

Ch 16/06 Ki_Online-Ergänzung



Das Unsichtbare sichtbar machen

Chemie lehren mit Simulationen auf der Teilchenebene

////////////////////////////////////
JÜRGEN SCHNITKER
////////////////////////////////////

Online-Ergänzung

5.5 Korrekturmöglichkeiten von nicht-belastbaren Vorstellungen mit Hilfe von Odyssey

a) Geschwindigkeit der Teilchen in Gasen

The screenshot displays the Odyssey Molecular Explorer software. The central 3D window shows Argon gas molecules (represented as blue and red spheres) moving within a cubic container. A scale bar indicates 1 nm. The right-hand panel, titled 'Kinetic Theory: The Meaning of Temperature', provides instructions for the user. It includes objectives, misconceptions, and a list of tasks to be completed, such as plotting kinetic energy versus temperature for Argon and Hydrogen Chloride.

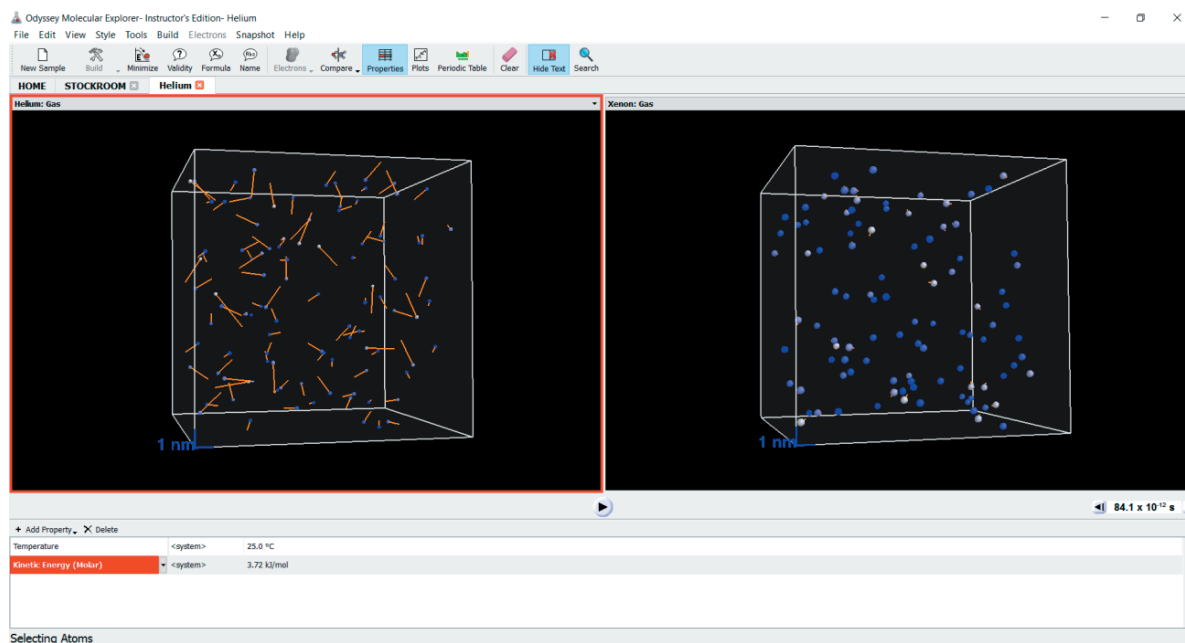
Nicht-belastbare Vorstellung:

„Alle Teilchen eines Gases bewegen sich mit gleicher Geschwindigkeit, die in Abhängigkeit von der Temperatur berechnet werden kann.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Gezeigt ist das molekulare Labor für die Beziehung zwischen kinetischer Energie und Temperatur. Die Atome der Probe von Argon sind entsprechend der kinetischen Energie eingefärbt (blau → kalt / rot → heiß). Die Teilchenspuren („Trails“) werden gezeigt; sie sind umso länger, je höher die Geschwindigkeit ist. Es ist offensichtlich, dass sich die Teilchen keinesfalls mit der gleichen Geschwindigkeit bewegen.

b) Kinetische Energie bei kleinen und großen Teilchen



Nicht-belastbare Vorstellung:

„Große Teilchen beinhalten mehr translatorische kinetische Energie als kleine Teilchen bei gleicher Temperatur.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Gezeigt sind eine Probe von Helium (ein Beispiel von kleinen Teilchen; verfügbar im „Molecular Stockroom“) und eine Probe von Xenon (ein Beispiel von großen Teilchen; auch verfügbar im „Molecular Stockroom“, kann mittels der „Search“-Funktion direkt dem Modell von Argon gegenübergestellt werden); beide Proben haben die gleiche Temperatur. Die Simulationen der Modelle sind synchronisiert und die Geschwindigkeitsvektoren („Velocities“) werden gezeigt (für Xenon sind die Pfeile so kurz, dass sie nur gerade eben erkennbar sind). Die Teilchen sind außerdem mit der entsprechenden kinetischen Energie eingefärbt, und der Energiebereich ist für das Minimum auf 0 kJ/mol und für das Maximum auf 20 kJ/mol eingestellt. Der numerische Wert der kinetischen Energie ist auch als „Property“ am unteren Rand angezeigt. Es kann geschlossen werden, dass sich die Teilchen mit sehr verschiedenen Geschwindigkeiten bewegen, aber nichtsdestotrotz die gleiche kinetische Energie tragen.

c) Eigenschaften von Teilchen in verschiedenen Aggregatzuständen

The screenshot shows the Odyssey Molecular Explorer software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a water droplet, with red spheres representing oxygen atoms and white spheres representing hydrogen atoms. The interface includes a menu bar (File, Edit, View, Style, Tools, Build, Electrons, Snapshot, Help) and a toolbar with various simulation controls. The right-hand panel, titled "Water at the Molecular Level Examining the Medium of Life", contains several sections:

- Objectives:**
 - To examine the molecular manifestations of hydrogen bonding in the three physical states of water.
 - To show the electron cloud of the water molecule and to highlight the existence of distinct molecular orbitals at five different energy levels.
 - To illustrate the molecular vibrations of the water molecule.
 - To examine the structure of water in the presence of various contaminants or dissolved substances.
- Molecule:**
 - Space Filling (H_2O)
 - Ball and Spoke (H_2O)
 - Tube (H_2O)
 - Ball and Wire (H_2O)
- Interaction Between Molecules:**
 - Dimer (25 °C) (H_2O_2)
 - Droplet (25 °C) (H_2O_{133})
 - Droplet, Superheated (138 °C) (H_2O_{133})
- Physical States:**
 - Solid (Ice) (H_2O_{36})
 - Liquid (H_2O_{36})
 - Gas (Vapor) (H_2O_{36})
 - Solid (Ice) (H_2O_{133})
 - Liquid (H_2O_{133})
 - Gas (Vapor) (H_2O_{133})
- Electron Cloud:**
 - Water Molecule (H_2O)
 - Hydronium (H_3O^+)
 - Hydroxide (OH^-)
 - Several Molecules (H_2O_{12})
 - Hydronium, Solvated ($H_3O^+_{12}$)
 - Hydroxide, Solvated (OH^-_{12})
- Molecular Vibrations:**

The bottom status bar shows "Selecting Atoms" and a scale of 2.55×10^{12} m.

Nicht-belastbare Vorstellung:

„Die Teilchen in Gasen haben eine andere Beschaffenheit als die in Flüssigkeiten, und die Partikel von Flüssigkeiten haben andere Eigenschaften als die in Feststoffen.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Odyssey enthält ein molekulares Labor mit zahlreichen Modellen von Wasser und anderen wässrigen Systemen. Im gezeigten Beispiel geht ein Wassertropfen (→ flüssige Phase) auf Grund der hohen Temperatur in die Gasphase über. Es ist offensichtlich, dass die Eigenschaften der Moleküle wie beispielsweise der Dipolcharakter unabhängig vom Aggregatzustand gleichbleiben.

d) Geschwindigkeit von Teilchen in Flüssigkeiten und in Gasen bei gleicher Temperatur

The screenshot shows the Odyssey Molecular Explorer software interface. The main window is split into two panels: "Methane: Liquid (-182 °C ... -161 °C)" on the left and "Methane: Gas" on the right. Both panels show a 3D ball-and-stick model of methane molecules with a 1 nm scale bar. Below the panels, a control panel shows "Temperature" set to 25.0 °C and "Speed, System Avg. (Time-Avg)" set to 621.1 m/s. On the right side, a "Linear Alkanes" sidebar lists various alkanes with their chemical formulas and phase transition temperatures.

Alkane	Chemical Formula	Phase Transition
Methane	CH ₄	Gas → Liquid (-182 °C ... -161 °C)
Ethane	C ₂ H ₆	Gas → Liquid (-184 °C ... -89 °C)
Propane	C ₃ H ₈	Gas → Liquid
Butane	C ₄ H ₁₀	Gas → Liquid (-138 °C ... -1 °C)
Pentane	C ₅ H ₁₂	Liquid
Hexane	C ₆ H ₁₄	Liquid
Heptane	C ₇ H ₁₆	Liquid
Octane	C ₈ H ₁₈	Liquid
Decane	C ₁₀ H ₂₂	Liquid

Nicht-belastbare Vorstellung:

„Teilchen in Flüssigkeiten bewegen sich langsamer als Teilchen in Gasen bei gleicher Temperatur.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Das linke Modell ist eine Probe von flüssigem Methan aus dem „Molecular Stockroom“, deren Temperatur von dem ursprünglichen Wert auf 25 °C erhöht ist (die Probe geht nicht in die Gasphase über, weil das Zellvolumen trotz des enormen Druckes konstant gehalten wird). Mit Hilfe der „Compare“-Funktion wird die Probe dann mit gasförmigen Methan verglichen. Die Simulationen sind synchronisiert und beide Modelle sind so gezoomt, dass sie im ungefähr gleichen Maßstab gezeigt werden. Obwohl die Dynamik der beiden Systeme sehr verschieden aussieht, ist die Durchschnittsgeschwindigkeit (der angezeigte Wert unterhalb der Proben ist „Time-Averaged“) ~620 m/s für beide Fälle.

e) Bewegung von Teilchen im festen Aggregatzustand

The screenshot shows the Odyssey Molecular Explorer software interface. The main window displays a 3D model of solid bromine (Br_2) with particles represented as red spheres connected by white sticks. The model is enclosed in a blue wireframe box, and a scale bar indicates 1 nm. The right-hand panel, titled "The States of Matter Molecular Motion", contains several sections: "Objectives" (To establish some universal differences with regard to the molecular motion in gases, liquids, and solids. To identify Brownian motion trails in liquids.), "Models" (Examine the following samples for the three phases of bromine and water: Bromine Br_2 (g), Water H_2O (g), Bromine Br_2 (l), Water H_2O (l), Bromine Br_2 (s), Water H_2O (s)), "Style" (Space Filling, Ball and Spoke, Ball and Wire, Wire, Tube, Hide), and "Questions" (1. Is there net motion of the particles over time, i.e., do the molecules migrate away from their original positions? Give separate answers for gas, liquid, and solid.).

Nicht-belastbare Vorstellung:

„Die Teilchen in Feststoffen bewegen sich nicht.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Gezeigt ist ein molekulares Labor, das die Teilchenbewegung für die verschiedenen Aggregatzustände vergleicht. Die Probe von festem Brom ist sichtbar mit Anzeige der Teilchenspuren („Trails“). Es ist offensichtlich, dass sich die Teilchen an Ort und Stelle oszillieren, ohne die Gitterplätze dabei zu verlassen.

f) Struktur von Atomen

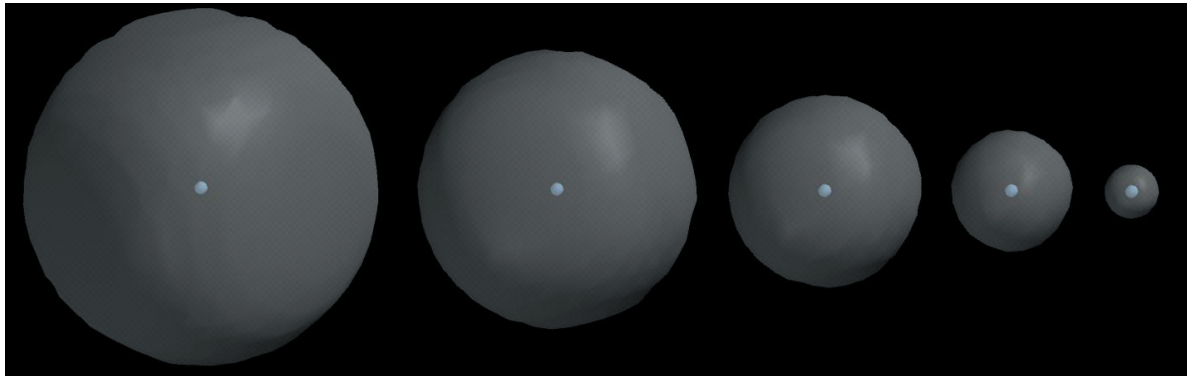
The screenshot shows the Odyssey Molecular Explorer software interface. The title bar reads "Odyssey Molecular Explorer- Instructor's Edition- Argon Atom". The menu bar includes File, Edit, View, Style, Tools, Build, Electrons, Snapshot, and Help. The toolbar contains icons for New Sample, Build, Minimize, Validate, Formula, Name, Electrons, Compare, Properties, Plots, Periodic Table, Clear, Hide Text, and Search. The main window is titled "Argon Atom" and contains two panels: "Neon: Electron Density" and "Xenon: Electron Density". Both panels show 3D models of atoms with electron density isosurfaces. The right panel contains a text area with the following text: "The following models show the electron density for another two kinds of noble gas atom: Neon (Ne) and Xenon (Xe). Isosurfaces for the total density are displayed in four different styles: Dots / Mesh / Solid / Transparent." Below this text are four questions: 10. For the neon atom, which style corresponds to the greatest density of electrons? Which style corresponds to the least dense region? 11. Are the surfaces for the xenon atom ordered the same way as for the neon atom? 12. You determined earlier where an argon atom has the maximum of its electron density. Are the shown surfaces for neon and xenon consistent with your findings for argon? 13. Find the total number of electrons for xenon and neon from the Periodic Table. What is the ratio of the number of electrons (heavier element/lighter element)? 14. If atoms were spheres and the electron density was uniform and... Below the questions are four yellow input boxes. At the bottom right of the right panel are buttons for "Print Answers" and "Save Answers (html)".

Nicht-belastbare Vorstellung:

„Atome haben Eigenschaften vergleichbar mit massiven Billardkugeln.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Gezeigt sind zwei Modelle aus dem Labor zur Veranschaulichung der Elektronendichteverteilung von Argon. Die Elektronenwolken von Neon und Xenon sind mittels von vier Elektronendichte-Isowerten (mit den höheren Isowerten in Kernnähe und den niedrigeren Isowerten in Kernferne) veranschaulicht. Es kann geschlossen werden, dass die beiden Atome keine wohldefinierte Grenze haben.

g) Abstand der Elektronen (-wolke) vom Kern

You can use the following control to inspect electron density surfaces for different isovalues:



Note that the 20 isosurfaces shown are just "snapshots" for certain values of the electron density. In principle, there are as many snapshots as you wish, and the sequence also extends to even lower values on the left and to even higher values on the right. (The underlying calculations are very difficult and treacherous close to the nuclear position, and therefore the results shown do not include any surfaces for isovalues larger than $\sim 3.5 \cdot 10^{-6} \text{ e/pm}^3$.)

Nicht-belastbare Vorstellung:

„Die Elektronenwolke umgibt den Nukleus wie eine Sphäre in einem bestimmten Abstand zum Kern.“

Relevantes Odyssee-Beispiel:

Das molekulare Labor für die Elektronendichteverteilung von Argon erlaubt es die Elektronenwolke mittels eines „Sliders“ schrittweise zu durchlaufen (fünf Isoflächen sind als Beispiel in der Abbildung gleichzeitig gezeigt). Es ist offensichtlich, dass sich die Elektronenwolke nicht in einem bestimmten Abstand vom Kern befindet.

The Electron Cloud Model
Examining a Hydrogen Atom

Objectives | **Misconceptions** | **Comments**

- To show the orbital of a hydrogen atom as an isosurface as well as via contour lines.
- To compare the resulting electron distribution with the "Space Filling" model style.

Model and Observations

Consider an atom of the simplest of all elements.

Hydrogen H

As there is only a single electron, just 1 occupied orbital describes the electron cloud fully.

Boundary Surface	Contour Lines
<input type="radio"/> 1a	<input checked="" type="radio"/> 1a

- The angular dependence of the orbital (shape) is extremely simple. It is spherically symmetric ("s-orbital").
- The radial dependence can be seen in the contour plot: the orbital amplitude drops from high values (bluish contour lines, at the nucleus) to small values (reddish contour lines, away from the nucleus).
- The distribution of the resulting electron density (ψ^2) is shown in the following isosurfaces.

Included Electron Density: 50% 82% 90% 95% 99%

The isosurface for "82% Electron Density" happens to correspond to the size of the standard Space Filling spheres that ODYSSEY draws for hydrogen atoms.

Style: Nucleus Only (Too Small to See) Space Filling

Note that the latter observation is quite remarkable: for hydrogen, as much as ~18% of the electron density may lie outside (!) of the "fat" Space Filling spheres that you see in molecular illustrations in textbooks, articles, etc.

The hydrogen atom with its one proton and one electron is the only atom (or molecule) that is a "two-body problem," i.e., a system for which the equations of quantum mechanics can be solved analytically. All other chemical systems are at least "three-body problems" (or much worse) and numerical solutions of the equations of nature must be sought.

Selecting Atoms

0.00 x 10⁻¹⁰ Normal Text Edit

Nicht-belastbare Vorstellung:

„Elektronen sind am wahrscheinlichsten in einer bestimmten Distanz um den Kern kreisend anzutreffen.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Das molekulare Labor für die elektronische Struktur eines Wasserstoffatoms erlaubt es, die Elektronenwolke als eine Sequenz von Konturlinien zu visualisieren. Die Konturlinien folgen einander in zunehmend kleinerem Abstand während der Kern erreicht wird: die Elektronendichteverteilung hat ein Maximum am Atomkern. Vom Atomkern weggehend fällt die Elektronendichte kontinuierlich ab, ohne dass ein bestimmter Abstand hervorgehoben werden könnte.

h) Reaktionspartner bei einer Chemischen Reaktion

The screenshot shows the Odyssey Molecular Explorer software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of the transition state for an SN2 reaction. The nucleophile (red sphere) and the leaving group (green sphere) are both partially bonded to the central carbon atom (grey sphere). The interface includes a menu bar, a toolbar, and a right-hand panel with text and interactive elements.

Organic Reactions
Describing a Nucleophilic Substitution

Objectives **Misconceptions** **Comments**

- To examine the motion of the nuclei in one of the most basic of organic reactions.
- To monitor the change of the electron cloud during the reaction.

Model

"Bimolecular nucleophilic substitutions" are among the most common organic reactions and have been studied in great detail. A very simple example is the reaction of methylchloride with bromide ion:

$$\text{CH}_3\text{Cl} + \text{Br}^- \rightarrow \text{CH}_3\text{Br} + \text{Cl}^-$$

The following sequence of structures provides a molecular-level view of the gradual progress of the reaction:

← REACTANTS.....PRODUCTS →

Note that you can scroll forward as well as backward—both are "valid" reactions (although one may be more likely to occur than the other).

Questions

1. What is the nucleophile in this reaction?
2. What is the substrate?
3. What is the leaving group?

Selecting Atoms

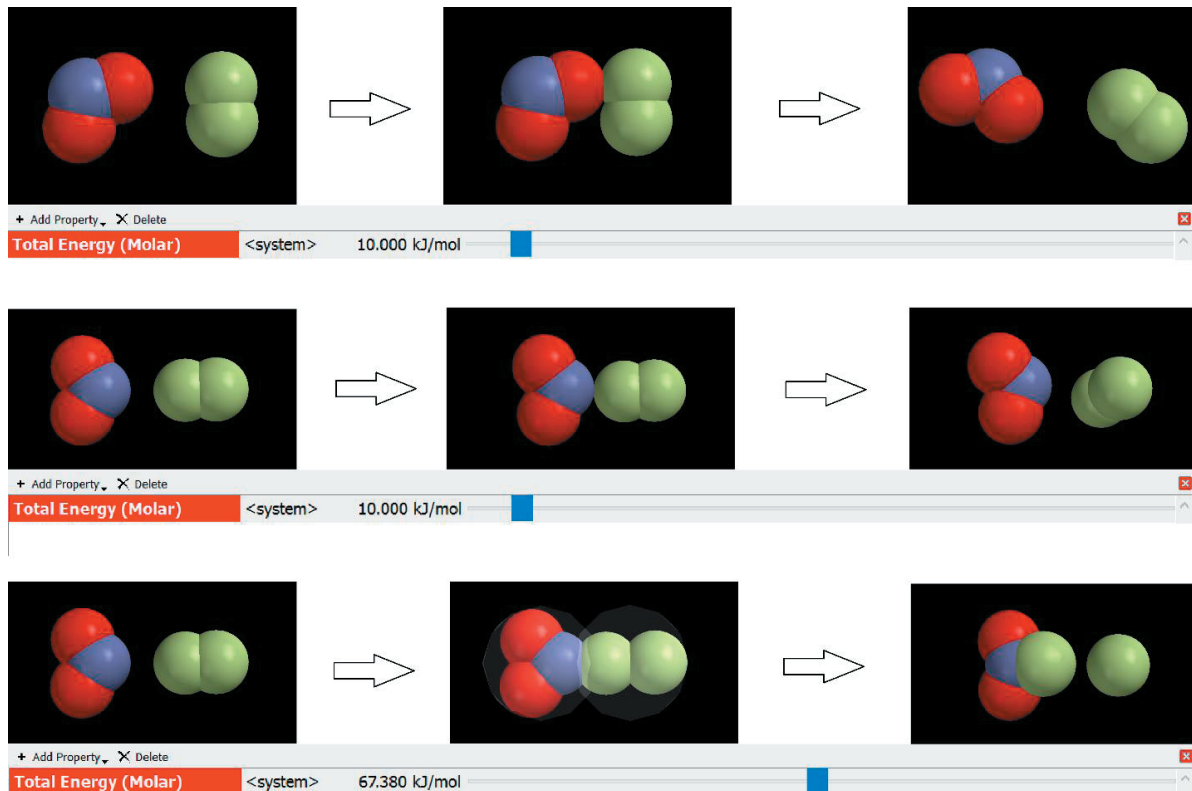
Print Answers Save Answers (html)

Nicht-belastbare Vorstellung:

„Reaktionen basieren auf dem Vorhandensein eines aktiven Reaktionspartners und eines passiven Substrats.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

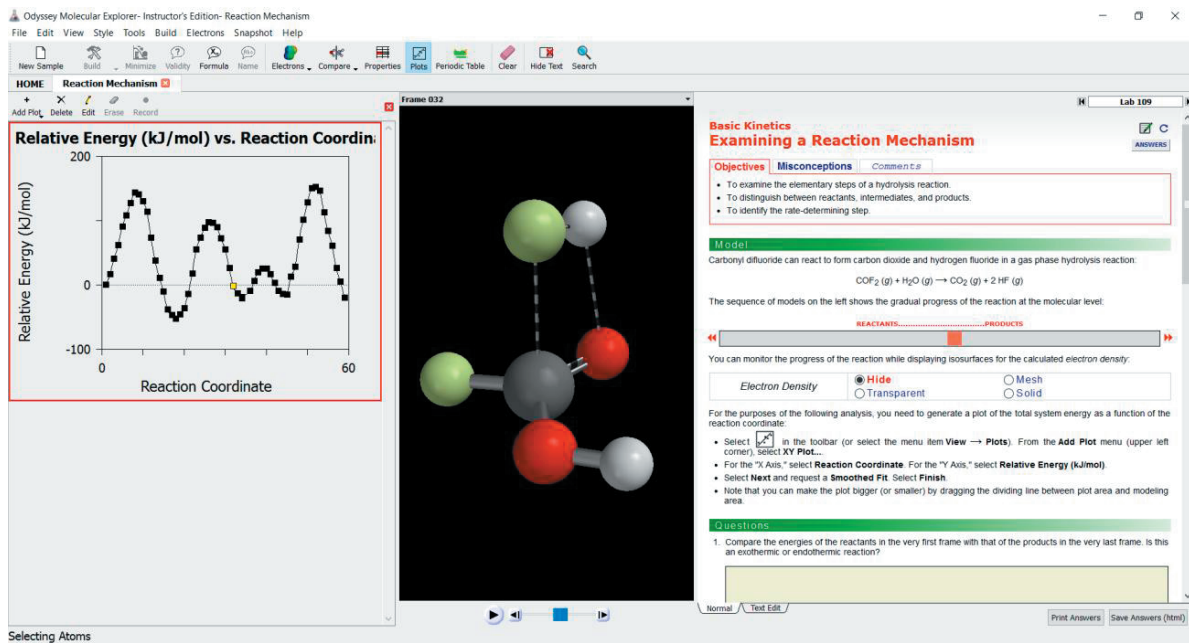
Das molekulare Labor für den Reaktionsmechanismus einer S_N2-Reaktion erlaubt es durch die Reaktion in 18 Einzelschritten zu gehen. Insofern dies in beiden Richtungen ablaufen kann und der gezeigte Übergangszustand vollkommen symmetrisch ist, gibt es keinen Grund zwischen einem „aktiven“ und „passiven“ Reaktionspartner zu unterscheiden.

**Nicht-belastbare Vorstellung:**

„Teilchen reagieren immer, wenn sie miteinander kollidieren.“

Relevantes Odyssee-Beispiel:

Das molekulare Labor für reaktive Kollisionen erlaubt es sowohl die relative Orientierung der beiden Reaktionspartner (Sterischer Faktor) als auch die Aktivierungsenergie zu kontrollieren. In der obersten Sequenz ist die relative Orientierung falsch und die Aktivierungsenergie unzureichend → die Reaktion ist nicht erfolgreich. In der mittleren Sequenz, sind die sterischen Bedingungen für eine Reaktion erfüllt, aber auf Grund von mangelnder Energie findet immer noch keine Reaktion statt. In der untersten Sequenz sind beide Bedingungen erfüllt und ein neues Molekül entsteht spontan. Das Labor ist so angelegt, dass der Lernende die genauen Bedingungen *empirisch* herausfinden kann.



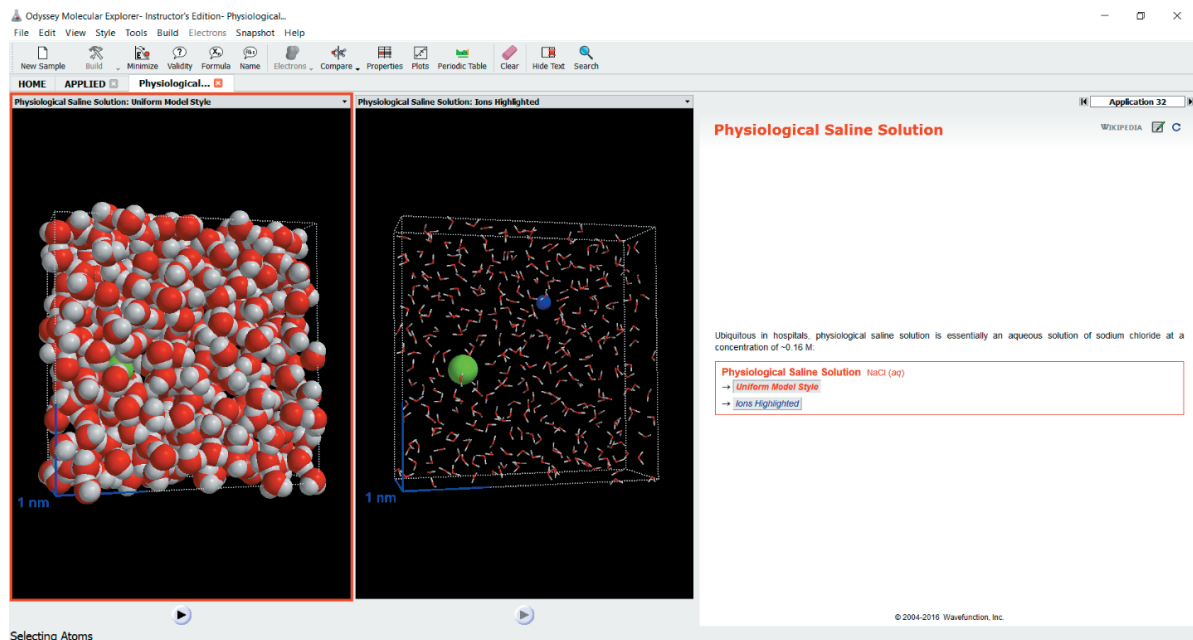
Nicht-belastbare Vorstellung:

„Reaktionen schreiten nur in einer Richtung fort.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Das molekulare Labor für die Hydrolyse von Carbonylfluorid zeigt, dass die Reaktion im Ganzen nur schwach exotherm ist; folglich macht eben so viel Sinn, die Reaktion rückwärts wie vorwärts zu simulieren.

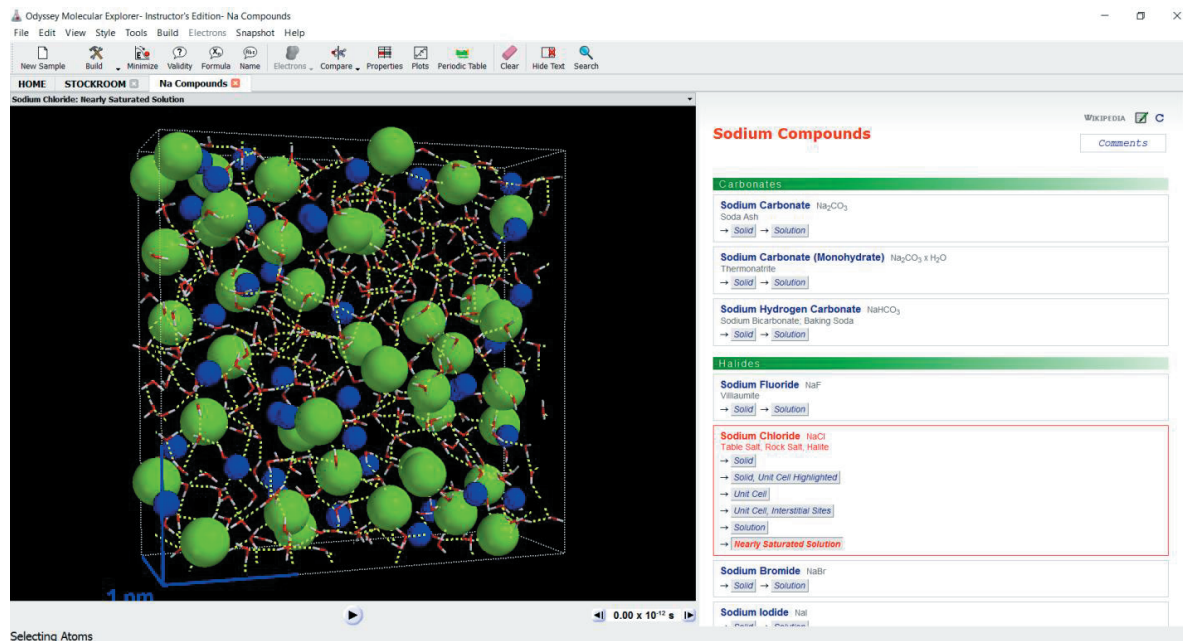
i) Ionen in Lösungen

**Nicht-belastbare Vorstellung:**

„Ionen in Lösungen treten in Paaren auf.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

In der „Applied Chemistry“ Sektion ist ein Modell für physiologische Kochsalz-Lösung verfügbar. Auf der linken Seite ist die Visualisierung so gestaltet, dass alle Atome im Kalotten-Modell gezeigt sind → die gelösten Ionen sind kaum erkennbar. Auf der rechten Seite sind nur die beiden Ionen im Kalotten-Modell gezeigt, während die Wassermoleküle im Stäbchen-Modell repräsentiert sind. Es ist offensichtlich, dass das Kation und das Anion nicht in unmittelbarer Nachbarschaft vorliegen.



Nicht-belastbare Vorstellung:

„Eisartige Strukturen umgeben die gelösten Ionen in Lösung.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Auf der Seite für Verbindungen des Natriums im „Molecular Stockroom“ ist das Modell einer Kochsalzlösung an der Löslichkeitsgrenze ($c \sim 6 \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1}$) verfügbar. Die Ionen sind als Kalotten-Modell gezeigt und die Wassermoleküle als Stäbchen (mit zusätzlicher Visualisierung der Wasserstoffbrückenbindungen). Die typische Unordnung einer Flüssigkeit ist erkennbar, d.h. es gibt keinen Hinweis auf eisartige Strukturen.

j) Heterogene Flüssigkeitsgemische

The screenshot shows the Odyssey Molecular Explorer software interface. The main window is titled "Nonpolar Solutes" and displays two 3D molecular models. The left model shows a methane molecule (CH₄) in a solution of water, with a "Clipping" option set to "Spherical". The right model shows a methane molecule within a "cage" of water molecules, with a "Dodecahedra" option set to "All Pentagons". The right sidebar contains text explaining the simulation and the structure of methane hydrate.

Miscibility
Nonpolar Solutes in Water

Objectives | **Misconceptions** | **Glossary** | **Comments**

- To examine models of aqueous systems, both liquid and solid, with hydrophobic solutes.
- To describe the molecular structure of clathrates.

Models and Observations

How exactly the structure of water is perturbed by a nonpolar substance (thereby making the latter insoluble) is the subject of ongoing research. A common model assumes that nonpolar solutes cause water to locally take on the structure of a "cathrate" - is this really a fair comparison? Let's examine a computer simulation of methane in bulk water and then compare the simulation results with the structure of a clathrate:

Methane in Water CH₄ (aq)

Start the simulation (below the model, select **J** and turn on the display of the hydrogen bonds:

Hydrogen Bonds Hide Show

Focus on the solvation shell:

Clipping None Spherical

"Zoom in" to show the model screen-filling. You can see how the methane molecule tumbles around inside a "cage" of hydrogen bonds that is formed by the surrounding water molecules. Everything is in a constant state of flux, but the "cage" appears to persist over time.

Let's examine the molecular structure of a clathrate for comparison. Clathrates are also known as "inclusion compounds" or "gas hydrates"; at sufficiently low temperatures and sufficiently high pressures they are well-known, stable compounds.

Here is a molecular model of the clathrate of methane:

Methane Hydrate (Type **L**, 100% Occupancy)

The lattice of water molecules in methane hydrate is quite different from that of ordinary ice. The lattice is full of cavities that can be occupied by "guests" - in fact, at least a certain fraction of the cavities (~30% or more) must be occupied for the whole structure to be stable. The molecular model shown illustrates the extreme: the host lattice is 100% occupied by methane molecules.

The cavities in methane hydrate are regular polyhedra of two different kinds:

Dodecahedra (12 Faces, All Pentagons)

Nicht-belastbare Vorstellung:

„Öl und Wasser vermischen sich nicht aufgrund der Abstoßung der verschiedenen Moleküle.“

Relevantes Odyssey-Beispiel:

Gezeigt ist das Modell einer (erzwungenen) Simulation von Methan in Wasser. Die unmittelbare Umgebung des Methanmoleküls ist sichtbar („Clipping“-Option) und die Wasserstoffbrückenbindungen zwischen den Molekülen sind gezeigt. Das rechte Modell zeigt im Vergleich die lokale Umgebung von Methan in „Methanhydrat“ (eine Substanz, die vermutlich in riesigen Mengen am Meeresgrund vorliegt). Der Hauptgrund, dass sich Methan in flüssigem Wasser so wenig auflöst, ist nicht die vermeintliche energetische Abstoßung zwischen den beiden Komponenten, sondern der starke ordnende Einfluss des Solvats.

Literatur

- AK MINILABOR (o. J.). Trainer, Spiele und Nachschlagewerkzeuge für die Chemie. <http://www.kappenberg.com/akminilabor/apps/start.html> (15.08.2016)
- AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (2011). *Chemistry in the Community*, 6th Edition. New York: W.H. Freeman.
- AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (2014). *Chemistry in Context*, 8th Edition. New York: McGraw Hill.
- AP® CHEMISTRY (2014). Course and Exam Description, Revised Edition. New York: College Board. <http://media.collegeboard.com/digitalServices/pdf/ap/ap-chemistry-course-and-exam-description.pdf> (17. 08. 2016).
- BLADON, P., GORTON, J. & HAMMOND, R.B. (2011). *Molecular Modeling: Computational Chemistry Demystified*. London: Royal Society of Chemistry.
- BODNER, G. (1991). I Have Found You an Argument. *J. Chem. Educ.*, 68, 385-388.
- BURKHOLDER, P.R., PURSER, G.H. & COLE, R.S. (2008). Using Molecular Dynamics Simulation to Reinforce Student Understanding of Intermolecular Forces. *J. Chem. Educ.*, 85, 1071-1077.
- CONNECT (o. J.). Digital Teaching and Learning Environment. New York: McGraw Hill. <http://connect.mheducation.com/connect/> (15. 08.2016)
- CRAMER, C.J. (2004). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Ed.* New York: Wiley.
- DEMUTH, R., PARCHMANN, I., & RALLE, B. (Hg., 2006). *Chemie im Kontext*. Berlin: Cornelsen Verlag.
- EILKS, I. (2003). Students' Understanding of the Particulate Nature of Matter and Misleading Textbook Illustrations. *Chemistry in Action*, 69, 35-40.
- FRENKEL, D. & SMIT, B. (2001). *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. San Diego: Academic Press.
- GABEL, D.L, SAMUEL, K.V. & HUNN, D. (1987), Understanding the Particulate Nature of Matter. *J. Chem. Educ.*, 64, 695-697.
- GEELAN, D., MUKHERJEE, M., & MAHAFFY, P. (2004). Scientific Visualisations for Developing Students' Understanding of Concepts in Chemistry: Some Findings and Some Lessons Learned. *Teaching Science*, 60, 30-38.
- HEHRE, W.J. (2003). *A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations*. Irvine, CA: Wavefunction.
- HORTON, C. (2007). Student Alternative Conceptions in Chemistry. *California Journal of Science Education*, 7, 103-150.
- JMOL (o. J.). An Open-Source Java Viewer for Chemical Structures in 3D. <http://www.jmol.org> (04. 08. 2016).

- JOHNSTONE, A.H. (1982). Macro and Microchemistry. *School Science Review*, 64, 377-379.
- JOHNSTONE, A.H. (2000). Teaching of Chemistry—Logical or Psychological? *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, 1, 9-15.
- LEACH, A.R. (2001). *Molecular Modeling: Principles and Applications*, 2nd Ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall.
- LEWARS, E. (2016). *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*, 3rd Ed. New York: Springer.
- LIEM, T. (1987). *Invitations to Science Inquiry, 2nd Edition*. Lexington, MA: Ginn Press.
- MAHAFFY, P. (2004). The Future Shape of Chemistry Education. *Chemistry Education: Research and Practice*, 5, 229-245.
- MAHAFFY, P. (2006). Moving Chemistry Education into 3D: A Tetrahedral Metaphor for Understanding Chemistry. *J. Chem. Educ.*, 83, 49-55.
- MAHAFFY, P. (2015). Chemistry Education and Human Activity. In: GARCÍA-MARTÍNEZ, J. & SERRANO-TORREGROSA, E. (HG.), *Chemistry Education: Best Practices, Opportunities and Trends*. Weinheim: Wiley-VCH, 3-26.
- MAHAFFY, P., TASKER, R., BUCAT, B., KOTZ, J.C., & WEAVER, G.C. (2014). *Chemistry: Human Activity, Chemical Reactivity*, 2nd Edition. Boston: Brooks/Cole.
- MASTERINGCHEMISTRY (o. J.). Online Homework, Tutorial, and Assessment System. New York: Pearson Education. <http://www.pearsonmylabandmastering.com/northamerica/masteringchemistry/> (15. 08.2016).
- MOLECULAR WORKBENCH (o. J.). Concord, MA: Concord Consortium. <http://mw.concord.org/modeler> (04. 08.2016).
- MOLECULES (o. J.). An Application for Viewing Three-Dimensional Renderings of Molecules. Madison, WI: Sunset Lake Software. <http://itunes.apple.com/us/app/molecules/id284943090> (04. 08.2016).
- ODYSSEY (o. J.). Molecular Explorer. Irvine, CA: Wavefunction. http://www.wavefun.com/support/odyssey/support_ody.html (04. 08.2016).
- OWL (o. J.). Online Web Learning. Boston: Cengage Learning. <http://www.cengage.com/owl/> (15. 08.2016).
- PHET (o. J.). Physics Education Technology. Boulder: University of Colorado. <https://phet.colorado.edu/> (08.04.2016).
- SALTERS CHEMIE (2012). *Chemical ideas / Chemical storylines*. Braunschweig: Schroedel Verlag.
- SAPLING LEARNING (o. J.). Online Homework System. Austin: Macmillan Learning. <http://www2.saplinglearning.com/> (15. 08.2016).
- SCHLICK, T. (2010). *Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide*. New York: Springer.

SCHNITKER, J. (2008). Molecular-Level Simulations as a Chemistry Teaching Tool. In: ELLISON, M.D. & SCHOOLCRAFT, T.A. (Hg.), *Advances in Teaching Physical Chemistry*. Washington, D.C.: American Chemical Society, 207-219.

SHUSTERMAN, A.J. & HOISTAD, L.M. (2001), Teaching Chemistry with Density Models. 2. Can Atomic Charges Adequately Explain Electrostatic Potential Maps? *Chem. Educator*, 6, 36-40.

SHUSTERMAN, G.P. & SHUSTERMAN, A.J. (1997), Teaching Chemistry with Electron Density Models. *J. Chem. Educ.*, 74, 771-776.

TANG, H. & ABRAHAM, M.R. (2016). Effect of Computer Simulations at the Particulate and Macroscopic Levels on Students' Understanding of the Particulate Nature of Matter. *J. Chem. Educ.*, 93, 31-38.

TSAPARLIS, G. & SEVIAN, H. (Hg.) (2013). *Concepts of Matter in Science Education*. Dordrecht: Springer.

WEBASSIGN (o. J.). Online Instructional System. Raleigh: WebAssign. <https://www.webassign.net/> (16.08.2016).

YOUNG, D. (2001). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*. New York: Wiley Interscience..

JÜRGEN SCHNITKER, jurgen@wavefun.com (Wavefunction, 18401 Von Karman #370, Irvine, CA 92612, hat Chemie an der RWTH Aachen und der University of Texas studiert und an der University of Michigan unterrichtet. Er ist der Begründer der Computersoftware Odyssey und leitet deren Entwicklung.

PETER TROJANOWSKI, peter.trojanowski@additive-net.de, hat Chemie an der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main studiert und ist derzeit bei der ADDITIVE Soft- und Hardware für Technik und Wissenschaft GmbH (Max-Planck-Str. 22b, D-61381 Friedrichsdorf) als Produktmanager und Vertriebsingenieur tätig.

□