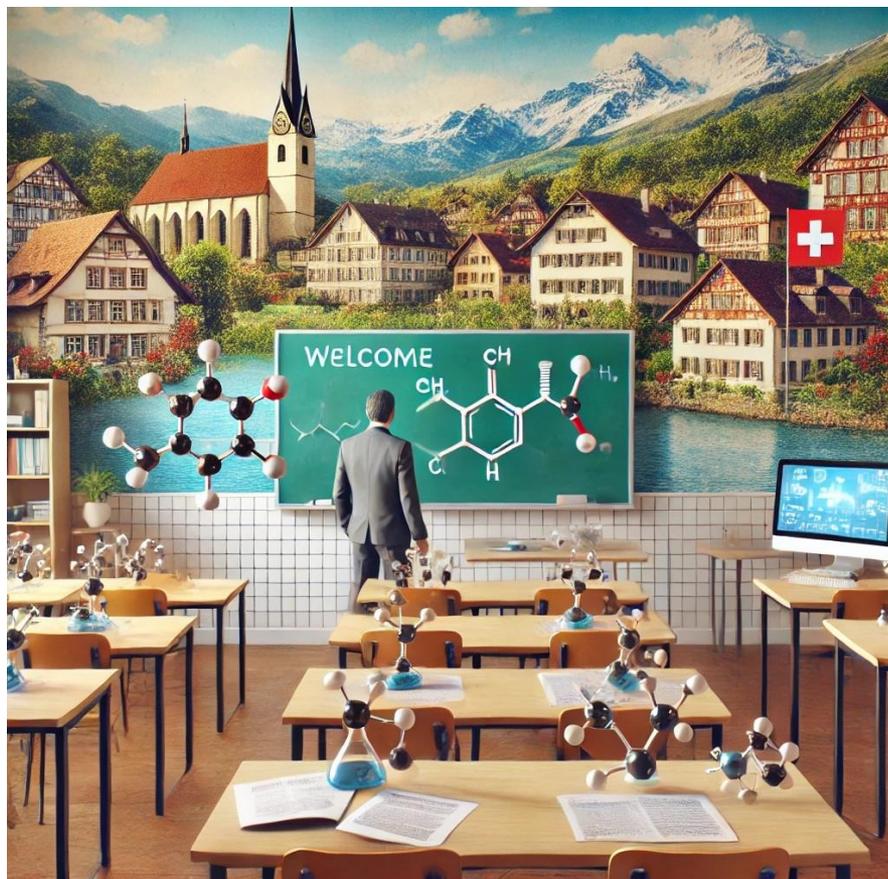


# Visualisierung und Simulation von auf der Teilchenebene relevanten Naturgesetzen mit *ODYSSEY*

Fehlvorstellungen überwinden und schwierige Konzepte besser vermitteln



**Jurgen Schnitker**

*Wavefunction*

18401 Von Karman Ave #435  
Irvine, California 92612, USA

*jurgen@wavefun.com*

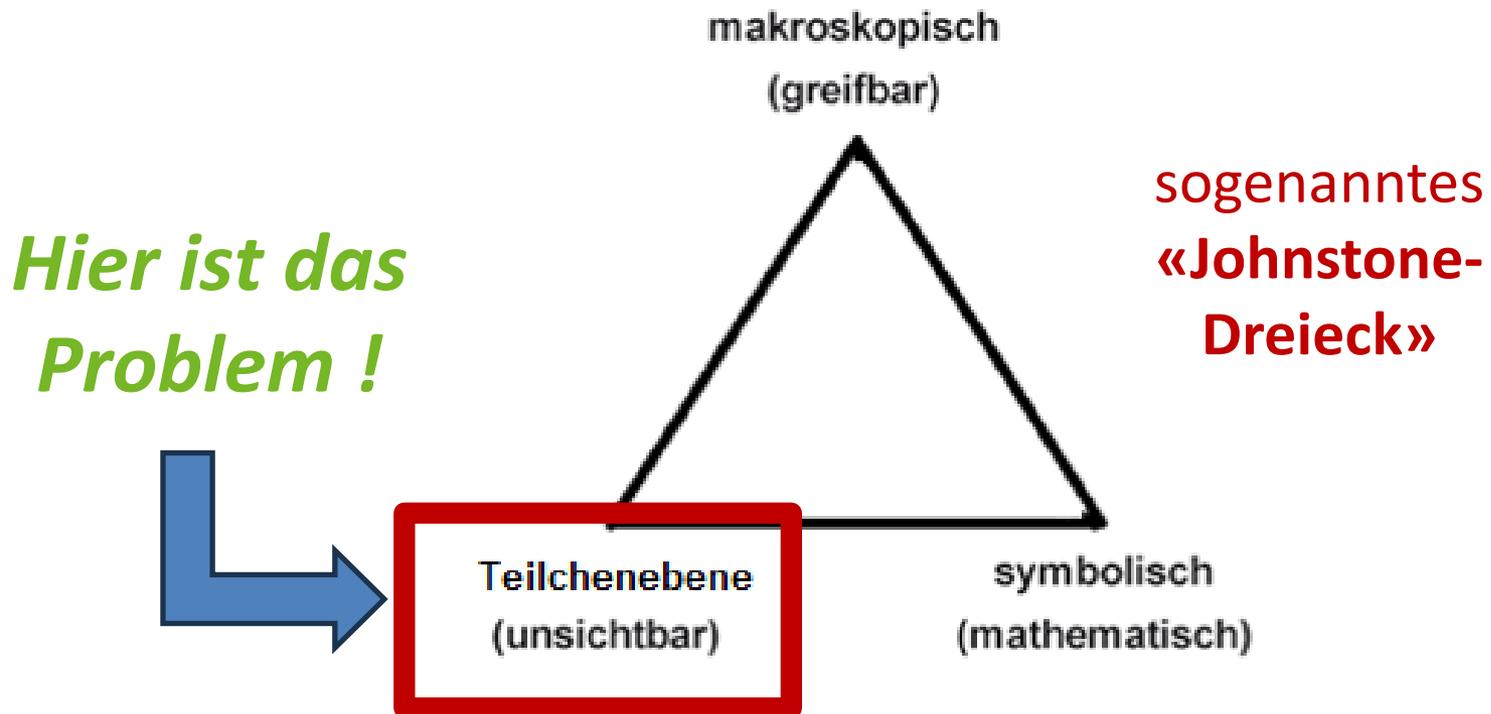
**Wolfgang Kirsch**

*Bildungscampus Saarland*

Beethovenstrasse 26  
D-66125 Saarbrücken

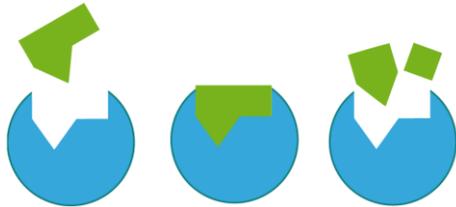
*Wolfgang.Kirsch@t-online.de*

# Mehrere Ebenen des Denkens in der Chemie

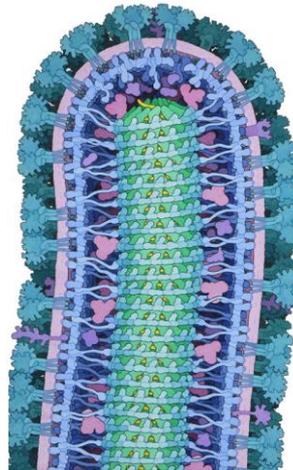


# Traditionelle Darstellungen der Teilchenebene

## Illustrationen

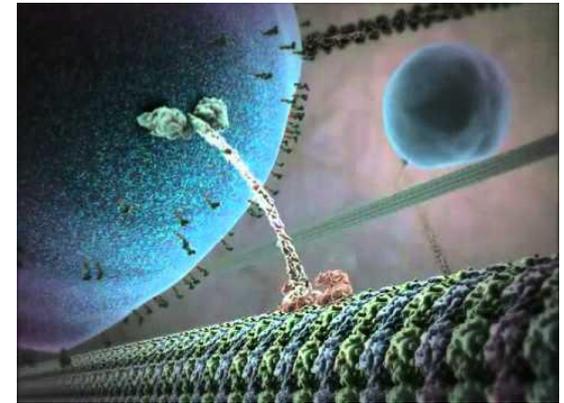


«Cartoons»



«realistisch»

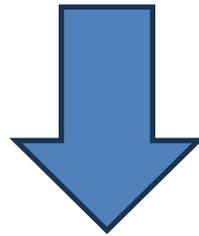
## Videos



**statisch, zum «konsumieren»**

## *Rechenleistung dieses Laptops*

3.2 GHz = **3 200 000 000** Operationen **pro Sekunde**

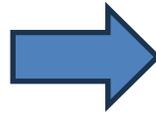


Ungeahnte Möglichkeiten !

# Darstellung der Teilchenebene

mit **ODYSSEY**  
Molecular Explorer

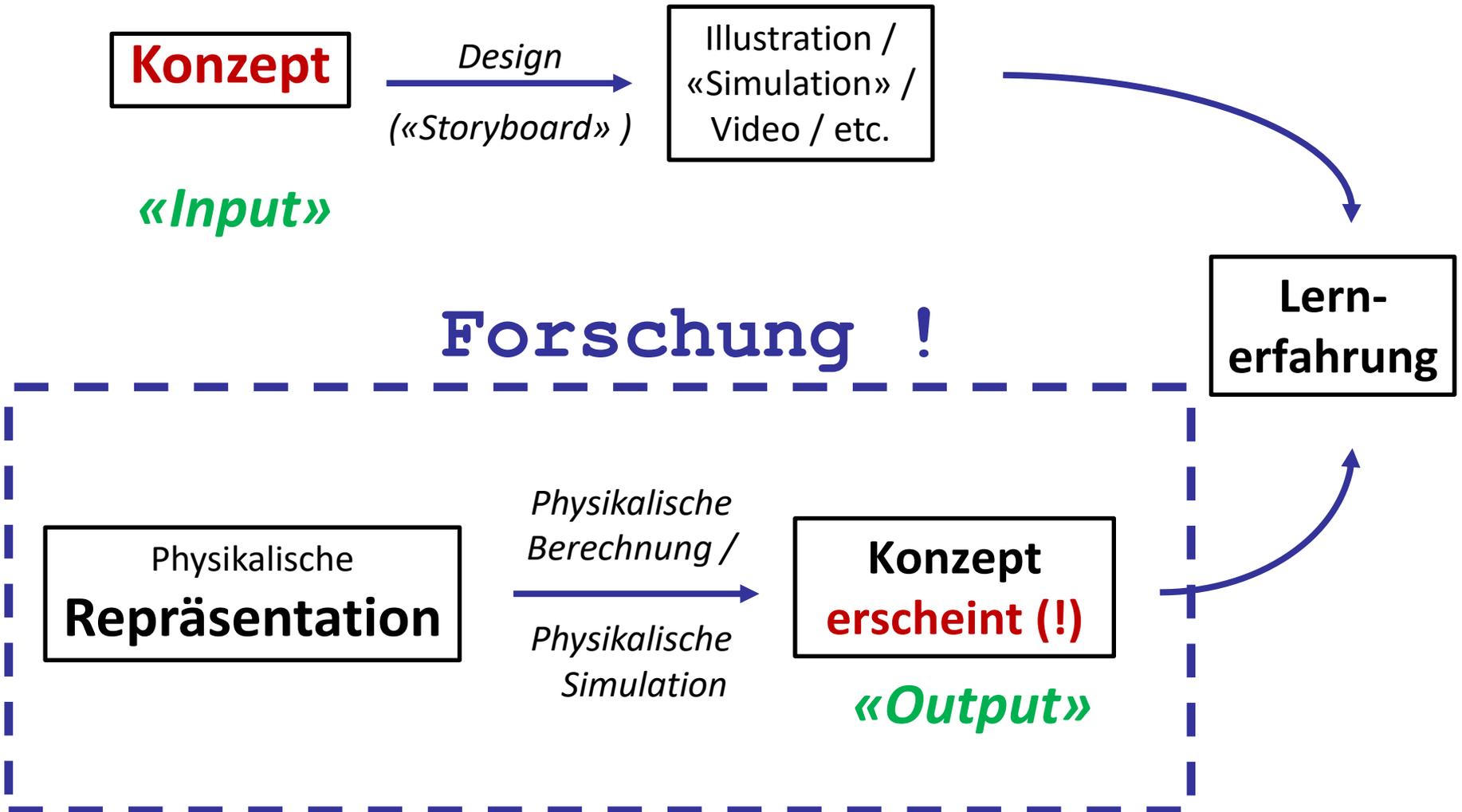
Physikalische (!)  
Modellierung



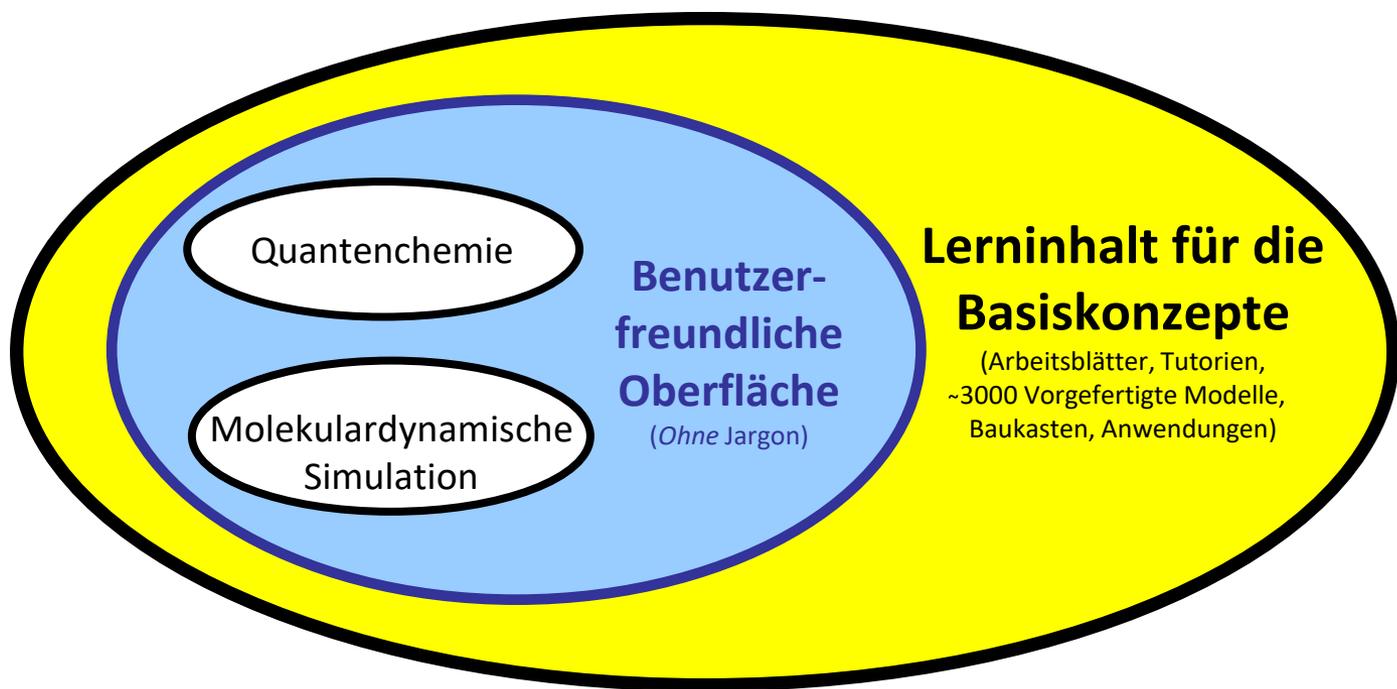
**manipulierbar**

# Vermittlung der Teilchenebene

Traditionell vs. **ODYSSEY**  
Molecular Explorer

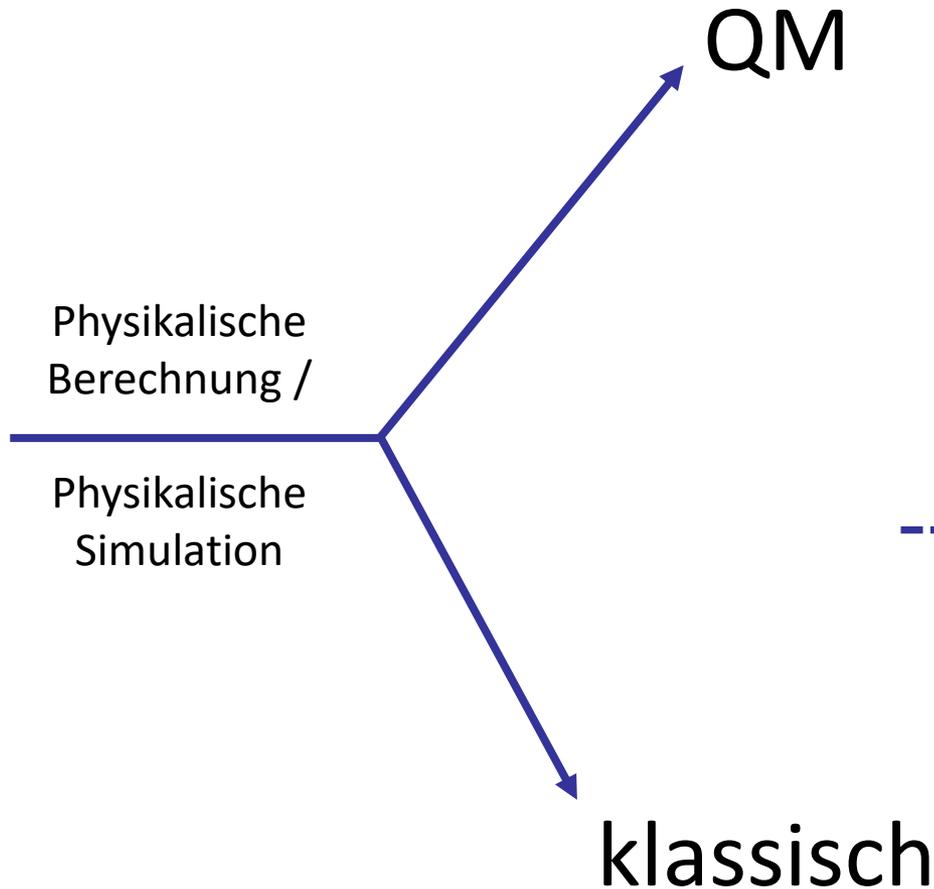


# «Harte Computerchemie getarnt im coolen Outfit»



**Windows / macOS / iPadOS**  
(ausgewählte Themen)

# Was macht die Software?



Wechselwirkungen zwischen  
**Atomkernen** und **Elektronen**  
(= Schrödinger-Gleichung)



~~Dynamik  
(= zeit**abhängige**  
Schrödinger-Gleichung)~~

Wechselwirkungen zwischen  
**Atomen, Ionen** und **Molekülen**  
(sogenannte «Kraftfeld-Berechnung»)



**Molekulardynamische** Simulation  
(Newton,  $F = m \cdot a$ )

## Quantenchemie (Molekülorbitaltheorie)

## Klassische Simulation (Molekulardynamik)

Gleichung

Schrödinger  
(1926)

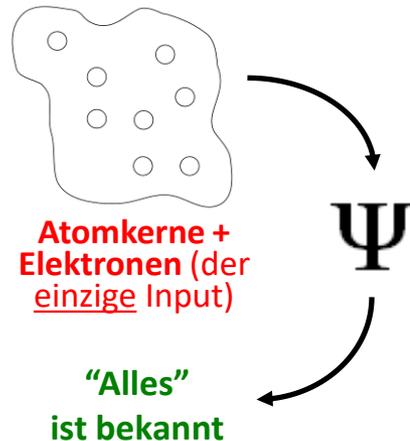
$$\hat{H} \Psi = E \Psi$$

Newton  
(1686)

$$\mathbf{F} = m \cdot \mathbf{a}$$

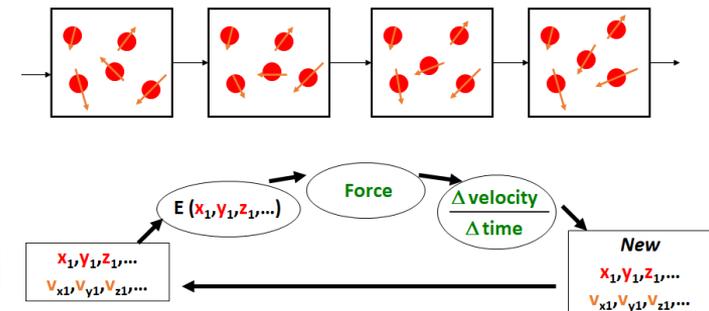
Wesentliche  
Annäherungen

- Hartree-Fock-Gleichungen  
(= mean field-Annäherung;  
**keine** Korrelationsenergie)
- Kleiner Basissatz (3-21G)



- Atom-Atom Paarpotentiale
- Zeitschritt von  $\approx$  Femtosekunden

einen Film “on-the-fly” herstellen:



**Verwendung eines der  
Forschung eng verwandten  
Programms**



**Schüler-Motivation**

# Forschungsprogramme

**QM**

Spartan

Gaussian

VASP

ADF

ORCA

GAMESS

MOPAC

...und viele andere



**klassisch**

**Amber**

(Assisted Model Building  
with Energy Refinement )

**CHARMM**

(Chemistry at Harvard  
Macromolecular Mechanics)

**Discovery Studio**

(von Dassault Systèmes BIOVIA)

**GROMACS**

(Groningen Molecular Machine  
for Chemical Simulation)

**LAMMPS**

(Large-Scale Atomic/Molecular  
Massively Parallel Simulator)

**NAMD**

(Nanoscale Molecular Dynamics)

...und viele andere



TEXAS ADVANCED COMPUTING CENTER  
Powering Discoveries That Change The World

USE TACC SYSTEMS & SERVICES RESEARCH & DEVELOPMENT PARTNERSHIPS EDUCATION NEWS ABOUT

## CORONAVIRUS MASSIVE SIMULATIONS COMPLETED ON FRONTERA SUPERCOMPUTER

New simulations can help researchers design new drugs and vaccines to combat the coronavirus

Published on March 24, 2020 by Jorge Salazar



Facebook



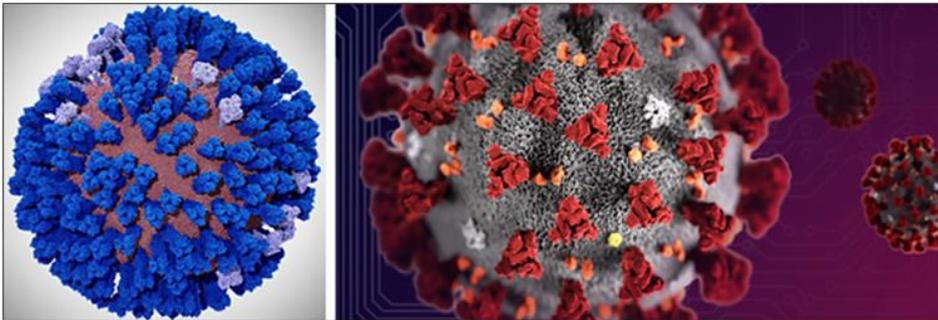
Twitter



LinkedIn



Email



A coronavirus envelope all-atom computer model is being developed by the Amaro Lab of UC San Diego on the NSF-funded Frontera supercomputer of TACC at UT Austin. Biochemist Rommie Amaro hopes to build on her recent success with all-atom influenza virus simulations (left) and apply them to the coronavirus (right). (Credit: Lorenzo Casalino, UCSD; TACC)

- **Vollständiges Modell der Virus-Oberfläche mit atomarer Auflösung**
- **305 Millionen Atome**
- **Mikrosekunden-Zeitskala**
- **Berechnung auf 250'000 Prozessoren (~60 ns/Tag)**



**Rommie Amaro**

*University of California, San Diego*

# Simulation der vollständigen Oberfläche von SARS-CoV-2

(49 sec Video)

Lorenzo Casalino, Zied Gaieb, Jory A. Goldsmith, Christy K. Hjorth, Abigail C. Dommer, Aoife M. Harbison, Carl A. Fogarty, Emilia P. Barros, Bryn C. Taylor, Jason S. McLellan, Elisa Fadda und Rommie E. Amaro, **ACS Cent. Sci. 2020, 6, 1722–1734**

*Dieser Workshop*



*Coronavirus-Simulation*



**NAMD**

(Not Another Molecular Dynamics Program)

*University of Illinois*

*Molekular-dynamisches Programm*

*Kraftfeld*

**MMFF** (erweitert)  
(Merck Molecular Force Field)

**CHARMM**  
(Chemistry at Harvard Macromolecular Mechanics)

*Wasser-Modell*

**SPC**  
(Simple Point Charge Model)

**TIP3P**  
(Transferable Intermolecular Potential with 3 Points)

*Zeitschritt*

~Femtosekunde

~Femtosekunde

*Anzahl der Prozessoren*

**2**  
(typischer Laptop)

≈**250'000**

*Kosten insgesamt*

**< 10<sup>3</sup> CHF**  
(normaler Laptop)

**>> 10<sup>7</sup> CHF**  
(viele Millionen)



# Spartan

## Forschung

- **Universitäten**
- **Chemische Industrie, Pharmazeutische Industrie, etc.**
- **Forschungslabors** («Government»)

**Windows** (64 bit)

**Macintosh**

**Linux**

# Spartan Student Edition

## Bildung

- **Organische Chemie** (Universitäten, zweites Jahr)
- **Physikalische Chemie**
- **Computer-Chemie** (+ andere Bereiche der Chemie)

**Windows** (64 bit)

**Macintosh**

# ODYSSEY

## Bildung

- **Universitäten** (General Chemistry, Physical Chemistry, CBCS, etc.)
- **Sekundarbereich** (Advanced Placement, High School Chemistry, A-Levels, etc.)

**Windows**  
(32 bit oder 64 bit)

**Macintosh**

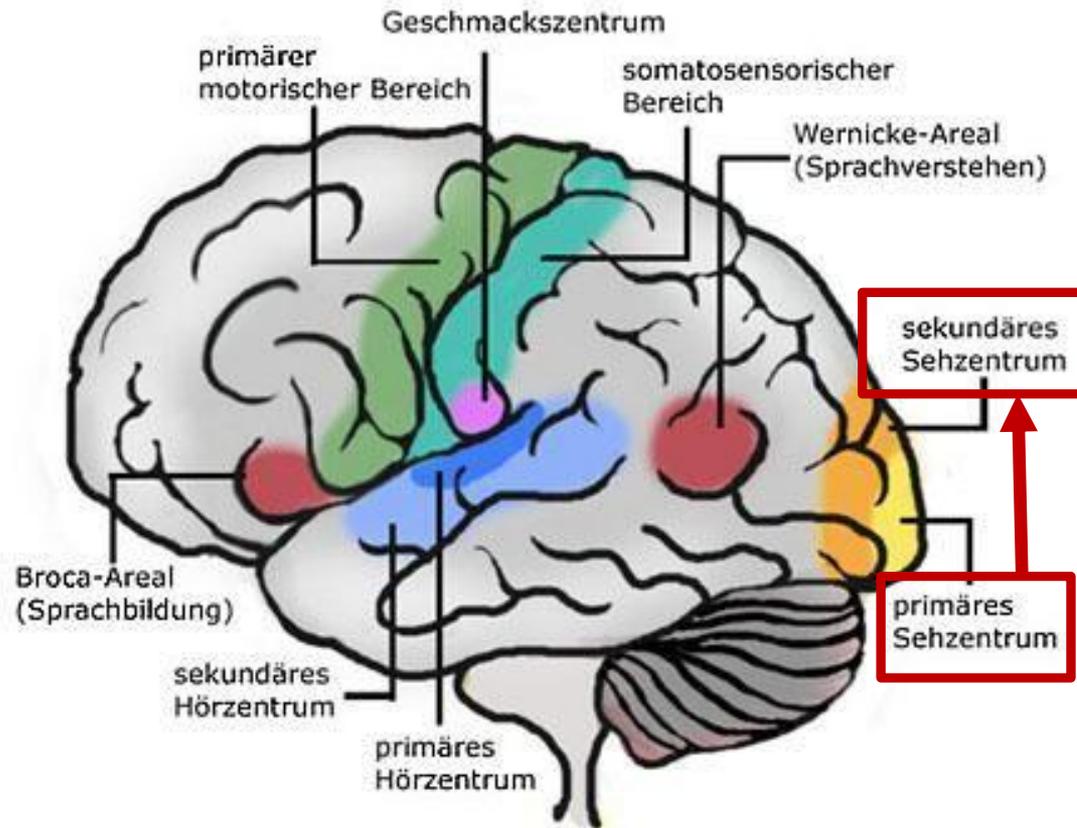
**iPadOS**  
(Ausgewählte Themen)

# Überlegungen zum schulischen Einsatz

# **als Vorstellungshilfe**

Stellen Sie sich eine Farbe vor, die Sie noch nie vorher gesehen haben!

Das ist aus sinnesphysiologischer Sicht unmöglich!



Das **sekundäre Sehzentrum** = ein Assoziationszentrum des Gehirns:  
Gegenüberstellung von bekannten Sinneseindrücken und verarbeiteten Mustern aus der  
**primären Sehrinde** → Erkennung → Interpretation



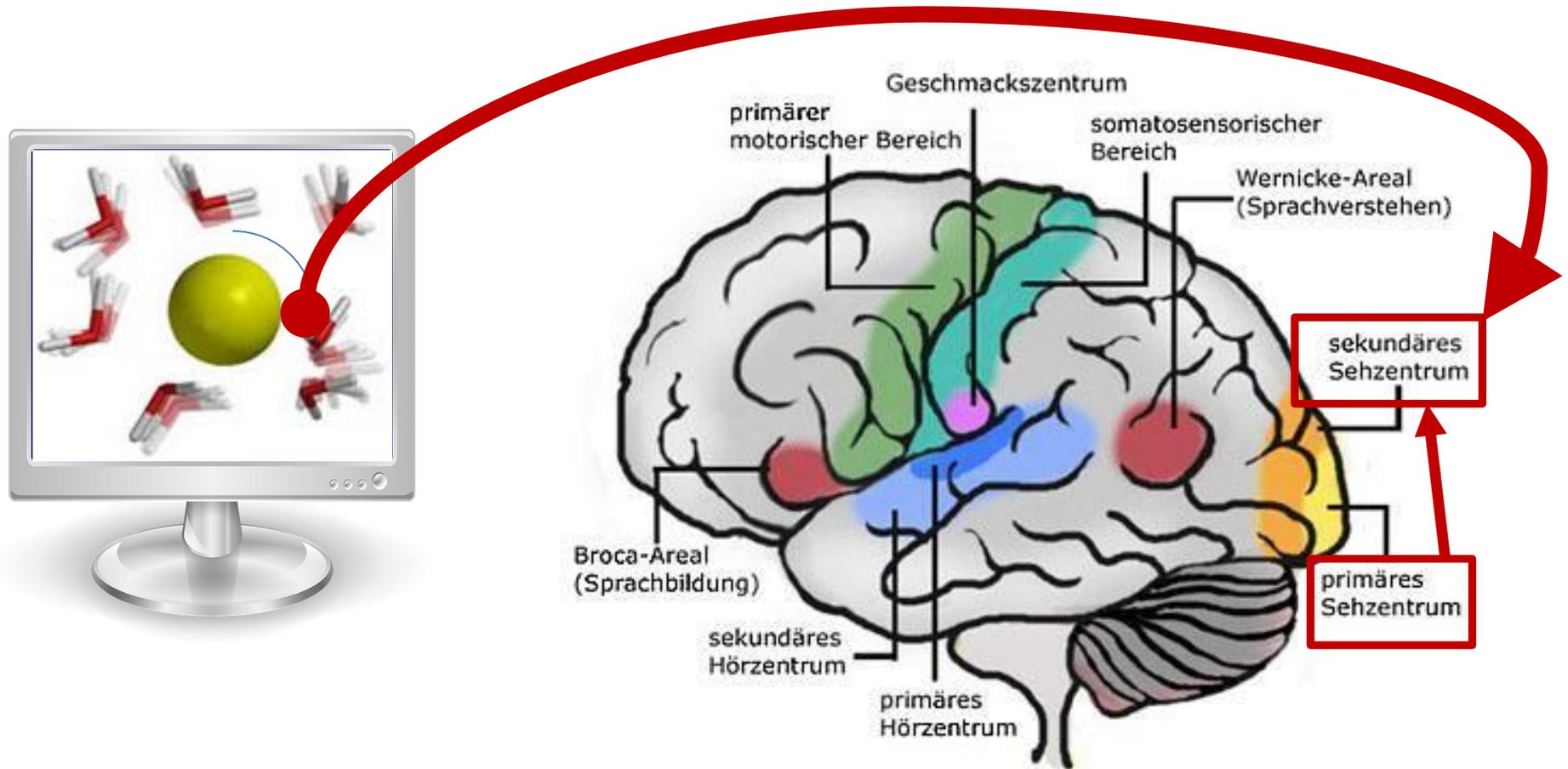
# als Vorstellungshilfe

Genauso verhält es sich mit den Vorgängen und Prozessen auf der Teilchenebene.

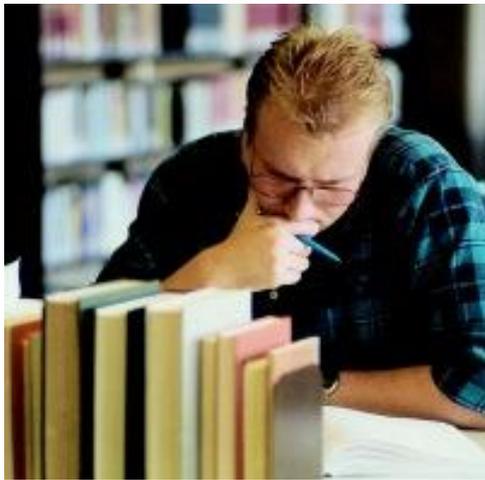
Auch das erscheint aus sinnesphysiologischer Sicht schlecht möglich!

Hier will die Computersimulation  hilfreich sein

## als Vorstellungshilfe für Prozesse auf der Teilchenebene



Das **sekundäre Sehzentrum** = ein Assoziationszentrum des Gehirns:  
Gegenüberstellung von bekannten Sinneseindrücken und verarbeiteten Mustern aus der  
primären Sehrinde → Erkennung → **Interpretation**



## Individuelle Lernstrategien

### «Surface Approach»

Aneignung des Stoffes für den Moment, ohne tieferes Verstehen anzuzielen, z. B. schlichtes Wiederholen oder Auswendiglernen.

### «Deep Approach»

Tiefe Verarbeitung des Stoffes, z.B. mit **ODYSSEY**, durch Lehren oder mit kognitiven Landkarten.

# Das SAMR-Modell zur Integration von Lerntechnologie bzw. zum digitalen Einsatz von Medien im Unterricht

(Ruben R. Puentedura)

**S**

**Substitution** Technik ist direkter Ersatz für Arbeitsmittel ohne funktionale Änderung (z.B. Overhead Folien, PowerPoint)

**A**

**Augmentation** Technik ist direkter Ersatz für Arbeitsmittel mit funktionaler Verbesserung (z.B. Animationen, Video)

**M**

**Modification** Technik ermöglicht beachtliche Neugestaltung von Aufgaben

→ *Ändert Unterricht strukturell*

**R**

**Redefinition** Neubelegung: Technik ermöglicht das Erzeugen von neuartigen Aufgaben

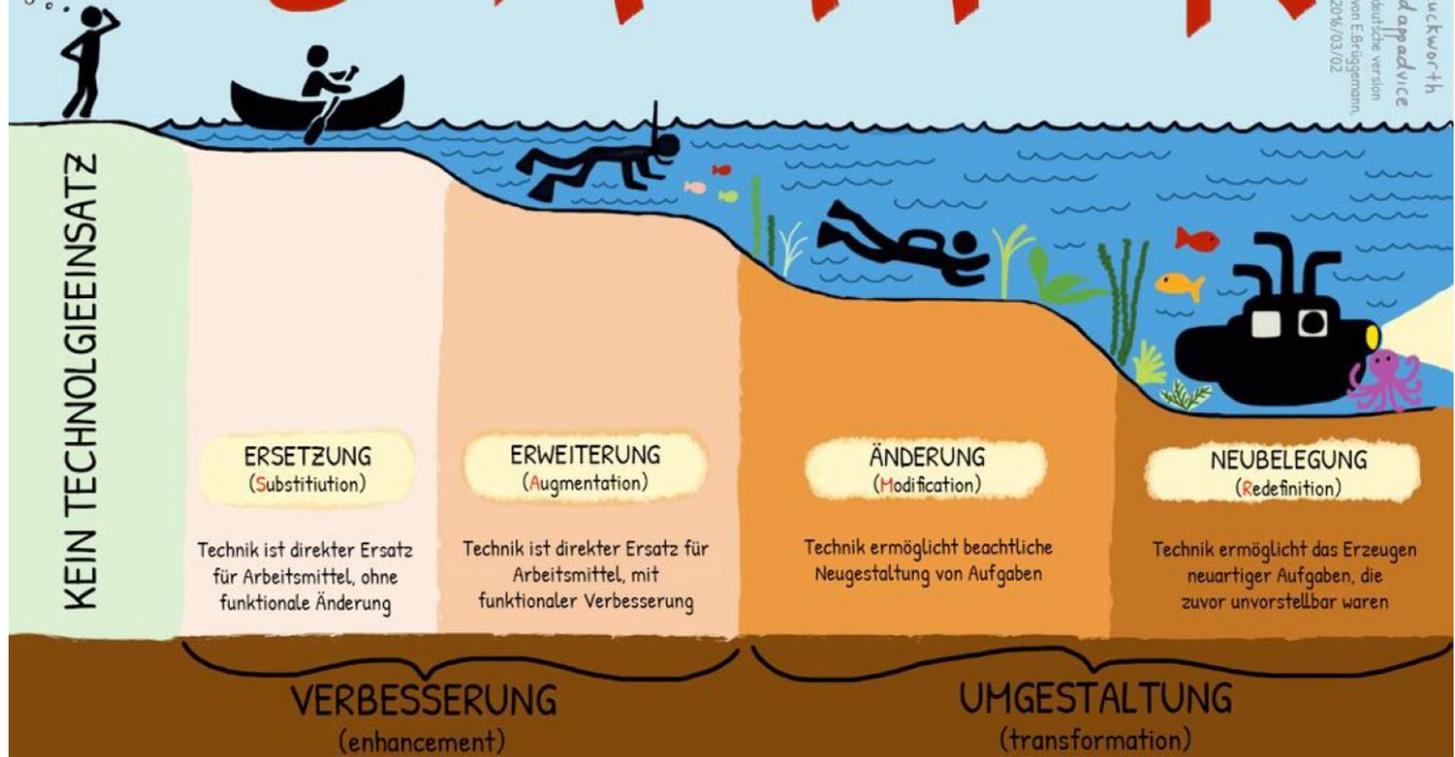
→ *Neues Denken von Unterricht*



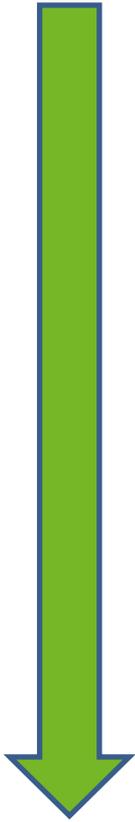
# Das SAMR Modell zur Integration von Lerntechnologie

# SAMR

Was machen die da nur im Wasser?



© silvaduackworth  
@edappadvice  
deutsche Version  
von Eberigemann,  
2016/03/02



*Erkenntnistiefe !*

**Illustration von Frajo Ligmann**

(Digitalisierung in Schulen, [https://youtu.be/a2C\\_FDQzwj0](https://youtu.be/a2C_FDQzwj0), Minute 40)



JÜRGEN SCHNITKER

**Das Unsichtbare sichtbar machen**  
Chemie lehren mit Simulationen auf der Teilchenebene

MNU Journal – Ausgabe 6.2016  
S. 392-399

Jürgen Schnitker und Christian Herdt

**Bindungskonzepte vermitteln**

Visualisierung von Bindungen und Wechselwirkungen mit wissenschaftlich fundierten Modellen

Unterricht Chemie 169 | 2019  
S. 38-42

**Interessiert *ODYSSEY* auszuprobieren ?**  
(Windows oder Macintosh)

→ kurze E-mail an **[jurgen@wavefun.com](mailto:jurgen@wavefun.com)**