Konstrukte einer fehlerhaften Sichtweise aus, als nicht-belastbare Annahmen zu verwerfen. Abweichende Fallbeispiele (LIEM, 1987) und starke visuelle Beispiele sind des Lehrenden bester Freund, um diesen »Wall aus Widerstand« einzureißen. Modellierungssoftware auf der Teilchenebene, wie sie in diesem Artikel beschrieben wird (sowie in naher Zukunft vermutlich ihr Äquivalent für die virtuelle Realität), bietet eine unerschöpfliche Werkzeugkiste für die Erzeugung von effektiven visuellen Beispielen. Solche Software ist jedoch nicht nur ein Hilfsmittel für die Aufklärung von physikalischen und chemischen Konzepten: Ein hocharbeitender Nebeneffekt ist, dass der Lernende ein *Gefühl* für Ereignisse auf der Teilchenebene entwickeln kann.

Odyssey wird an vielen Schulen und Universitäten in den USA, Kanada, Großbritannien, Australien, und einigen anderen Ländern eingesetzt. Die Nutzung ist beinahe gleichmäßig verteilt zwischen Sekundarschulbildung (High Schools) und Hochschulbildung (erstes Jahr im College). Die Software wird in ungefähr gleichem Umfang für Demonstrationen durch Lehrkräfte und für Computereperimente in Schülerlaboren eingesetzt. High Schools, die jedem Lernenden einen Laptop permanent zur Verfügung stellen (One-to-One-Programm), erhalten die Software mit einer Lizenzart, die eine Verwendung zu Hause gestattet. Der Gebrauch der Software ist vereinzelt dokumentiert worden (BURKHOLDER, PURSER & COLE, 2008), aber extensive Feldstudien wurden bisher nicht unternommen.

Beachtet werden sollte bei Einsatz der Software, dass es keinen zwingenden Grund gibt, bei jeder Anwendung unverzüglich die Erfahrungen auf der Teilchenebene mit tiefgründigen Analysen zu verknüpfen. Das kann zu einem späteren Zeitpunkt erfolgen. Aber eine frühe Veranschaulichung der Materie mit einem computerbasierten Mikroskop, um zu sehen wie Materie nach aktuellen wissenschaftlichen Erkenntnissen aufgebaut ist, kann möglicherweise den Grundstein für ein nachhaltiges Verständnis chemischer Vorgänge legen.

Literatur

Die umfangreichen Literaturhinweise und weitere Ergänzungen zum Beitrag können von der MNU-Homepage geladen werden (<http://www.mnu.de/zeitschriften/224-2016-06>).

Das Manuskript wurde von PETER TROJANOWSKI und WOLFGANG KIRSCH aus dem Englischen übersetzt.

Testversion und Bezugsquelle

Interessenten können kostenlos eine 30-Tage-Instructor-Odyssey-Vollversion zu Testzwecken erhalten: http://www.wavefun.com/products/demo_odyssey.html (01.09.2016)

Bezugsquelle in Deutschland:
<http://software.additive-net.de/de/produkte/wavefunction/odyssey> (01.09.2016).



JÜRGEN SCHNITKER, jurgen@wavefun.com (Wavefunction, 18401 Von Karman #370, Irvine, CA 92612, hat Chemie an der RWTH Aachen und der University of Texas studiert und an der University of Michigan unterrichtet. Er ist der Begründer der Computersoftware Odyssey und leitet deren Entwicklung.

Ich danke PETER TROJANOWSKI (Fa. Additive) für die Übersetzung des Manuskripts und WOLFGANG KIRSCH für viele Anregungen und Verbesserungsvorschläge. ■

Ch 16/06 Ki_Online-Ergänzung



Das Unsichtbare sichtbar machen

Chemie lehren mit Simulationen auf der Teilchenebene

////////////////////////////////////
JÜRGEN SCHNITKER
////////////////////////////////////

Online-Ergänzung

5.5 Korrekturmöglichkeiten von nicht-belastbaren Vorstellungen mit Hilfe von Odyssey

a) Geschwindigkeit der Teilchen in Gasen

The screenshot displays the Odyssey Molecular Explorer software. The main window shows a 3D simulation of Argon gas molecules in a cubic container. The molecules are represented as small spheres with trails indicating their movement. The temperature is set to 3.20×10^{12} s. The right-hand panel contains a 'Kinetic Theory' section with 'The Meaning of Temperature' and 'Monatomic Gas' sub-sections. It includes objectives, misconceptions, and a list of instructions for the user to explore the relationship between temperature and kinetic energy. A 'Temperature (°C)' slider is visible, ranging from -100 to 727. The bottom status bar shows 'Selecting Atoms' and '3.20 x 10¹² s'.

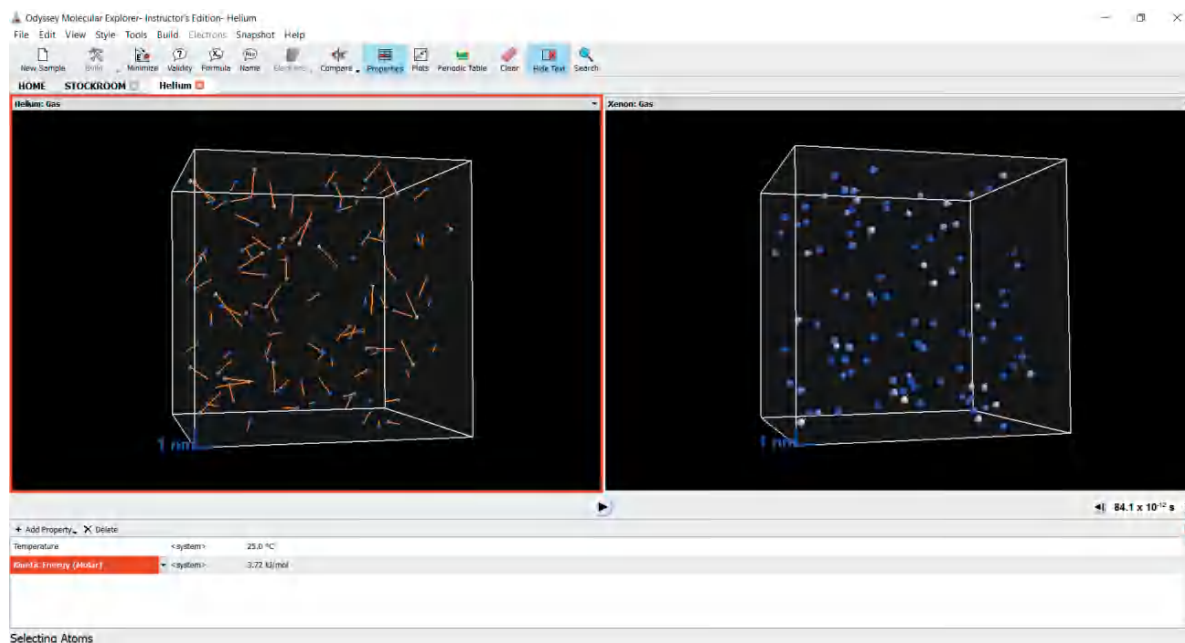
Nicht-belastbare Vorstellung:

„Alle Teilchen eines Gases bewegen sich mit gleicher Geschwindigkeit, die in Abhängigkeit von der Temperatur berechnet werden kann.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Gezeigt ist das molekulare Labor für die Beziehung zwischen kinetischer Energie und Temperatur. Die Atome der Probe von Argon sind entsprechend der kinetischen Energie eingefärbt (blau → kalt / rot → heiß). Die Teilchenspuren („Trails“) werden gezeigt; sie sind umso länger, je höher die Geschwindigkeit ist. Es ist offensichtlich, dass sich die Teilchen keinesfalls mit der gleichen Geschwindigkeit bewegen.

b) Kinetische Energie bei kleinen und großen Teilchen



Nicht-belastbare Vorstellung:

„Große Teilchen beinhalten mehr translatorische kinetische Energie als kleine Teilchen bei gleicher Temperatur.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Gezeigt sind eine Probe von Helium (ein Beispiel von kleinen Teilchen; verfügbar im „Molecular Stockroom“) und eine Probe von Xenon (ein Beispiel von großen Teilchen; auch verfügbar im „Molecular Stockroom“, kann mittels der „Search“-Funktion direkt dem Modell von Argon gegenübergestellt werden); beide Proben haben die gleiche Temperatur. Die Simulationen der Modelle sind synchronisiert und die Geschwindigkeitsvektoren („Velocities“) werden gezeigt (für Xenon sind die Pfeile so kurz, dass sie nur gerade eben erkennbar sind). Die Teilchen sind außerdem mit der entsprechenden kinetischen Energie eingefärbt, und der Energiebereich ist für das Minimum auf 0 kJ/mol und für das Maximum auf 20 kJ/mol eingestellt. Der numerische Wert der kinetischen Energie ist auch als „Property“ am unteren Rand angezeigt. Es kann geschlossen werden, dass sich die Teilchen mit sehr verschiedenen Geschwindigkeiten bewegen, aber nichtsdestotrotz die gleiche kinetische Energie tragen.

c) Eigenschaften von Teilchen in verschiedenen Aggregatzuständen

The screenshot shows the Odyssey Molecular Explorer software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a water droplet, with red spheres representing oxygen atoms and white spheres representing hydrogen atoms. The interface includes a menu bar (File, Edit, View, Style, Tools, Build, Electrons, Snapshot, Help) and a toolbar with various icons. The right-hand side of the interface features a control panel titled "Water at the Molecular Level Examining the Medium of Life". This panel includes sections for "Objectives", "Misconceptions", "Glossary", and "Comments". Below these are sections for "Molecule" (Space Filling, Ball and Spoke, Tube, Ball and Wire), "Interaction Between Molecules" (Dimer, Droplet, Droplet, Superheated), "Physical States" (Solid, Liquid, Gas), "Electron Cloud" (Water Molecule, Hydronium, Hydroxide), and "Molecular Vibrations". The "Droplet, Superheated" option is highlighted in red. The bottom of the interface shows a "Selecting Atoms" status bar and a "Print Answers" button.

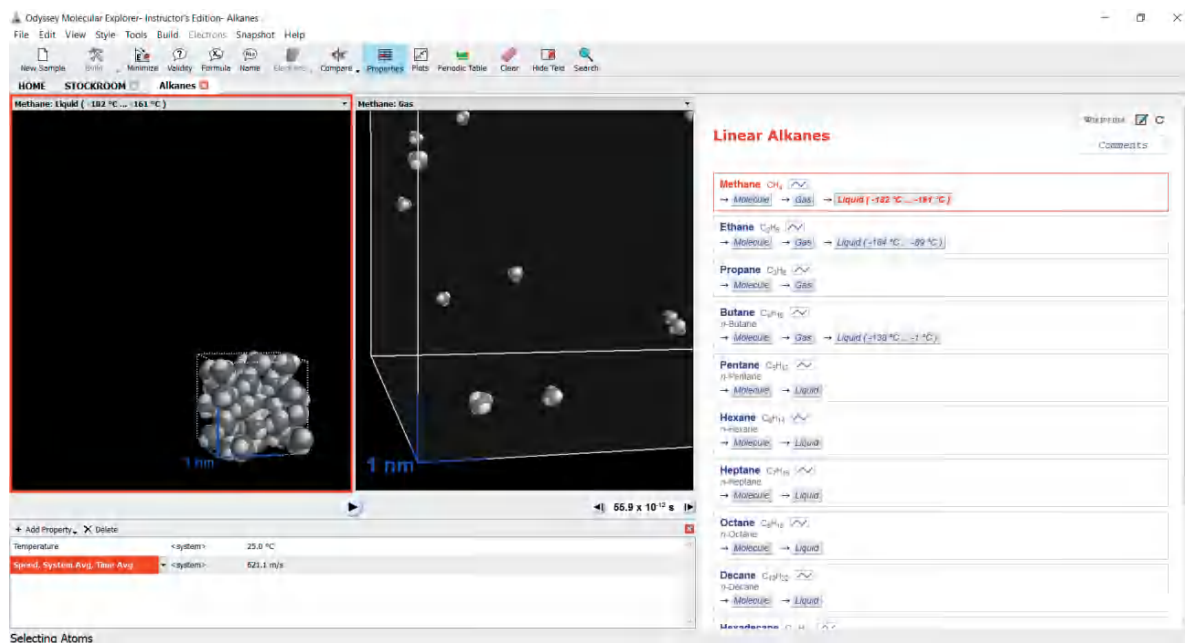
Nicht-belastbare Vorstellung:

„Die Teilchen in Gasen haben eine andere Beschaffenheit als die in Flüssigkeiten, und die Partikel von Flüssigkeiten haben andere Eigenschaften als die in Feststoffen.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Odyssey enthält ein molekulares Labor mit zahlreichen Modellen von Wasser und anderen wässrigen Systemen. Im gezeigten Beispiel geht ein Wassertropfen (→ flüssige Phase) auf Grund der hohen Temperatur in die Gasphase über. Es ist offensichtlich, dass die Eigenschaften der Moleküle wie beispielsweise der Dipolcharakter unabhängig vom Aggregatzustand gleichbleiben.

d) Geschwindigkeit von Teilchen in Flüssigkeiten und in Gasen bei gleicher Temperatur

**Nicht-belastbare Vorstellung:**

„Teilchen in Flüssigkeiten bewegen sich langsamer als Teilchen in Gasen bei gleicher Temperatur.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Das linke Modell ist eine Probe von flüssigem Methan aus dem „Molecular Stockroom“, deren Temperatur von dem ursprünglichen Wert auf 25 °C erhöht ist (die Probe geht nicht in die Gasphase über, weil das Zellvolumen trotz des enormen Druckes konstant gehalten wird). Mit Hilfe der „Compare“-Funktion wird die Probe dann mit gasförmigen Methan verglichen. Die Simulationen sind synchronisiert und beide Modelle sind so gezoomt, dass sie im ungefähr gleichen Maßstab gezeigt werden. Obwohl die Dynamik der beiden Systeme sehr verschieden aussieht, ist die Durchschnittsgeschwindigkeit (der angezeigte Wert unterhalb der Proben ist „Time-Averaged“) ~620 m/s für beide Fälle.

e) Bewegung von Teilchen im festen Aggregatzustand

The screenshot displays the Odyssey Molecular Explorer software. The main window shows a 3D model of a solid bromine crystal lattice. The particles are represented as red spheres connected by white lines, forming a regular grid. The model is set to a temperature of -7 °C . A scale bar indicates 1 nm . The right-hand panel, titled "The States of Matter Molecular Motion", contains several sections:

- Objectives:**
 - To establish some universal differences with regard to the molecular motion in gases, liquids, and solids.
 - To identify Brownian motion trails in liquids.
- Models:**

Examine the following samples for the three phases of bromine and water:

Bromine Br_2 (g)	Water H_2O (g)
Bromine Br_2 (l)	Water H_2O (l)
Bromine Br_2 (s)	Water H_2O (s)
- Style:**
 - Space Filling
 - Ball and Spoke
 - Ball and Wire (selected)
 - Wire
 - Tube
 - Hide
- Trails:**
 - Trails
 - Hide
 - Show (selected)
- Questions:**

1. Is there net motion of the particles over time, i.e. do the molecules migrate away from their original positions? Give separate answers for gas, liquid, and solid.

Nicht-belastbare Vorstellung:

„Die Teilchen in Feststoffen bewegen sich nicht.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Gezeigt ist ein molekulares Labor, das die Teilchenbewegung für die verschiedenen Aggregatzustände vergleicht. Die Probe von festem Brom ist sichtbar mit Anzeige der Teilchenspuren („Trails“). Es ist offensichtlich, dass sich die Teilchen an Ort und Stelle oszillieren, ohne die Gitterplätze dabei zu verlassen.

f) Struktur von Atomen

The screenshot displays the Odyssey Molecular Explorer software interface. The main window is titled "Argon Atom" and shows two panels: "Neon: Electron Density" on the left and "Xenon: Electron Density" on the right. Both panels show a central white sphere representing the nucleus, surrounded by concentric, semi-transparent electron density shells. The Xenon atom is significantly larger than the Neon atom. On the right side of the interface, there is a sidebar with the following text and questions:

The following models show the electron density for another two kinds of noble gas atoms.

Neon **Xenon**

Isosurfaces for the total density are displayed in four different styles:
Dots / Mesh / Solid / Transparent.

10. For the neon atom, which style corresponds to the greatest density of electrons? Which style corresponds to the least dense region?

11. Are the surfaces for the xenon atom ordered the same way as for the neon atom?

12. You determined earlier where an argon atom has the maximum of its electron density. Are the shown surfaces for neon and xenon consistent with your findings for argon?

13. Find the total number of electrons for xenon and neon from the Periodic Table. What is the ratio of the number of electrons (heavier element/lighter element)?

14. If

- atoms were spheres and
- the electron density was uniform and

Buttons at the bottom right include "Print Answers" and "Save Answers (New)".

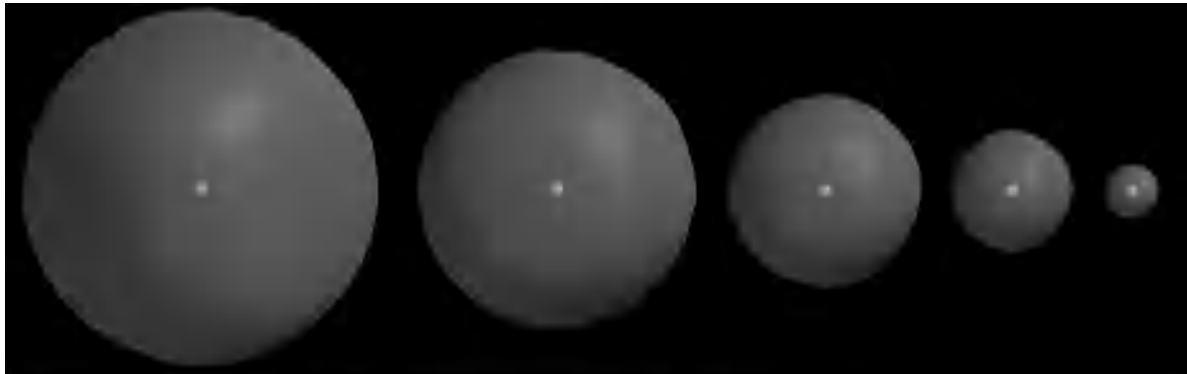
Nicht-belastbare Vorstellung:

„Atome haben Eigenschaften vergleichbar mit massiven Billardkugeln.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:


Gezeigt sind zwei Modelle aus dem Labor zur Veranschaulichung der Elektronendichteverteilung von Argon. Die Elektronenwolken von Neon und Xenon sind mittels von vier Elektronendichte-Isosflächen (mit den höheren Isowerten in Kernnähe und den niedrigeren Isowerten in Kernferne) veranschaulicht. Es kann geschlossen werden, dass die beiden Atome keine wohldefinierte Grenze haben.

g) Abstand der Elektronen (-wolke) vom Kern



You can use the following control to inspect electron density surfaces for different isovalues:

LOW.....Electronic Density.....HIGH



Note that the 20 isosurfaces shown are just "snapshots" for certain values of the electron density. In principle, there are as many snapshots as you wish, and the sequence also extends to even lower values on the left and to even higher values on the right. (The underlying calculations are very difficult and treacherous close to the nuclear position, and therefore the results shown do not include any surfaces for isovalues larger than $\sim 3.5 \cdot 10^{-6} \text{ e/pm}^3$.)

Nicht-belastbare Vorstellung:

„Die Elektronenwolke umgibt den Nukleus wie eine Sphäre in einem bestimmten Abstand zum Kern.“

Relevantes Odyssee-Beispiel:

Das molekulare Labor für die Elektronendichteverteilung von Argon erlaubt es die Elektronenwolke mittels eines „Sliders“ schrittweise zu durchlaufen (fünf Isoflächen sind als Beispiel in der Abbildung gleichzeitig gezeigt). Es ist offensichtlich, dass sich die Elektronenwolke nicht in einem bestimmten Abstand vom Kern befindet.

The Electron Cloud Model
Examining a Hydrogen Atom

Objectives | **Misconceptions** | **Comments**

- To show the orbital of a hydrogen atom as an isosurface as well as via contour lines
- To compare the resulting electron distribution with the "Space Filling" model style

Model and Observations

Consider an atom of the simplest of all elements

Hydrogen (1)

As there is only a single electron, just 1 occupied orbital describes the electron cloud fully.

Boundary Surface	Contour Lines
<input type="checkbox"/> 1s	<input checked="" type="checkbox"/> 1s

- The angular dependence of the orbital (shape) is extremely simple. It is spherically symmetric ("s-orbital").
- The radial dependence can be seen in the contour plot: the orbital amplitude drops from high values (bluish contour lines, at the nucleus) to small values (reddish contour lines, away from the nucleus).
- The distribution of the resulting electron density (\propto square of the orbital) is shown in the following isosurfaces

Included Electron Density: 50% 82% 90% 95% 99%

- The isosurface for "92% Electron Density" happens to correspond to the size of the standard Space Filling spheres that ODYSSEY draws for hydrogen atoms.

Style: Nucleus Only (Too Small to See) Space Filling

Note that the latter observation is quite remarkable: for hydrogen as much as ~18% of the electron density may lie outside (!) of the "fat" Space Filling spheres that you see in molecular illustrations in textbooks, articles, etc.

- The hydrogen atom with its one proton and one electron is the only atom (or molecule) that is a "two-body problem," i.e. a system for which the equations of quantum mechanics can be solved analytically. All other chemical systems are at least "three-body problems" (or much worse) and numerical solutions of the equations of nature must be sought.

0.00 x 10⁻¹⁰ Normal | Top Edge

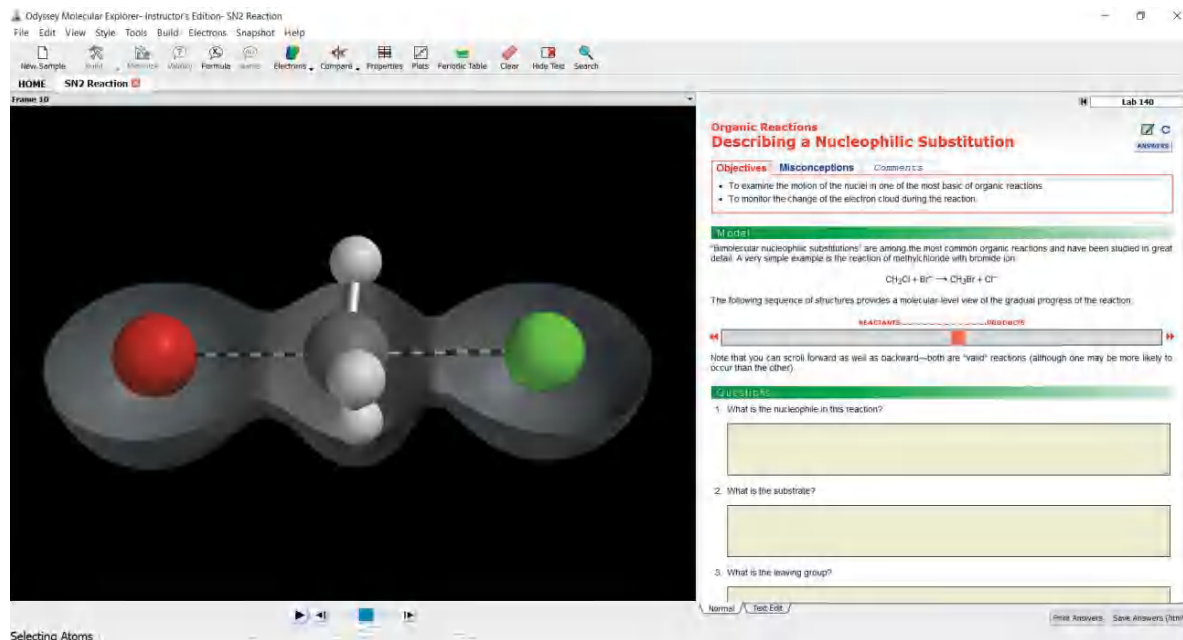
Nicht-belastbare Vorstellung:

„Elektronen sind am wahrscheinlichsten in einer bestimmten Distanz um den Kern kreisend anzutreffen.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Das molekulare Labor für die elektronische Struktur eines Wasserstoffatoms erlaubt es, die Elektronenwolke als eine Sequenz von Konturlinien zu visualisieren. Die Konturlinien folgen einander in zunehmend kleinerem Abstand während der Kern erreicht wird: die Elektronendichteverteilung hat ein Maximum am Atomkern. Vom Atomkern weggehend fällt die Elektronendichte kontinuierlich ab, ohne dass ein bestimmter Abstand hervorgehoben werden könnte.

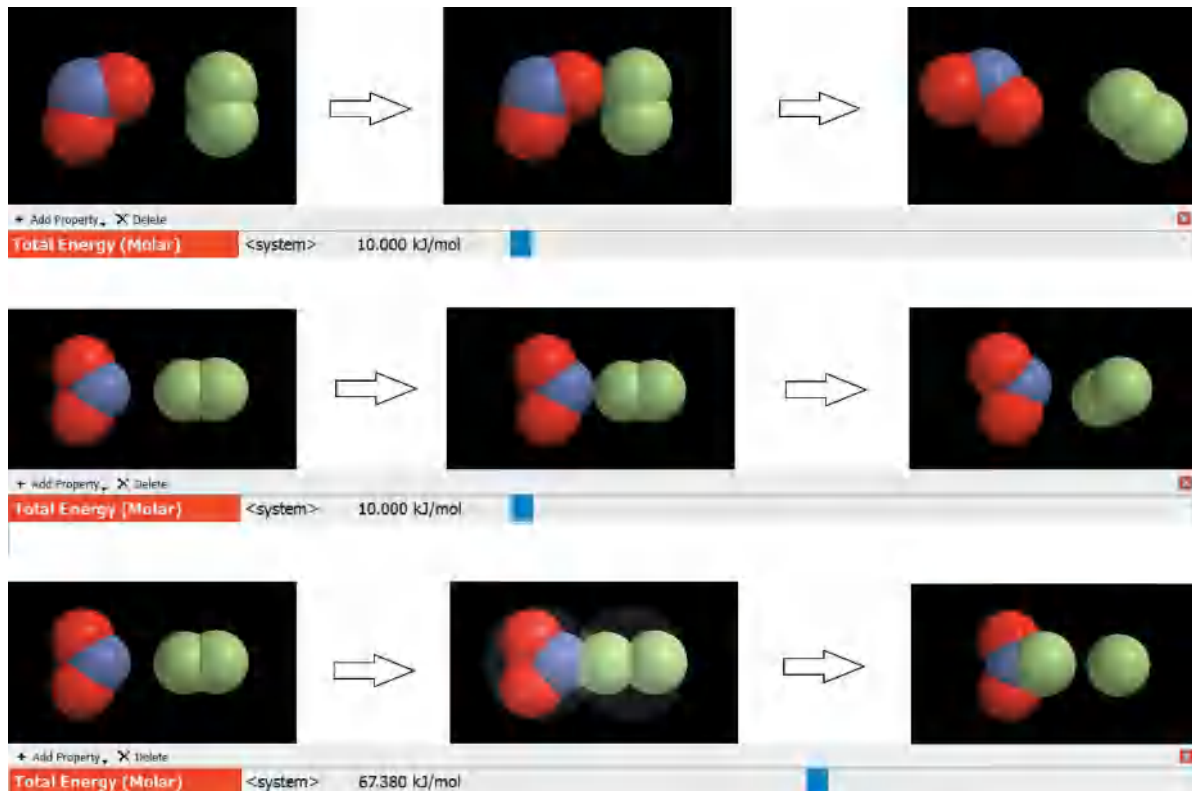
h) Reaktionspartner bei einer Chemischen Reaktion

**Nicht-belastbare Vorstellung:**

„Reaktionen basieren auf dem Vorhandensein eines aktiven Reaktionspartners und eines passiven Substrats.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Das molekulare Labor für den Reaktionsmechanismus einer S_N2-Reaktion erlaubt es durch die Reaktion in 18 Einzelschritten zu gehen. Insofern dies in beiden Richtungen ablaufen kann und der gezeigte Übergangszustand vollkommen symmetrisch ist, gibt es keinen Grund zwischen einem „aktiven“ und „passiven“ Reaktionspartner zu unterscheiden.

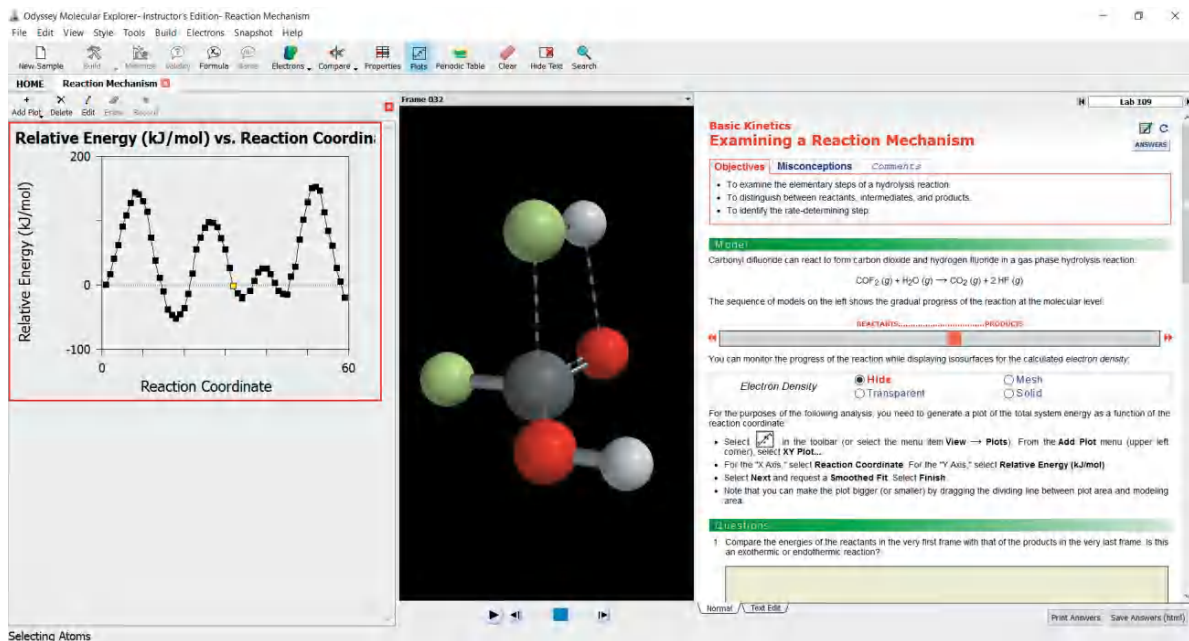


Nicht-belastbare Vorstellung:

„Teilchen reagieren immer, wenn sie miteinander kollidieren.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Das molekulare Labor für reaktive Kollisionen erlaubt es sowohl die relative Orientierung der beiden Reaktionspartner (Sterischer Faktor) als auch die Aktivierungsenergie zu kontrollieren. In der obersten Sequenz ist die relative Orientierung falsch und die Aktivierungsenergie unzureichend → die Reaktion ist nicht erfolgreich. In der mittleren Sequenz, sind die sterischen Bedingungen für eine Reaktion erfüllt, aber auf Grund von mangelnder Energie findet immer noch keine Reaktion statt. In der untersten Sequenz sind beide Bedingungen erfüllt und ein neues Molekül entsteht spontan. Das Labor ist so angelegt, dass der Lernende die genauen Bedingungen *empirisch* herausfinden kann.



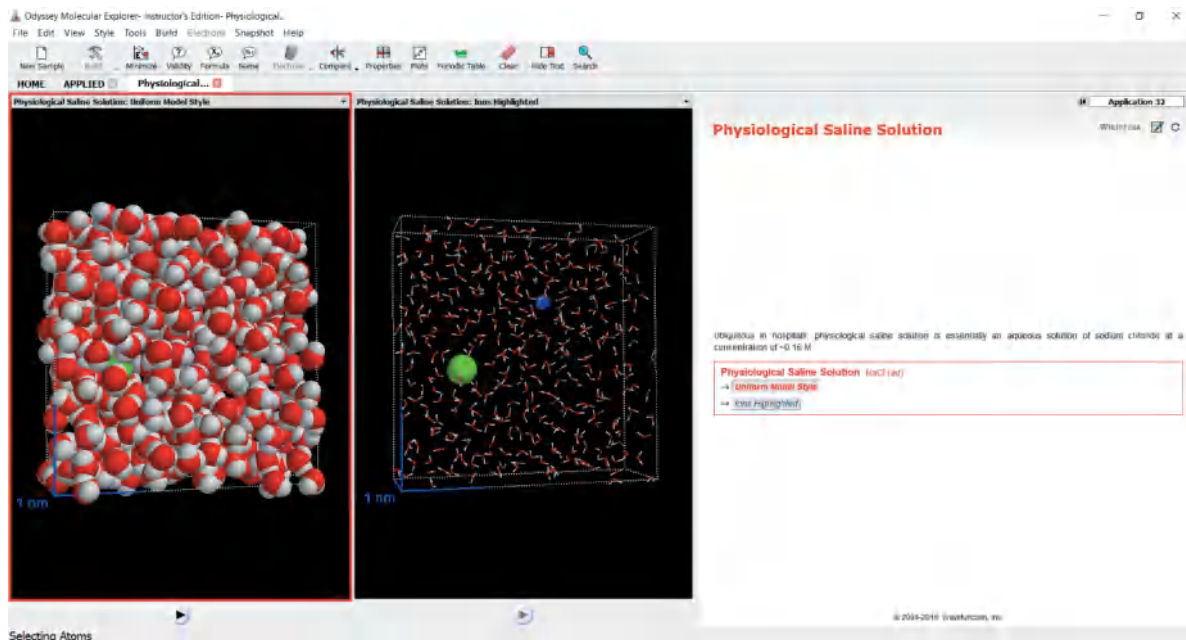
Nicht-belastbare Vorstellung:

„Reaktionen schreiten nur in einer Richtung fort.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Das molekulare Labor für die Hydrolyse von Carbonylfluorid zeigt, dass die Reaktion im Ganzen nur schwach exotherm ist; folglich macht eben so viel Sinn, die Reaktion rückwärts wie vorwärts zu simulieren.

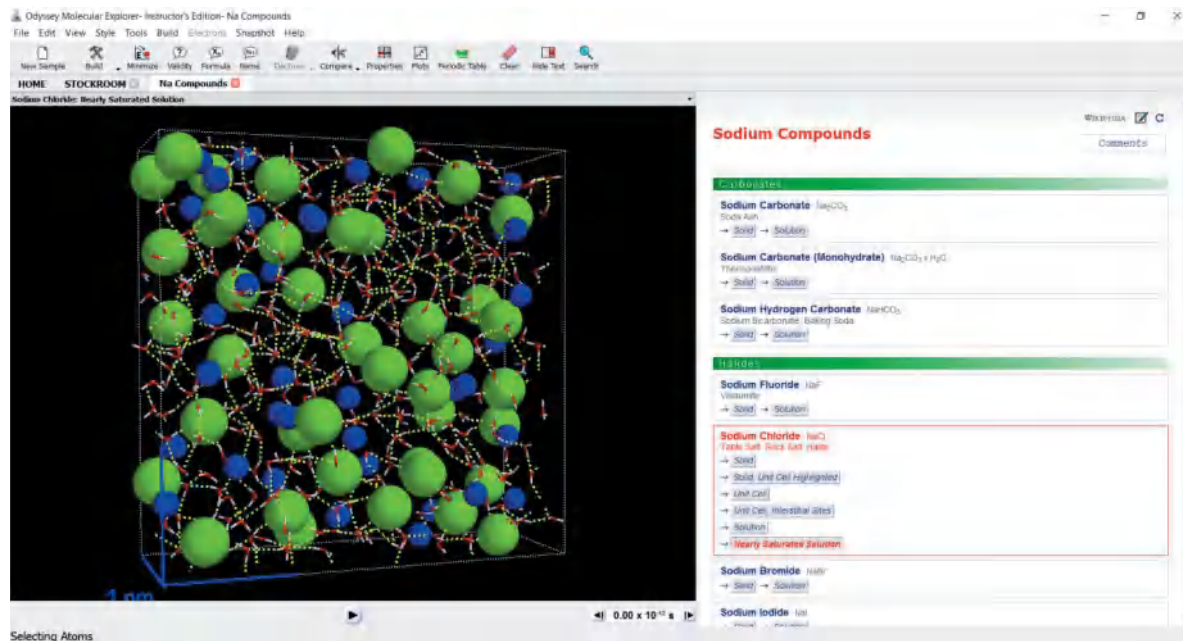
i) Ionen in Lösungen

**Nicht-belastbare Vorstellung:**

„Ionen in Lösungen treten in Paaren auf.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

In der „Applied Chemistry“ Sektion ist ein Modell für physiologische Kochsalz-Lösung verfügbar. Auf der linken Seite ist die Visualisierung so gestaltet, dass alle Atome im Kalotten-Modell gezeigt sind → die gelösten Ionen sind kaum erkennbar. Auf der rechten Seite sind nur die beiden Ionen im Kalotten-Modell gezeigt, während die Wassermoleküle im Stäbchen-Modell repräsentiert sind. Es ist offensichtlich, dass das Kation und das Anion nicht in unmittelbarer Nachbarschaft vorliegen.



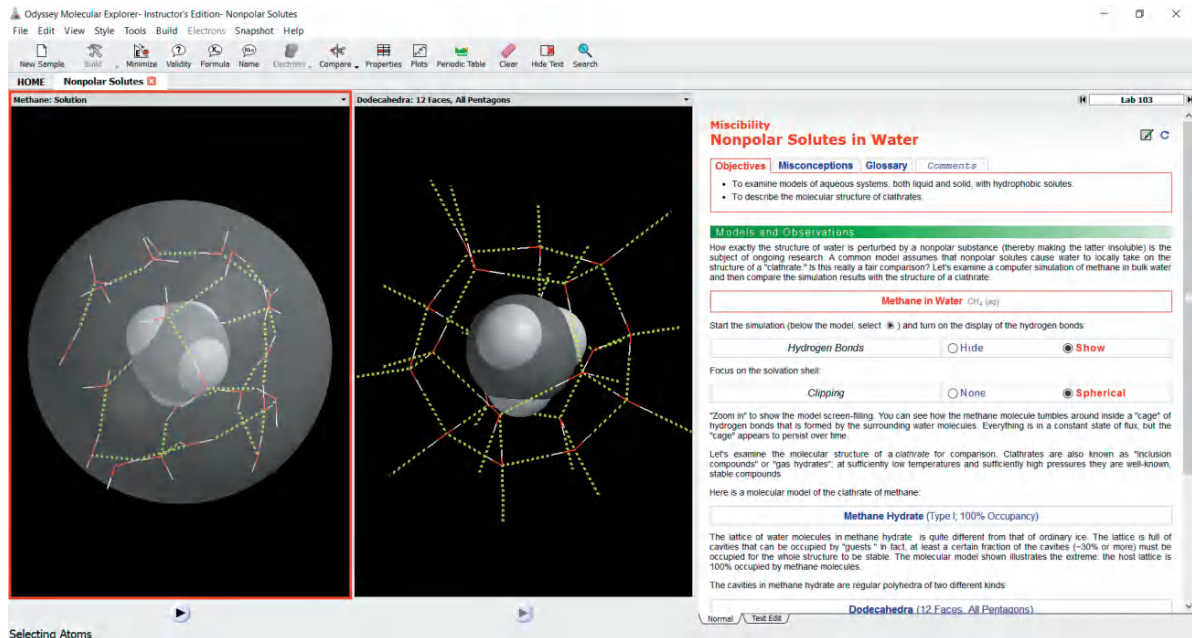
Nicht-belastbare Vorstellung:

„Eisartige Strukturen umgeben die gelösten Ionen in Lösung.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Auf der Seite für Verbindungen des Natriums im „Molecular Stockroom“ ist das Modell einer Kochsalzlösung an der Löslichkeitsgrenze ($c \sim 6 \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1}$) verfügbar. Die Ionen sind als Kalotten-Modell gezeigt und die Wassermoleküle als Stäbchen (mit zusätzlicher Visualisierung der Wasserstoffbrückenbindungen). Die typische Unordnung einer Flüssigkeit ist erkennbar, d.h. es gibt keinen Hinweis auf eisartige Strukturen.

j) Heterogene Flüssigkeitsgemische

**Nicht-belastbare Vorstellung:**

„Öl und Wasser vermischen sich nicht aufgrund der Abstoßung der verschiedenen Moleküle.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Gezeigt ist das Modell einer (erzwungenen) Simulation von Methan in Wasser. Die unmittelbare Umgebung des Methanmoleküls ist sichtbar („Clipping“-Option) und die Wasserstoffbrückenbindungen zwischen den Molekülen sind gezeigt. Das rechte Modell zeigt im Vergleich die lokale Umgebung von Methan in „Methanhydrat“ (eine Substanz, die vermutlich in riesigen Mengen am Meeresgrund vorliegt). Der Hauptgrund, dass sich Methan in flüssigem Wasser so wenig auflöst, ist nicht die vermeintliche energetische Abstoßung zwischen den beiden Komponenten, sondern der starke ordnende Einfluss des Solvats.

Literatur

- AK MINILABOR (o. J.). Trainer, Spiele und Nachschlagewerkzeuge für die Chemie. <http://www.kappenberg.com/akminilabor/apps/start.html> (15.08.2016)
- AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (2011). *Chemistry in the Community*, 6th Edition. New York: W.H. Freeman.
- AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (2014). *Chemistry in Context*, 8th Edition. New York: McGraw Hill.
- AP® CHEMISTRY (2014). Course and Exam Description, Revised Edition. New York: College Board. <http://media.collegeboard.com/digitalServices/pdf/ap/ap-chemistry-course-and-exam-description.pdf> (17. 08. 2016).
- BLADON, P., GORTON, J. & HAMMOND, R.B. (2011). *Molecular Modeling: Computational Chemistry Demystified*. London: Royal Society of Chemistry.
- BODNER, G. (1991). I Have Found You an Argument. *J. Chem. Educ.*, 68, 385-388.
- BURKHOLDER, P.R., PURSER, G.H. & COLE, R.S. (2008). Using Molecular Dynamics Simulation to Reinforce Student Understanding of Intermolecular Forces. *J. Chem. Educ.*, 85, 1071-1077.
- CONNECT (o. J.). Digital Teaching and Learning Environment. New York: McGraw Hill. <http://connect.mheducation.com/connect/> (15. 08.2016)
- CRAMER, C.J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Ed.* New York: Wiley.
- DEMUTH, R., PARCHMANN, I., & RALLE, B. (Hg., 2006). *Chemie im Kontext*. Berlin: Cornelsen Verlag.
- EILKS, I. (2003). Students' Understanding of the Particulate Nature of Matter and Misleading Textbook Illustrations. *Chemistry in Action*, 69, 35-40.
- FRENKEL, D. & SMIT, B. (2001). *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. San Diego: Academic Press.
- GABEL, D.L, SAMUEL, K.V. & HUNN, D. (1987), Understanding the Particulate Nature of Matter. *J. Chem. Educ.*, 64, 695-697.
- GEELAN, D., MUKHERJEE, M., & MAHAFFY, P. (2004). Scientific Visualisations for Developing Students' Understanding of Concepts in Chemistry: Some Findings and Some Lessons Learned. *Teaching Science*, 60, 30-38.
- HEHRE, W.J. (2003). *A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations*. Irvine, CA: Wavefunction.
- HORTON, C. (2007). Student Alternative Conceptions in Chemistry. *California Journal of Science Education*, 7, 103-150.
- JMOL (o. J.). An Open-Source Java Viewer for Chemical Structures in 3D. <http://www.jmol.org> (04. 08. 2016).

- JOHNSTONE, A.H. (1982). Macro and Microchemistry. *School Science Review*, 64, 377-379.
- JOHNSTONE, A.H. (2000). Teaching of Chemistry—Logical or Psychological? *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 1, 9-15.
- LEACH, A.R. (2001). *Molecular Modeling: Principles and Applications*, 2nd Ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall.
- LEWARS, E. (2016). *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*, 3rd Ed. New York: Springer.
- LIEM, T. (1987). *Invitations to Science Inquiry, 2nd Edition*. Lexington, MA: Ginn Press.
- MAHAFFY, P. (2004). The Future Shape of Chemistry Education. *Chemistry Education: Research and Practice*, 5, 229-245.
- MAHAFFY, P. (2006). Moving Chemistry Education into 3D: A Tetrahedral Metaphor for Understanding Chemistry. *J. Chem. Educ.*, 83, 49-55.
- MAHAFFY, P. (2015). Chemistry Education and Human Activity. In: GARCÍA-MARTÍNEZ, J. & SERRANO-TORREGROSA, E. (HG.), *Chemistry Education: Best Practices, Opportunities and Trends*. Weinheim: Wiley-VCH, 3-26.
- MAHAFFY, P., TASKER, R., BUCAT, B., KOTZ, J.C., & WEAVER, G.C. (2014). *Chemistry: Human Activity, Chemical Reactivity*, 2nd Edition. Boston: Brooks/Cole.
- MASTERINGCHEMISTRY (o. J.). Online Homework, Tutorial, and Assessment System. New York: Pearson Education. <http://www.pearsonmylabandmastering.com/northamerica/masteringchemistry/> (15. 08.2016).
- MOLECULAR WORKBENCH (o. J.). Concord, MA: Concord Consortium. <http://mw.concord.org/modeler> (04. 08.2016).
- MOLECULES (o. J.). An Application for Viewing Three-Dimensional Renderings of Molecules. Madison, WI: Sunset Lake Software. <http://itunes.apple.com/us/app/molecules/id284943090> (04. 08.2016).
- ODYSSEY (o. J.). Molecular Explorer. Irvine, CA: Wavefunction. http://www.wavefun.com/support/odyssey/support_ody.html (04. 08.2016).
- OWL (o. J.). Online Web Learning. Boston: Cengage Learning. <http://www.cengage.com/owl/> (15. 08.2016).
- PHET (o. J.). Physics Education Technology. Boulder: University of Colorado. <https://phet.colorado.edu/> (08.04.2016).
- SALTERS CHEMIE (2012). *Chemical ideas / Chemical storylines*. Braunschweig: Schroedel Verlag.
- SAPLING LEARNING (o. J.). Online Homework System. Austin: Macmillan Learning. <http://www2.saplinglearning.com/> (15. 08.2016).
- SCHLICK, T. (2010). *Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide*. New York: Springer.

SCHNITKER, J. (2008). Molecular-Level Simulations as a Chemistry Teaching Tool. In: ELLISON, M.D. & SCHOOLCRAFT, T.A. (Hg.), *Advances in Teaching Physical Chemistry*. Washington, D.C.: American Chemical Society, 207-219.

SHUSTERMAN, A.J. & HOISTAD, L.M. (2001), Teaching Chemistry with Density Models. 2. Can Atomic Charges Adequately Explain Electrostatic Potential Maps? *Chem. Educator*, 6, 36-40.

SHUSTERMAN, G.P. & SHUSTERMAN, A.J. (1997), Teaching Chemistry with Electron Density Models. *J. Chem. Educ.*, 74, 771-776.

TANG, H. & ABRAHAM, M.R. (2016). Effect of Computer Simulations at the Particulate and Macroscopic Levels on Students' Understanding of the Particulate Nature of Matter. *J. Chem. Educ.*, 93, 31-38.

TSAPARLIS, G. & SEVIAN, H. (Hg.) (2013). *Concepts of Matter in Science Education*. Dordrecht: Springer.

WEBASSIGN (o. J.). Online Instructional System. Raleigh: WebAssign. <https://www.webassign.net/> (16.08.2016).

YOUNG, D. (2001). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*. New York: Wiley Interscience..

JÜRGEN SCHNITKER, jurgen@wavefun.com (Wavefunction, 18401 Von Karman #370, Irvine, CA 92612, hat Chemie an der RWTH Aachen und der University of Texas studiert und an der University of Michigan unterrichtet. Er ist der Begründer der Computersoftware Odyssey und leitet deren Entwicklung.

PETER TROJANOWSKI, peter.trojanowski@additive-net.de, hat Chemie an der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main studiert und ist derzeit bei der ADDITIVE Soft- und Hardware für Technik und Wissenschaft GmbH (Max-Planck-Str. 22b, D-61381 Friedrichsdorf) als Produktmanager und Vertriebsingenieur tätig.

□