



Digitalisierung im Chemieunterricht: Algorithmen und Programmierung

Thomas Kraska

Institut für Physikalische Chemie, Universität zu Köln
Freies Christliches Gymnasium Düsseldorf

NeDiChe 9.5.2022

```
65 repeat iter:  
66   i=i+1  
67   h1  
68   Vhin = V1 / A1  
69   V1 = h1 * Ahin  
70   print i, V1
```

Übersicht

- Einleitung
- Reaktionsgeschwindigkeit
 - Gärung
 - Entleerungsversuch
 - Stochastische Simulation
- Chromatographie
 - Papierchromatographie
 - Gaschromatographie
- Zusammenfassung

Software

TigerJython

<https://www.tjgroup.ch/index.php?site=download>

<https://webtigerjython.ethz.ch/> (online)

Scratch

<https://scratch.mit.edu/download>

<https://scratch.mit.edu/projects/editor/> (online)

Libre Office Calc

<https://www.libreoffice.org/download/download/>

GeoGebra

<https://www.geogebra.org/download?lang=de>

Warum?

Querschnittsthema mit Nutzen für die Chemie

- Simulationen von chemischen Prozessen aus dem Unterricht
- Rückwirkung auf fachliche Inhalte
- Basierend auf Schüler:innen-Experimente
- Anbindung an Themen, die bereits im KLP enthalten sind
- submikroskopisch → makroskopisch
- Kennenlernen von Simulationen auf Teilchenebene

6. PROBLEMLÖSEN UND MODELLIEREN



6.1 Prinzipien der digitalen Welt

Grundlegende Prinzipien und Funktionsweisen der digitalen Welt identifizieren, kennen, verstehen und bewusst nutzen

6.2 Algorithmen erkennen

Algorithmische Muster und Strukturen in verschiedenen Kontexten erkennen, nachvollziehen und reflektieren

6.3 Modellieren und Programmieren

Probleme formalisiert beschreiben, Problemlösestrategien entwickeln und dazu eine strukturierte algorithmische Sequenz programmieren; diese auch durch Programmieren umsetzen und die gefundene Lösungsstrategie beurteilen

6.4 Bedeutung von Algorithmen

Einflüsse von Algorithmen und Auswirkung der Automatisierung von Prozessen in der digitalen Welt beschreiben und reflektieren

3. KOMMUNIZIEREN UND KOOPERIEREN	4. PRODUZIEREN UND PRÄSENTIEREN	5. ANALYSIEREN UND REFLEKTIEREN	6. PROBLEMLÖSEN UND MODELLIEREN
3.1 Kommunikations- und Kooperationsprozesse Kommunikations- und Kooperationsprozesse mit digitalen Werkzeugen	4.1 Medienproduktion und Präsentation Medienprodukte adressatengerecht planen, gestalten und präsentieren; Möglichkeiten des Erfindens und Teilens identifizieren und nutzen	5.1 Medienanalyse Die Vielfalt der Medien, ihre Entwicklung und Bedeutungen kennen, analysieren und reflektieren	6.1 Prinzipien der digitalen Welt Grundlegende Prinzipien und Funktionsweisen der digitalen Welt identifizieren, kennen, verstehen und bewusst nutzen
	4.2 Nutzungsmittel	5.2 Meinungsbildung	6.2 Algorithmen erkennen Algorithmische Muster und Strukturen in verschiedenen Kontexten erkennen, nachvollziehen und reflektieren
			6.3 Modellieren und Programmieren Probleme formalisiert beschreiben, Problemlösestrategien entwickeln und dazu eine strukturierte algorithmische Sequenz programmieren; diese auch durch Programmieren umsetzen und die gefundene Lösungsstrategie beurteilen
			6.4 Bedeutung von Algorithmen Einflüsse von Algorithmen und Auswirkung der Automatisierung von Prozessen in der digitalen Welt beschreiben und reflektieren

Informationen und Daten speichern, wiederfinden und in verschiedenen Orten abrufen; Informationen und Daten zusammenfassen, organisieren und strukturiert aufbewahren

1.4 Datenschutz und Informationssicherheit
 Verantwortungsvoll mit persönlichen und fremden Daten umgehen; Datenschutz, Privatsphäre und Informationssicherheit beachten

2.4 Informationskritik
 Unangemessene und gefährdende Medieninhalte erkennen und hinsichtlich rechtlicher Grundlagen sowie gesellschaftlicher Normen und Werte einschätzen; Jugend- und Verbraucherschutz kennen und Hilfs- und Unterstützungsstrukturen nutzen

3.4 Cybergesundheit und -kriminalität
 Normen beachten; Persönliche, soziale und wirtschaftliche Auswirkungen von Cyberkriminalität und -kriminalität einschätzen; Ansprechpartner identifizieren

KMK Bildungsstandards Chemie für das Abitur, Juni 2020

BILDUNGSSTANDARDS FÜR DIE KOMPETENZBEREICHE

E 6 nutzen digitale Werkzeuge und Medien zum Aufnehmen, Darstellen und Auswerten von Messwerten, für Berechnungen, Modellierungen und Simulationen;

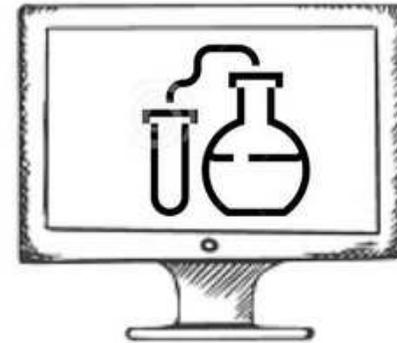
2.1.4 Chemische Zusammenhänge quantitativ-mathematisch beschreiben

Die Lernenden ...

S 17 wenden bekannte mathematische Verfahren auf chemische Sachverhalte an.

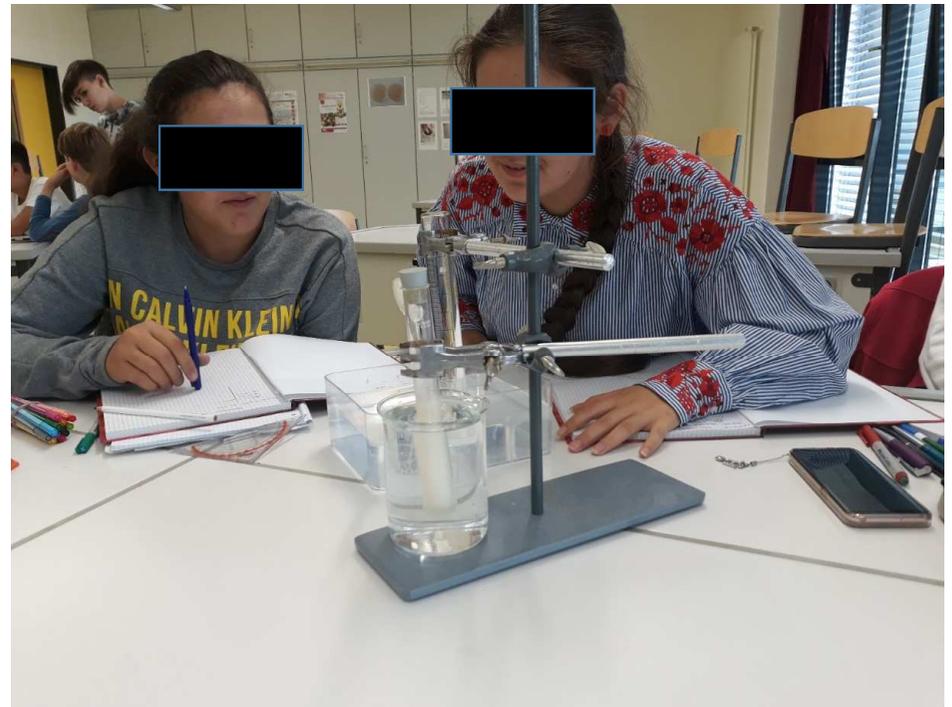
Übersicht

- Einleitung
- Reaktionsgeschwindigkeit
 - Gärung
 - Entleerungsversuch
 - Stochastische Simulation
- Chromatographie
 - Papierchromatographie
 - Gaschromatographie
- Zusammenfassung



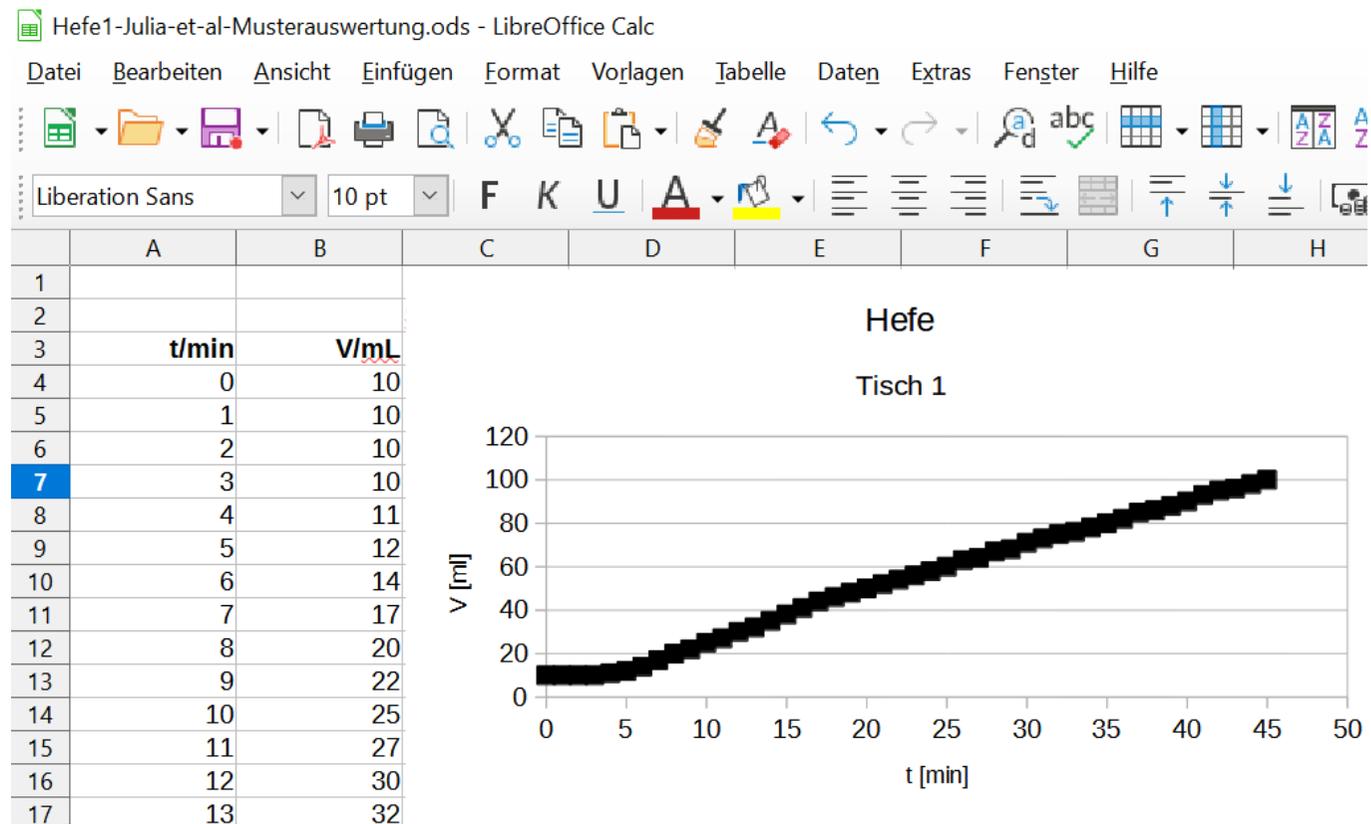
Reaktionsgeschwindigkeit

- MINT Klasse 8/9 (WP II)
- ca. 12 bis 20 SuS
- Ein Thema: Alkoholische Gärung
- ca. 6 Wochen je 90 Minuten
- Selbständige Planung, Aufbau, Optimierung der Parameter, Zugabe von Giften, ...
- Protokollführung / Klassenarbeit



Reaktionsgeschwindigkeit

- Messwertdarstellung mit Tabellenkalkulation (Libre Office Calc)



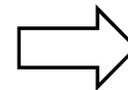
Reaktionsgeschwindigkeit (numerische Ableitung)

Steigungsdreieck

$$m = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}$$

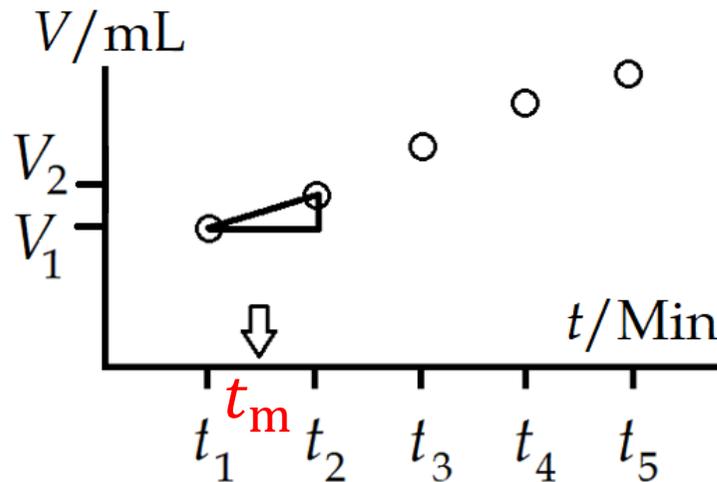
Bewegung

$$v = \frac{s_2 - s_1}{t_2 - t_1}$$



Reaktionsgeschwindigkeit

$$\text{RG} = \frac{V_2 - V_1}{t_2 - t_1}$$



ggfs. Intervallmitte

$$t_m = \frac{t_1 + t_2}{2}$$

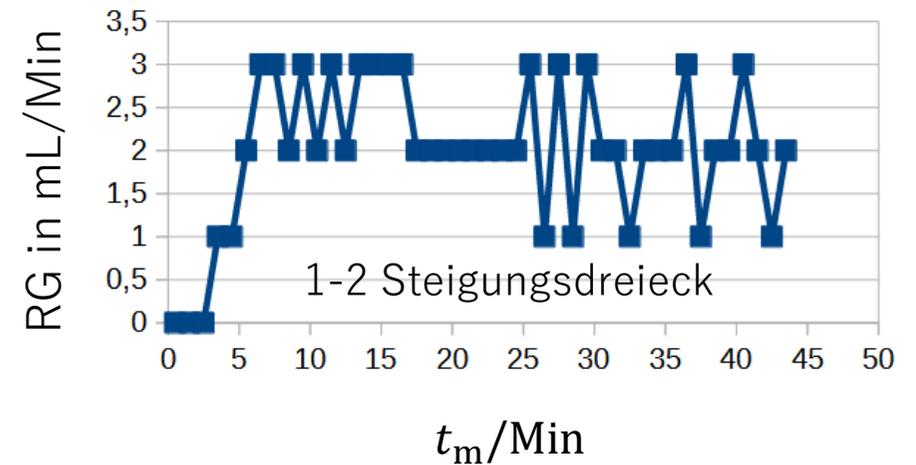
(t_m |RG)

Reaktionsgeschwindigkeit

- „Programmierung“ in einer Tabellenkalkulation
- Optimierung des Steigungsdreiecks 1-2, 1-3, 1-5

$$RG = \frac{V_2 - V_1}{t_2 - t_1}$$

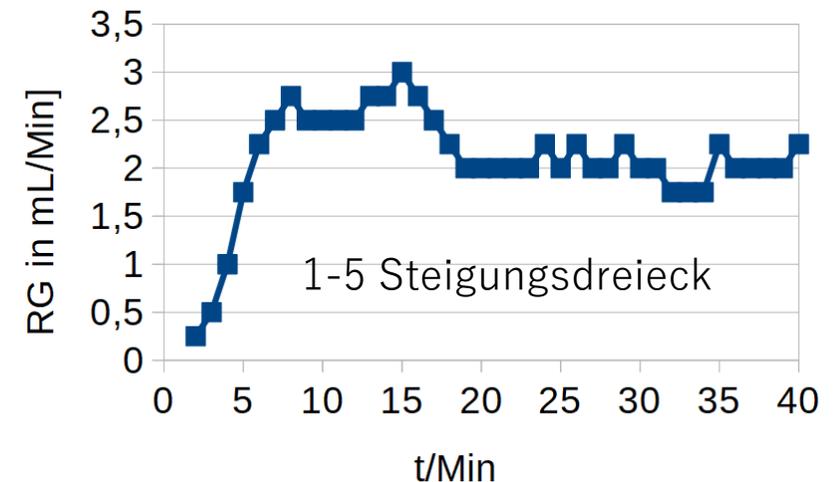
	t/Min.	V/mL	t _m /Min	
	A	B	C	D
1	0	10		
2	1	10	0,5	$= (B2 - B1) / (A2 - A1)$
3	2	10	1,5	0
4	3	10	2,5	0
5	4	11	3,5	1



Reaktionsgeschwindigkeit

- „Programmierung“ in einer Tabellenkalkulation
- Optimierung des Steigungsdreiecks 1-2, 1-3, 1-5

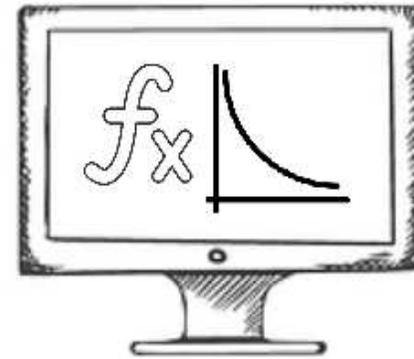
	t/min	V/mL	t(m)/min	RG / mL/min
3				
4	0	10		
5	1	10		
6	2	10	2	$= (B8 - B4) / (A8 - A4)$
7	3	10	3	0,5
8	4	11	4	1
9	5	12	5	1,75



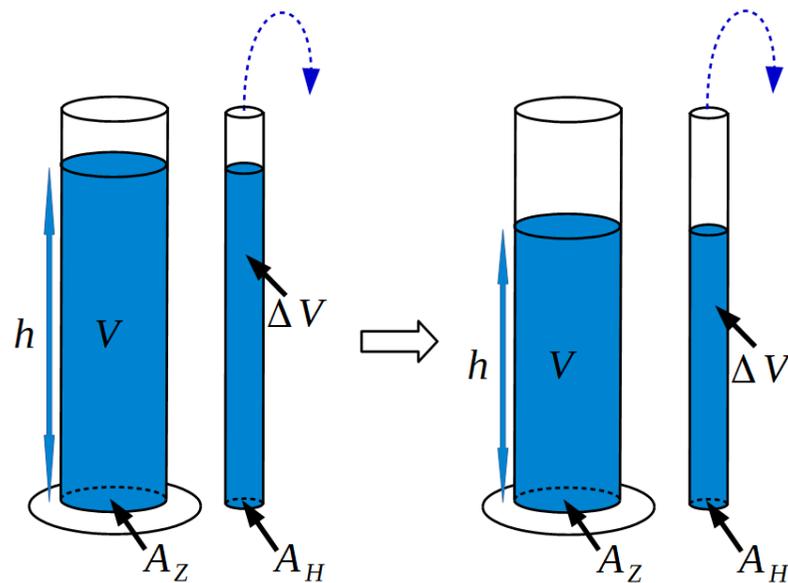
- Auswertung einer Reihe von Experimenten
- RG, Diskussion des Reaktionsverlaufs: Graph und Stärke der Blasenbildung
- Beispiel für die Nutzung der Mathematik

Übersicht

- Einleitung
- Reaktionsgeschwindigkeit
 - Gärung
 - Entleerungsversuch
 - Stochastische Simulation
- Chromatographie
 - Papierchromatographie
 - Gaschromatographie
- Zusammenfassung



Chemische Kinetik 1. Ordnung: Entleerungsversuch

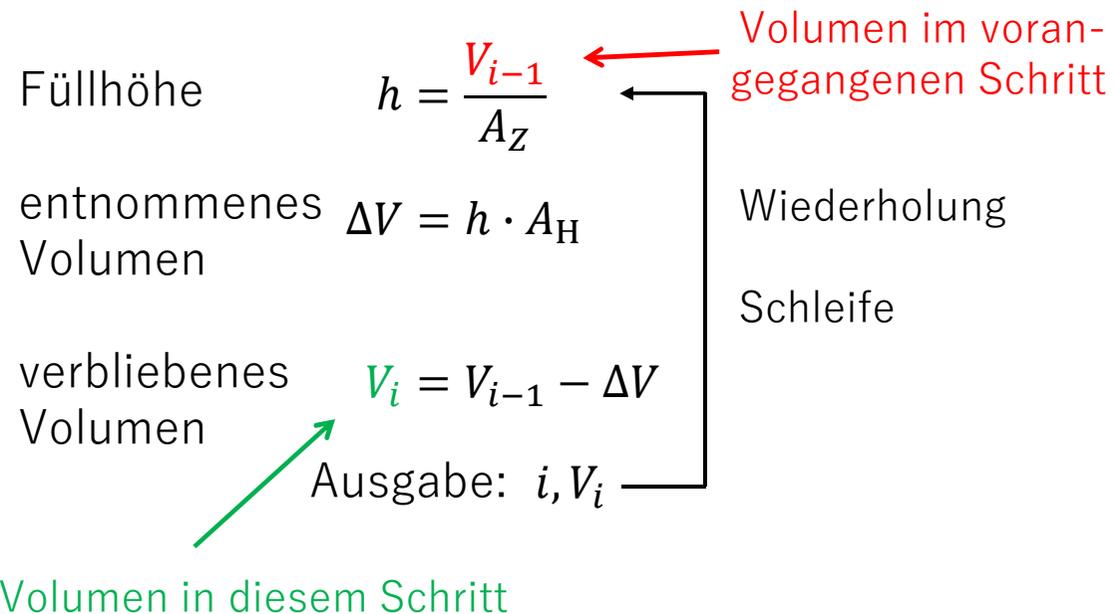


Praktische Beobachtung der DGL

$$\frac{\Delta V}{\Delta i} \sim -V \quad V'(i) = -k \cdot V$$

Schüler:innenexperiment

Pseudocode des Algorithmus



Chemische Kinetik 1. Ordnung: Entleerungsversuch

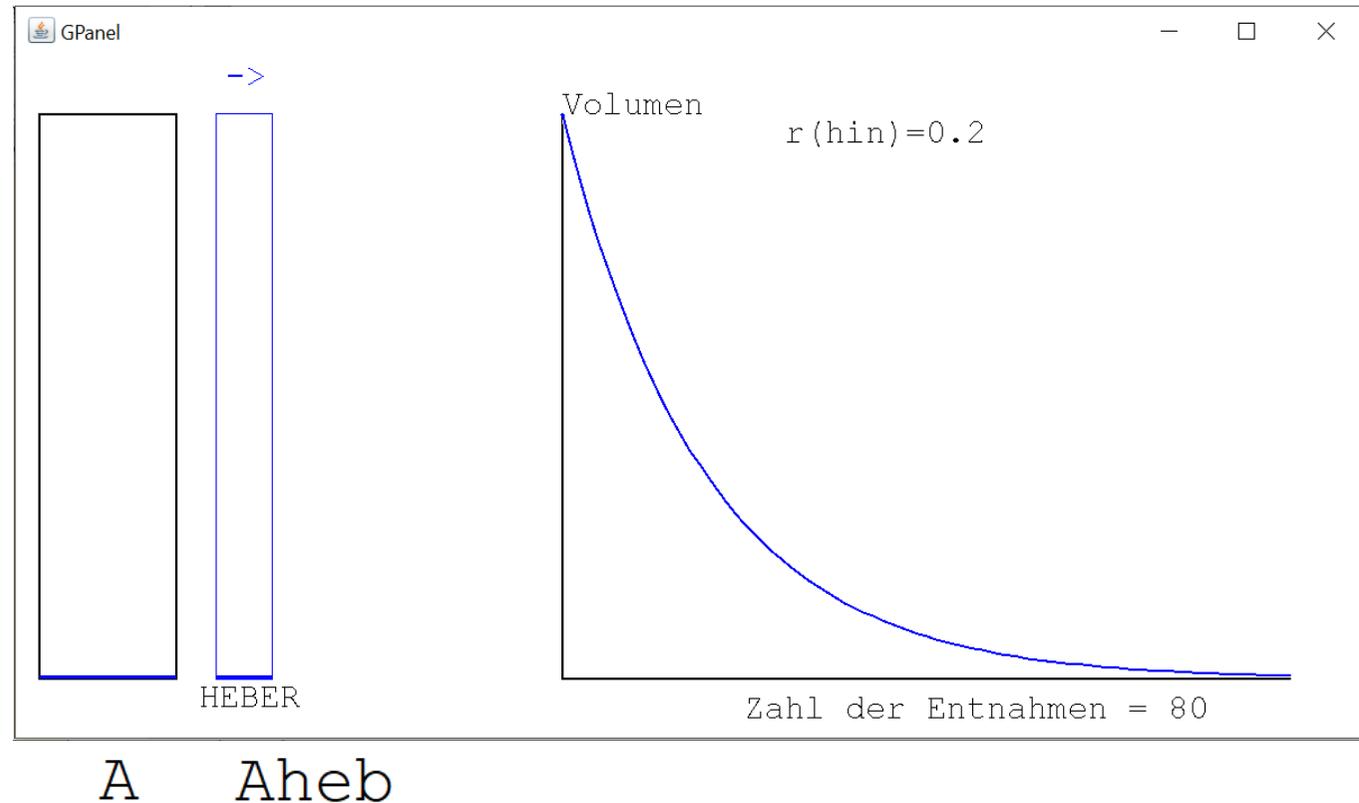
```
4 V = 100
5 n = 80
6 A = 10
7 Aheb = 0.5
```

Algorithmus

```
14 repeat n:
15     i = i + 1
16     h = V / A
17     Vheb = h * Aheb
18     V = V - Vheb
19     print i, V
```

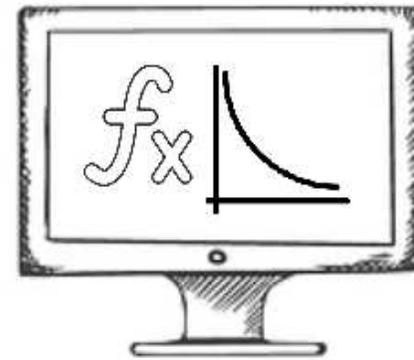
Zuweisung $i \leftarrow i + 1$

$i += 1$

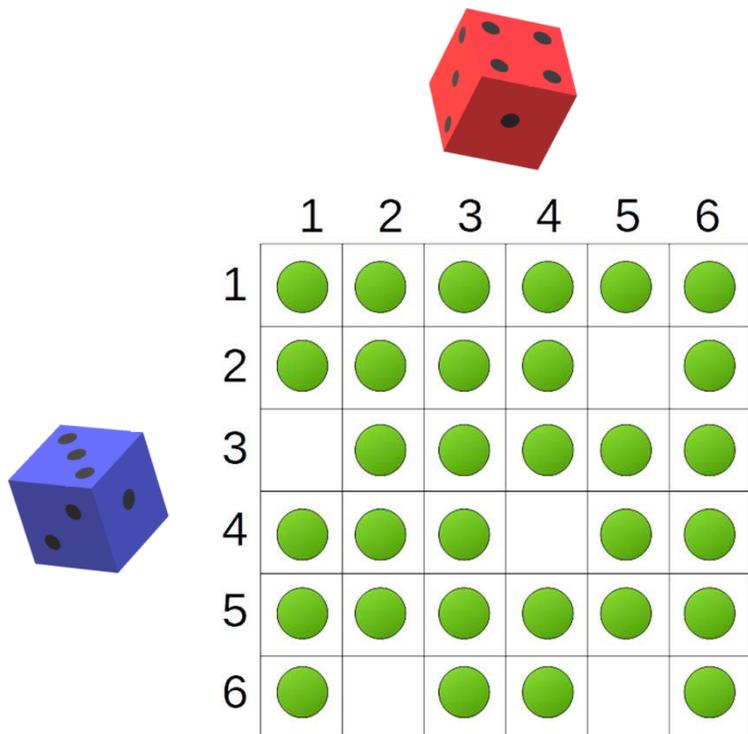


Übersicht

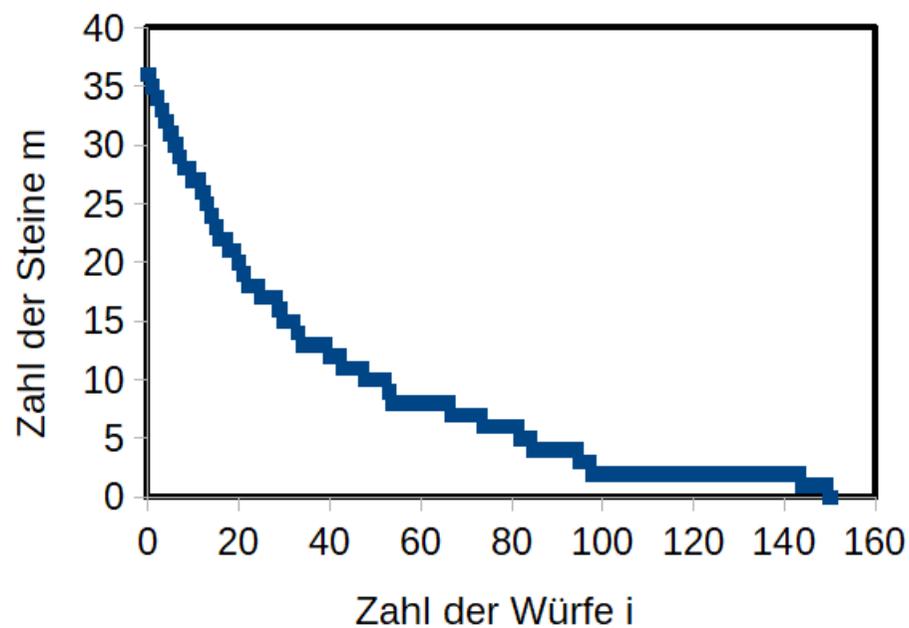
- Einleitung
- Reaktionsgeschwindigkeit
 - Gärung
 - Entleerungsversuch
 - Stochastische Simulation
- Chromatographie
 - Papierchromatographie
 - Gaschromatographie
- Zusammenfassung



Chemische Kinetik 1. Ordnung: Stochastisches Spiel



$$m'(i) \sim -m(i) \quad \text{DGL}$$



- ⇒ Anleitung
- ⇒ Pseudocode
- ⇒ Algorithmus

		ix					
		1	2	3	4	5	6
iy	1	●	●	●	●	●	●
	2	●	●	●	●		●
	3		●	●	●	●	●
	4	●	●	●		●	●
	5	●	●	●	●	●	●
	6	●		●	●		●

- ⇒ nächster Wurf
- ⇒ i um 1 erhöhen
- ⇒ $i=i+1$ oder $i+=1$

```

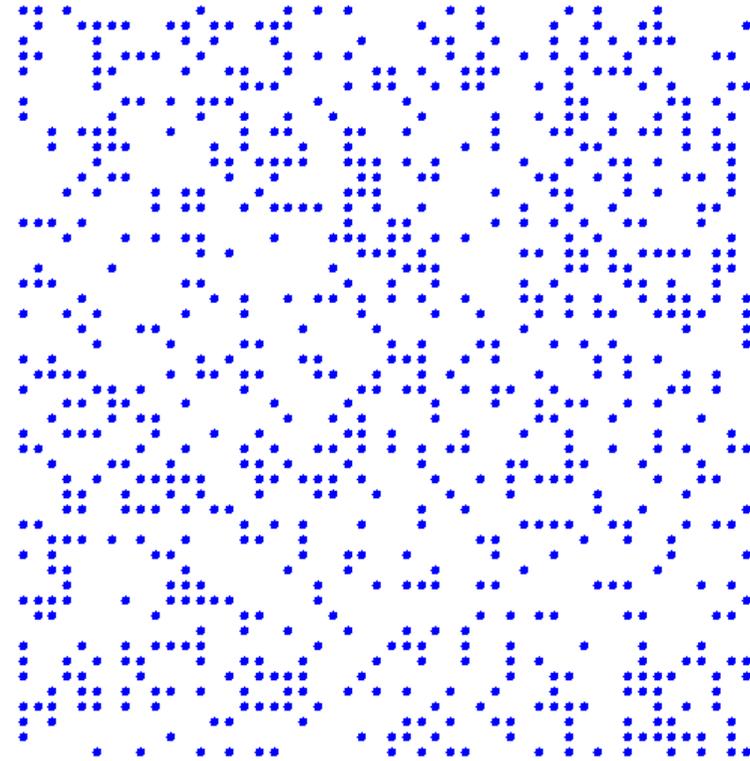
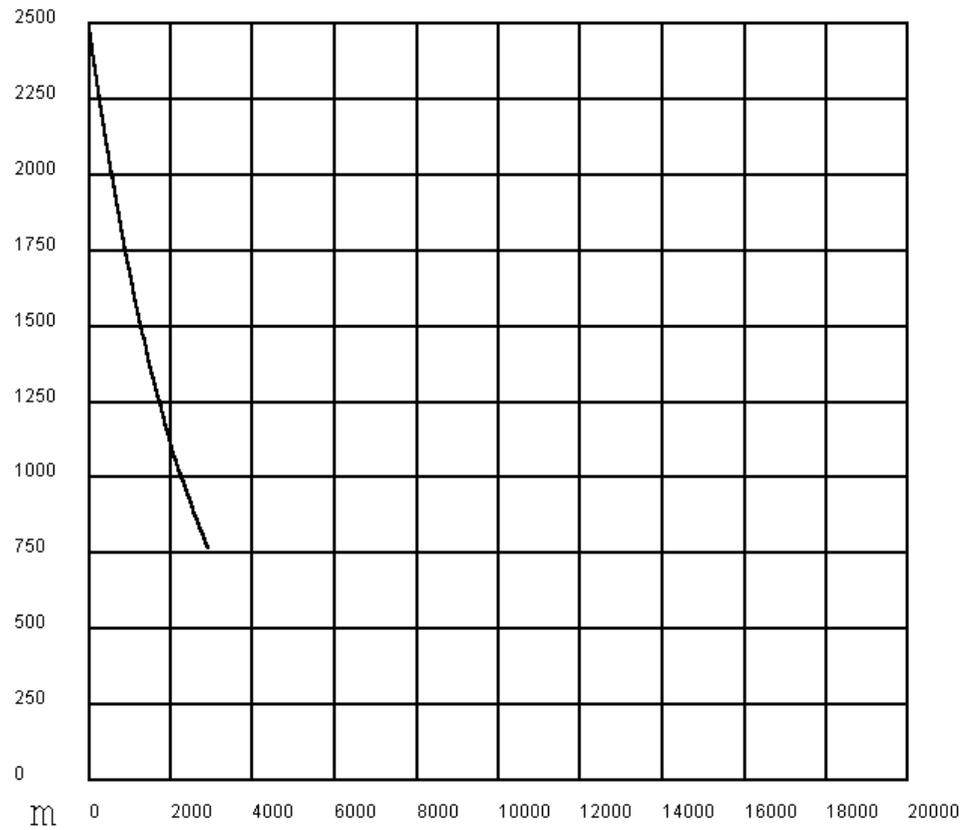
1 from random import *
2
3 n = 6
4 Pos = [[1 for j in range(n+1)] for i in range(n+1)]
5 f = open("Ki...")
6 m = n**2
7 i = 0
8 f.write("i = ")
9 f.write(str(i)+" "+str(m)+"\n")
10 print i,m
11 while m > 0:
12     ix = randint(1,n)
13     iy = randint(1,n)
14     i = i + 1
15     if Pos[ix][iy]==1:
16         m = m - 1
17         Pos[ix][iy]=0
18     print i,m
19     f.write(str(i)+" "+str(m)+"\n")
20
21 f.close()

```

SuS programmieren
 SuS sortieren
 SuS ordnen zu

solange noch Steine auf dem Brett
Koordinaten per Zufall
Schrittzähler um 1 erhöhen
wenn ein Stein auf dieser Position ist
verringere die Zahl der Steine auf dem Brett um 1
nimm den Stein vom Feld

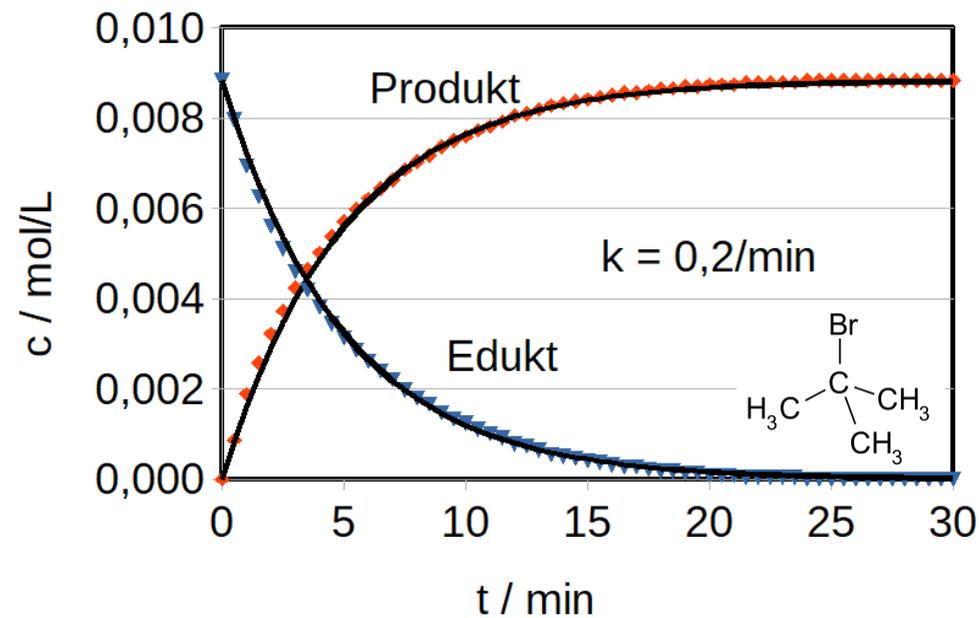
Simulation der Kinetik 1. Ordnung



Simulation und Experiment: 2-Brom-2-Methylpropan + H₂O

- Leitfähigkeitsmessung
- Exponentieller Abfall → Zerfall

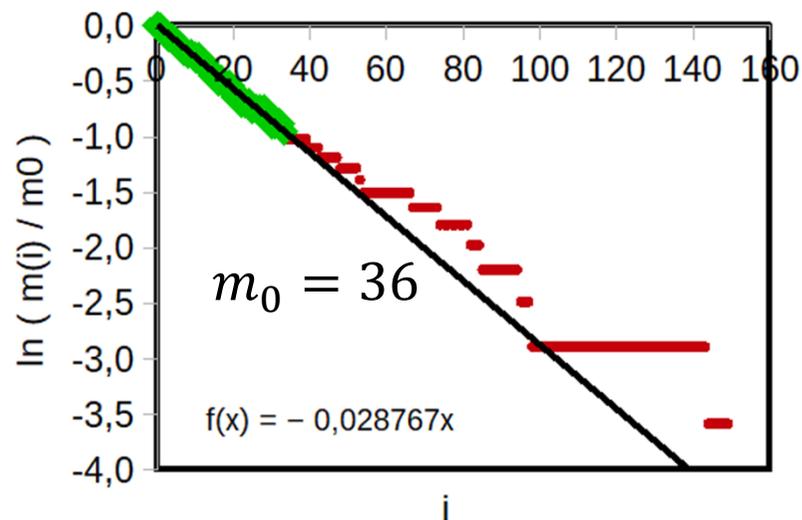
Schüler:innen-Experiment



Vergleich Simulation, Experiment: 2-Brom-2-Methyl-Propan + H₂O

Spiel

$$\ln \frac{m(i)}{m_0} = -k \cdot i$$

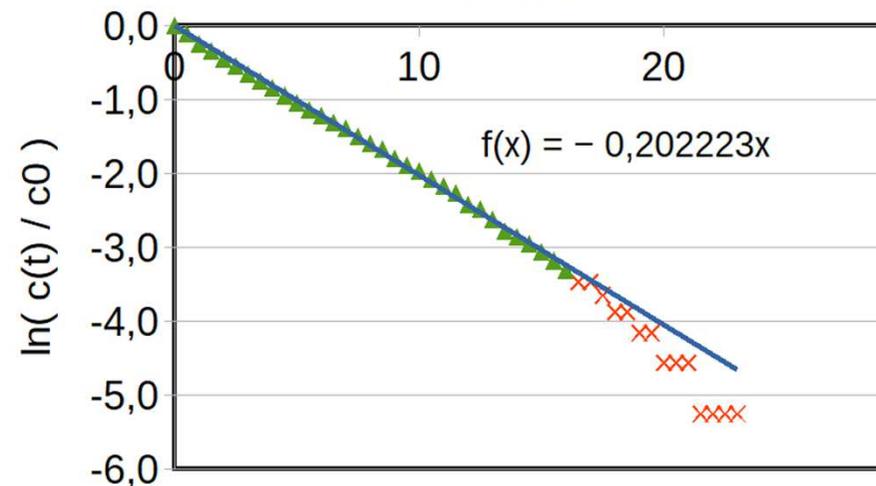


Linearisierung

Versuch

$$\ln \frac{c(i)}{c_0} = -k \cdot t$$

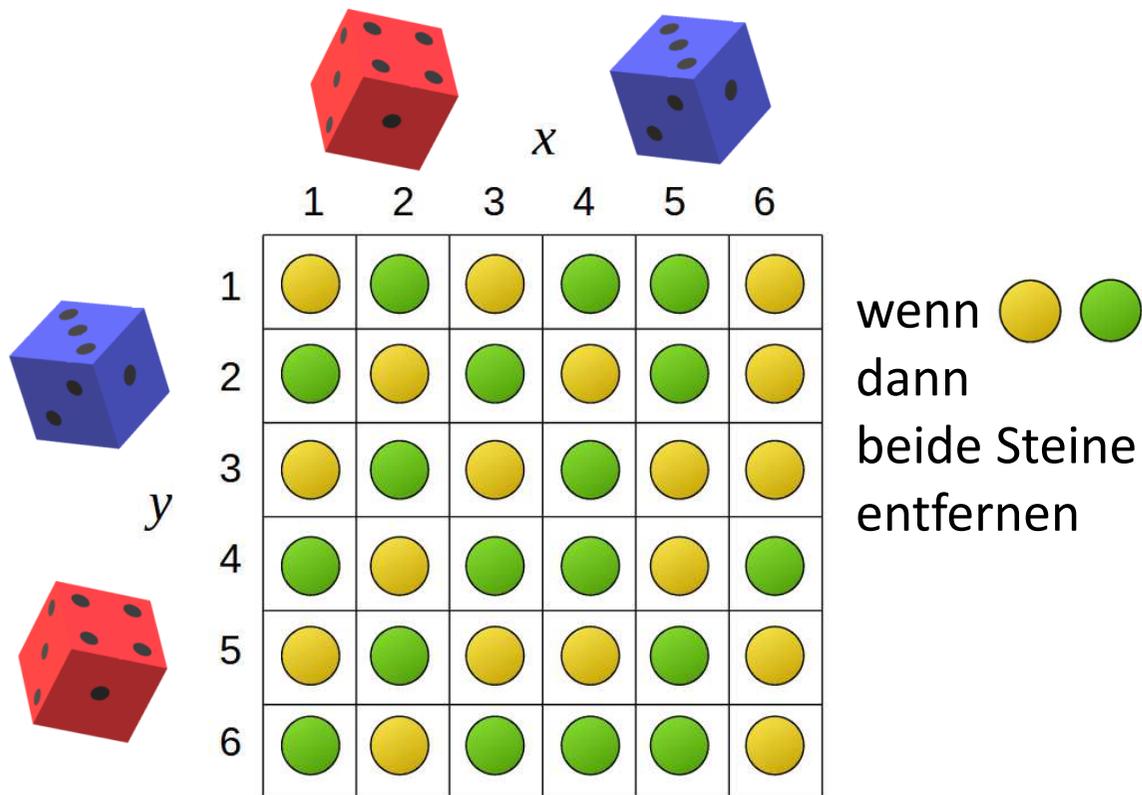
t / min



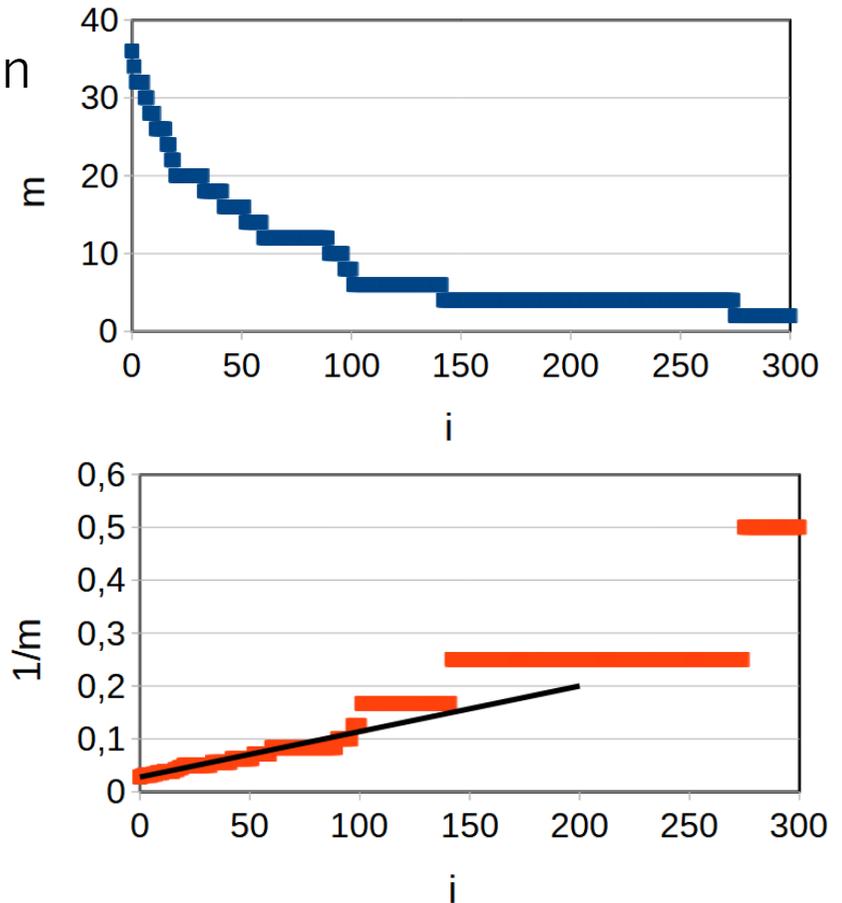
Exponentialfunktion, d.h. Zerfallsreaktion muss dominant sein $\Rightarrow S_N1$

Chemische Kinetik 2. Ordnung

- Leitfähigkeitsmessung einer Esterhydrolyse
- Simulation mit zwei stochastische Schritten



NeDiChe 9.5.2022

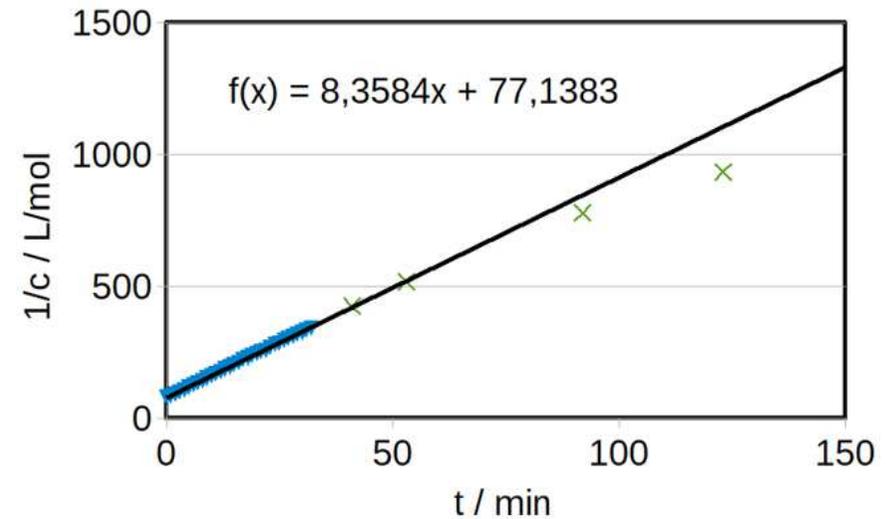
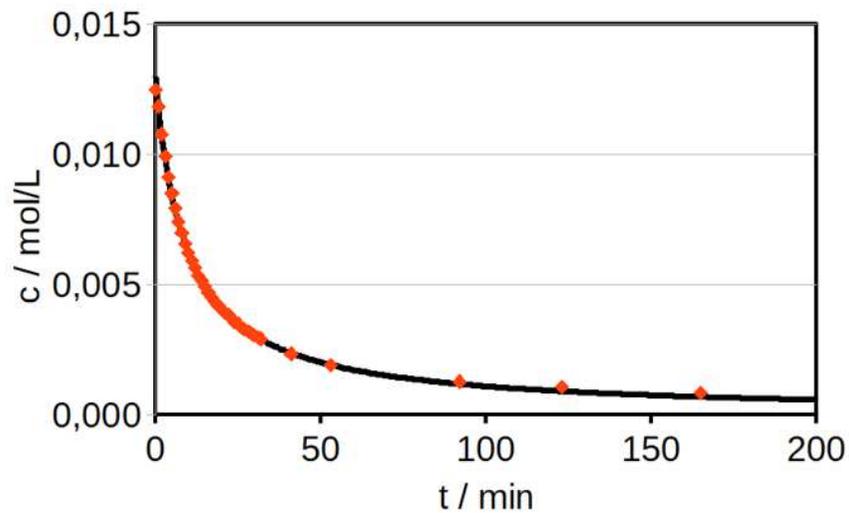


T. Kraska, Uni Köln & FCG Düsseldorf

Chemische Kinetik 2. Ordnung

- Leitfähigkeitsmessung einer Esterhydrolyse
- Simulation mit zwei stochastische Schritten

Schüler:innen-Experiment

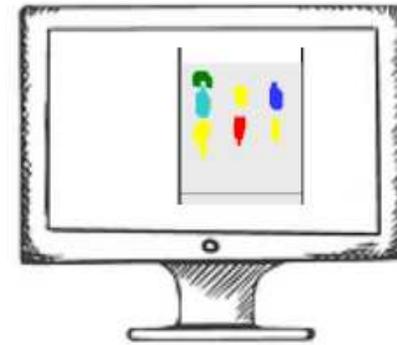


Chemische Kinetik

- Simulation mit einem Spiel
- Pseudoalgorithmus
- Simulationscode
- Untersuchung mit einem Simulationsprogramm
- Rückschlüsse auf den Reaktionsmechanismus

Übersicht

- Einleitung
- Reaktionsgeschwindigkeit
 - Gärung
 - Entleerungsversuch
 - Stochastische Simulation
- Chromatographie
 - Papierchromatographie
 - Gaschromatographie
- Zusammenfassung

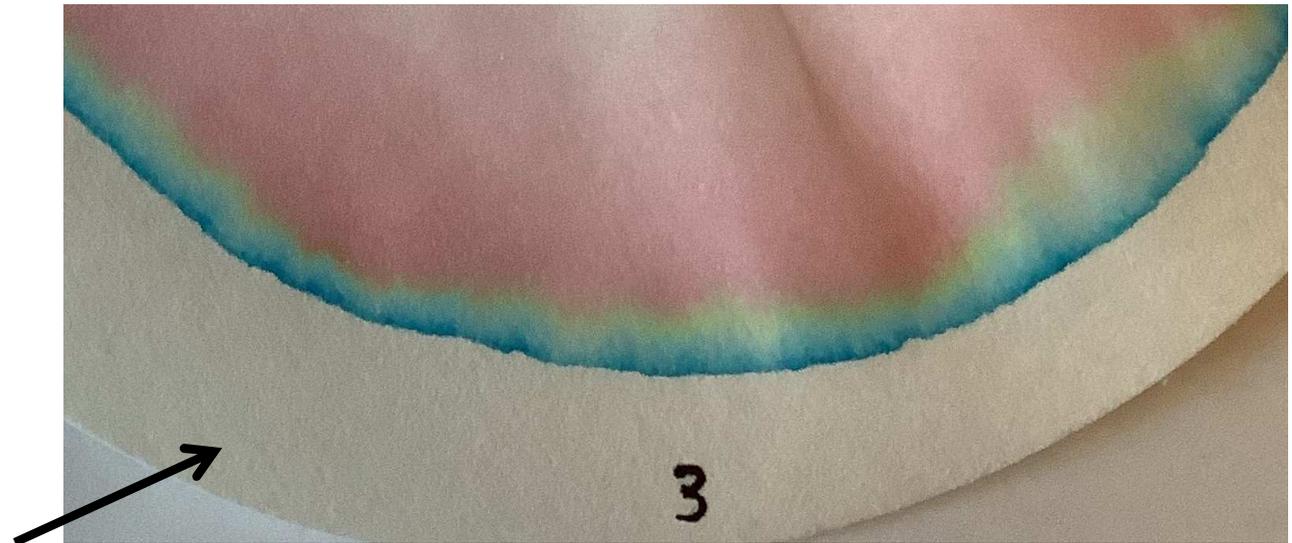


Papierchromatographie

NW Klasse 5/6 (WP)

Experimente mit Wasser:

- Blätter
- Schwarze Filzstiftfarbe
 - Pelikan colorella duo
 - Faber Kastell Multimark 1514 non-permanent F
 - ...



Papierchromatographie

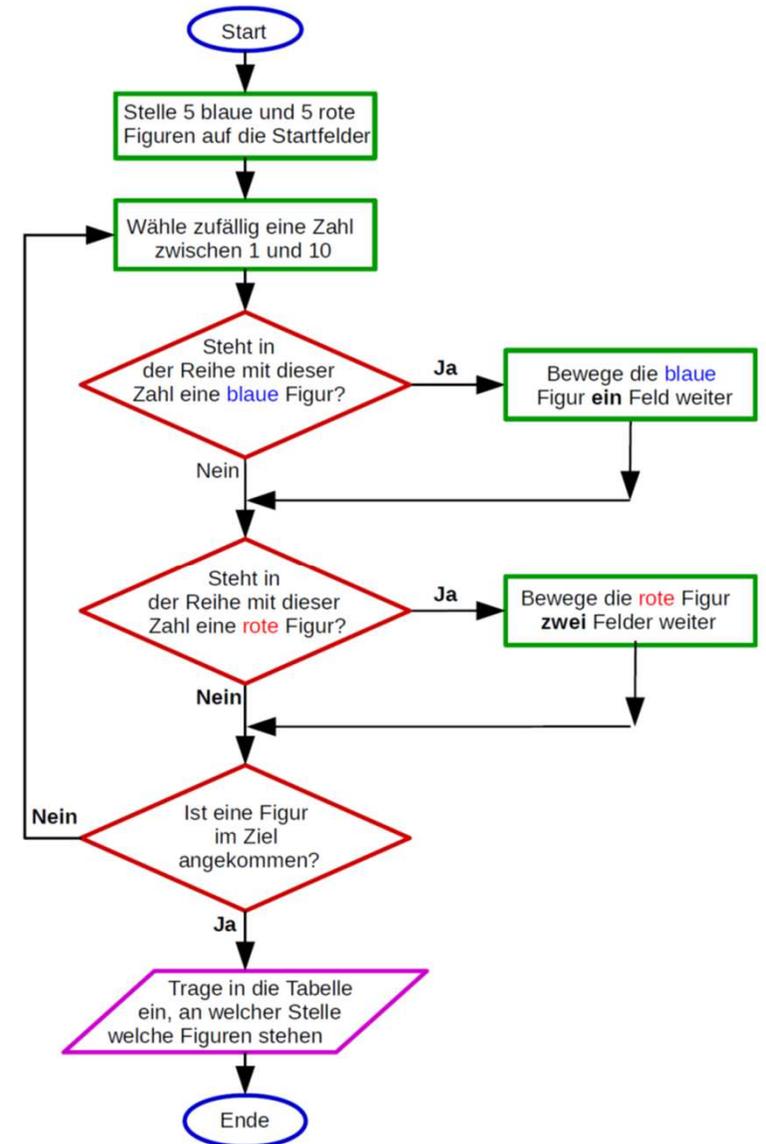
Spielerischer Zugang / Simulation:

- Zwei Sorten „Teilchen“
- Zufallszahlen zw. 1 und 10
- wenn  dann 2 vor
- wenn  dann 1 vor

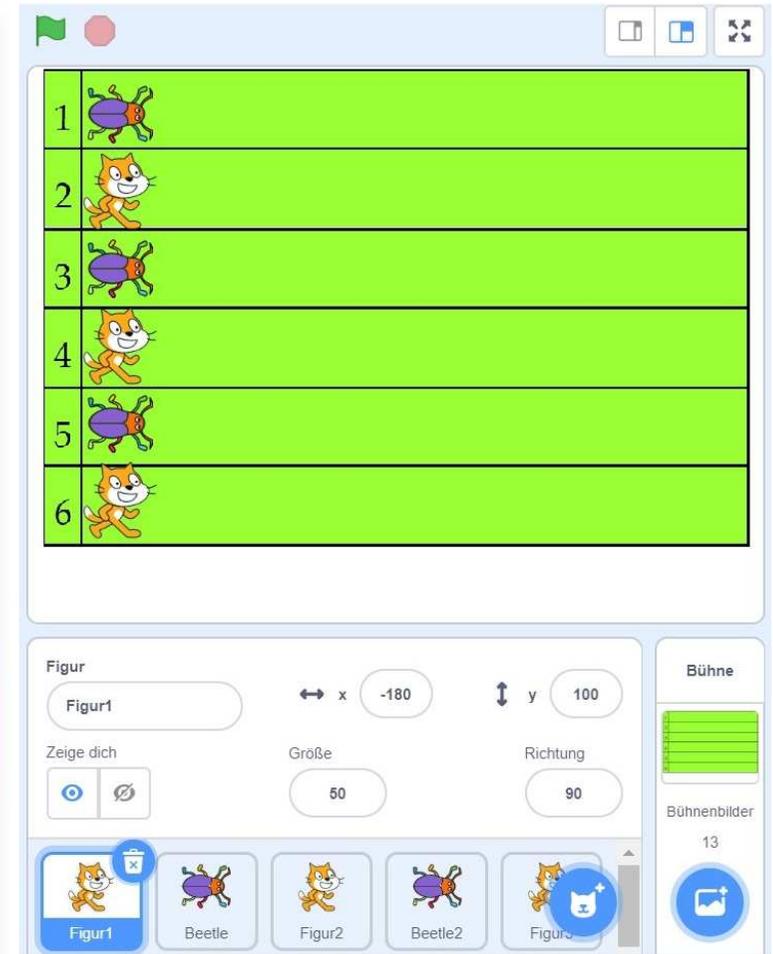
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
										
B										
C										
D										
E										
F										
G										
H										
I										
J										
K										
L										
M										

Papierchromatographie

Datenflussdiagramm als Spielanleitung



Spielanleitung \Rightarrow Algorithmus mit Scratch (Unterstufe)



01:07:08

Steuerung anfordern



Verlassen

Scratch 3.19.2

Scratch-Projekt

Skripte Kostüme Klänge

Verstecke Apfel, Banane

Bewegung: Zeichen 1 von Apfel, Länge von Apfel, Apfel enthält a?

Aussehen: mod, gerändert

Klang: mod, gerändert

Ereignisse: Beitrag von

Steuerung: Beitrag von

Fühlen: Beitrag von

Operatoren: Variablen

Neue Variable, meine Variable

setze meine Variable auf 0, ändere meine Variable um 1, zeige Variable meine Variable, verstecke Variable meine Variable

Meine Blöcke: Neuer Block

Wenn angeklickt wird

gehe zu x: -100 y: 100

warte 2 Sekunden

Wiederhole fortlaufend

ändere x um Zufallszahl von 1 bis 3

falls wird Farbe berührt? dann

sage Ich habe keinen Moment an mir gezeitelt für 2 Sekunden

stoppe alles

Figur: Crab, Größe 35, Richtung 180

Bühne: Bühnenbilder 3

Teilnehmer

Namen eingeben

Referenten (5)

Alle stummschalten

- Erik [redacted]
- TK Thomas Kraska Organisor
- David [redacted]
- Esteban [redacted]
- Gregor [redacted]

Teilnehmer (12)

- Timo [redacted]
- Ben [redacted]
- Fabian [redacted]

Erik [redacted]

Zur Suche Text hier eingeben

Windows taskbar icons: File Explorer, Edge, Word, etc.

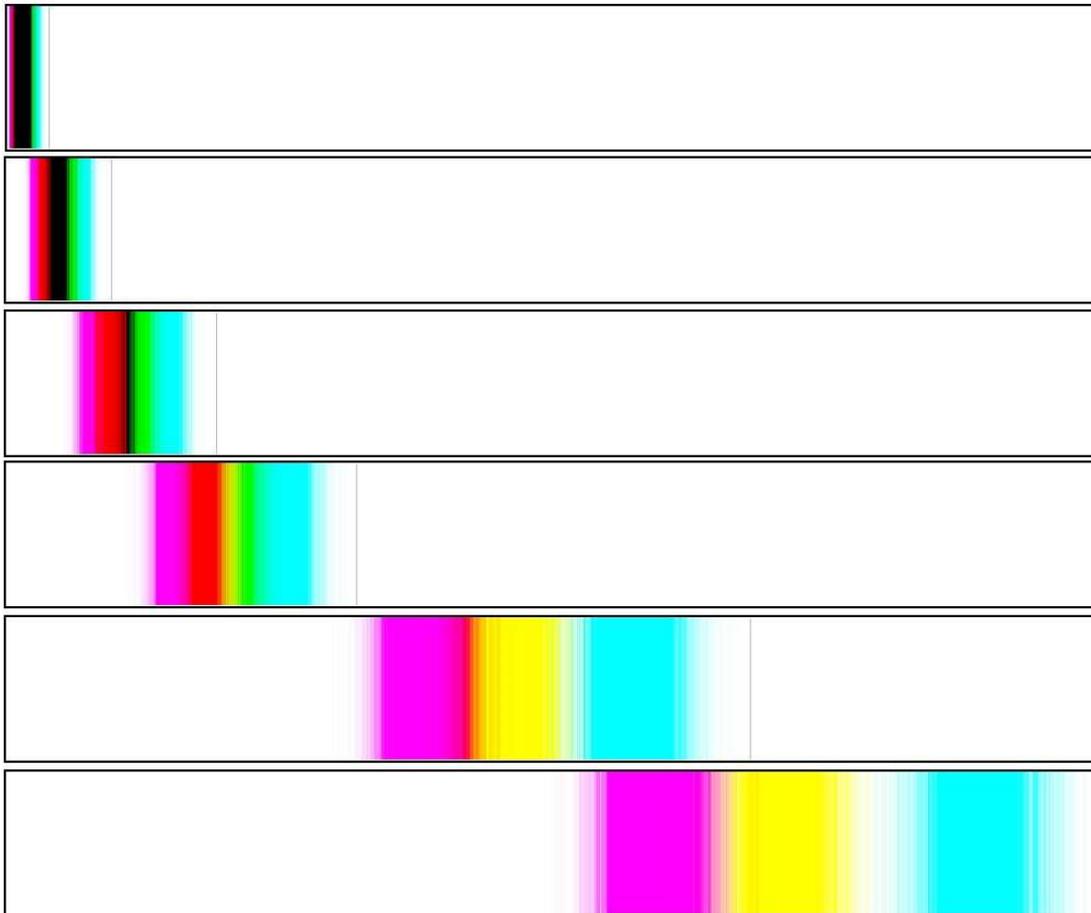
System tray: 06:52, 23.02.2021, DEU, 08:52

Video thumbnails for participants: Timo, Gregor, Erik, and another participant.

Animation sehr viele Teilchen

Papierchromatographie einer schwarzen Filzstiftfarbe

Haftung: **C=6** **B=5** **A=4**
Molenbruch: $x_C=0.4$ $x_B=0.3$ $x_A=0.3$



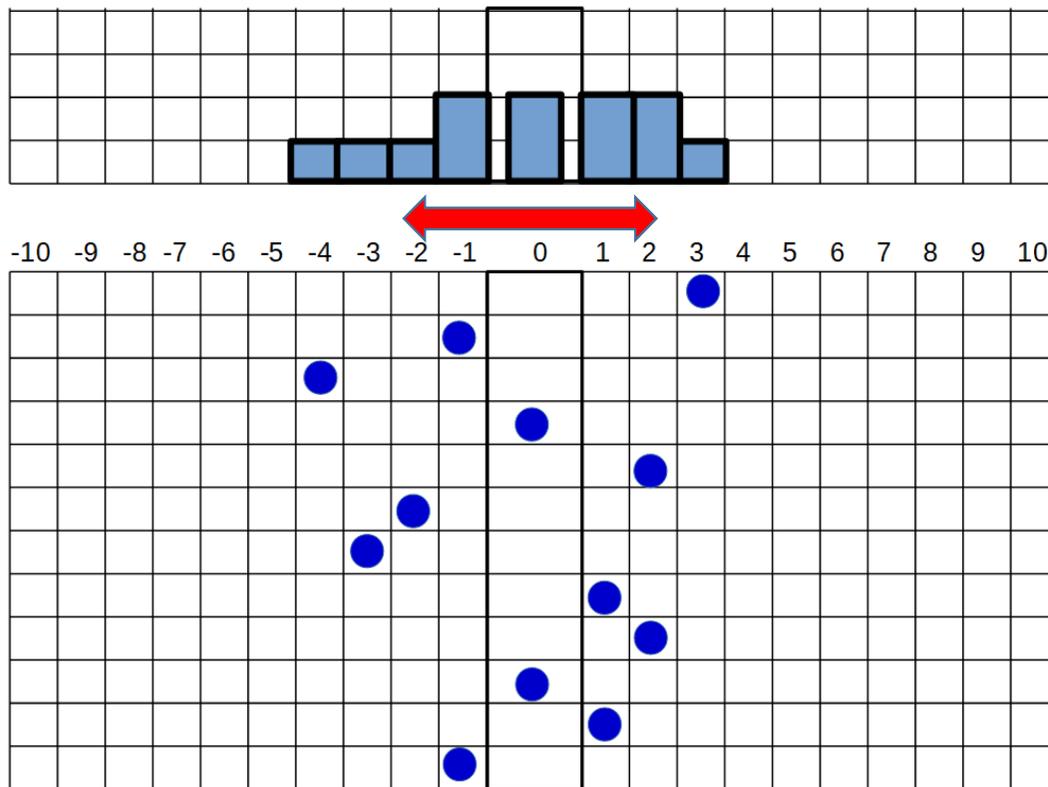
Übersicht

- Einleitung
- Reaktionsgeschwindigkeit
 - Gärung
 - Entleerungsversuch
 - Stochastische Simulation
- Chromatographie
 - Papierchromatographie
 - Gaschromatographie
- Zusammenfassung



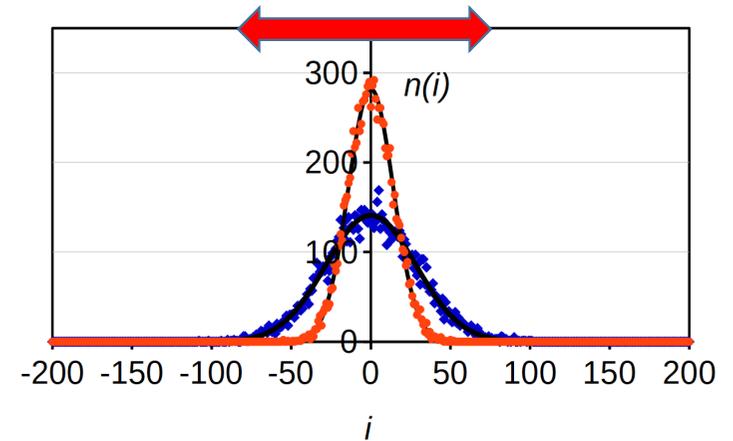
Spielanleitung \Rightarrow Binomialverteilung

Spiel

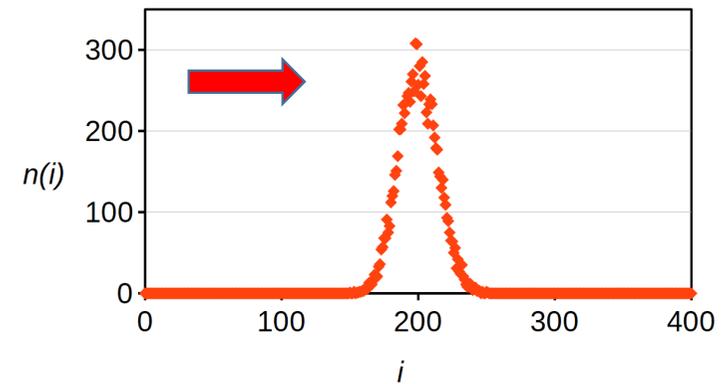


NeDiChe 9.5.2022

Diffusion, beidseitig



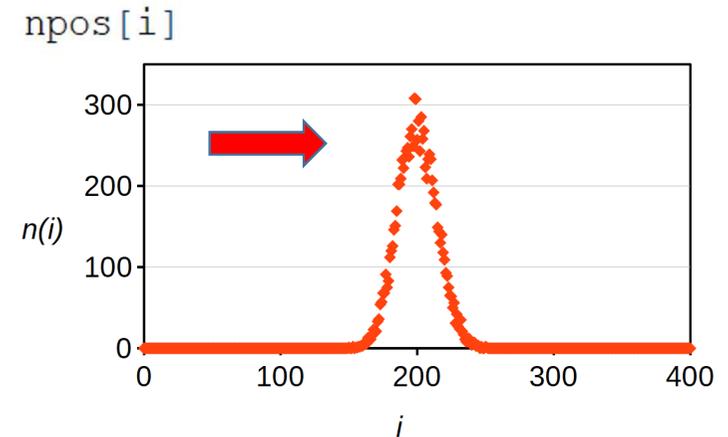
nur in positiver Richtung



T. Kraska, Uni Köln & FCG Düsseldorf

Spielanleitung \Rightarrow Code

Taylor Dispersion, ohne Wechselwirkung



```
11 repeat Nrun:
12     i = randint(1,NA)
13     xpos[i] = xpos[i] + 1
14     xp = xpos[i]
15     npos[xp-1] = npos[xp-1] - 1
16     npos[xp] = npos[xp] + 1
```

Zahl der Schritte

Zahl der Teilchen

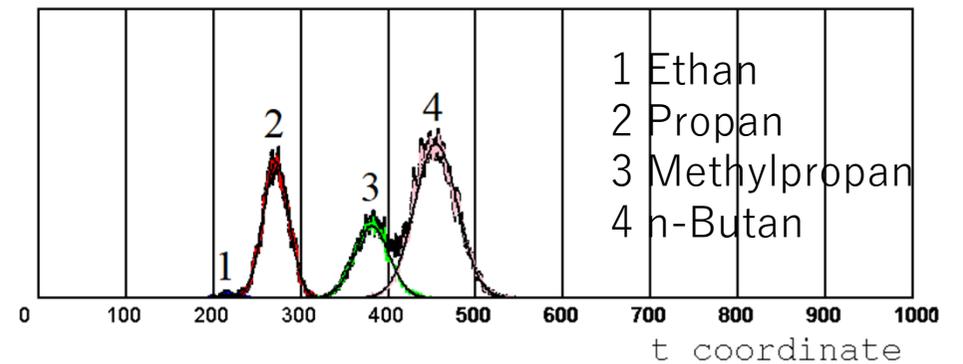
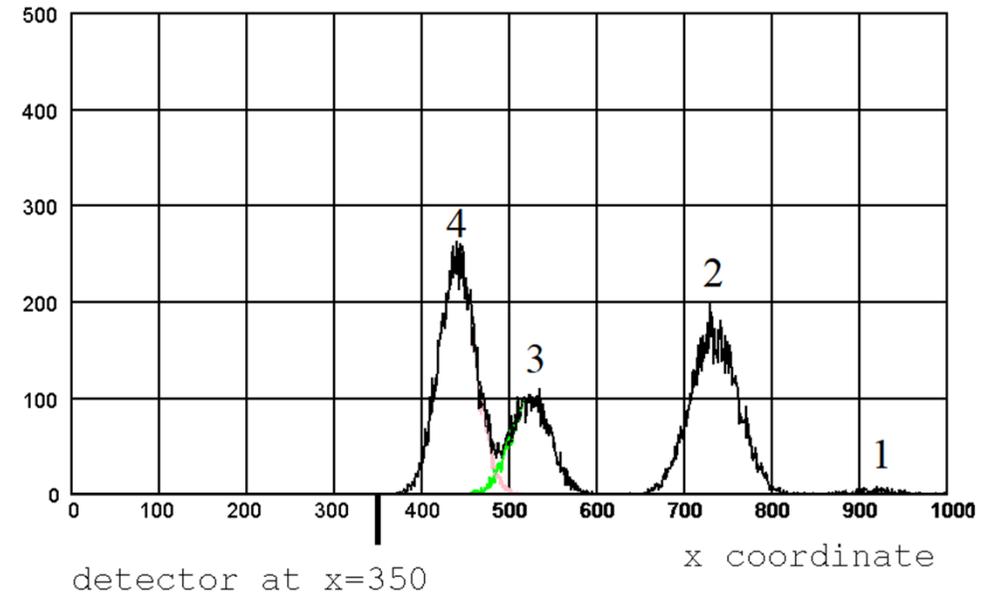
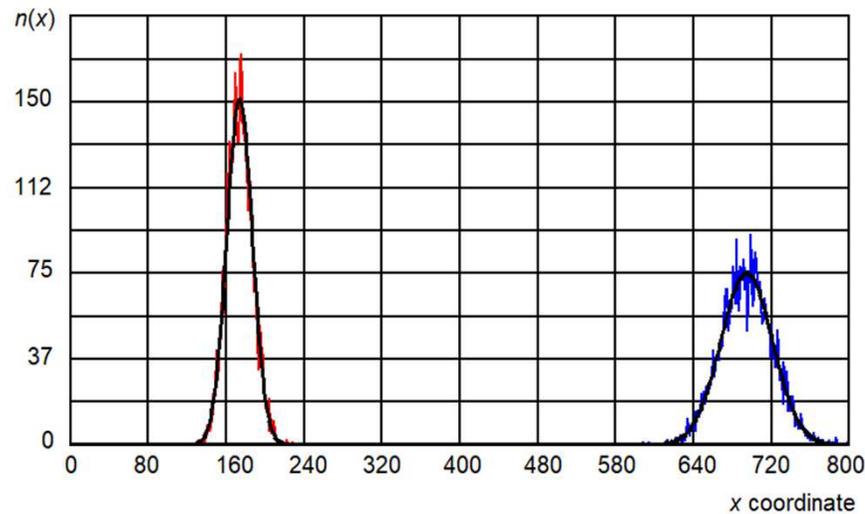
um 1 nach rechts verschieben

Buchhaltung

Gaschromatographie mit Wechselwirkung

nur jeder n -te Treffer wird verschoben

$$n \sim t_R$$



Übersicht

- Einleitung
- Reaktionsgeschwindigkeit
 - Gärung
 - Entleerungsversuch
 - Stochastische Simulation
- Chromatographie
 - Papierchromatographie
 - Gaschromatographie
- Zusammenfassung



Zusammenfassung

- Vertiefung einzelner fachlicher Themen durch Simulationsmethoden
- Immer im Zusammenhang mit Schüler:innenexperimenten
- Submikroskopisch \Rightarrow makroskopisch / Teilchenmodell
- Methoden der submikroskopische Simulation kennen lernen
- Darstellung der Breite des Fachs Chemie

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit