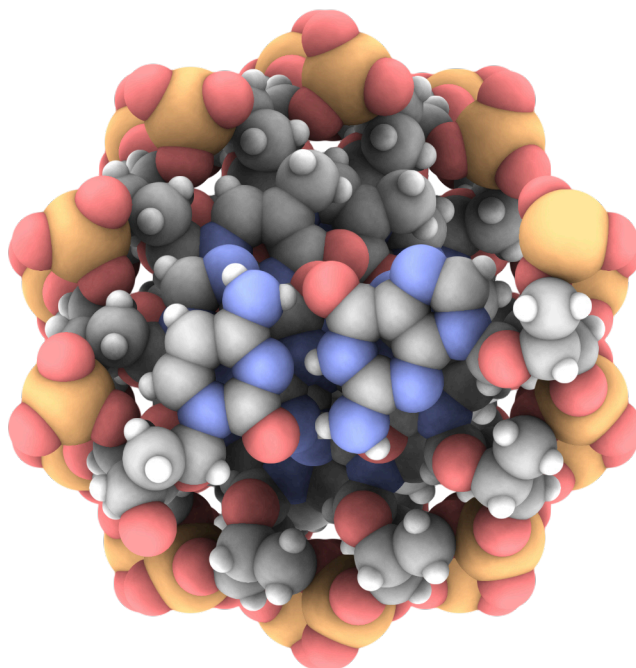


Simulationen im Chemieunterricht



Inhaltsverzeichnis

1. Grundsätzliche Überlegungen	1
1.1 Einbettung von Simulationen in den Chemieunterricht	1
1.2 Tipps für die Erstellung von Arbeitsblättern.....	2
2. Die Simulationsplattform PhET	2
2.1 Beispiel für eine Unterrichtssequenz mit Arbeitsblatt	3
2.2 Gedanken zur Unterrichtssequenz «Molekülgeometrie».....	8
2.3 Ein eigenes Arbeitsblatt erstellen	8
2.4 Ideen für Arbeitsblätter.....	9
3. Simulationen von «Chemie interaktiv»	10
3.1 Beispiel: Streuversuch von Rutherford.....	10
4. Blitzlichter	13
4.1 Schüler/innen erstellen eigene Simulationen mit Powerpoint.....	13
4.2 Eigene Webseiten mit JSmol	14
4.3 ChatGPT als Hilfsmittel zur Erstellung eigener Simulationen.....	15
4.4 Visualisierung von Molekülen mit MolView	16
4.5 Simulation von IR-Spektren und den Schwingungen im Molekül.....	17

1. Grundsätzliche Überlegungen

Wir leben in einem Zeitalter, in dem die Digitalisierung in nahezu allen Lebensbereichen präsent ist und unsere Art zu denken, zu lernen und zu arbeiten tiefgreifend verändert. Der Einsatz von Computer-Simulationen im Chemieunterricht stellt ein wichtiges Werkzeug im Methoden-Repertoire der Chemielehrpersonen dar, das sowohl die Motivation als auch das Verständnis der Schülerinnen und Schüler für komplexe chemische Prozesse und Phänomene wesentlich steigern kann.

Zunächst bieten Simulationen den Vorteil, dass sich Strukturen und Vorgänge auf den persönlichen Geräten der Lernenden jederzeit ohne grossen Aufwand visualisieren lassen. Zudem erlauben Simulationen das spielerische Erkunden der Materie. Dabei ermöglichen das Anhalten, Wiederholen oder Verlangsamten von Prozessen eine tiefere Analyse und Reflektion.

Durch die flächendeckende Einführung von BYOD (Bring Your Own Device) auf der Sekundarstufe II in vielen Kantonen haben die Schülerinnen und Schüler ständigen Zugriff auf ein digitales Gerät. Dies liefert die optimale Grundlage, dass diese Werkzeuge nahtlos in den Unterricht integriert werden können und somit die Lernerfahrung im Chemieunterricht zu bereichern vermögen. Ausserdem sind mittlerweile sehr viele Simulationen als Web-Apps (HTML5) frei verfügbar und lassen sich auf den unterschiedlichsten digitalen Geräten ausführen. Simulationen stellen damit eine leicht zugängliche und wertvolle Ergänzung – *aber kein Ersatz!* – zu Experimenten und Modellen dar.

1.1 Einbettung von Simulationen in den Chemieunterricht

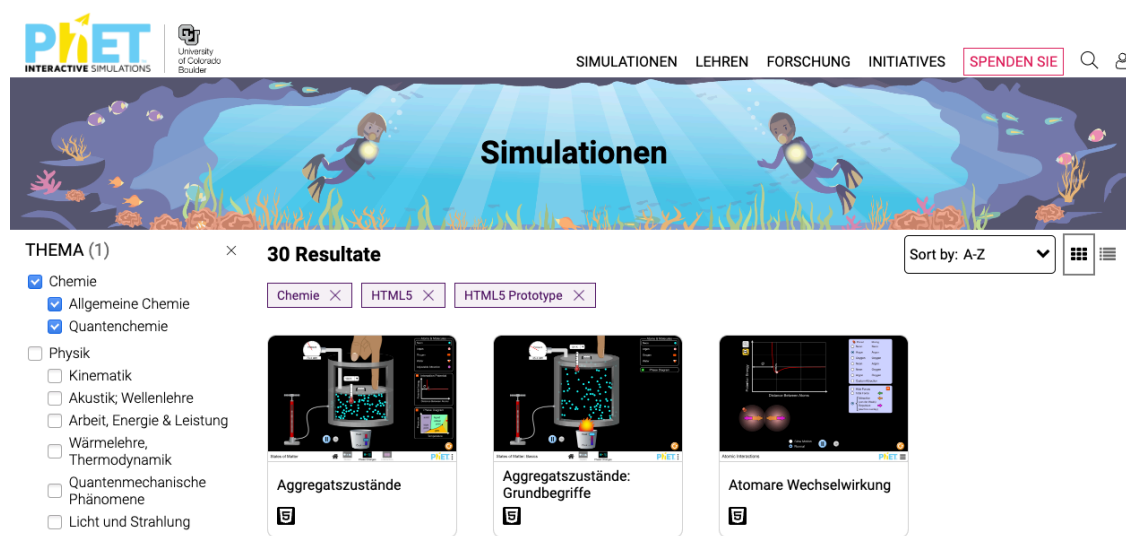
Der Einsatz von Simulationen im Chemieunterricht macht diesen nicht per se gut! Die Integration von Simulationen in den Chemieunterricht kann jedoch ein sehr wertvolles Werkzeug sein, um den Unterrichtsstoff lebendig und verständlich zu vermitteln. Um eine optimale Lernerfahrung zu gewährleisten, bedarf es einer gezielten Strukturierung und Anleitung im Umgang mit Simulationen. Hier kommen Arbeitsblätter ins Spiel. Diese bieten eine Vielzahl von Vorteilen, die das Lernerlebnis der Schülerinnen und Schüler (SuS) massgeblich verbessern:

- 1. Zielorientiertes Arbeiten:** Arbeitsblätter bieten klare Aufgabenstellungen, die sicherstellen, dass die SuS sich gezielt mit den Inhalten auseinandersetzen und die Simulationen sinnvoll nutzen.
- 2. Dokumentation von Erkenntnissen:** Durch das Ausfüllen von Arbeitsblättern werden die Erkenntnisse und Resultate aus den Simulationen festgehalten. Dies erleichtert die Wissenssicherung und ermöglicht eine spätere Überprüfung oder Diskussion.
- 3. Der Lernprozess wird sichtbar:** Arbeitsblätter bieten eine klare Struktur, die es erlaubt, den Lernfortschritt der SuS systematisch zu verfolgen und bei Bedarf rechtzeitig individuell zu fördern oder zu unterstützen.
- 4. Vertiefung und Reflexion:** Arbeitsblätter ermöglichen es den SuS, über das in den Simulationen Gesehene nachzudenken, es zu verarbeiten und die wichtigsten Punkte hervorzuheben.
- 5. Aktive Beteiligung:** Statt nur passiv die Simulationen zu verfolgen, nehmen die SuS durch das Ausfüllen von Arbeitsblättern aktiv an ihrem eigenen Lernprozess teil.
- 6. Strukturierte Auseinandersetzung:** Arbeitsblätter sorgen dafür, dass die SuS sich Schritt für Schritt und systematisch mit dem Lernstoff auseinandersetzen, was das Verständnis der Materie vertieft.
- 7. Feedback-Möglichkeit:** Arbeitsblätter bieten eine Plattform für Feedback, sowohl von Lehrpersonen als auch von Mitschülerinnen und Mitschülern, wodurch der Lernprozess weiter verbessert werden kann.

1.2 Tipps für die Erstellung von Arbeitsblättern

- 1. Vorhandene Arbeitsblätter nutzen:** Auf den verschiedenen Plattformen, die Simulationen anbieten, sind häufig Arbeitsblätter hinterlegt. Diese können einfach für den eigenen Unterricht angepasst werden. Das Rad muss nicht stets neu erfunden werden!
- 2. Fokussiertes Arbeiten mit der Simulation:** Stellen Sie von Beginn weg sicher, dass die SuS die Aufgaben auf dem Arbeitsblatt erledigen und nicht nur mit der Simulation «spielen».
- 3. Pflicht & Kür:** Gestalten Sie Ihre Arbeitsblätter so, dass es einen Pflichtteil gibt, der von allen SuS in der vorgegebenen Zeit erfolgreich erledigt werden kann, und damit zu einer positiven Lernerfahrung führt. Halten Sie aber stets auch zusätzliche Aufgaben für diejenigen SuS bereit, die schneller arbeiten, damit auch sie bis zum Ende des Arbeitsauftrages gefordert sind.
- 4. Präzise Fragestellungen:** Die Fragen in den Arbeitsblättern sollten direkt auf das abzielen, was in der Simulation gezeigt wird, und keine zusätzliche Theorie einführen.
- 5. Einsatz von Tabellen:** Tabellarische Aufgaben erleichtern die Übersichtlichkeit und ermöglichen es der Lehrperson, den Lernfortschritt der SuS auf einen Blick zu erfassen.
- 6. Feedback und Reflexion:** Es kann sinnvoll sein, auch Metafragen einzubauen, durch die die SuS ihr Feedback zur Simulation geben und auf eventuelle Schwierigkeiten hinweisen können.

2. Die Simulationsplattform PhET



The screenshot shows the PhET website interface. At the top, there is a navigation bar with links for 'SIMULATIONEN', 'LEHREN', 'FORSCHUNG', 'INITIATIVES', and 'SPENDEN SIE'. Below the navigation bar is a large banner image with the word 'Simulationen' in the center. Underneath the banner, there is a search filter section. On the left, there is a list of subjects: 'Chemie' (checked), 'Physik' (unchecked), and 'Mathematik' (unchecked). Under 'Chemie', there are sub-options: 'Allgemeine Chemie' (checked), 'Quantenchemie' (checked), 'Kinematik', 'Akustik; Wellenlehre', 'Arbeit, Energie & Leistung', 'Wärmelehre, Thermodynamik', 'Quantenmechanische Phänomene', and 'Licht und Strahlung'. On the right, there is a search bar with the text 'THEMA (1) × 30 Resultate' and a 'Sort by: A-Z' dropdown menu. Below the search bar, there are three simulation thumbnails. The first two are titled 'Aggregatzustände' and the third is 'Atomare Wechselwirkung'. Each thumbnail shows a simulation interface with a beaker and a graph.

PhET ist eine Webseite, die von der University of Colorado Boulder entwickelt wurde und eine Sammlung von kostenlosen interaktiven Mathematik- und Naturwissenschaftssimulationen bietet. Die Hauptmerkmale und Vorteile von PhET-Simulationen sind:

- 1. Interaktivität:** Benutzer können mit verschiedenen Elementen der Simulationen experimentieren, um Konzepte besser zu verstehen.
- 2. Visuell ansprechend:** Die Simulationen sind grafisch sehr ansprechend gestaltet, was die SuS fesselt und den Lernprozess motivierend und spannend macht.
- 3. Pädagogisch fundiert:** Die Simulationen wurden entwickelt, um mathematische und naturwissenschaftliche Konzepte auf intuitive und leicht verständliche Weise zu vermitteln.
- 4. Reichhaltige Sammlung von Arbeitsblättern:** PhET bietet zu den Simulationen eine Fülle von begleitenden Arbeitsblättern und Unterrichtsmaterialien, die adaptiert werden können.
- 5. Plattformübergreifend:** Viele der Simulationen sind in HTML5 entwickelt, sodass sie auf verschiedenen Geräten, einschliesslich Tablets und Smartphones, funktionieren.
- 6. Kostenlos:** Alle Simulationen auf der PhET-Webseite sind kostenlos zugänglich und können sowohl online als auch offline genutzt werden.

Vorbereitung

1. Öffnen Sie die [PhET-Webseite zu den Molekülgeometrien](#)
2. Wählen Sie *Modell* aus
3. Setzen Sie zusätzlich ein Häkchen bei *Molekülgeometrie* und *Bindungswinkel anzeigen*

Bedienung der Simulation

Durch Anklicken einer Einfach-, Doppel- oder Dreifachbindung wird diese an das violette Atom angehängt.

Durch Anklicken eines nichtbindenden Elektronenpaars wird dieses an das violette Atom angehängt.

Ein Klick auf x entfernt eine Bindung oder ein Elektronenpaar

3D-Struktur des HCl-Moleküls

Bezeichnung

Elektronengeometrie Molekülgeometrie
linear

Ihre Aufgaben

1. Zeichnen Sie in der nachfolgenden Tabelle die Lewisformeln aller Moleküle, deren Summenformel gegeben ist. Gehen Sie die Tabelle dazu Zeile für Zeile durch.
2. Notieren Sie zu jedem Molekül die Anzahl der Bindungspartner (BP) und die Anzahl der freien Elektronenpaare (EP), die das violett markierte Atom besitzt.
3. Bauen Sie nun die Moleküle im Editor von PhET. Dabei werden Sie feststellen, dass sich die räumliche Geometrie des Moleküls beim Hinzufügen und Entfernen von Bindungen und freien Elektronenpaaren jeweils ändert.
 - a. Notieren Sie zu jedem Molekül den Namen der Molekülgeometrie, der von PhET unter *Bezeichnung* angezeigt wird.
 - b. Erstellen Sie ein Bildschirmfoto von jedem Molekül und fügen Sie es in Ihre Tabelle ein. Drehen Sie vorab das Molekül jeweils so, dass möglichst viele Bindungswinkel gut sichtbar sind.

Summen-Formel	Lewisformel	Anzahl BP	Anzahl freie EP	Molekülgeometrie	Bildschirmfoto
CH_4					
NH_3					
H_2O					
CH_2O					
NOCl					
HCN					
CO_2					

2.2 Gedanken zur Unterrichtssequenz «Molekülgeometrie»

Reflektieren Sie, was an der Unterrichtssequenz «Molekülgeometrie» gut funktioniert hat, wo es Stolpersteine für die Schülerinnen und Schüler geben könnte und was allenfalls noch fehlt. Halten Sie Ihre Gedanken auf [diesem Miro-Board](#) fest.

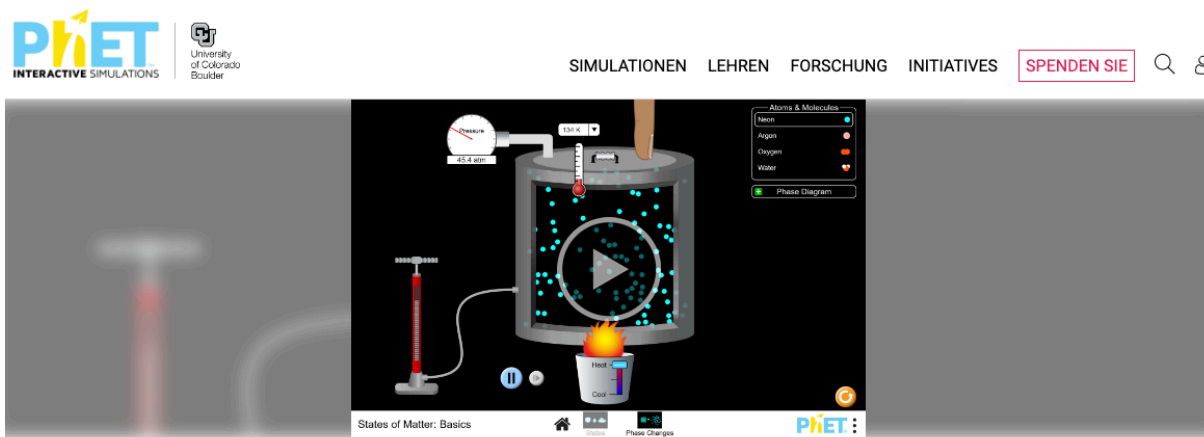
2.3 Ein eigenes Arbeitsblatt erstellen

Öffnen Sie die [PhET-Simulation zu den Aggregatzuständen](#). Befassen Sie sich während 10 Minuten intensiv mit allen Aspekten dieser Simulation. Halten Sie parallel dazu auf [diesem Miro-Board](#) konkrete Fragen fest, die Sie in ein Arbeitsblatt zu dieser Simulation aufnehmen würden. Schlagen Sie dabei aber nur Fragen vor, die sich nicht schon auf dem Miro-Board befinden. Aus diesem Pool an Ideen sollte es Ihnen leicht fallen, Ihr erstes Arbeitsblatt zu einer chemischen Simulation für Ihren Unterricht zu gestalten.

2.4 Ideen für Arbeitsblätter

In der Entwicklung und Planung Ihres Unterrichts kann es sehr hilfreich sein, auf bestehende Ressourcen zurückzugreifen. Auf der Webseite von PhET können Sie sich kostenlos [als Dozent registrieren](#) und erhalten dadurch Zugang zu einer Vielzahl von Arbeitsblättern, die Sie in Ihrem Unterricht nutzen oder als Inspiration für eigene Aufträge verwenden können.

Es ist jedoch zu beachten, dass der Grossteil der Materialien auf PhET in Englisch verfügbar ist. Es gibt bisher nur wenige Beiträge in deutscher Sprache. Dies ist eine ideale Gelegenheit für Sie, im Laufe Ihrer Ausbildung und späteren beruflichen Laufbahn zur Erweiterung dieser Ressourcen beizutragen!



Aggregatzustände: Grundbegriffe



[Über](#) [Didaktik](#) [Beiträge](#) [Übersetzungen](#) [Impressum](#)

von Lehrern eingereichte Aktivitäten


✓ Zeigt an, dass eine Aktivität an unseren anfragebasierten Richtlinien ausgerichtet ist.

Filter

TITLE	INQUIRY	AUTHOR	LEVEL	TYPE	SUBJECT	LANGUAGE
Einführung der Aggregatzustände im Teilchenmodell		A. Bärtsch – ETH	Sekundarstufe I Sekundarstufe II	Geführte Aktivität	Chemie	Deutsch
Concept Questions for Chemistry using PhET	✓	PhET Trish Loeblein	Sekundarstufe I Sekundarstufe II Hochschule - Grundstudium	Multiple-Choice Fragen	Chemie	English
Concept questions for Physics using PhET (Inquiry Based)	✓	PhET Trish Loeblein	Sekundarstufe II Hochschule - Grundstudium	Multiple-Choice Fragen	Physik	English
Intermolecular Forces and Molecules - Interactive Lecture Demonstration	✓	PhET Ted Clark, Julia Chamberlain	Hochschule - Grundstudium	Demonstration	Chemie	English
Intermolecular Forces and States of Matter - Interactive Lecture Demonstration	✓	PhET Ted Clark, Julia Chamberlain	Hochschule - Grundstudium	Demonstration	Chemie	English
States of Matter Basics - Clicker Questions	✓	PhET Robert Parson, Trish Loeblein	Hochschule - Grundstudium	Multiple-Choice Fragen	Chemie	English
Using PhET in High School Chemistry- all my activities in pdf	✓	PhET Trish Loeblein	Sekundarstufe II Hochschule - Grundstudium	Praktikum Hausaufgabe Demonstration	Chemie	English

3. Simulationen von «Chemie interaktiv»

[Chemie interaktiv](#) ist eine Website die unzählige Animationen und Simulationen zum Chemieunterricht enthält. Viele lassen sich direkt im Browser abspielen (HTML5) und visualisieren chemische und physikalische Vorgänge auf der Teilchenebene.




KOOPERATIONSPARTNER BIS 2010
BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL
DIDAKTIK DER CHEMIE

StartseiteOnlineOfflineMol-ViewerBiologieInformationCode-Nr:

Lösungsvorgang von Salz in Wasser - Teilchenmodelle

Auflösung eines NaCl-Kristall-Modells in Wasser



Softwareprodukt: Mit Swiffy konvertierte Flashanimation (2016), ohne Vokabelteil.
Sprachen: 3./4. Flash-Animation (2007) mit ext. Ruffle-Player oder Browser-Addon angezeigt.
[Info ein-/ausblenden?](#)

Start: HTML5

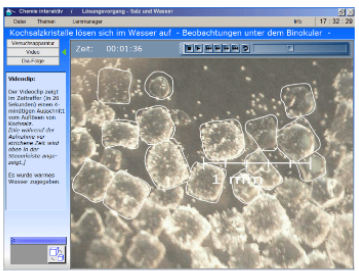
1. **Code-Nr:** a104

Start: Flash

3. **Code-Nr:** e104

4. **Code-Nr:** f104

Auflösung von Kochsalz unter dem Mikroskop



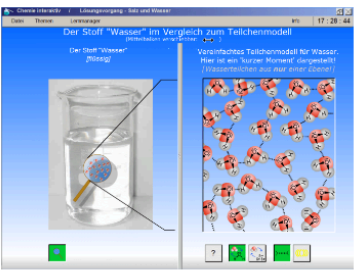
Softwareprodukt: Mit Macromedia- bzw. Adobe - Flash erstellte Animation (2006).
Technisch überarbeitet 2022.
[Info ein-/ausblenden?](#)

Start: Flash

3. **Code-Nr:** e105

4. **Code-Nr:** f105

Wasser im Teilchenmodell, Teilchen halten zusammen



Softwareprodukt: Mit Macromedia- bzw. Adobe - Flash erstellte Animation (2007, technisch überarbeitet 2022).
[Info ein-/ausblenden?](#)

Start: Flash

3. **Code-Nr:** e106

4. **Code-Nr:** f106

3.1 Beispiel: Streuversuch von Rutherford

Die Simulation von Chemie interaktiv eignet sich gut, um mit den Schülerinnen und Schülern das [Experiment von Rutherford](#) vertieft zu diskutieren und das Kern-Hülle-Modell einzuführen. In einem zweiten Schritt können die gewonnenen Erkenntnisse mit der [entsprechenden PhET-Simulation](#) noch vertieft werden.


Vorwissen der Schülerinnen und Schüler

Den Schülerinnen und Schülern ist vor Beginn dieser Unterrichtssequenz bekannt, dass die Atome aus Protonen, Neutronen und Elektronen aufgebaut sind. Sie kennen deren Ladung und Massen. Ausserdem wurde das Coulomb'sche Gesetz bereits eingeführt und die Lernenden wissen, dass sich gleich geladene Teilchen abstossen und ungleich geladene Teilchen anziehen.

Das Experiment von Rutherford

Sir Ernest Rutherford und seine Mitarbeiter Hans Geiger und Ernest Marsden haben zu Beginn des 20. Jahrhunderts eine sehr dünne Goldfolie mit α -Teilchen beschossen. Rutherford und seine Mitarbeiter wollten mit diesem Experiment mehr über den Aufbau der Atome herausfinden und haben dabei eine erstaunliche Entdeckung gemacht.

Ihre Aufgaben

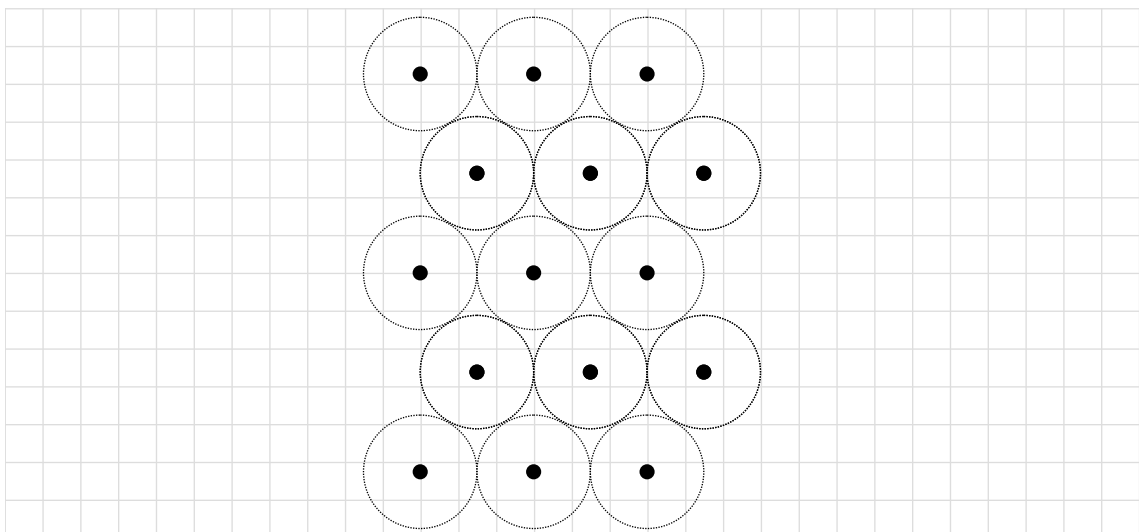
1. Klicken Sie auf den Link um die Simulation zum [Experiment von Rutherford](#) zu starten.
2. Klicken sie in der Simulation links unten auf  um eine Legende für alle abgebildeten Objekte zu erhalten.
3. Wenn Sie mit der Maus über die Schaltflächen fahren, wird Ihnen angezeigt, was ein Klick auf den entsprechenden Knopf bewirkt. Probieren Sie es aus. Die Schaltfläche «interaktiv» wird nicht benötigt.
4. Fertigen Sie eine Skizze der Versuchsanordnung an und beschriften Sie diese vollständig. Zeichnen Sie auch die Flugbahnen mehrerer α -Teilchen ein. Diese werden von radioaktivem Radium abgegeben und bestehen aus 2 Protonen (rot) und 2 Neutronen (weiss).



5. Klicken Sie in der Simulation auf «2. Erklärung am Atommodell» und dann auf L und K



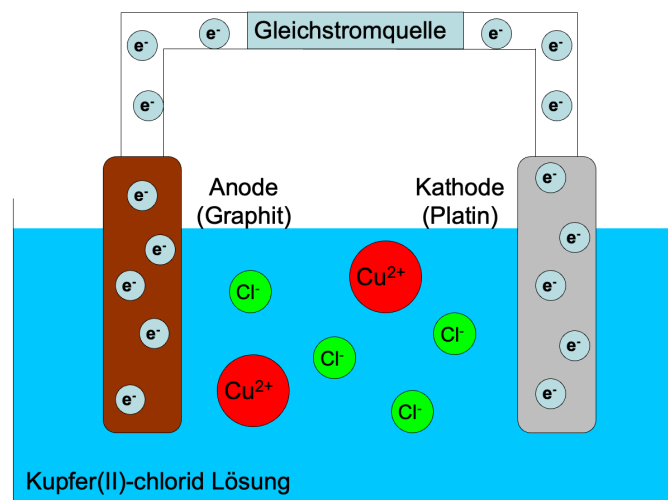
6. Skizzieren Sie die Flugbahn der α -Teilchen durch die Goldfolie



4. Blitzlichter

4.1 Schüler/innen erstellen eigene Simulationen mit Powerpoint

Alle Schülerinnen und Schüler besitzen im Rahmen Ihrer M365-EDU-Lizenz Microsoft Powerpoint. Damit lassen sich sehr einfach Simulationen erstellen, die automatisiert ablaufen können. Ein besonders geeignetes Beispiel dafür ist die Elektrolyse von Salzlösungen. Die Schülerinnen und Schüler erstellen mit Hilfe von PowerPoint eine Simulation, mit der die Vorgänge bei der Stromleitung von Salzlösungen (Elektrolyse) auf der Teilchenebene möglichst detailliert dargestellt werden. Insbesondere sollen die Elektronenübertragung und die Stoffumwandlungen deutlich visualisiert werden.



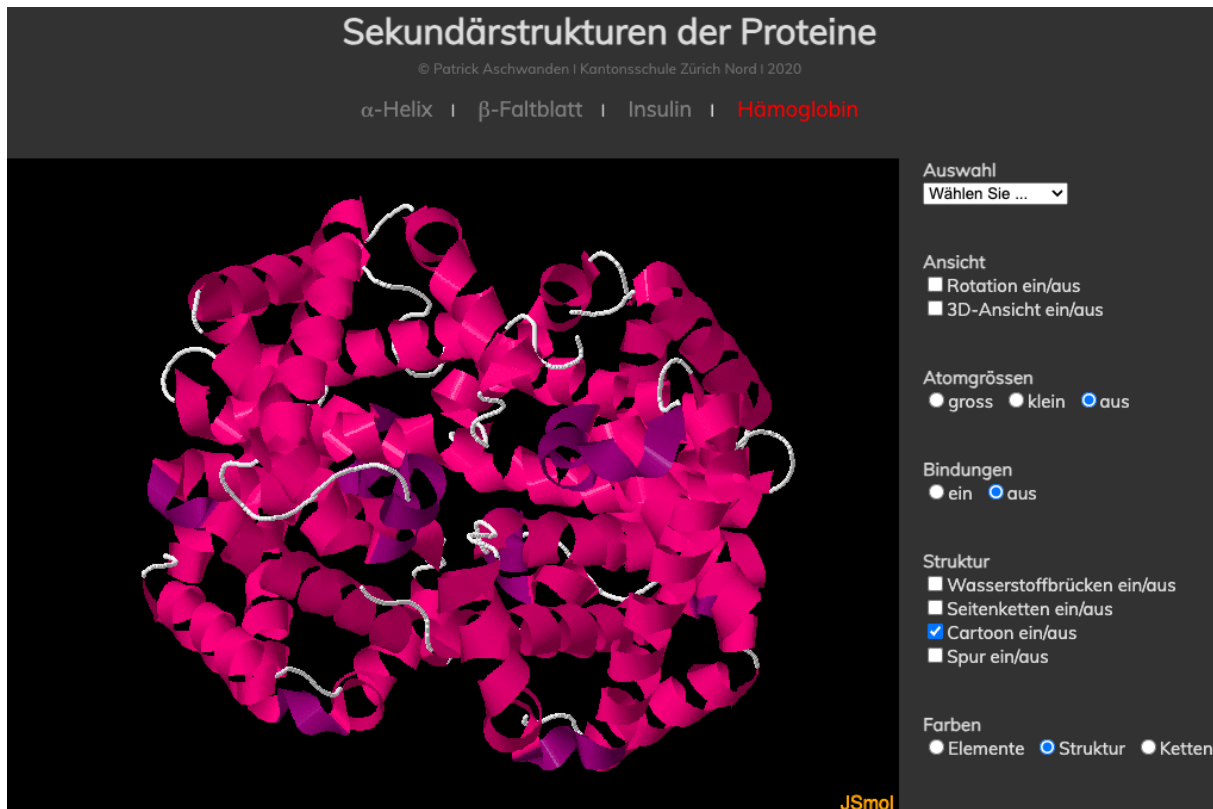
Als Einstieg können solche Simulationen gemeinsam betrachtet und diskutiert werden. So sind die Schülerinnen und Schüler sensibilisiert, welche Punkte besonders beachtet werden müssen. Besonderes Gewicht soll auf die Übertragung der Elektronen und die Umwandlung der Ionen in ungeladene Teilchen gelegt werden.

Die Realisierung einer solchen Simulation motiviert die Schülerinnen und Schüler, die Vorgänge auf atomarer Ebene intensiv zu reflektieren. Als Abschluss können die Präsentationen vorgeführt und im Plenum diskutiert werden.

Die Schülerinnen und Schüler lernen eine bisher unbekanntes Möglichkeit von Powerpoint kennen, sie stoßen aber auch an die Grenzen dieses Programms und werden dadurch motiviert, auch andere Simulations-/Animations-Programme auszuprobieren.

4.2 Eigene Webseiten mit JSmol

JSmol ist ein Open-Source-HTML5-Tool zur Visualisierung von Molekülen und Proteinen. JSmol benötigt kein Java und ist daher unabhängig von den typischen Sicherheitsproblemen und Plattformbeschränkungen, die bei Java-Applets auftreten können. Es bietet sowohl eine einfache Einbindung in Websites als auch eine grosse Palette von Funktionen und ist somit ideal für Visualisierungen und Simulationen im Chemieunterricht.



Nützliche Links:

JSmol Homepage

Hier finden Sie allgemeine Informationen, Downloads und Dokumentationen zu JSmol.
<https://wiki.jmol.org/index.php/JSmol>

Die Dokumentation und Beispiele zur Integration von JSmol in HTML

Diese Seiten bieten detaillierte Anleitungen und Beispiele zur Integration von JSmol.
<https://chemapps.stolaf.edu/jmol/docs/>

Molekularium

Dieses interaktive Portal bietet vielfältige Visualisierungen von Molekülen mit JSmol.
<https://www.molekularium.ch/>

4.3 ChatGPT als Hilfsmittel zur Erstellung eigener Simulationen

Selbst wenn nur rudimentäre HTML, CSS und Javascript-Kenntnisse vorhanden sind, lassen sich mit Hilfe von [Chat-GPT](#) Simulationen erstellen, die im Browser ausgeführt werden können.

P Erzeuge ein HTML/Javascript-Code (alles in einer Datei) mit einer Titrationskurve für die Titration einer schwachen Säure mit Natronlauge als Titrans. Verwende die Bibliotheken Plotly und Bootstrap. Folgende Parameter sollen mit Schiebereglern angepasst werden können:

- vBz = Volumen des Titrans zugegeben
- vHA0 = Volumen der Säure zu Beginn
- cHA0 = Konzentration der Säure zu Beginn
- cB0 = Konzentration der Säure zu Beginn
- pKs = pKs der Säure

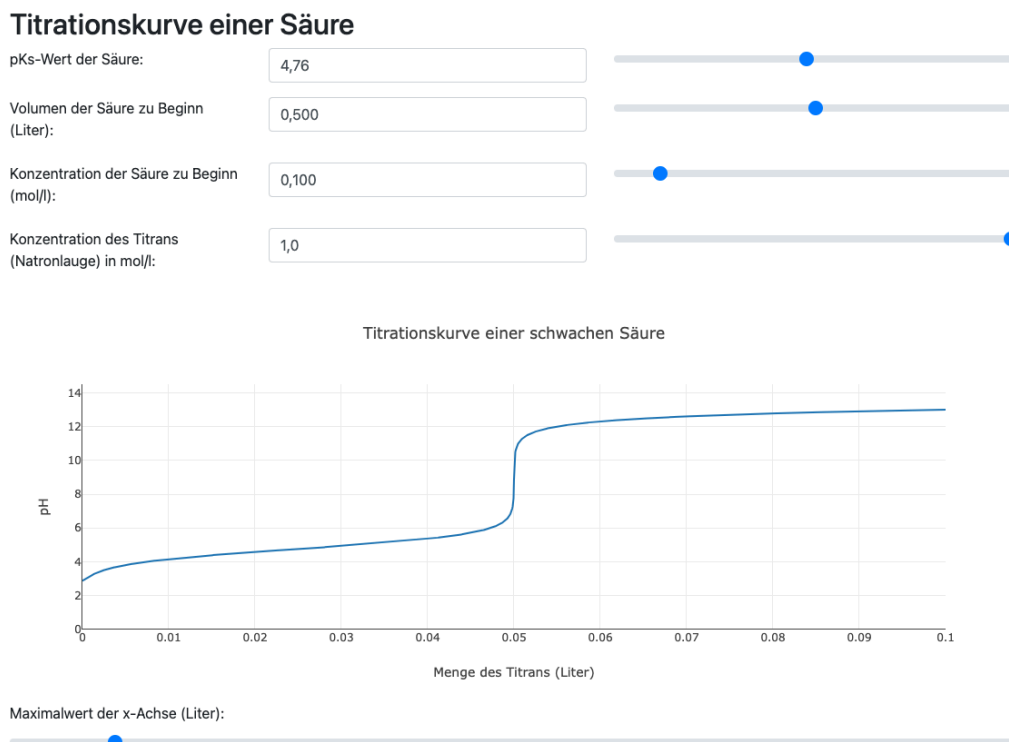
Es gilt folgender mathematischer Zusammenhang:
$$vBz = vHA0 * (cHA0 / (10^{(pKs-pH)+1} + 10^{(pH-14)} - 10^{-(pH)})) / (cB0 - 10^{(pH-14)} + 10^{-(pH)})$$

Aus dieser Formel muss der pH-Wert mit einem geeigneten Näherungsverfahren (Bisektionsverfahren) errechnet werden. Gib im HTML den vollständigen Javascript-Code dazu an.

Hier ist ein einfacher HTML-Code, der Ihre Anforderungen erfüllt:

```
html
<!DOCTYPE html>
<html lang="de">
<head>
  <meta charset="UTF-8">
  <title>Titrationskurve</title>
  <link href="https://maxcdn.bootstrapcdn.com/bootstrap/4.5.2/css/bootstrap.min.css">
  <script src="https://cdn.plot.ly/plotly-latest.min.js"></script>
</head>
```

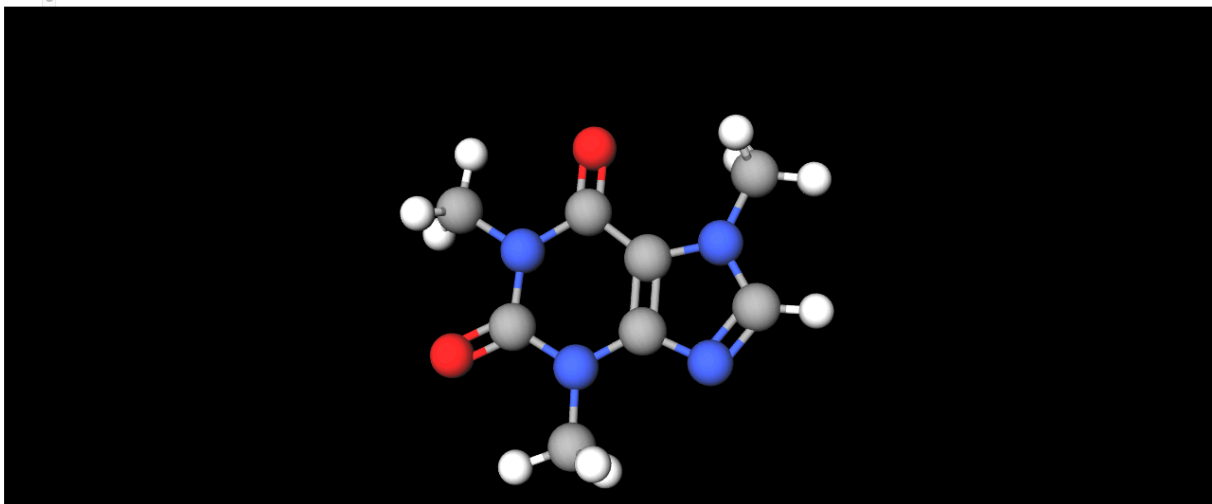
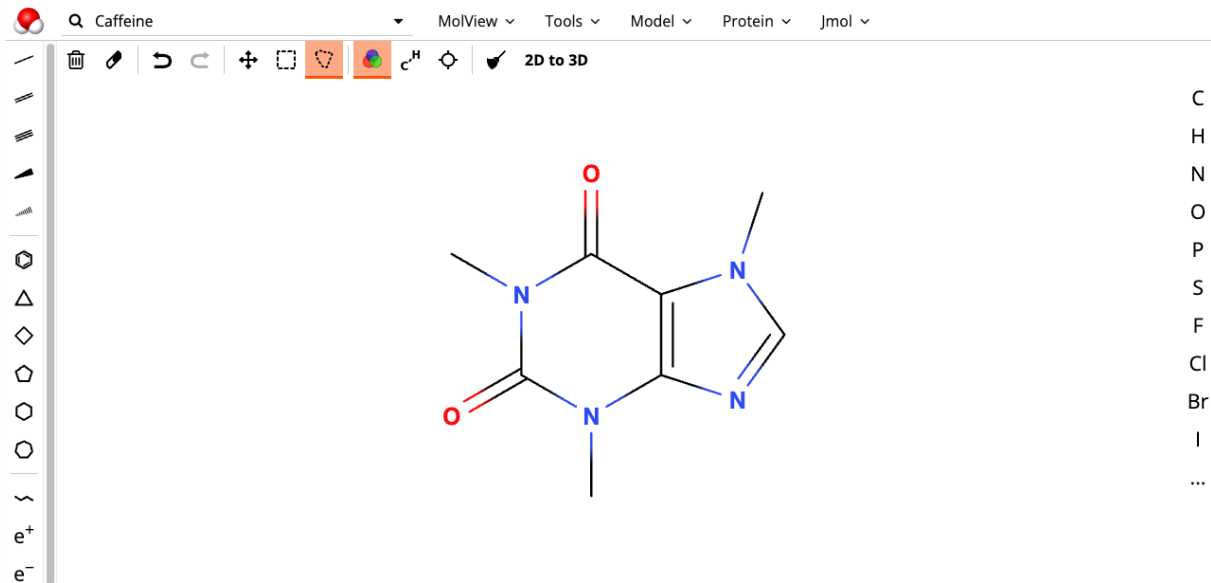
Nach einigen Verbesserungs- und Ergänzungsvorschlägen resultierte folgende Simulation:



4.4 Visualisierung von Molekülen mit MolView

[MolView](#) ist ein digitales Tool zur Darstellung und Analyse von Molekül- und Kristallstrukturen. Das Hauptmerkmal von MolView ist die Möglichkeit, Moleküle in einem dreidimensionalen Format zu visualisieren. Diese 3D-Darstellung ermöglicht ein besseres Verständnis der räumlichen Anordnung von Atomen in einem Molekül.

Zusätzlich zur Visualisierung bietet MolView Funktionen zur Modifikation und Erstellung eigener Molekülstrukturen. Eine integrierte Datenbank ermöglicht zudem den Zugriff auf eine Vielzahl bekannter Molekülstrukturen. Durch verschiedene Darstellungsoptionen können Bindungslängen, Bindungswinkel und andere chemische Informationen, wie beispielsweise IR- und Massenspektren, untersucht werden.



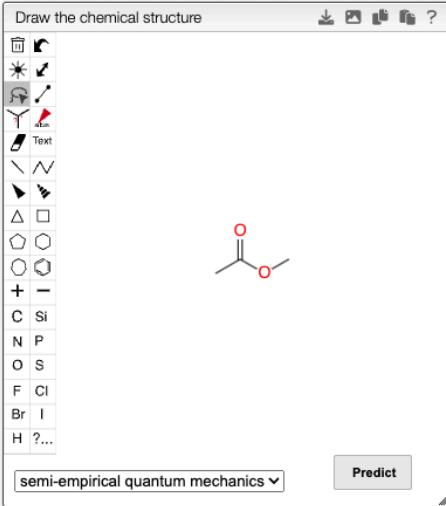
4.5 Simulation von IR-Spektren und den Schwingungen im Molekül

Die Webseite <https://ir.cheminfo.org/> ist ein Online-Tool zur Analyse von Infrarot-Spektren. Nutzer können eigene IR-Spektren hochladen oder auf eine Datenbank mit vorhandenen Spektren zurückgreifen. Innerhalb der Plattform können die verschiedenen Absorptionsbanden im Spektrum identifiziert und die damit korrespondierenden Schwingungen innerhalb der Moleküle visualisiert werden. Darüber hinaus bietet die Webseite Ressourcen, um die Grundlagen und Techniken der IR-Spektroskopie zu verstehen.

[Click to access the documentation.](#)

Rerun tour Infrared Raman Infrared + Raman

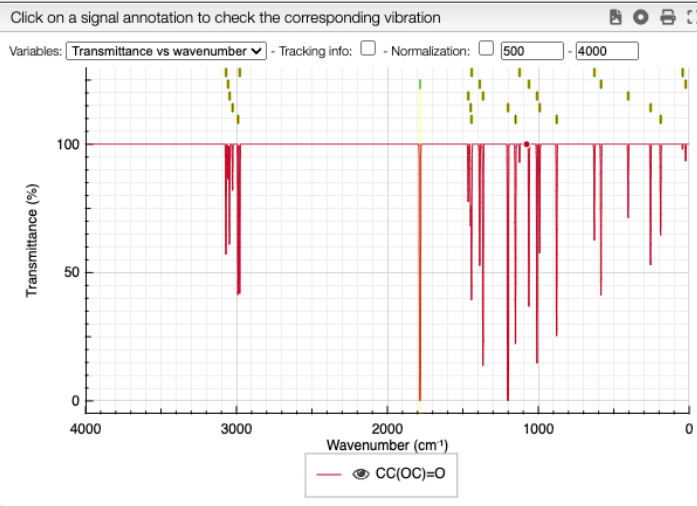
Draw the chemical structure



semi-empirical quantum mechanics Predict

Click on a signal annotation to check the corresponding vibration

Variables: Transmittance vs wavenumber - Tracking info: - Normalization: 500 - 4000




Transmittance (%)

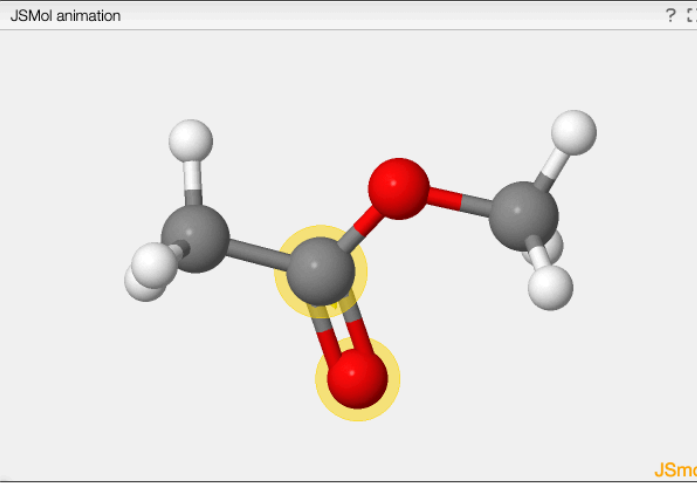
Wavenumber (cm⁻¹)

CC(OC)=O

Click row to load modes, smiley to load collections

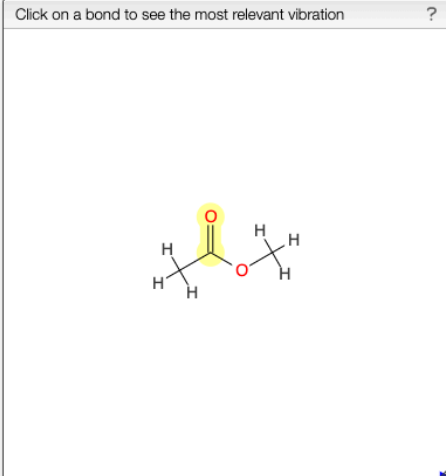
Structure	Method	Color
	GFN2xTB	

JSMol animation



JSmol

Click on a bond to see the most relevant vibration



List of modes (click on a row to load the corresponding animation)

ID	Intensity	Wavenumber (cm ⁻¹)
29	0.086	3025.5
28	0.383	2989.6
27	0.380	2977.8
26	10.562	1783.3
25	0.111	1464.0
24	0.165	1448.0
23	0.295	1442.5
22	0.130	1441.4
21	0.280	1387.8
20	0.870	1365.8
19	8.878	1200.6
18	0.654	1150.7
17	0.032	1124.1

Anhang

Musterlösungen

2.1 Beispiel für eine Unterrichtssequenz mit Arbeitsblatt

Räumliche Anordnung der Atome in Molekülen

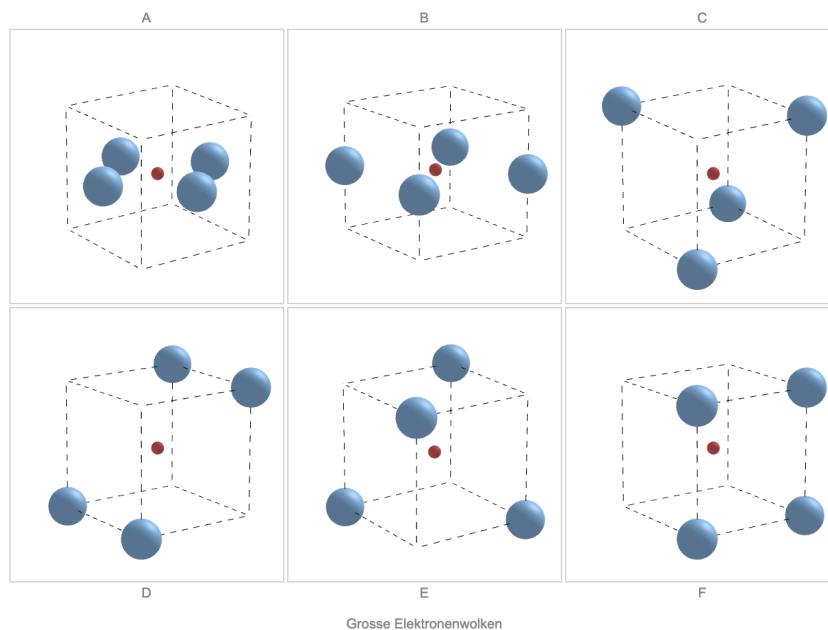
In den vergangenen Lektionen haben Sie gelernt, Moleküle mit Hilfe von Lewisformeln zu zeichnen. Es handelt sich dabei um eine Darstellungsform, mit der sich Moleküle sehr einfach und schnell zweidimensional darstellen lassen. Es stellt sich jedoch die Frage, wie sich die Atome und die Bindungen im dreidimensionalen Raum anordnen. Die folgende Übung hilft Ihnen dabei, dies selbst herauszufinden!

Anordnung der Elektronenwolken im Atomen

Im bisherigen Chemie-Unterricht haben wir ausschliesslich Atome betrachtet, deren Atomkerne von maximal vier Elektronenwolken umgeben sind. Überlegen Sie sich, wie sich diese vier Elektronenwolken im dreidimensionalen Raum optimal um den Atomkern anordnen.

Bei Ihren Überlegungen hilft Ihnen die Visualisierung unter [diesem Link](#). Sie zeigt sechs verschiedene Vorschläge für die Anordnung der vier negativ geladenen Elektronenwolken (blau) um den Atomkern (rot). Die Elektronenwolken sind bewusst klein dargestellt, damit die räumliche Anordnung besser ersichtlich ist. Unterhalb der Visualisierungen haben Sie jedoch jederzeit die Möglichkeit, die Elektronenwolken mit einem Klick auf *Grosse Elektronenwolken* zu vergrössern.

Überprüfen Sie Ihren Vorschlag mit [diesem Forms-Quiz](#). Wählen Sie dazu Ihre präferierten Anordnungen aus, drücken Sie auf *Absenden* und dann auf *Ergebnis anzeigen*. Sie erhalten direkt ein Feedback zu Ihrer Antwort und, sollte noch nicht alles vollständig korrekt sein, auch einen Tipp. Sie können beliebig oft am Quiz teilnehmen. Laden Sie dazu den Browser einfach neu.



Begründen Sie Ihre Antwort stichwortartig:

Die Elektronenwolken sind negativ geladen und stossen sich gegenseitig ab. Bei den Anordnungen C und E (tetraedrische Anordnung) sind die Abstände am grössten.

Vorbereitung

1. Öffnen Sie die [PhET-Webseite zu den Molekülgeometrien](#)
2. Wählen Sie *Modell* aus
3. Setzen Sie zusätzlich ein Häkchen bei *Molekülgeometrie* und *Bindungswinkel anzeigen*

Bedienung der Simulation

Durch Anklicken einer Einfach-, Doppel- oder Dreifachbindung wird diese an das violette Atom angehängt.

Durch Anklicken eines nichtbindenden Elektronenpaares wird dieses an das violette Atom angehängt.

Ein Klick auf x entfernt eine Bindung oder ein Elektronenpaar

3D-Struktur des HCl-Moleküls

Alle entfernen

Optionen

- Nichtbindende Elektronenpaare anzeigen
- Bindungswinkel anzeigen

Bezeichnung

- Elektronengeometrie
- Molekülgeometrie linear

Ihre Aufgaben

1. Zeichnen Sie in der nachfolgenden Tabelle die Lewisformeln aller Moleküle, deren Summenformel gegeben ist. Gehen Sie die Tabelle dazu Zeile für Zeile durch.
2. Notieren Sie zu jedem Molekül die Anzahl der Bindungspartner (BP) und die Anzahl der freien Elektronenpaare (EP), die das violett markierte Atom besitzt.
3. Bauen Sie nun die Moleküle im Editor von PhET. Dabei werden Sie feststellen, dass sich die räumliche Geometrie des Moleküls beim Hinzufügen und Entfernen von Bindungen und freien Elektronenpaaren jeweils ändert.
 - a. Notieren Sie zu jedem Molekül den Namen der Molekülgeometrie, der von PhET unter *Bezeichnung* angezeigt wird.
 - b. Erstellen Sie ein Bildschirmfoto von jedem Molekül und fügen Sie es in Ihre Tabelle ein. Drehen Sie vorab das Molekül jeweils so, dass möglichst viele Bindungswinkel gut sichtbar sind.

Summen-Formel	Lewisformel	Anzahl BP	Anzahl freie EP	Molekülgeometrie	Bildschirmfoto
CH_4		4	0	tetraedrisch	
NH_3		3	1	trigonal-pyramidal	
H_2O		2	2	gewinkelt	
CH_2O		3	0	trigonal-planar	
NOCl		2	1	gewinkelt	
HCN		2	0	linear	
CO_2		2	0	linear	

4. Zeichnen Sie nun die folgenden Moleküle mit Hilfe der Lewisformel und bestimmen Sie sämtliche in den Strukturen vorkommenden Geometrien. Wenn mit der Übung fertig sind, vergleichen Sie Ihre Resultate mit der Banknachbarin/dem Banknachbarn.

Summenformel	Lewisformel	Molekülgeometrie
CH ₄ O		C: tetraedrisch O: gewinkelt
C ₂ H ₄		C: trigonal planar
C ₂ H ₆ O		C: tetraedrisch O: gewinkelt
C ₃ H ₄		C: linear C: tetraedrisch C: trigonal planar
CH ₃ N		C: trigonal planar N: gewinkelt
C ₂ H ₇ N		C: tetraedrisch N: trigonal pyramidal

5. Wählen Sie in der PhET-Anwendung unten in der Mitte *reale Moleküle* aus. Vergleichen Sie die Bindungswinkel in CH₄, NH₃ und H₂O mit den von Ihnen in Aufgabe 3 notierten.

- a. Welche Unterschiede sind erkennbar?

CH ₄	: Keine Unterschiede
NH ₃	: Der Winkel beträgt 107° anstelle von 109,5°
H ₂ O	: Der Winkel beträgt 104,5° anstelle von 109,5°

- b. Erklären Sie, wie diese Unterschiede zustande kommen.

Die freien EP benötigen mehr Platz, da nur von einem Kern angezogen, und drücken die Bindungen zusammen

Aufgaben für die Schnellen

6. In einigen Fällen stimmt die Molekülgeometrie mit der Elektronengeometrie überein, in anderen nicht. Setzen Sie für diese Aufgabe in der Box *Bezeichnung* zusätzlich ein Häkchen bei *Elektronengeometrie*. Vervollständigen Sie dazu die folgenden Sätze:

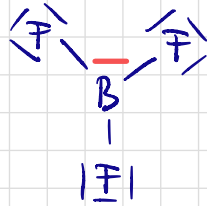
Molekül- und Elektronengeometrie stimmen in einem Molekül überein, wenn ...

... keine freien GP am zentralen Atom vorhanden sind.

Molekül- und Elektronengeometrie sind unterschiedlich, wenn ...

... freie GP am zentralen Atom vorhanden sind.

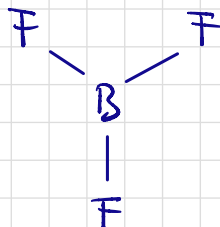
7. Was ist speziell am BF_3 -Molekül?
- Zeichnen Sie das BF_3 -Molekül mit Hilfe der Lewisformel und bestimmen Sie dessen Molekülgeometrie.



tetramedrisch ?!

- Vergleichen Sie Ihre Lewisformel und Ihre Voraussage zur Molekülgeometrie mit der Visualisierung durch die PhET-Simulation. Wählen Sie dazu unter *Moleküle* BF_3 aus.

Stimmen Ihre Lewisformel und Ihre Überlegungen zur Molekülgeometrie mit dem von PhET angezeigten Molekül überein? Falls nicht, notieren Sie, in welchem Überlegungsschritt Sie sich geirrt haben. Fügen Sie zum Abschluss unten ein Bildschirmfoto der PhET-Darstellung von BF_3 ein.




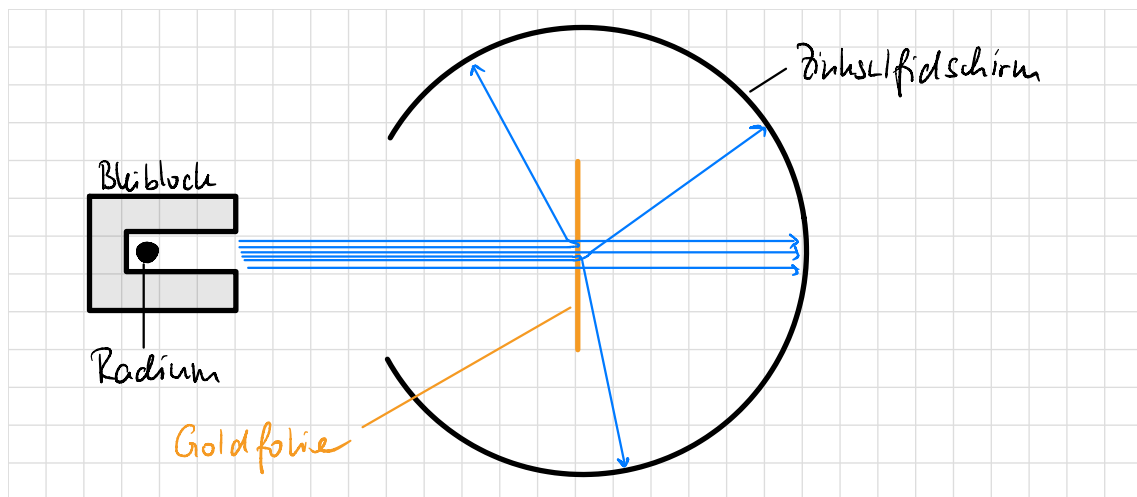
Die Verbindung ist trigonal planar!
 Bor hat nur 3 Valenzelektronen
 \Rightarrow kein freies GP
 \Rightarrow trigonal planar

Das Experiment von Rutherford

Sir Ernest Rutherford und seine Mitarbeiter Hans Geiger und Ernest Marsden haben zu Beginn des 20. Jahrhunderts eine sehr dünne Goldfolie mit α -Teilchen beschossen. Rutherford und seine Mitarbeiter wollten mit diesem Experiment mehr über den Aufbau der Atome herausfinden und haben dabei eine erstaunliche Entdeckung gemacht.

Ihre Aufgaben

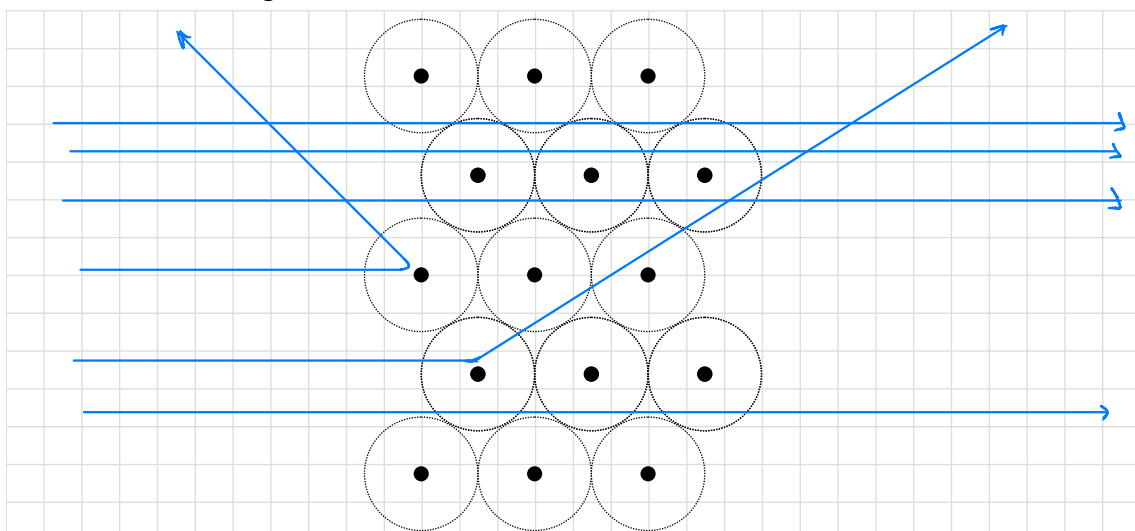
1. Klicken Sie auf den Link um die Simulation zum [Experiment von Rutherford](#) zu starten.
2. Klicken sie in der Simulation links unten auf  um eine Legende für alle abgebildeten Objekte zu erhalten.
3. Wenn Sie mit der Maus über die Schaltflächen fahren, wird Ihnen angezeigt, was ein Klick auf den entsprechenden Knopf bewirkt. Probieren Sie es aus. Die Schaltfläche «interaktiv» wird nicht benötigt.
4. Fertigen Sie eine Skizze der Versuchsapparatur an und beschriften Sie diese vollständig. Zeichnen Sie auch die Flugbahnen mehrerer α -Teilchen ein. Diese werden von radioaktivem Radium abgegeben und bestehen aus 2 Protonen (rot) und 2 Neutronen (weiss).



5. Klicken Sie in der Simulation auf «2. Erklärung am Atommodell» und dann auf L und K



6. Skizzieren Sie die Flugbahn der α -Teilchen durch die Goldfolie



7. Interpretieren Sie die folgenden drei Beobachtungen Rutherfords. Nehmen Sie dazu auch die [Simulation des Rutherford-Versuchs von PhET](#) zu Hilfe.
1. Fast alle α -Teilchen durchdringen die Folie senkrecht, ohne dabei abgelenkt zu werden.

Fast die ganze Masse eines Gold-Atoms muss an einem kleinen Ort innerhalb des Atoms (dem Kern) konzentriert sein - der Rest des Atoms (die Hülle) muss praktisch massenlos sein. Ohne diese Annahme liesse sich nicht erklären, weshalb die meisten Alpha-Teilchen die Folie geradewegs durchfliegen.

2. Ein geringer Teil der α -Teilchen wird beim Durchfliegen durch die Goldfolie abgelenkt.

Der Kern muss eine Ladung tragen, ansonsten könnte die Ablenkung der positiv geladenen Alpha-Teilchen nicht erklärt werden.

3. Einige wenige α -Teilchen durchdringen die Folie nicht, sondern werden reflektiert und fliegen praktisch geradewegs zurück.

Der Kern muss positiv geladen sein, ansonsten liesse sich die Reflexion, d.h. die Ablenkung um 180° , der Alpha-Teilchen nicht erklären.