



„Die Kuhnschen Knäuel sind uns hier ein Gräuel“

Paradigmenwechsel durch Teilchensimulation im Chemieunterricht

THOMAS KRASKA

Simulationen sind etablierter Bestandteil der chemischen Forschung und kommen bereits auch in der Schule vor, jedoch in der Regel als Black-Box. Kann man mit Schüler/inne/n eine Simulation nicht nur nutzen, sondern auch weitgehend selbstständig erstellen lassen? Für einfache Modelle ist dies unter Nutzung der Methoden des informatischen Denkens durchaus möglich. Ausgangspunkt ist eine haptische Simulation in Form eines Spiels, das in mehreren Stufen in einen Programmcode abgebildet wird.

1 Einleitung

Das Thema Polymere wird im Chemieunterricht der Sekundarstufe II mit Blick auf Kunststoffe behandelt. Dies schließt Struktur-Eigenschaftsbeziehungen für Thermoplaste, Duroplaste und Elastomere ein. Die Geschichte der Entdeckung der Polymere und der Aufklärung ihrer Eigenschaften lässt sich als Beispiel für die Entwicklung der Wissenschaft über Praradigmenwechsel (KUHN, 1986) im Unterricht einsetzen. Dies bezieht sich auf die Anerkennung der Existenz großer Moleküle generell aber auch auf die Frage nach deren Gestalt, hier konkret, ob sie gestreckt oder geknävelt vorliegen. So hatte man sich die gelartigen Produkte zunächst als kolloidale Systeme vorgestellt. Das Gebiet der Kolloide war zu jener Zeit etabliert und man versuchte das, was sich später als Makromoleküle herausstellte, zunächst im Rahmen dieses Gebietes zu erklären. Will man in den Unterricht ein Modell einfließen lassen, das zu erklären versucht wie die Wissenschaft fortschreitet, dann bietet sich in diesem Zusammenhang das Modell der wissenschaftlichen Umbrüche von THOMAS KUHN (1986) an. Wie alle Modelle ist auch dieses

Modell nicht unumstritten, führte zu Schwierigkeiten bei der Rezeption (ROSE, 2004) und KUHN selbst hat einen Kernbegriff seines Modells, das Paradigma, im späteren Verlauf wegen der dann beliebigen Verwendung (ROSE 2004) durch den Begriff Disziplinäre Matrix ersetzt (KRÜGER, 1992). Unabhängig davon kann man dieses Modell bei vielen kleineren und größeren wissenschaftlichen Umbrüchen beobachten. Für die Schule geeignete Materialien zu KUHN'S Werk findet man in z.B. Ethik Schulbüchern oder im Internet (siehe Literatur).

Nach KUHN (1986), ist ein Paradigma die Menge der aktuell akzeptierten Modelle und Theorien aber auch Arbeitsmethoden und Fragestellungen bis hin zu Lehrbüchern, Vorlesungen und Laborübungen. Ist von der Gemeinschaft ein Paradigma allgemein angenommen, nennt KUHN dies die normale Wissenschaft. In der normalen Wissenschaft werden Rätsel gelöst und Aufräumarbeiten durchgeführt hinsichtlich größerer Exaktheit, der Bestätigung der Vorhersagen des geltenden Paradigmas und dessen Artikulierung in Form von Naturkonstanten sowie quantitativer Gesetze und Differenzierungen bei der Anwendung des

Paradigmas auf neue Interessensgebiete. In dieser kumulativen Phase werden sehr effektiv tiefergehende Erkenntnisse gewonnen. Widersprüche zum Paradigma, sogenannte Anomalien, treten jedoch auf und es wird versucht diese im Rahmen des geltenden Paradigmas zu erklären. Anomalien können jedoch auch zu einer Krise anwachsen, die zu einer Periode ausgesprochenen fachwissenschaftlicher Unsicherheit führt. Erkennbar ist eine Krise auch an der Wucherung von unterschiedlichen Versionen der betreffenden Theorie, die dadurch diffuser und weniger eindeutig wird. In der Krise wird zum Teil noch im alten Paradigma gedacht und unerwartete Beobachtungen mit den entsprechenden Methoden untersucht und zu erklären versucht. Zum Teil entwickelt sich in einer Phase des Neuaufbaus ein neues Paradigma. KUHN nennt diese Phase die außerordentliche Wissenschaft. Altes und neues Paradigma sind inkommensurabel, d.h. sie sind nicht zusammen messbar und man kann nicht das eine mit Bezug auf das andere ausdrücken. Dies kann natürlich auch die fachliche Kommunikation erschweren, die nach KUHN in dieser Phase eher Überredensversuchen gleicht. Schließlich wird sich eins der Paradigmen als richtig bzw. dauerhaft und das andere als falsch für den betrachteten Sachverhalt herausstellen. Setzt sich das neue durch, dann liegt ein wissenschaftlicher Umbruch vor. Dies kann je nach Tragweite von einer kleinen Verschiebung in einer Teildisziplin bis zu einer großen wissenschaftlichen Revolution variieren. Während das Paradigma also einerseits ein ordnendes Prinzip ist, welches für die Durchführung von Wissenschaft erforderlich ist, kann es auf der anderen Seite hinderlich bei Umbrüchen sein. Diese soziologische Betrachtung relativiert die rationale Sicht von linearen wissenschaftlichen Entwicklungen, die mit konstanter Geschwindigkeit stetig aufeinander aufbauen.

So wurde der Idee der Existenz von Molekülen mit einer sehr hohen Molmasse, die STAUDINGER postulierte (STAUDINGER, 1920), von einer Reihe von Wissenschaftlern in dieser Zeit vehement widersprochen (POHL, 2008 & KAUSCH-BLECKEN VON SCHMELING, 2011). Es wurde behauptet, dass sehr komplizierte Moleküle zerbrechlich wären oder dass die Zahlen der Molmasse sehr ungenau seien. Ferner wurde argumentiert, dass Polymere schlicht nicht existieren, STAUDINGER seine Produkte aufreinigen solle und am besten die Idee der Polymere ganz aufgeben sollte. Den Widerständen zum Trotz konnte STAUDINGER schließlich unter anderem durch Viskositätsexperimente überzeugen. Und obwohl STAUDINGER Widerstände überwinden musste, war er selbst Widerstand bei einer der folgenden Entwicklung. Er war unbeirrt der Auffassung, dass Polymere gestreckte langkettige Moleküle seien. WERNER KUHN konnte anhand von Viskositätsmessungen von STAUDINGER selbst und auf der Grundlage von theoretisch-statistischen Überlegungen zeigen, dass Polymere geknäuelte sein müssen (KUHN, 1934). Zwar hat das Lösemittel einen Einfluss auf den Grad der Knäuelung aber gestreckt sind Polymermoleküle nicht. Das Zitat im Titel dieser Arbeit stammt aus dem wissenschaftlichen Umfeld von STAUDINGER (POHL, 2008 & ELIAS, 1985) und verdeutlicht wiederum das Verharren in einem alten Paradigma. THOMAS KUHN weist auch darauf hin, dass das gleiche Paradigma in unterschiedlichen Disziplinen unterschiedliche Bedeutung haben kann. Hier ist das alte Paradigma nur in Bezug auf Polymere ein altes. Selbstverständlich

ist das Gebiet der Kolloide z.B. in den Nanowissenschaften aktueller denn je. Daneben gibt es natürlich auch Paradigmen, die vollständig verworfen wurden wie z.B. das Phlogiston.

2 Einbindung in den Unterricht

WERNER KUHN begründete die Knäuelung unter anderem statistisch. Hierauf kann man im Unterricht Bezug nehmen, allerdings mit stochastischen Simulationen anstelle der analytisch-mathematischen Herleitungen von KUHN. Als Maß für die Gestalt von Polymermolekülen kann man den mittleren quadratischen Abstand $\langle R^2 \rangle$ zwischen den beiden Enden der Polymermoleküle verwenden (KUHN, 1934), der mathematisch der Varianz entspricht. Wenn man ein Modell für Polymermoleküle mit frei beweglichen Bindungen annimmt, kann man ihre Struktur mit dem Random Walk-Modell untersuchen. Hierbei bewegt man sich schrittweise in zufällige Richtung. Für ein Polymermolekül entspricht ein Schritt einem Segment. Die Theorie liefert für einen Random Walk der Länge N die Beziehung $\langle R^2 \rangle = N$. Hierbei ist die Länge eines Segments zur Vereinfachung der Gleichung auf eins gesetzt. Wären Polymermoleküle immer gestreckt, dann wäre das Ergebnis $\langle R^2 \rangle = N^2$. Letzteres kann man plausibel machen, wenn man den quadratischen End-End-Abstand eines gestreckten Moleküls mit der Zahl der Segmente vergleicht.

Das Random Walk-Modell eignet sich, Modellbildung und Simulation im Chemieunterricht zu thematisieren. Dazu können die Schüler/innen an der Entwicklung eines Simulationsprogramms mitwirken und damit anschließend das System erforschen. Der individuelle Grad der Mitwirkung kann mit Methoden des sogenannten informatischen Denkens (computational thinking) differenziert begleitet werden. So ist es möglich Schüler/innen, die über keine informatischen Vorkenntnisse verfügen, an die Erstellung einer Computersimulation für ein chemisches System heranzuführen bzw. an ihr teilhaben zu lassen.

Ziel der didaktischen Beschäftigung mit dem informatischen Denken ist letztlich immer ein Hinführen zu den Grundlagen der Digitalisierung wie das Erstellen von Algorithmen und Computerprogrammen. Nichtsdestotrotz gibt es auch Aktivitäten auf dem Gebiet des stromlosen (unplugged) informatischen Denkens, also der Beschäftigung mit z.B. algorithmischen Vorgängen ohne Nutzung digitaler Geräte. Die Untersuchung des stromlosen informatischen Denkens kann als Grundlage für die Entwicklung von didaktischen Methoden dienen. So haben KOTSOPoulos et al. (2022) das freie Spiel von Vorschulkindern auf Ausprägungen des informatischen Denkens im Rahmen einer systematischen Übersichtsarbeit untersucht. Dazu haben sie 26 Ausprägungen identifiziert und diese beim freien Spiel von Kindern beobachten können. Dies zeigte, dass im Rahmen der natürlichen Entwicklung von Kindern bereits Aspekte des informatischen Denkens vorliegen. Wie gelangt man aber von dort zu einem konkreten Computercode? Programmiersprachen muten bisweilen kryptisch an, und sind häufig nicht intuitiv. Hier kann man Methoden wie Pseudocodes oder Programmablaufpläne nutzen, um von den natürlichen Voraussetzungen

eine Brücke zu konkreten Codes zu bauen. Eine der freien spielerischen Aktivitäten von KOTSOPOULOS et al. (2022) basiert ebenfalls auf dem Random Walk. Dazu lassen sie Kinder ein entsprechendes Spiel spielen und beobachteten dabei bestimmte Ausprägungen des informatischen Denkens. In ähnlicher Weise spielen Schüler/innen hier das Random Walk-Spiel zur Untersuchung der Gestalt von Polymermolekülen. In Anlehnung an eben zitierte Arbeit ist zu erwarten, dass die Schüler/innen bereits vorhandene Fähigkeiten des informatischen Denkens einbringen und diese hierbei weiterentwickeln.

Ein Unterrichtsetting beginnt mit der Erarbeitung des historischen wissenschaftlichen Problems durch die Schüler/innen, also der Auseinandersetzung zwischen STAUDINGER und WERNER KUHN. Die eigenständige Recherche zu WERNER KUHN fällt schwer. Hier kann man unterstützend einen ChiuZ-Artikel zur Verfügung stellen (KUHN, 1985). Das Modell von THOMAS KUHN kann über ein Referat vorgestellt und diskutiert werden. Schließlich folgt die Hinleitung zu der Frage, wie man auf einem zweidimensionalen Gitter ein Polymermolekül mit flexiblen Bindungen anordnen könnte. Der Ablauf und die Regeln eines entsprechenden Spiels können die Schüler/innen strukturiert in Stichworten verschriftlichen, was einem Pseudocode entspricht. Ein Pseudocode ist ein allgemein verständlicher Ablaufplan eines Programms, ohne eine konkrete Programmiersprache zu verwenden. Mit einem vorgefertigten, leeren Programmablaufplan als unterstützendes Gerüst kann der Spielalgorithmus erstellt werden.

Je nach Leistungsstand kann man anstelle einer vorgefertigten Version auch die Bausteine eines Programmablaufplans vorgeben. Die Umsetzung in einen lauffähigen Computercode kann ebenfalls über die Bereitstellung von Bausteinen erfolgen. Alternativ kann man auch direkt einen Code zur Verfügung stellen und quasi rückblickend den Zusammenhang zwischen Programmablaufplan und Code erarbeiten lassen. So wird der Programmcode auch ohne Programmierkenntnisse verständlich. Die Schüler/innen können anschließend Polymerketten unterschiedlicher Länge simulieren, den End-End-Abstand über viele Konfigurationen mitteln und daraus Gesetzmäßigkeiten herleiten.

3 Simulationen

Wir beschränken uns hier auf zweidimensionale Systeme. Der Einstieg in die Simulation erfolgt mit dem Random Walk-Modell, dass man als den Heimweg einer betrunkenen Person einführen kann. Betrunken bezieht sich auf eine regellose Bewegung, bei der völlig zufällig die Richtung geändert wird. Dieses Modell lässt sich auf Polymere anwenden, wenn man annimmt, dass die Bindungen völlig frei beweglich sind. Statt des kontinuierlichen Raums nutzen wir hier ein quadratisches Gitter. Der Abstand zwischen zwei Gitterplätzen und somit auch die Segmentlänge ist eins, so dass die Koordinaten der Gitterplätze über ganze Zahlen angegeben werden können.

```

1 from random import randint
2 Konfigurationen = 1000
3 N = 20
4 rechts = 1
5 links = 2
6 hoch = 3
7 runter = 4
8 Summe = 0
9 for n in range(0, Konfigurationen):
10     x = 0
11     y = 0
12     for i in range(0, N):
13         Schritt = randint(1, 4)
14         if Schritt == rechts: x = x + 1
15         if Schritt == links: x = x - 1
16         if Schritt == hoch: y = y + 1
17         if Schritt == runter: y = y - 1
18         Summe += x**2 + y**2
19 Mittelwert = Summe / Konfigurationen
20 print "<R^2> =", Mittelwert, " N =", N

```

Abb. 1. TigerJython-Code (ARNOLD et al., 2023) für einen Random Walk auf einem quadratischen Gitter.

Für die haptische Simulation ist ein Tetraederwürfel und Kästchenpapier erforderlich. In den ergänzenden Informationen sind Arbeitsblätter für die Durchführung und die Auswertung des Spiel zur Verfügung gestellt. Der Random Walk startet im Koordinatenursprung. Je nach gewürfelte Zahl wird ein Strich in eine der vier Richtungen gezogen und so der Random Walk fortgesetzt. Nach einer vorgegebenen Zahl an Schritten z.B. $N=10$ wird der End-End-Abstand Δx und Δy in x - und y -Richtung als Anzahl an Kästchen bestimmt und das Quadrat des End-End-Abstandes $R^2 = \Delta x^2 + \Delta y^2$ berechnet. Dies wird einige Male wiederholt und schließlich der Mittelwert $\langle R^2 \rangle$ berechnet. Man kann zur Verbesserung der Statistik zusätzlich über die Ergebnisse eines ganzen Kurzes mitteln. Mit diesem Vorgehen erreicht mal leicht eine Größenordnung von 100 Konfigurationen. Die Schüler/innen erkennen an den so erhaltenen Daten die Gleichung $\langle R^2 \rangle \approx N$ selbstständig ebenso wie $\langle \Delta x \rangle^2 \approx 0$ und $\langle \Delta y \rangle^2 \approx 0$.

Der in Abbildung 1 gelistete Code bildet dieses Spiel ab. Anstelle des Tetraederwürfels wird der Zufallszahlengenerator `randint()` genutzt. Mit der bedingten

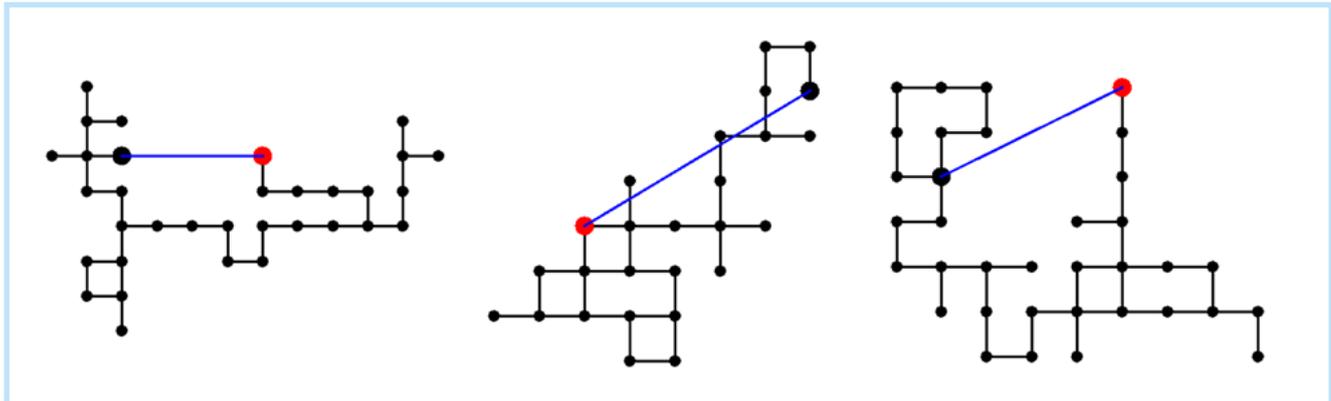


Abb. 2. Einzelne Konfigurationen für $N = 50$ Segmente. Der schwarze Punkt ist der Startpunkt im Ursprung, der Endpunkt ist rot und die blaue Linie ist der End-End-Abstand. Der entsprechende Programmcode mit graphischer Ausgabe befindet sich in den Online Ergänzungen. Für eine einzelne Konfiguration ist es unwahrscheinlich, dass man exakt $R^2 = N$ erhält. Erst der Mittelwert über viele Konfigurationen liefert $\langle R^2 \rangle = N$.

Anweisung `if` wird in Abhängigkeit der Zufallszahl entschieden in welche Richtung der Random Walk fortgesetzt wird. In dem Code wurden wegen der besseren Lesbarkeit Variablen für die vier Richtungen verwendet. Zur Berechnung des Mittelwerts muss man diesen Code in eine übergeordnete Schleife von Wiederholungen einbinden, in der eine große Zahl von Random Walks erzeugt werden. In Zeile 18 wird nach Abschluss eines Random Walk R^2 aufsummiert, um damit am Ende den Mittelwert $\langle R^2 \rangle$ zu berechnen (bei += wird das Ergebnis der rechten Seite zur Variablen auf der linken Seite hinzuaddiert). Hierbei ist x der Abstand zwischen Anfangs- und Endpunkt in x -Richtung (also Δx) und entsprechend y in y -Richtung (also Δy). Ordentliche Ergebnisse erhält man bereits mit 10^3 Konfigurationen.

eine Segmentlänge von eins der Theorie mit $\langle R^2 \rangle = N$ entspricht. Zur Verdeutlichung des Unterschiedes in dieser Auftragung zu einem gestreckten Polymermolekül ist in Abbildung 3 der Graph für $\langle R^2 \rangle = N^2$, eine Parabel, ergänzt.

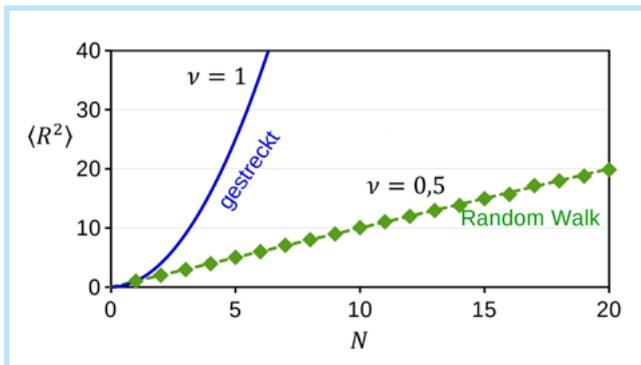


Abb. 3. Simulationsdaten des mittleren quadratischen End-End-Abstand des Random Walk (Punkte) im Vergleich zur Theorie des Random Walk (Gerade) und zum Verlauf des Graphen für hypothetische, gestreckte Moleküle. Die Exponenten ν gelten für $\langle R^2 \rangle = N^{2\nu}$.

In Abbildung 2 sind einzelne Konfigurationen abgebildet, die bereits einen Eindruck der Gestalt von Polymeren geben, denn die Wahrscheinlichkeit ein gestrecktes Polymer zu erhalten ist beliebig gering. Die Auftragung des Mittelwerts $\langle R^2 \rangle$ gegen die Zahl der Segmente liefert einen linearen Zusammenhang wie in Abbildung 3 aufgetragen. Eine lineare Regression (Trendlinie bei Tabellenkalkulationen) liefert die Steigung eins, was für

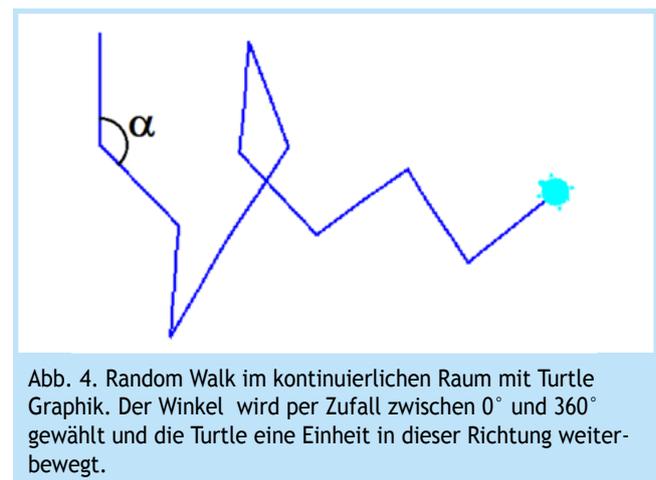


Abb. 4. Random Walk im kontinuierlichen Raum mit Turtle Graphik. Der Winkel wird per Zufall zwischen 0° und 360° gewählt und die Turtle eine Einheit in dieser Richtung weiterbewegt.

Diese Ergebnisse der Untersuchungen ermöglichen den Schüler/innen die Beantwortung der Frage nach der Gestalt von Polymeren und somit auch, ob STAUDINGER oder WERNER KUHN am Ende Recht behalten sollten. Lässt man das Ergebnis dieser Frage zu Beginn offen, so können die Schüler/innen auf Grundlage ihrer Simulationen diese Frage beantworten und somit zumindest einen kleinen Teil des Paradigmenwechsels bei der Entdeckung hochmolekularer Verbindungen nachvollziehen.

Eine einfache graphische Ausgabe eines Random Walk kann man auch mit Turtle-Graphik erzeugen (Abb. 4 und 5). Hierzu steht in TigerJython (ARNOLD et al., 2023) die Befehlsbibliothek (`gturtle`) zur Verfügung. Hierbei werden nicht diskrete Koordinaten des nächsten Schritts berechnet, sondern zunächst ein Winkel (α in Abb. 4 bzw. `Winkel` in Abb. 5) per Zufall ausgewählt und die Turtle dann um einen bestimmten Betrag in diese Winkelrichtung bewegt. Hierbei kann man die Winkelaufösung variable halten. Für `Winkel=90` verläuft der Random Walk auf einem quadratischen Gitter, für z.B. `Winkel=1` können sehr

```

1 from gturtle import *
2 from random import randint
3
4 tf = TurtleFrame()
5 rw = Turtle(tf)
6
7 Winkel = 1 # Winkelauflösung
8 Laenge = 40 # Länge eines Schritts in Pixel
9 N = 30 # Länge des Random Walks
10 rw.setPenWidth(2)
11
12 repeat N:
13     i = randint(1,360/Winkel) # Zufallszahl
14     rw.left(i*Winkel) # Richtung
15     rw.forward(Laenge) # Verschiebung
16
17 dx = rw.getX()/Laenge # End-End-Abstand in x-Richtung
18 dy = rw.getY()/Laenge # End-End-Abstand in y-Richtung
19
20 rw.setPenColor("red")
21 rw.moveTo(0,0) # End-End-Abstand zeichnen
22 print dx,dy,dx**2+dy**2, N

```

Abb. 5. TigerJython-Code für einen Random Walk mit der Turtle-Graphik.

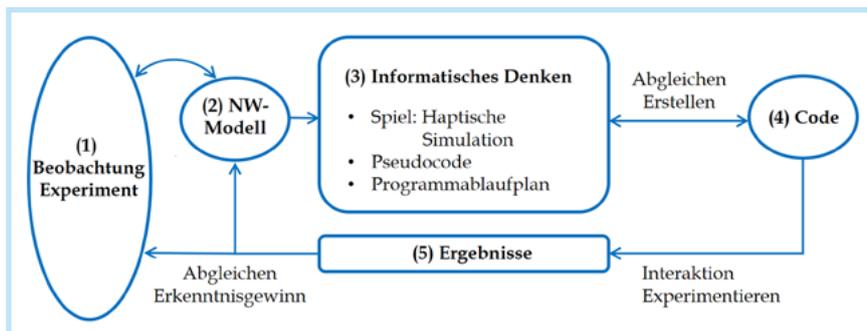


Abb. 6. Ablauf der Nutzung des informatischen Denkens zur Erstellung einer Simulation eines naturwissenschaftlichen Systems (KRASKA, 2023).

viel mehr Punkte auf der Fläche erreicht werden. Zur Berechnung des quadratischen End-End-Abstandes R^2 müssen die Koordinaten der Turtle am Ende ausgelesen werden. Ein Nachteil der Turtle-Graphik ist die geringe Geschwindigkeit. Deshalb wird in dem Programm auch kein Mittelwert über viele Konfigurationen berechnet, es dient zur Illustration des Random Walk. In den Online Ergänzungen findet sich zusätzlich eine Variante dieses Programms, bei dem drei Turtle-Objekte erzeugt werden, die simultan bewegt werden und am Ende der Mittelwert des quadratischen End-End-Abstand berechnet wird.

4 Fazit

Über einen Unterrichtseinstieg zu einer historischen wissenschaftlichen Auseinandersetzung, wurde beispielhaft eine wissenschaftliche Entwicklung in der Chemie behandelt und in ein wissenschaftstheoretisches Modell eingeordnet.

Die Schüler/innen konnten durch die Erstellung einer Simulation an diese Entwicklung quasi teilnehmen, indem sie eine Teilfrage der fachlichen Entwicklung selber durch eine Simulation beantworteten. Das bietet die Möglichkeit der Auseinandersetzung mit einer Vielzahl von Aspekten im Rahmen dieses chemisch-fachlichen Themas. Die Umsetzung im Chemieunterricht in einem Q2-Kurs (letztes Jahr der Oberstufe) mit 16 Schüler/innen im Rahmen des Lehrplanthemas organische Werkstoffe, zeigte, dass die Schüler/innen der Methode aufgeschlossen sind und umsetzen konnten.

In Abbildung 6 (KRASKA, 2023) ist die Vorgehensweise zusammenfassend dargestellt. In den Online Ergänzungen sind Materialien zu Punkt (3) gegeben. Ausgangspunkt (1) ist eine experimentelle Beobachtung oder eine Fragestellung wie der hier geschilderte historische Disput. Zur Aufklärung wird ein Modell (2) erstellt, hier das von Kettenmolekülen, die aufgrund der geringen Energiebarriere der Bindungsrotation einer zufälligen Ausrichtung ihre Segmente unterliegen. Mit unterschiedlichen Methoden (3) wie einem Spiel, einem Pseudocode oder einen Programmablaufplan werden die Grundlagen für die Erstellung eines Codes (4) gelegt. Der Code kann dann entweder erstellt werden oder durch Abgleich mit Pseudocode bzw. Programmablaufplan ein Verständnis dafür entwickelt werden. Mit dem lauffähigen Programm können dann Simulationen des Modells auch für eine sehr hohe Anzahl von Konfigurationen durchgeführt werden (5), die dazu beitragen, die ursprüngliche Fragestellung zu

beantworten. Durch die Bandbreite der Tätigkeiten ist außerdem eine Differenzierung im Unterricht möglich.

Literatur

ARNOLD, J., KOHN, T., KOMM, D., ROTH, N., Programmierumgebung TigerJython, <https://www.tigerjython.ch/de> (zuletzt abgerufen am 02.10.2023)

ELIAS, H.-G. (1985). *Große Moleküle*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.

KAUSCH-BLECKEN VON SCHMELING, H.-H. (2011). Eighty years of macromolecular science: from birth to nano-, bio- and self-assembling polymers - with slight emphasis on European contributions, *Colloid Polym. Sci.* 289, 1407-1427.

KOTSOPOULOS, D., FLOYD, L., DICKSON, B. A., NELSON, V., MAKOSZ, S. (2022). Noticing and Naming Computational Thinking During Play, *E. Child. Educ. J.* 50, 699-708.

KRASKA, T. (2023). Particle simulations for inquiry-based teaching of polymer shape and entropic elasticity using computational thinking. *Phys. Educ.* 58(6), 065010.

KRÜGER, L. (Hg.) (1992). Thomas S. Kuhn Die Entstehung des Neuen, Kap. 12, *Neue Überlegungen zum Begriff des Paradigma*, Suhrkamp Frankfurt/Main 4. Aufl.

KUHN, W. (1934). Über die Gestalt fadenförmiger Moleküle in Lösungen, *Kolloid-Z.* 68, 2–15.

KUHN, H. (1985). Das Portrait: Werner Kuhn (1899–1963), *Chemie in unserer Zeit*, 19(3), 86–94.

KUHN, T.S. (1986). *Die Struktur wissenschaftlicher Revolutionen*, 13. Aufl., Suhrkamp-Verlag.

KUHN, T.S. – Alles über die Paradigmenwechsel in der Wissenschaft, <https://wissenschaftstheorieeins.wordpress.com/2017/12/02/thomas-s-kuhn-alles-ueber-die-paradigmenwechsel-in-der-wissenschaft/> (zuletzt abgerufen am 02.10.2023)

POHL, W.G. (2008). *Staudinger – Mark – Kuhn: Historical Notes from the Development of Macromolecular Chemistry between 1920 and 1940*, 6th International Conference on the History of Chemistry, Leuven.

ROSE, U. (2004). *Thomas S. Kuhn: Verständnis und Mißverständnis – Zur Geschichte seiner Rezeption*, Dissertation, Göttingen.

STAUDINGER, H. (1920). Über Polymerisation, *Ber. dt. chem. Ges.*, 53, 1073–1085.

THOMAS KRASKA, Institut für Physikalische Chemie, Naturwissenschaftliche Fakultät, Universität zu Köln, Greinstraße 4-6, 50939 Köln, <https://van-der-waals.pc.uni-koeln.de/>, t.kraska@uni-koeln.de, studierte Chemie und promovierte an der Ruhr-Universität Bochum. Nach Postdoc- und Forschungsaufenthalten an der Cornell University und an der UC Berkeley habilitierte er sich 1999 an der Universität zu Köln. Seit 2010 unterrichtet er außerdem an einem Gymnasium die Fächer Chemie, Physik, Mathematik, MINT/Informatik und NW. ■□