



Poster

Transparente Teilchensimulation im Chemieunterricht für das vertiefende Verständnis chemischer Prozesse

T. Kraska, Institut für Physikalische Chemie, Universität zu Köln



Teilchensimulationen in der Schule^{1,2,3,4,5}

- o Entwicklung von Simulationen durch Lernende
- o Einblicke ins Submikroskopische
- o Vertiefendes Verständnis durch Umsetzung in einen Code



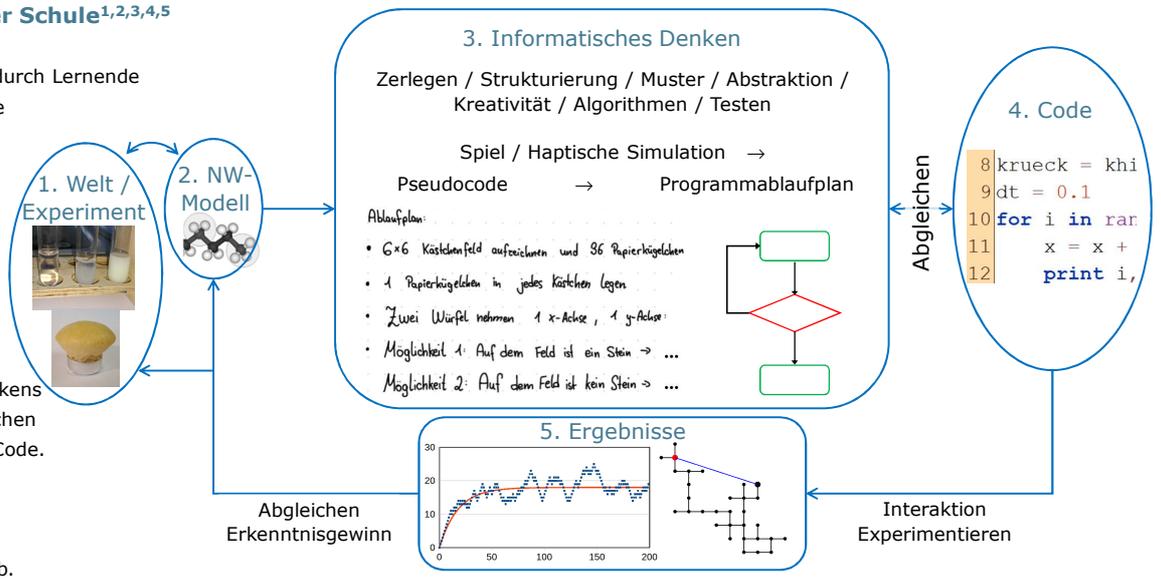
Aber ... , ohne informatische Vorkenntnisse?



Methoden des informatischen Denkens (computational thinking) ermöglichen einen zwanglosen Übergang zum Code.



Der resultierende Code bildet submikroskopische Vorgänge ab.

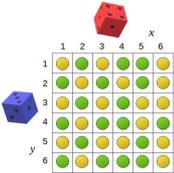


Chemisches Gleichgewicht¹

Übliche haptische Modellsimulationen sind der Apfelkrieg oder der Stechheberversuch.

Stochastisches Spiel

Ein stochastisches Brettspiel ermöglicht einen einfachen Programmcode: Die Koordinaten werden gewürfelt und der Stein auf dem gewürfeltem Feld wird umgedreht.



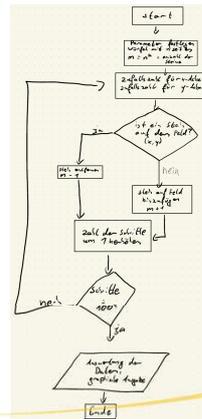
Spielanleitung / Pseudocode

Eine Spielanleitung fungiert als Pseudocode. Ein Pseudocode ist allgemein verständlich und unabhängig von einer konkreten Programmiersprache:

- Feld 6x6 vorbereiten -> Eduktfeld
- Feld für Produkte vorbereiten
- 2 mal würfeln, erstes Mal x, zweites Mal y
- Auf dem 6x6 Feld den Stein weglegen.
- Ziel: Alle Steine sollen vom Eduktfeld weg. -> sehr geringe Wahrscheinlichkeit
- Leeres Feld gewürfelt -> Stein zurücklegen
- Nach jedem Würfeln, Edukt und Produktwerte aufschreiben

- Erstelle ein Spielfeld mit der Größe 6 X 6
- Lege in jedes Feld einen Stein
- Würfle mit zwei Würfeln eine Koordinate
- Wenn auf der Koordinate ein Stein liegt entferne ihn
- Würfle erneut
- Wenn auf der Koordinate ein kein Stein liegt füge einen hinzu wenn dort einer liegt entferne ihn
- Ende des Versuches nach 100 Durchführungen

Programmablaufplan



Programmcode

Für die Umsetzung in einen Programmcode ist eine konkrete Programmiersprache erforderlich (z.B. TigerJython).

```

3 from random import *
4 W = 6
5 NAO = W*W
6 x = 0
7 Feld = [[1 for i in range(W+1)] for i in range(W+1)]
8 print 0, x
9 for i in range(1,200):
10 ix = randint(1,W)
11 iy = randint(1,W)
12 if Feld[ix][iy]==1:
13 x = x + 1
14 Feld[ix][iy]=0
15 else:
16 x = x - 1
17 Feld[ix][iy]=1
18 print i, x

```



Video

Alternativ ist der Abgleich mit einem gegebenem Code möglich.

Papierchromatographie mit Scratch⁴

Für die Unterstufe eignet sich Scratch.

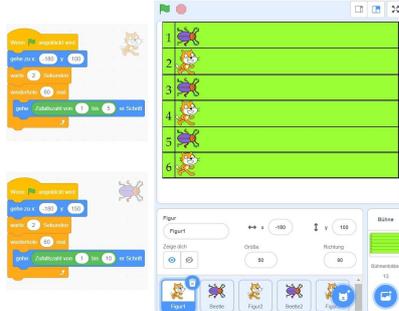


Zum Einstieg in die Simulation haben die Schülerinnen und Schüler zunächst nur ein Objekt auf einer Bahn laufen lassen. Die Simulation setzen sie dann aus mehreren Objekten mit zwei unterschiedlichen Geschwindigkeiten zusammen.



Video

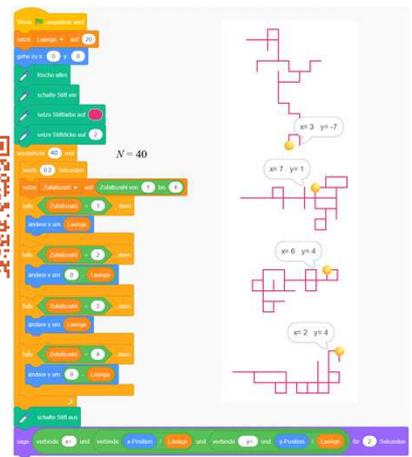
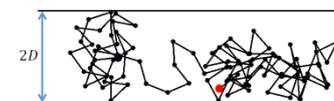
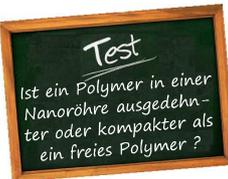
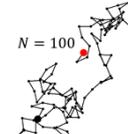
haptische Simulation: Brettspiel



Gestalt von Polymermolekülen mit Scratch¹ oder TigerJython⁵

Random Walk-Modell

Gestalt von flexiblen Polymermolekülen



Weitere Anwendungen

- o Molekulardynamik
- o Le Chatelier-Braun-Effekt
- o Arrhenius-Gleichung
- o Gaschromatographie
- o Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte in der Quantenmechanik

Fazit

Über alle Jahrgangsstufen haben die Lernenden mit Freude an der Entwicklung der Simulationen gearbeitet. Neben der vertiefenden Beschäftigung mit den chemischen Inhalten erlaubt die hier geschilderte Vorgehensweise eine Überwindung der Barriere zu Programmcodes für naturwissenschaftliche Simulationen.

Literatur

1. T. Kraska, NeDiChe-Treff 2022, Uni Wuppertal
 2. T. Kraska, CHEMKON 28, 112-121 (2021)
 3. T. Kraska, J. Chem. Educ. 97, 1951-1959 (2020); 99, 2026-2031 (2022)
 4. T. Kraska, CHEMKON 28, 299-304 (2021)
 5. T. Kraska, Phys. Educ. 58 (2023)
- <https://doi.org/10.1088/1361-6552/acf086>