



## Visualisierung und Simulation auf der Teilchenebene im naturwissenschaftlichen Unterricht: Fehlvorstellungen überwinden und schwierige Konzepte besser vermitteln

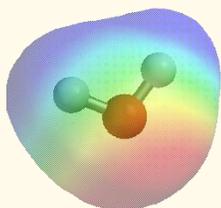
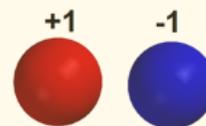
Wavefunction, Inc., 18401 Von Karman #435, Irvine, CA 92612, USA

[www.wavefun.com](http://www.wavefun.com)

Die Teilchennatur der Materie ist eine der grossen Entdeckungen der modernen Wissenschaft. Durch die Nutzung der enormen Geschwindigkeit heutiger Computer (Milliarden von Operationen pro Sekunde selbst auf einem gewöhnlichen Laptop) können Simulationen auf der Teilchenebene eine grosse Anzahl von naturwissenschaftlichen Phänomenen erfolgreich reproduzieren, wenn nur die folgenden Anforderungen erfüllt sind:

1. Die Wechselwirkung zwischen den Teilchen muss korrekt beschrieben werden. Auf der atomaren Ebene sind die Wechselwirkungen immer elektrostatischer oder elektromagnetischer Natur. **In der Chemie dreht sich alles um Ladung und Polarität.\***

\*Die einzige Ausnahme ist die Kernchemie, wo sogenannte starke und schwache Wechselwirkungen ins Spiel kommen. Die vierte Art grundlegender Wechselwirkung (Gravitation) ist für Phänomene auf der molekularen Ebene vernachlässigbar.



2. In der Chemie sind keine Teilchen wichtiger als Elektronen. Mit einer Masse, die selbst auf der atomaren Skala extrem klein ist, haben Elektronen von Natur aus wellenartigen Charakter und erfordern eine quantenmechanische Beschreibung. **Molekulare Objekte zeigen Verhaltensweisen, die von unseren Erfahrungen mit Alltagsgegenständen drastisch abweichen können.**

3. Wenn möglich, sollten Simulationen auf der Teilchenebene nicht bei einem statischen Bild stehen bleiben, sondern die Wechselwirkungen zeitlich verfolgen. **Die materielle Welt ist von Natur aus dynamisch.**

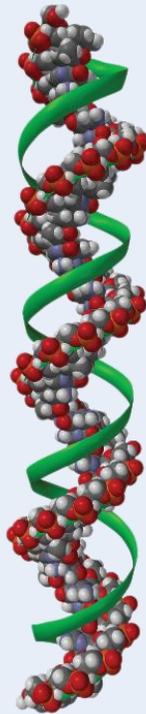


**ODYSSEY**  
Molecular Explorer

- ODYSSEY ist ein leistungsstarkes Computerprogramm, das auf wissenschaftliche Programme in der Welt der chemischen Forschung zurückgeht, aber für den Unterricht so angepasst ist, dass es von Lernenden und Lehrkräften ohne technischen Hintergrund verwendet werden kann.
- ODYSSEY bedient sich zwei rechnerischer Methoden, die die oben genannten Anforderungen erfüllen, nämlich entweder die Anforderungen Nr. 1 und Nr. 2 (sogenannte Quantenchemie) oder die Anforderungen Nr. 1 und Nr. 3 (sogenannte Molekulardynamik).

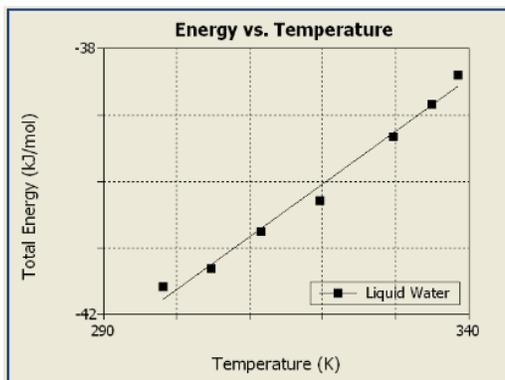
- *ODYSSEY* generiert Daten momentan und ermöglicht es damit zu **beobachten**, wie Naturgesetze auf der Teilchenebene zum Ausdruck kommen (die Gesetze sind ein Ergebnis der Berechnungen, nicht ein Input):

- ✓ **Anziehende und abstossende Kräfte** (für intra- und zwischenmolekulare Wechselwirkungen)
- ✓ **Gesetz der Energieerhaltung** (in Zusammenstößen von Teilchen und in Schwingungen)
- ✓ **Struktur ionischer Verbindungen** (wie es sich aus dem Coulombschen Gesetz ergibt)
- ✓ **Diffuse Natur von Elektronenwolken** (in Atomen und Molekülen)
- ✓ **Kovalente Bindungen** (in diatomaren and polyatomaren Molekülen)
- ✓ **Eigenschaften der Aggregatzustände** (als Funktion der Dichte und Temperatur)
- ✓ **Gesetz von Boyle** (und andere Korrelationen für thermodynamische Eigenschaften)
- ✓ **Gesetz von Graham** (und andere Phänomene für die Diffusion von Gasen)



- ✓ **Maxwell-Boltzmann-Verteilung** (für die Geschwindigkeit und kinetische Energie)
- ✓ **Gleichverteilung der Energie** (zwischen den Freiheitsgraden für Translation, Rotation und Vibration)
- ✓ **Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik** (durch zeitliche Verfolgung des Ordnungszustandes)
- ✓ **Übergangszustände und Aktivierungsenergie** (in bimolekularen chemischen Reaktionen)
- ✓ **Mikroskopische Reversibilität** (in dynamischen Gleichgewichten)
- ✓ **Prinzip von Le Chatelier** (in physikalischen und chemischen Gleichgewichten)
- ✓ **Stabilisierende Wechselwirkungen in Biopolymeren** (Kohlenhydrate, Proteine und Nukleinsäuren)

- *ODYSSEY* ermöglicht es zu untersuchen, wie sich **Veränderungen** in einem chemischen System auf das beobachtete Verhalten auswirken:



- ✓ Änderungen der **Art** der Teilchen (chemische Elemente, usw.)
- ✓ Änderungen der **Zahl** der Teilchen
- ✓ Änderungen der **Ladungen** der Teilchen
- ✓ Änderungen der **Dichte** oder des **Volumens**
- ✓ Änderungen der **Temperatur**
- ✓ Änderungen des **Aggregatzustandes**
- ✓ Änderungen der **Zusammensetzung** von Mischungen

- *ODYSSEY* hilft Lernenden, ein wirkliches Gefühl für die **Universalität** von Naturgesetzen zu entwickeln.