



LEUPHANA
UNIVERSITÄT LÜNEBURG

Lehren und Lernen (B.A.)

Bachelorarbeit

Zur Erlangung des Grades

Bachelor of Arts

Modelle zu Molekülen – ausgewählte Modellbaukästen und Computervisualisierungen im Vergleich

Molecule Modelling-

selected Model Sets and Computer Visualisation in Comparison

Abgabetermin: **30.September 2016**

Vorgelegt von:

Miriam Kälber

Bei:

Frau Friederike-Elisabeth Scheller

Frau Prof. Dr. Simone Abels

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	5
2. Modelle und Modellvorstellungen.....	6
3. Aspekte des Vergleichs	8
4. Teilchenmodelle.....	9
4.1. Kalottenmodell.....	9
4.2. Kugel-Stab-Modell	10
4.3. Orbitalmodell.....	10
5. Computer[visualisierung] im Chemieunterricht.....	17
6. Online Modelle ChiLe	19
6.1. Moleküle	20
6.2. Reaktionen.....	22
7. Modelle zum Anfassen	25
7.1. Molekülbaukasten – Kugel-Stab-Modell.....	25
7.1.1. Molekül	27
7.1.2. Reaktionen	30
7.2. Molekülbaukasten – Orbitalmodell	31
7.2.1. Moleküle und Atome	33
7.2.2. Reaktionen	36
8. Vergleich – Pro und Contra der verschiedenen Molekülmodelle	38
9. Fazit.....	42
10. Glossar	44
11. Literatur.....	45
12. Eigenständigkeitserklärung	46

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Kalottenmodell des Wassermoleküls – rot =Sauerstoff, weiß =Wasserstoff (Glossardatenbank, 2008)	9
Abbildung 2: Kugel-Stab-Modell des Wassermoleküls - rot= Sauerstoff, weiß = Wasserstoff	10
Abbildung 3: Sauerstoffatom im Schalenmodell - schwarz = Elektronen, grau = Atomkern	10
Abbildung 4: Elektronendichteverteilung des Wasserstoffs – Aufenthaltswahrschein- lichkeit des Elektrons (Brown et al., 2011, S. 255)	11
Abbildung 5: Orbitalenergieniveau des Kohlenstoffatoms $1s^2$, $2s^2$, $2p_x$, $2p_y$	13
Abbildung 6: Orbitaldiagramm des Berylliums – Grundzustand	13
Abbildung 7: Orbitaldiagramm des Berylliums – Elektron wird angehoben	14
Abbildung 8: Orbitaldiagramm des Berylliums – mit sp-Hybridorbitalen	14
Abbildung 9: Bildung von sp-Hybridorbitalen (Brown et al., 2011, S. 249)	14
Abbildung 10: Berylliumfluorid im Orbitalmodell (ebd., S. 249).....	14
Abbildung 11: Hybridisierung des Boratoms.....	15
Abbildung 12: Bildung von sp^2 -Hybridorbitalen (Brown et al., S. 350)	15
Abbildung 13: Hybridisierung des Kohlenstoffatoms	15
Abbildung 14: Bildung von sp^3 -Hybridorbitalen (Brown et al., 2011, S. 351)	16
Abbildung 15: Hybridisierung des Kohlenstoffatoms zu sp^2 -Orbitalen	16
Abbildung 16: Hybridisierung in Ethylen (Brown et al., 2011, S. 355)	16
Abbildung 17: Ausbildung der π -Bindung im Ethylen (ebd., S. 355)	17
Abbildung 18: ChiLe-Chemie interaktiv Lernen, Projekt zur Etablierung des Computers im Chemieunterricht (ChiLe, o.J.)	19
Abbildung 19: ChiLe – 3D-Animation der Ameisensäure (ChiLe, o.J.)	20
Abbildung 20: 3D-Molekül der Ameisensäure – mit weißem Hintergrund (ChiLe, o.J.)	21
Abbildung 21: 3D-Molekül der Ameisensäure – mit schwarzem Hintergrund (ChiLe, o.J.)	21
Abbildung 22: 3D-Stab-Modell der Ameisensäure, mit Elementensymbolen (ChiLe,o.J.)	21
Abbildung 23: 3D-Kalottenmodell der Ameisensäure (ChiLe, o.J.)	21
Abbildung 24: 3D-Kugel-Stab-Modell der Ameisensäure, mit gepunkteter Oberfläche (ChiLe, o.J.)	21
Abbildung 25: 3D-Kugel-Stab-Modell Ameisensäure, mit elektrostatischer Oberfläche – rot = negativ, grün = neutral, blau = positiv (ChiLe,o.J.)	22

Abbildung 26: ChiLe – 2D-Animation der Veresterung (ChiLe, o.J.)	23
Abbildung 27: Dehydratisierung von 3-Pentanol - Startbild (ChiLe, o.J.)	23
Abbildung 28: Dehydratisierung von 3-Pentanol – roter Pfeil signalisiert den Elektro- nenübergang (ChiLe,o.J.)	23
Abbildung 29: Dehydratisierung von 3-Pentanol – Ladungsverschiebung (ChiLe, o.J.)	24
Abbildung 30: Dehydratisierung von 3-Pentanol – Elektronenübergang am protonierten 3-Pentanol (ChiLe, o.J.)	24
Abbildung 31: Dehydratisierung von 3-Pentanol – Ladungsverschiebung am protonier- ten 3-Pentanol (ChiLe, o.J.) -.....	24
Abbildung 32: Dehydratisierung von 3-Pentanol – Elektronenübergang am Carbenium- ion (ChiLe, o.J.)	24
Abbildung 33: Dehydratisierung von 3-Pentanol – Abspaltung des Protons	24
Abbildung 34: Molekülbaukasten 1 (CoreEx, o.J.a)	26
Abbildung 35: Molekülbaukasten 2	26
Abbildung 36: Schüleranleitung zu Molekülbaukasten 1 und 2 – Auswahl wichtiger Verbindungen, Alkohole (CorEx, 2008a)	26
Abbildung 37: Lehrerheft zu Molekülbaukästen 1 und 2 – Darstellung von Verbindun- gen, Nitrogruppe (CorEx, 2008b)	27
Abbildung 38: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell des Methanols	27
Abbildung 39: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell des Ethanals.....	28
Abbildung 40: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell des Ethins	28
Abbildung 41: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell der D-Milchsäure (links) und R-Milchsäure (rechts)	28
Abbildung 42: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell des Ethans, Wasserstoff- modelle sind gestaffelt angeordnet	29
Abbildung 43: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell des Ethans, Wasserstoff- modelle sind ekliptisch angeordnet	29
Abbildung 44: CorEx Molekülbaukasten 1 (rechts) und 2 (links): Kugel-Stab-Modell des Benzols	29
Abbildung 45: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell Funktioneller Gruppen - links = Aldehyd, rechts = Keton	30
Abbildung 46: CorEx Molekülbaukasten 1 & 2: Elektrophile Substitution am Benzolring mit Salpetersäure – Edukte im Kugel-Stab-Modell	30
Abbildung 47: CorEx Molekülbaukasten 1 & 2: Mesomere Grenzstrukturen des σ -Kom- plexes bei einer elektrophilen Substitution am Benzolring (Alteso, o.J.)	31
Abbildung 48: CorEx Molekülbaukasten 1 & 2: Elektrophile Substitution am Benzolring mit Salpetersäure – Produkte (Nitrobenzol & Wasser) im Kugel-Stab-Modell	31

Abbildung 49: ZEPTER Orbitalbaukasten (Conatex Lernsysteme, o.J)	32
Abbildung 50: Foto der Anleitung - ZEPTER Orbitalbaukasten (Zepter Orbitalbaukasten)	33
Abbildung 51: ZEPTER Orbitalbaukasten: Kohlenstoffatom im Grundzustand	33
Abbildung 52: ZEPTER Orbitalbaukasten: Kohlenstoffatom im angeregten Zustand ..	34
Abbildung 53: ZEPTER Orbitalbaukasten: Hybridisiertes Kohlenstoffatom mit sp^3 -Orbitalen	34
Abbildung 54: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ethans	34
Abbildung 55: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ethans (gestaffelt)	35
Abbildung 56: ZEPTER Orbitalbaukasten: Kohlenstoffatom im Grundzustand	35
Abbildung 57: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ethens	35
Abbildung 58: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ethins	35
Abbildung 59: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ammoniums	36
Abbildung 60: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ethens mit nicht hybridisierten p-Orbitalen	36
Abbildung 61: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des sp-hybridisierten Kohlenstoffatoms.....	37
Abbildung 62: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ethins mit nicht hybridisierten p-Orbitalen	37
Abbildung 63: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Wassermoleküls	37
Abbildung 64: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Oxoniumions	37

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Materialliste der Molekülbaukästen 1 und 2 (CorEx, o.J.b)	25
Tabelle 2: Eigenschaften der Kohlenstoffatommodelle (Conatex Lernsysteme, o.J.) ..	32

1. Einleitung

„Ohne ein tiefergehendes Verständnis des Modellcharakters chemischer Theorien bleibt das Verständnis für Chemie oberflächlich phänomenologisch oder anwendungsorientiert formal“ (Saborowski, 2000, S. 14)

Modelle und Experimente sind das Fundament naturwissenschaftlich-chemischer Erkenntnisse und sind auch im Chemieunterricht unumgänglich. Um Chemie nicht nur phänomenologisch betrachten zu können, muss auf eine Teilchenvorstellung zurückgegriffen werden. Die Einführung und das Arbeiten mit solchen abstrakten Vorstellungen ist nicht immer einfach für die Schülerinnen und Schüler (SuS). Umso wichtiger ist es, geeignete Modelle einzusetzen, um den „‘Sprung‘ ins Abstrakte“ (ebd., S.15) so leicht als möglich zu gestalten. Erschwerend kommt bei den Modellen der Chemie noch hinzu, dass das submikroskopische Original nie betrachtet werden kann. (ebd.)

Eine der vier Kompetenzen im Bereich der Chemie, die in den Bildungsstandards festgelegt sind, ist die Erkenntnisgewinnung. Hierbei sollen „experimentelle und andere Untersuchungsmethoden sowie Modelle [genutzt]“ (Kultusministerkonferenz, 2005, S.7.) werden. Schon länger wird dabei auf Molekülbaukästen im Unterricht zurückgegriffen, um so durch ein selbstständiges Zusammenbauen der Molekülmodelle das Verständnis der Strukturen und Reaktionen zu unterstützen. „Modelle werden aber auch für die Kommunikation von Chemie genutzt“ (Eilks & Bindernagel, 2008). Schon länger wird der Einsatz von Computern im Unterricht diskutiert. Für die Messwerterfassung, deren Auswertung und zur Unterstützung bei Experimenten wird dieser immer wieder im Chemieunterricht eingesetzt (Eilks, Flintntjer, Krilla, Möllencamp & Wagner, 2004). Die schnelle Entwicklung der graphischen Simulationen ermöglicht es nun auch, Strukturen und Vorgänge in der Chemie anschaulich darzustellen.

In dieser Bachelorarbeit werden zwei ausgewählte Modellbaukästen mit online verfügbaren Computervisualisierungen von Molekülmodellen und Reaktionsmechanismen verglichen. Zu Beginn wird im zweiten Kapitel die Entstehung von Modellen und Modellvorstellungen genauer erläutert. Im darauffolgenden Abschnitt werden dann die Aspekte des Vergleichs genauer erläutert. Im Kapitel vier werden drei verschiedene Teilchenmodell vorgestellt. Zum einen das Kugel-Stab-Modell, anschließend das Kalottenmodell und als drittes das Orbitalmodell. Diese drei Modelle werden in den Modellbaukästen und der Computervisualisierung verwendet. Im fünften Kapitel wird dann der Computereinsatz und die Computervisualisierung im Unterricht genauer behandelt und erklärt. Anschließend werden die von ChiLe – Chemie interaktiv lernen zur Verfügung gestellten computervisualisierten Moleküle und Reaktionsmechanismen genauer beschrieben. In

Kapitel 7 werden die „Modelle zum Anfassen“ betrachtet und auch hier werden beispielhaft Moleküle und Reaktionsmechanismen aufgezeigt, um die verschiedenen Möglichkeiten darzustellen, die mit diesen Modellen verdeutlicht werden können. In 7.1 wird zuerst der Molekülbaukasten betrachtet, mit dem Kugel-Stab-Modelle der Moleküle zusammengebaut werden können. In Kapitel 7.2 wird ein sogenannter Orbitalmodellbaukasten genauer untersucht. Im Kapitel acht werden diese Modelle dann miteinander verglichen, dabei werden die vorher festgelegten Aspekte des Vergleichs aufgezeigt und Vor- und Nachteile betrachtet. In Kapitel neun wird ein abschließendes Fazit gezogen.

2. Modelle und Modellvorstellungen

Modelle und Modellvorstellungen spielen im Chemieunterricht eine wichtige Rolle. Die Besonderheit ist, dass Modelle in der Chemie meist nicht mit einem Original verglichen werden können, da die kleinsten Teilchen der Materie nicht sichtbar gemacht werden können. Beim Erstellen von Modellen in der Chemie werden vorrangig die Eigenschaften der jeweiligen Materien betrachtet, um daraus Rückschlüsse zum Beispiel im Bezug zur Form zu ziehen. (Barke, Harsch, Marohn & Krees, 2015)

Nach Stachowiak gibt es drei wichtige Bestimmungsmerkmale, die ein Modell oder eine Modellvorstellung beschreiben. Zum einen gibt es das *Abbildungsmerkmal*, „Modelle sind stets Modelle von etwas, nämlich Abbildungen und damit Repräsentationen gewisser natürlicher oder künstlicher Objekte“ (ebd., S.186). Das zweite ist das *Verkürzungsmerkmal*. Hier wird darauf verwiesen, dass niemals alle Eigenschaften des Originals in einem Modell beschrieben werden können. Nur diejenigen Eigenschaften, die der/die Ersteller/in oder der/die Benutzer/in des Modells für relevant hält, finden Beachtung darin. Ein weiteres Merkmal ist das *Subjektivierungsmerkmal*. Dabei erfüllen Modelle „ihre Repräsentations- oder Ersetzungsfunktion immer nur für bestimmte Subjekte unter Einschränkung auf bestimmte gedankliche oder tatsächliche Operationen und innerhalb bestimmter Zeitspannen“ (ebd., S.186). Zum Beispiel wählt eine Lehrperson, je nach Thema, unterschiedliche Teilchenmodelle aus, um den jeweiligen Unterrichtsinhalt bestmöglich zu veranschaulichen. (ebd.)

Der *Erkenntnisprozess*, der eng mit dem Modellbegriff einhergeht, kann mithilfe verschiedener Schemata erklärt werden. Steinbuch stellt das Original oder einen realen Sachverhalt an den Anfang des Prozesses. Dieser Sachverhalt wird nun in einem abstrakten *Denkmodell* abgebildet. Es werden nicht alle Eigenschaften des Originals berücksichtigt, nur die für den Betrachter wichtigen Dinge werden in das Denkmodell übernommen. Hinzu kommen zusätzliche Informationen, schon vorhandenes Wissen, wie bereits bekannte chemische oder physikalische Gesetze. Dieses komplexe Denkmodell

wird nun in einem konkreten Modell, einem *Anschauungsmodell*, dargestellt (Barke et al., 2015). In diesem Anschauungsmodell finden sich nun aber auch „*irrelevante Zutaten*“ (ebd., S.188). Zum Beispiel werden verschiedene Atome in verschiedenen Farben dargestellt oder Moleküle werden mithilfe von Stäben konstruiert. Der Ablauf vom Original, über das Denkmodell bis hin zum Anschauungsmodell muss nicht zwangsläufig eingehalten werden. Wohl kann auch zuerst ein konkretes Modell betrachtet werden und dann ein Denkmodell entstehen. (ebd.)

Ein zweites Schema zur Betrachtung des Erkenntnisprozesses bei der Anwendung von Modellen wurde von Kircher formuliert, das *M-O-S-Schema*. Es besteht aus dem Modell M, dem Objekt O und Subjekt oder Schüler/in S. Das Subjekt hat eine Frage bezüglich des Objekts. Da diese Frage allerdings nicht direkt aus der Betrachtung des Objekts zu beantworten ist, kann ein Modell untersucht werden, um die jeweilige Antwort zu finden. Wichtig hierbei ist, dass das Modell nicht alle Eigenschaften des Objekts abbilden kann, so genannte *Verkürzungsmerkmale* nach Stachowiak. Wiederum hat das Modell Eigenschaften, wie Farbe und Material, die irrelevant für das entsprechende Objekt sind, die *irrelevanten Zutaten* nach Steinbuch. (Saborowski, 2000)

Werden Modelle im Chemieunterricht eingesetzt, so haben sie häufig die Funktion, einen chemischen Sachverhalt zu erklären, ihn zu erkennen oder sind zum Zweck der Demonstration. Sie dienen als Denkhilfe, können bei der Hypothesenbildung unterstützen und ermöglichen den Zugang zu schwierigen Strukturen und Systemen. (Pfeifer, Lutz & Bader, 2002)

Wie bereits erwähnt, müssen in der Chemie beobachtbare Phänomene auf submikroskopischer Ebene erklärt werden. Dies geschieht im Unterricht häufig mit Hilfe verschiedener Modelle. Diese Modelle sind so abstrakt, dass sie von den Schülerinnen und Schülern (SuS) nicht selbst entworfen werden können. Sie „erhalten den Status einer Illustration zum besseren Verständnis“ (Eilks et al., 2008, S.13) und werden von der Lehrkraft meistens informativ dargelegt. Häufig wird zudem nicht genauer darauf eingegangen, dass es sich hierbei um eine modellhafte Deutung handelt. Ein solches Modell bezeichnet man als ein *Lehr-Modell*.

Eine andere Version ist das *wissenschaftliche Modell*, das verwendet wird um forschungsrelevante Phänomene zu begründen oder neue Hypothesen zu formulieren. Ist ein solches „Denkkonstrukt“ (ebd., S.13) von den Wissenschaftlern/innen akzeptiert, so spricht man von einem *Konsensmodell*. Die Lehr-Modelle dienen dazu, solche Konsensmodelle Personen zu erklären, die nicht der Gruppe der Wissenschaftler/innen angehören. Dazwischen steht das Curriculum-Modell. Durch eine didaktische Reduktion des

wissenschaftlichen Modells soll so eine Vermittlung des Inhalts an bestimmte Zielgruppen, zum Beispiel Lehrende, gewährleistet werden. (Eilks et al., 2008)

Werden Modelle in den Unterricht eingebunden, so betrachten die SuS zuerst das konkrete Modell um eine Vorstellung des jeweiligen Objekts aufzubauen. Im ersten Schritt wird ignoriert, dass die ersten Denkmodelle, die aus der Betrachtung des konkreten Modells entstehen, „irrelevanten Zutaten“ (Barke et al., 2015, S.198) mit beinhalten. Erst in einem weiteren Schritt kann eine Verfeinerung und Anpassung des Denkmodells stattfinden. (ebd.)

Für die Vermittlung chemischer Sachverhalte mithilfe von Modellen gibt es nach Johnstone drei *Repräsentationsebenen*, die in einem Dreieck angeordnet werden. An der Spitze steht das „macro level“ (ebd., S.199), es beinhaltet den phänomenologischen Aspekt, also alles was man beobachten, fühlen oder riechen kann. Eine zweite Repräsentationsebene ist die „representational“ (ebd., S.198) Ebene. Hier werden sowohl Symbole und Formeln betrachtet als auch Reaktionsgleichungen erstellt und die Stöchiometrie des chemischen Sachverhalts genauer untersucht. Zudem werden Tabellen und Graphen erstellt. Die letzte Ebene ist die „submicro“ (ebd. S.198) Ebene. Sie beinhaltet die Atome, Moleküle, Ionen und deren Strukturen. Im Chemieunterricht sollten alle drei Ebenen abgedeckt werden. Wichtig ist aber, dass der Übergang vom „macro level“ (ebd., S.199) nicht direkt auf die Ebene der Reaktionsgleichungen, Symbole und Formel erfolgt, da oft die Struktur der Atome und Moleküle die Reaktionen beeinflussen. Vor allem zu Beginn sollten experimentelle Beobachtungen zunächst mithilfe konkreter Modelle beschrieben werden, bevor chemische Symbole eingesetzt werden. Zu beachten ist, dass die Kugelform ausschließlich den Atomen vorbehalten ist. Werden zur Einführung Moleküle durch Kugelmodelle beschrieben, so kann es im weiteren Unterricht zu Fehlvorstellungen kommen. (ebd.)

3. Aspekte des Vergleichs

Die Modellbaukästen und die Computervisualisierung der Modelle soll im Verlauf dieser Arbeit unter verschiedenen Aspekten verglichen werden. Zum einen ist die Frage nach dem *Preis* häufig ein wichtiges Kriterium, wenn es um die Beschaffung von Arbeitsmaterialien an Schulen geht. Des Weiteren werden die *Bedienung* und die *Handhabung* genauer betrachtet und beschrieben. Zudem werden die verwendeten *Verkürzungsmerkmale* betrachtet bzw. aufgezeigt, was wird im Modell dargestellt und welche Aspekte werden vernachlässigt. Daran anschließend werden die jeweiligen *Einsatzgebiete* verglichen. Wo können die verschiedenen Darstellungsweisen wie eingesetzt werden, die Subjektivierungsmerkmale spielen hierbei eine zentrale Rolle. Außerdem werden

die sogenannten „*irrelevanten Zutaten*“ beschrieben und verglichen. Zuletzt werden die Modelle und Computervisualisierungen nach ihrer *Art* unterschieden. Handelt es sich um ein Lehr-Modell, ein wissenschaftliches Modell oder curriculares Modell und ist es somit für den Einsatz im Unterricht geeignet. Bei der Betrachtung von Reaktionsgleichungen soll ein besonderes Augenmerk daraufgelegt werden, ob diese überhaupt mit den verschiedenen Darstellungsweisen durchgeführt werden können und ob ein möglichst einfaches „Umstecken“ möglich ist.

4. Teilchenmodelle

Häufig in der Chemie verwendete Modelle sind Modelle zu Molekülstrukturen. Gemeinsam haben sie, dass sie trotz ihrer Abweichungen die Form der verschiedenen Strukturen und Formen der Moleküle widerspiegeln (Hammond, Osteryoung, Crawford, & Gray, 1979). Unterschiede liegen im Bereich der Verkürzungsmerkmale bzw. der Subjektivierungsmerkmale, also wozu das jeweilige Modell eingesetzt werden kann und was durch seine Hilfe verdeutlicht werden soll. Es können zusätzlich zur Form des jeweiligen Moleküls, Bindungslängen und Bindungswinkel, die experimentell in einem Labor ermittelt werden, verdeutlicht werden (Barke et al., 2015). Raumerfüllende Modelle wie das Kalottenmodell liefern zusätzlich Informationen bezüglich der Atomgröße (Hammond et al., 1979). Im Folgenden werden drei Molekülmodelle genauer beschrieben.

4.1. Kalottenmodell

Wie oben beschrieben handelt es sich beim Kalottenmodell um ein raumerfüllendes Modell. Die Atomkalotten werden mit unterschiedlichen Durchmessern dargestellt, sodass die Verhältnisse der Atomgrößen maßstabsgerecht dargestellt werden können, der Maßstab liegt bei ca. „ $1,5 \cdot 10^8$ -facher Vergrößerung“ (Pfeifer et al., 2002, S. 278). Die Bindungsachsen, also die Verbindungen zwischen den verschiedenen Atomen werden nicht durch Stäbchen oder ähnliches dargestellt, da die Kalotten ineinander übergehen. Des Weiteren geht der Valenzwinkel, also der Bindungswinkel im Molekül, der die räumliche Anordnung der Moleküle verdeutlicht, aus dem Modell hervor. (ebd.)

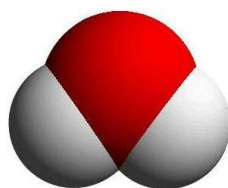


Abb. 1: Kalottenmodell des Wassermoleküls -
rot = Sauerstoff, weiß= Wasserstoff
(Glossardatenbank, 2008)

Allerdings ist hier anzumerken, dass es Modelle gibt, aus denen dieser Winkel besser abgelesen werden kann. Wie auch in anderen Modellen werden die Atome durch unterschiedliche Farben gekennzeichnet, was die Abgrenzung vereinfacht. Es gibt aber auch die Möglichkeit, die Atomkalotten mit Hilfe der jeweiligen chemischen Symbole zu kennzeichnen. (Brown, LeMay & Bursten, 2011)

4.2. Kugel-Stab-Modell

Beim Kugel-Stab-Modell werden die verschiedenen Atome in Kugeln unterschiedlichster Farbe dargestellt, wobei eine Farbe immer für dasselbe Element steht. Zusätzlich haben die Kugeln entweder kleine Löcher oder Ausbuchtungen, an denen die Stäbchen befestigt werden können. Die Stäbchen stellen beim Zusammenbauen des Moleküls die Bindungen zwischen den Atomen dar. Betrachtet man die Anzahl der Löcher der verschiedenen Kugeln, so fällt auf, dass unterschiedliche Atome verschieden viele Löcher oder Ausbuchtungen haben. Die Anzahl dieser ist abhängig von der Wertigkeit oder Valenz der verschiedenen Atome. Während der Wasserstoff zum Beispiel nur eine Bindung ausbilden kann, ist die Wertigkeit des Kohlenstoffs gleich vier (Hammond et al., 1979). Er kann sich also an vier andere Atome binden. Im Unterschied zum Kalottenmodell kann bei diesem Modell darauf verzichtet werden die Größenverhältnisse der Atome aufzuzeigen. Die Kugeln sind zwar unterschiedlich eingefärbt, jedoch kann es sein, dass sie alle gleich groß sind. (Barke et al., 2015)

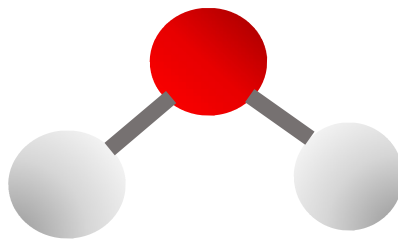


Abb. 2: Kugel-Stab-Modell des Wassermoleküls
- rot= Sauerstoff, weiß = Wasserstoff

4.3. Orbitalmodell

Das Orbitalmodell baut auf die Erkenntnisse des sogenannten Bohr'schen Schalenmodells oder auch Atommodells auf. Bei dieser Variante umkreisen die Elektronen eines Atoms den Atomkern auf verschiedenen Umlaufbahnen mit bestimmten Radien.

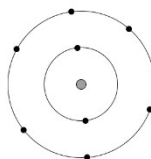


Abb. 3: Sauerstoffatom im Schalenmodell -
schwarz = Elektronen, grau = Atomkern

Des Weiteren haben die Elektronen in den verschiedenen Schalen (Umlaufbahnen) bestimmte Energien und damit einen bestimmten energetischen Zustand, sodass sie keine Energie mehr abstrahlen. Zusätzlich kann Energie „von einem Elektron nur emittiert oder absorbiert werden, wenn dieses von einem erlaubten Energiezustand in einen anderen erlaubten Energiezustand wechselt“ (Brown et al., 2011, S. 219). Wenn das Elektron also zwischen zwei Umlaufbahnen oder Schalen wechselt. (ebd.)

Im Orbitalmodell wird aufgrund der Unschärferelation nicht der genaue Aufenthaltsort und die exakte Bewegung des Elektrons im Atom angegeben. Die Unschärferelation ist darauf zurück zu führen, dass Elektronen sowohl wellenartiges als auch teilchenartiges Verhalten aufzeigen. Die Unschärferelation besagt, dass es nicht möglich ist den exakten Impuls, also die Bewegungsrichtung und den genauen Aufenthaltsort eines Elektrons im Raum zu bestimmen. In diesem Modell wird zwar die Energie der jeweiligen Elektronen beschrieben, aufgrund der Relation wird aber der Aufenthaltsort nur mit einer Wahrscheinlichkeit angegeben. Die Wahrscheinlichkeit bezieht sich auf die Orte an denen sich das Elektron mit hoher Wahrscheinlichkeit aufhält. Diese wird auch als „Elektronendichte“ (ebd., S.225) bezeichnet. In Abbildung 4 ist die Elektronendichte des Elektrons im Wasserstoffs aufgezeigt. (ebd.)

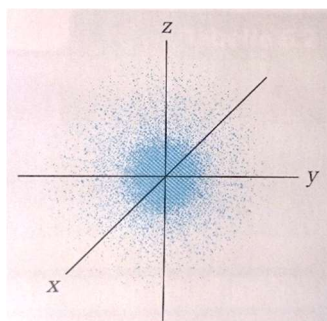


Abb. 4: Elektronendichteverteilung des Wasserstoffs – Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons (Brown et al., 2011, S.225)

Mithilfe der sogenannten Schrödingergleichung, die sowohl die teilchenartige als auch die wellenartige Eigenschaft der Elektronen mit einbezieht, können „Wellenfunktionen“ (Brown et al., 2011, S. 225) aufgestellt werden. Diese Wellenfunktionen beschreiben die Elektronen genauer. Das Quadrat der Funktion gibt nicht nur die Elektronendichte an, also den Aufenthaltsort des jeweiligen Elektrons, auch der entsprechende Energiezustand kann daraus abgelesen werden (ebd.).

Die Wellenfunktionen bilden die Grundlage des Modells und werden als „Orbitale“ (ebd., S.225) bezeichnet. Die Orbitale beschreiben die Elektronendichte im Atom und besitzen somit eine kennzeichnende Form sowie eine bestimmte Energie (ebd.). Im Unterschied

zum Bohr'schen Atommodell wird beim Orbitalmodell nicht eine Quantenzahl n zur Beschreibung der Energien bzw. Aufenthaltswahrscheinlichkeiten verwendet, sondern vier Quantenzahlen n , l , m und s beschreiben die Orbitale genauer (Wawra, Dolznig & Müller, 2010). In einem Orbital befinden sich immer zwei Elektronen mit unterschiedlichem Spinn. Außerdem können nach dem Pauli-Prinzip zwei Elektronen in einem Atom niemals in allen Quantenzahlen übereinstimmen. Die Hauptquantenzahl n beschreibt die Größe des Orbitals und ist somit gleich zu setzen mit der Nummerierung der Schale im Bohr'schen Atommodell. Die Energie eines Orbitals nimmt mit steigendem n zu, wobei n nur natürliche Zahlen annehmen kann (Brown et al., 2011). Die Nebenquantenzahl l gibt die Form des Orbitals an. Sie kann Werte vom 0 bis $n-1$ annehmen. Zu jeder Hauptquantenzahl gibt es Nebenquantenzahlen. Zur übersichtlichen Gestaltung werden den Nebenquantenzahlen null bis drei entsprechend die vier Buchstaben s , p , d und f zugeordnet (ebd.). Ist $l=0$ so handelt es sich um ein kugelförmiges Orbital. Bei $l=1$ ist die Form des Orbitals mit einer Hantel zu vergleichen. Bei den Werten zwei und drei entstehen komplexere Formen (Wawra et al., 2010). Die dritte Quantenzahl m ist die sogenannte Magnetquantenzahl. „Sie beschreibt die Ausrichtung des Orbitals im Raum“ (ebd., S.10). Da eine Kugel keine Orientierung im Raum besitzt ist hier $m=0$. Eine hantelförmige Form hingegen kann mit der Hauptachse in drei Richtungen zeigen. Zum besseren Verständnis kann man sich hier ein dreidimensionales Koordinatensystem vorstellen mit den Achsen x , y und z , wobei die Hauptachse der Hantel in alle drei Richtungen zeigen kann (ebd.) Die Magnetquantenzahl kann dabei Werte von $-l$ bis l , einschließlich null annehmen (Brown et al., 2011). Die vierte und letzte Quantenzahl ist die Spinquantenzahl s . Sie bezieht sich nur auf das Elektron und beschreibt somit nicht ausführlicher die Form des Orbitals. Es wird angenommen, dass jedes Elektron einen „Eigendrehimpuls“ (Latscha, Kazmaier & Klein, 2016, S.12) besitzt. Dieser Drehimpuls liegt in der Drehung des Elektrons um die eigene Achse begründet und wird auch „Elektronenspin“ (ebd., S.12) genannt. Es gibt nur die Werte $+\frac{1}{2}$ und $-\frac{1}{2}$ die durch die Pfeile $\uparrow$ bzw. $\downarrow$ abgebildet werden. (ebd.)

Betrachtet man nun verschiedene Atome, so hat jedes Atom unendlich viele Orbitale, die der Reihe nach mit Elektronen besetzt werden. Dies geschieht mit allen Elektronen, die im Atom vorhanden sind. In einem neutralen Atom entspricht die Anzahl der Elektronen der entsprechenden Ordnungszahl (Brown et al., 2011). Wichtig ist, dass hierbei die Orbitale mit dem geringsten Energieniveau zuerst besetzt werden. Die Hund'sche Regel besagt, dass jedes Orbital erst mit einem Elektron besetzt wird bevor eine Elektronenpaarung auftritt (ebd.). So ist zum Beispiel beim Wasserstoff ein Elektron im $1s$ -Orbital. Der Kohlenstoff besitzt insgesamt sechs Elektronen, so sind zwei davon im $1s$ -Orbital, zwei im $2s$ -Orbital und zwei im $2p$ -Orbital. Die zwei Elektronen im $2p$ -Orbital werden

nach der Hund'schen Regel besetzt. In der Abbildung 5 ist diese Verteilung graphisch dargestellt. Zu erkennen sind hier die verschiedenen Energieniveaus der Orbitale. (Wawra et al., 2010)

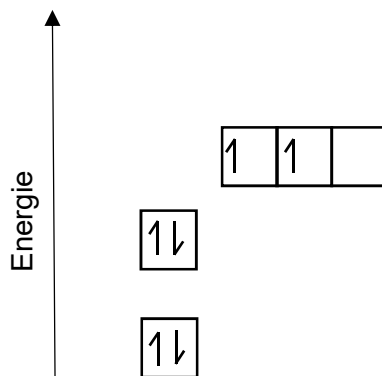


Abb. 5: Orbitalenergieniveau des Kohlenstoffatoms $1s^2, 2s^2, 2p_x, 2p_y$

Bei der Ausbildung von Bindungen spielt die sogenannte „Hybridisierung“ (Wawra et al., 2010, S. 19) eine große Rolle. Betrachtet man die in Abbildung 5 dargestellte Elektronenverteilung des Kohlenstoffs, so fällt auf, dass in dem Orbital, das die Hauptquantenzahl $n=1$ besitzt zwei Elektronen sind und in den Orbitalen mit der Hauptquantenzahl $n=2$ sind vier Elektronen. Diese vier Elektronen sind die Valenzelektronen und somit für die Bindungen von Atomen ausschlaggebend. Es fällt allerdings auf, dass sich diese vier Elektronen in unterschiedlichen Orbitalen aufhalten (ebd.). Um nun eine Bindung eingehen zu können werden die Orbitale hybridisiert. Das heißt, dass die Orbitale eines Atoms vermischt werden, wobei sich die Formen der Hybridorbitale von den Formen der vorherigen Orbitale unterscheiden. (ebd.)

Es gibt drei verschiedene Hybridorbitale bei der Betrachtung von Orbitalen und p. Das erste ist das sp -Hybridorbital. Betrachtet man zum Beispiel das Orbitaldiagramm des Berylliums (Abbildung 6), so fällt auf, dass dieses Atom im Grundzustand keine Bindungen eingehen kann, da es keine freien Elektronen gibt. (Brown et al., 2011)

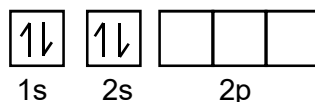


Abb. 6: Orbitaldiagramm des Berylliums - Grundzustand

Es existieren aber Verbindungen wie zum Beispiel das Berylliumfluorid in dem das Beryllium zwei Bindungen ausbilden kann. Es wird also nun ein Elektron des $2s$ -Orbitals auf das Niveau eines $2p$ -Orbital angehoben (Brown et al., 2011) (Abbildung 7). Anheben daher, da die Energie des $2p$ -Orbitals höher ist als die Energie des $2s$ -Orbitals.

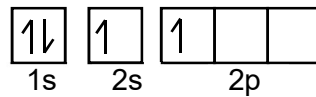


Abb. 7: Orbitaldiagramm des Berylliums
– Elektron wird angehoben

Die s- und p-Orbitale werden anschließend gemischt und werden so zu zwei sp-Orbitalen (Abbildung 8).

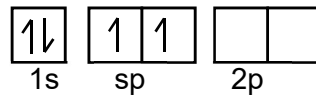


Abb. 8: Orbitaldiagramm des Berylliums –
mit sp-Hybridorbitalen

In Abbildung 9 sind die Formen der Orbitale dargestellt. Wie die p-Orbitale haben diese Orbitale auch zwei Lappen, die sich allerdings in der Größe unterscheiden, die größeren Lappen der zwei neuen Orbitale weisen in entgegengesetzte Richtungen.

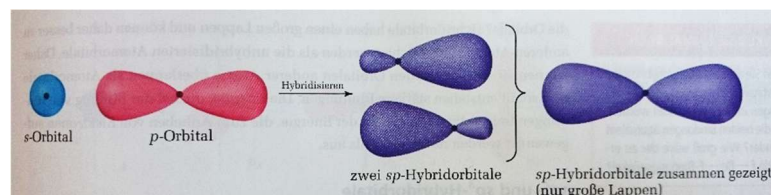


Abb. 9: Bildung von sp-Hybridorbitalen. (Brown et al., 2011, S. 249)

Die sp-Hybridorbitale können nun „Zwei-Elektronenbindungen“ mit, in diesem Fall, den zwei Fluoratomen eingehen und es entsteht das Berylliumfluorid (Abbildung 10). Durch die Hybridisierung ist es nun also möglich, dass gleichartige Bindungen entstehen. Das s- und das p-Orbital sind in ihrer Form sehr unterschiedlich und ohne eine Hybridisierung würden hierbei unterschiedliche Bindungen entstehen, die so aber nicht vorkommen. Erst durch das Mischen der Orbitale können die gleichartigen Bindungen in Molekülen erklärt werden.

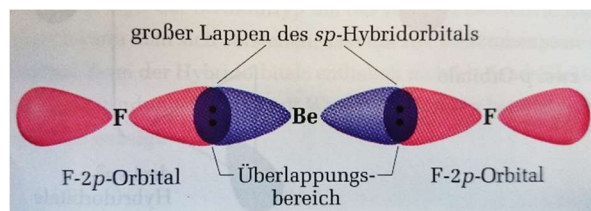


Abb. 10: Berylliumfluorid im Orbitalmodell (ebd., S. 249)

Es gibt nun die Möglichkeit mehr als nur ein 2s- und ein 2p-Orbital zu mischen. Betrachtet man zum Beispiel das Bor mit seinen fünf Elektronen (Abbildung 11). So sind zwei Elektronen im 1s-Orbital, zwei im 2s-Orbital und ein Elektron im 2p-Orbital. Nun steht man hier wieder vor einem ähnlichen Problem wie oben. Bor kann drei Bindungen ausbilden aber es steht nur ein freies Elektron zur Verfügung. Also wird nun auch wieder ein

Elektron angehoben und die Orbitale gemischt. Dabei entstehen nun sp^2 -Orbitale, da zwei 2p Orbitale beteiligt sind. (Brown et al., 2011)

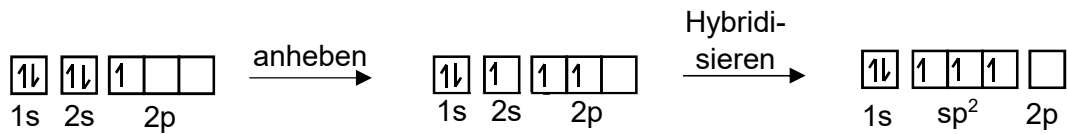


Abb. 11: Hybridisierung des Boratoms

Die drei sp^2 -Orbitale liegen in der Ebene mit einem Abstand von 120° voneinander entfernt. Diese Orbitale ermöglichen es nun drei Bindungen auszubilden. (ebd.)

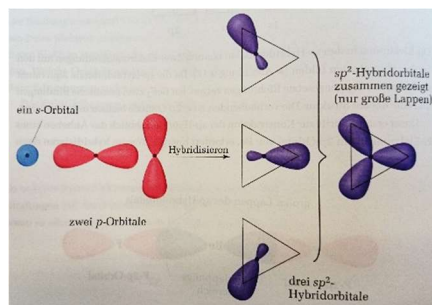


Abb. 12: Bildung von sp^2 -Hybridorbitalen (Brown et al., 2011, S. 350)

Zu beachten ist, dass das nicht besetzte 2p-Orbital nicht hybridisiert wird, aber dennoch wichtig bei der Bildung von Bindungen sein kann, insbesondere bei Doppelbindungen, die später noch genauer erläutert werden.

Betrachtet man den Kohlenstoff, so liegt nahe, dass auch eine Mischung als einem 2s-Orbital und der 2p-Orbitalen möglich ist um an einem Atom vier Bindungen eingehen zu können. Es bilden sich dann sogenannte sp^3 -Orbitale (Abbildung 13). (ebd.)

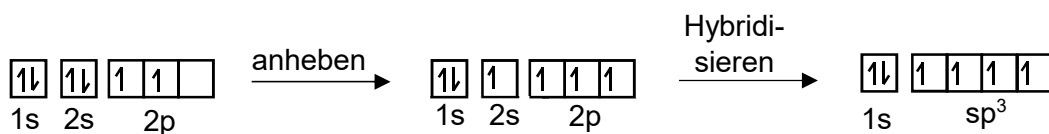


Abb. 13: Hybridisierung des Kohlenstoffatoms

Die Orbitale sind nun nicht mehr in einer Ebene, sondern die großen Lappen der sp^3 -Orbitale ergeben eine Tetraeder-Form (Abbildung 14). Hierbei sind sie immer $109,5^\circ$ voneinander entfernt. (ebd.)

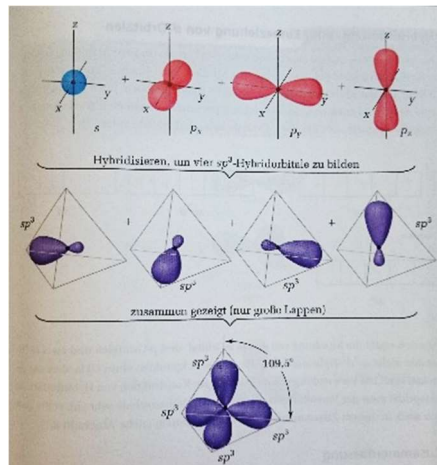


Abb. 14: Bildung von sp^3 -Hybridorbitalen.
(Brown et al., 2011, S. 351)

Bindungen bei denen „die Linie, die die Kerne verbindet, [...] durch die Mitte des Überlappungsbereiches“ (Brown et al., 2011, S. 354) führt werden als σ -Bindungen (Sigma-Bindungen) bezeichnet. Ein Beispiel ist das oben aufgeführte Berylliumfluorid, bei dem ein s- und ein sp-Orbital überlappen. Bei der Betrachtung von Mehrfachbindungen kommt eine weitere Bindungsart dazu. Es kommt hier zu einer Überlappung von zwei p-Orbitalen, die senkrecht zur Verbindungslinie der beiden Atomkerne stehen. Diese seitliche Überlappung wird als π -Bindung bezeichnet. „Eine π -Bindung ist eine kovalente Bindung, in der die Überlappungsbereiche ober- und unterhalb der Kernverbindungsachse liegen“ (ebd., S.354). Im Folgenden wird das Ethylen genauer betrachtet. Da die Bindungswinkel im Ethylen alle ca. 120° betragen liegt es nahe, dass es sich hier um sp^2 -Hybridorbitale handelt (Abbildung 15). (ebd.)

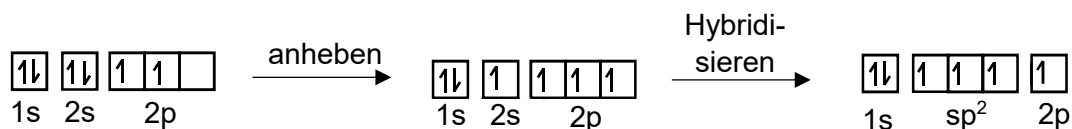


Abb. 15: Hybridisierung des Kohlenstoffatoms zu sp^2 -Orbitalen

Nun kann der Kohlenstoff σ -Bindung zum Wasserstoff und anderen Kohlenstoff ausbilden. Da der Kohlenstoff vier Valenzelektronen besitzt belegt ein Elektron das nicht hybridisierte 2p-Orbital. (Abbildung 16) Dieses Orbital ist senkrecht zur Kernverbindungsachse bzw. zur Ebene in der die sp^2 -Orbitale liegen. (ebd.)

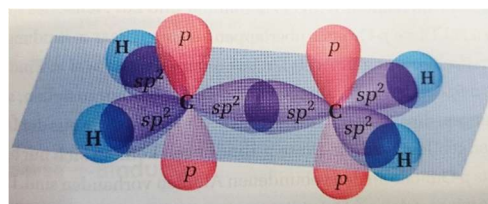


Abb. 16: Orbitale im Ethylen vor der Ausbildung der π - Bindung
(Brown et al., 2011, S. 355)

Die zwei nicht hybridisierten 2p-Orbitale können sich nun seitlich überlappen und bilden somit die π -Bindung aus. Die Elektronendichte ist über und unterhalb der C-C σ -Bindung konzentriert (Abbildung 17). (ebd.)

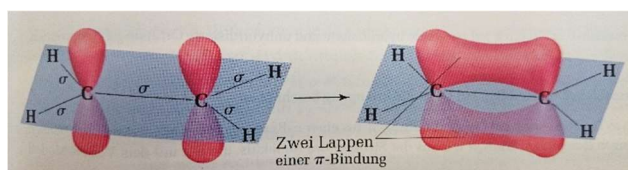


Abb. 17: Ausbildung der π -Bindung im Ethylen (Brown et al., 2011, S. 355)

Eine Einfachbindung besteht in den meisten Fällen aus einer σ -Bindung, eine Doppelbindung aus einer σ -Bindung und einer π -Bindung und eine Dreifachbindung aus einer σ -Bindung und zwei π -Bindungen. (ebd.)

5. Computer[visualisierung] im Chemieunterricht

Wie in den vorherigen Kapiteln beschrieben, gibt es eine Vielzahl verschiedener Teilchenmodelle, die unterschiedliche Schwerpunkte abdecken. Im Unterricht reicht es häufig nicht aus nur ein Modell zu besprechen, je nach Thema ist eine andere Betrachtung der Teilchenebene notwendig. Wird ein neues, differenziertes Modell eingeführt, so kommt es häufig dazu, dass die SuS ihre bisherige Vorstellung als falsch ansehen und mit dieser auch nicht weitergearbeitet wird. Bei der Betrachtung und Beschreibung chemischer Vorgänge ist es allerdings unabdingbar verschiedene Modelle nebeneinander zu betrachten um eine Vorstellung der Vorgänge zu erhalten. Der Übergang vom einen zum anderen Modell und das parallele Hantieren mit verschiedenen Modellvorstellungen kann durch den Einsatz eines Computers verbessert werden. „Aufgrund der raschen Entwicklung im Bereich der graphischeren Simulation ist man heute in der Lage, mit durchschnittlich leistungsstarken Rechnern submikroskopische Strukturen und Vorgänge anschaulich zu modellieren“ (Saborowski, 2000, S. 15)

Die Umwandlung einer Idee, einer Vorstellung in ein Bild wird als Visualisierung bezeichnet. Oft wird der Begriff der Visualisierung gleich gesetzt mit dem Begriff der Computervisualisierung. Es handelt sich also um die „optische Aufbereitung binärer Daten in Form von Bildern oder Animationen durch sogenannte „bildgebende Verfahren““ (Saborowski, 2000, S. 74). Im Besonderen sind zwei Vorteile zu nennen, die die Aufbereitung von Lernstoff durch die Computervisualisierung hervorbringen. (ebd.)

Zum einen wird der *visuelle Lerntyp* unterstützt und zum anderen besteht eine Notwendigkeit darin „*ganzheitliche Analyseverfahren*“ (ebd., S.74) einzuführen. Der Computer ermöglicht den Zugang zu komplexen Zusammenhängen, da große Datenmengen visuell darstellbar sind. Die Möglichkeit einer graphischen Darstellung komplexer Systeme

und Vorgänge ist gerade für den naturwissenschaftlichen Unterricht eine große Hilfe. Wie bereits oben beschrieben ist insbesondere das Molecular Modelling in der Chemie von großer Bedeutung. (ebd)

Der Einsatz von Computern im Unterricht fordert einerseits einen gewissen Anteil an Instruktion und Lenkung, andererseits bietet eine multimediale Lernumgebung Offenheit und Komplexität. Um einen erfolgreichen Unterricht zu gestalten muss darauf geachtet werden, dass diese Komplexität und Offenheit die SuS nicht kognitiv überlastet. Auch beim Einsatz von Animationen muss gewährleistet sein, dass diese nicht den eigentlich zu lernenden Inhalt überlagern. Eine gute Mischung aus Anleitung und Offenheit, schlicht-strukturierter Informationen und abwechslungsreicher Darstellung ist ein wichtiger Bestandteil beim Einsatz neuer Medien im Unterricht. Zuzüglich müssen auch immer das Vorwissen und das Alter mit in Betracht gezogen werden. (Eilks et al., 2004)

Der Einsatz des Computers im Chemieunterricht ist nicht darauf beschränkt, dass SuS mithilfe einer Lernsoftware ihr bisheriges Wissen festigen oder neue Informationen aufnehmen und verarbeiten. Viel länger schon wird der Computer dazu eingesetzt Messwerte zu erfassen. Mit dem Computer können im experimentellen Chemieunterricht die Messwerte ausgewertet oder das Experiment gesteuert werden. Des Weiteren ist es möglich, mit Simulationssoftware, Experimente theoretisch durchzuführen und dabei immer wieder verschiedene Parameter zu verändern. In kurzer Zeit können so eine Vielzahl an Versuchen durchgeführt werden und der Einfluss der Parameter aufs Ergebnis beobachtet. Auch die Anwendung von Office-Programmen kann in den Chemieunterricht mit einfließen. Präsentationen von Ergebnissen können schnell, einfach und übersichtlich gestaltet werden oder als Hilfsmittel auch zur Erstellung von Mind- oder Concept-Maps können diese Programme genutzt werden. (ebd.)

Ebenfalls kann das Internet eine wichtige Quelle sein um an Informationen zu gelangen, die in der Chemie von großer Bedeutung sind. Stoffdatenbanken, Industrie oder Umweltverbände geben auf dieser Plattform verschiedenste Informationen preis. Das „Distance Learning“ (ebd., S.124) bzw. das „Open Distance Learning“ (ebd., S. 125) erfordert allerdings ein hohes Maß an Selbstkontrolle und Disziplin. Es handelt sich hierbei um eine Art Fernstudium, bei dem die SuS vorgegebene Themen selbstständig bearbeiten und erforschen. Bei der „offenen“ Form können die SuS weiterhin die Inhalte und den Zeitpunkt an dem sie arbeiten selbst wählen und auch den Zeitpunkt der Selbstdiagnose. Diese Einsatzmöglichkeit des Computers im Chemieunterricht wird kaum genutzt, da hier insbesondere die Frage der Motivation und der Angemessenheit im Vordergrund stehen sollte. (ebd.)

Eine weitere Einsatzmöglichkeit ist das sogenannte „Molecular Modelling“ (ebd., S.123). „Unter Molecular Modelling versteht man das computergestützte Modellieren von Strukturen, Wechselwirkungen und Dynamik von Molekülen“ (Pfeifer et al., 2002, S.328). Es können Konformationen und Wechselwirkungen ebenso wie Konstitutionen untersucht werden. Diese Bereiche sind für den Chemieunterricht von nur geringer Relevanz. Dennoch kann eine solche Software dazu eingesetzt werden, den räumlichen Aufbau von Molekülen zu betrachten oder die Isomerie und die Chiralität verschiedener Stoffe zu untersuchen. Ebenso ist es möglich, Reaktionsmechanismen zu visualisieren. Gerade bei der Reaktion eines Nucleophils kann es hilfreich sein die Elektronendichte – das Orbitalmodell – zu betrachten. (Eilks, 2004)

6. Online Modelle ChiLe

ChiLe – Chemie interaktiv lernen ist ein, von der Abteilung Didaktik der Chemie der Carl von Ossietzky-Universität Oldenburg, initiiertes Projekt, das sich mit dem Einsatz von Computern im Chemieunterricht auseinandersetzt. Vorrangig wird an der Entwicklung von interaktiven und multimedialen Elementen wie Animationen und Moleküldarstellungen gearbeitet. Außerdem wird der Einsatz von Computern im Chemieunterricht gefördert durch das Angebot von Fortbildungen und Weiterbildungen für Lehrerinnen und Lehrer. (ChiLe, o.J.)

Auf der Website stehen verschiedene Lerninhalte zur Verfügung. Es gibt nicht nur 3D-Animationen von Molekülen, auch gibt es Aufgaben zum Beispiel zur Elektrochemie, die von den SuS selbstständig bearbeitet werden können. Dieses Format ist mit einer Lernsoftware zu vergleichen. Zusätzlich stehen auch gesamte Lerneinheiten online zur Verfügung. Durch eine sogenannte „Lerntour“ (ebd) können die SuS zum Beispiel den Bleiakku oder das Wirken von freien Radikalen selbst entdecken. Ebenso stehen auf der Website 2D- verschiedene andere Reaktionen zur Verfügung.

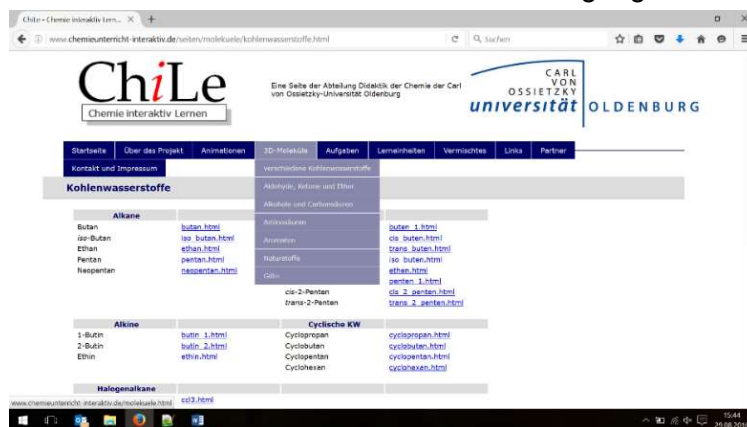


Abb. 18: ChiLe-Chemie interaktiv Lernen, Projekt zur Etablierung des Computers im Chemieunterricht (ChiLe, o.J.)

Alle Inhalte der Website, die Aufgaben, Lerninhalte und Animationen sind direkt verfügbar, können also im Browserfenster geöffnet werden. Zusätzlich stehen sie als Downloads zur Verfügung. Nach dem Herunterladen ist allerdings eine Internetverbindung notwendig.

Um die Animationen von ChiLe nutzen zu können benötigt man einen Computer. Ein bestimmter Browser ist dafür nicht erforderlich. Die Nutzung der Inhalte ist kostenlos und ohne Anmeldung möglich. Um die 3D-Animationen der Moleküle betrachten zu können ist ein Adobe Shockwave Player erforderlich. Für die Darstellung der Reaktionen ist keine weitere Installation nötig. Für die 3D-Animation muss allerdings ein Plug-In installiert werden. (ebd.)

6.1. Moleküle

Die Moleküle sind bereits vorgegeben und werden so von den SuS nicht zusammengebaut. Unter dem Menüpunkt „3D-Moleküle“ (ebd.) sind verschiedene Kohlenwasserstoffe, Aldehyde, Ketone, Ether, Alkohole, Carbonsäuren, Aminosäuren, Aromaten, Naturstoffe und Gifte aufgeführt.

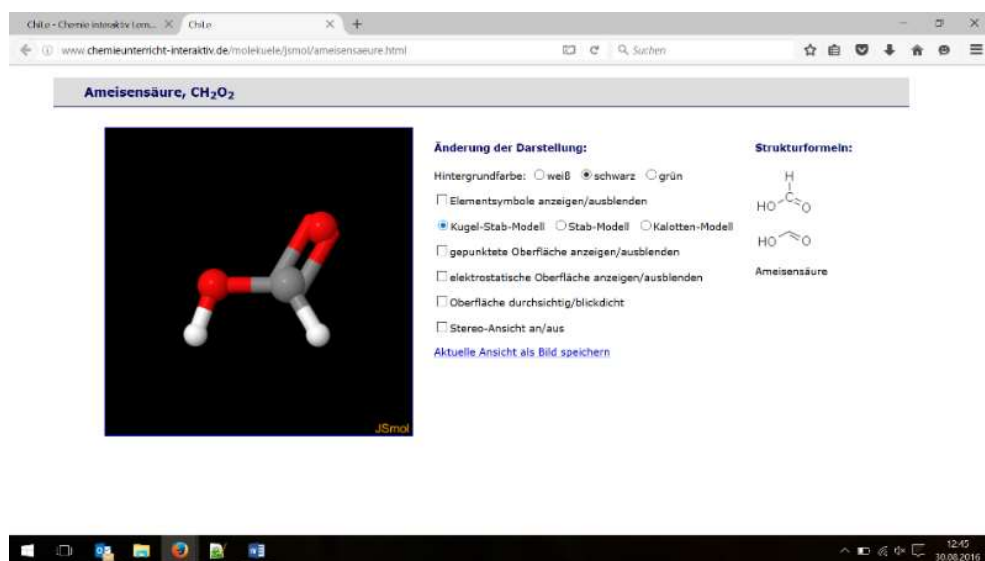


Abb. 19: ChiLe – 3D-Animationen der Ameisensäure (ChiLe, o.J.)

Die Animationsmöglichkeiten werden im Folgenden beispielhaft an der Ameisensäure (HCOOH) genauer erklärt. Die 3D-Animationen können mit der Maus des Computers so gedreht werden, dass der Anwender die Modelle von allen Seiten betrachten kann. Die Darstellung der Animation kann vom SuS selbst verändert werden. In Abbildung 19 ist die Benutzeroberfläche zu sehen. Das Molekül wird in einem Kasten dargestellt, daneben können verschiedene Darstellungsweisen ausgewählt werden und am rechten Rand ist die Strukturformel in zwei Schreibweisen aufgezeigt, darunter ist nochmals der Name zu finden.

Zuerst kann man die Hintergrundfarbe auswählen, weiß, schwarz oder grün. Der Wasserstoff wird beispielsweise in Weiß abgebildet, eine Änderung der Hintergrundfarbe kann somit zu einem besseren Kontrast führen. In den Abbildungen 20 und 21 wird der Unterschied aufgezeigt.

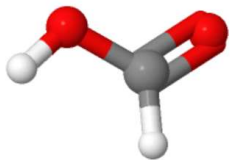


Abb. 20: 3D-Molekül der Ameisensäure mit weißem Hintergrund (ChiLe, o.J.)

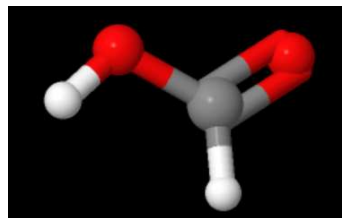


Abb. 21: 3D-Molekül der Ameisensäure mit schwarzem Hintergrund (ChiLe, o.J.)

Dann besteht die Möglichkeit die Elementensymbole anzuzeigen. Da der Sauerstoff in der Farbe Rot dargestellt wird erscheint ein rotes O neben dem Atommodell. Die SuS können zwischen drei Molekülmodellen wählen. Das Stab-Modell, das Kalottenmodell und das Kugel-Stab-Modell stehen zur Auswahl. In Abbildung 21 ist das Kugel-Stab-Modell zu sehen. Abbildung 22 zeigt das Stabmodell mit Elementensymbolen und Abbildung 23 zeigt das Kalottenmodell.

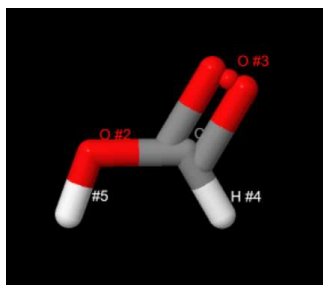


Abb. 22: 3D-Stab-Modell der Ameisensäure, mit Elementensymbolen (ChiLe, o.J.)

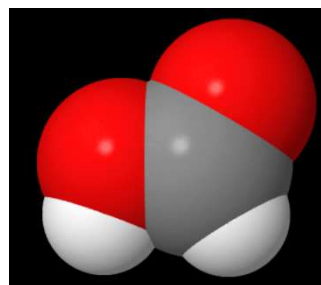


Abb. 23: 3D-Kalottenmodell der Ameisensäure (ChiLe, o.J.)

Wählt man zum Beispiel das Kugel-Stab-Modell so kann durch die Darstellung der gepunkteten Oberfläche die Größe der Moleküle angezeigt werden und gleichzeitig die Bindungen zwischen den Atomen betrachtet werden. Wie in Abbildung 24 zu sehen ist, werden auch die Punkte in den entsprechenden Farben der Atommodelle dargestellt.

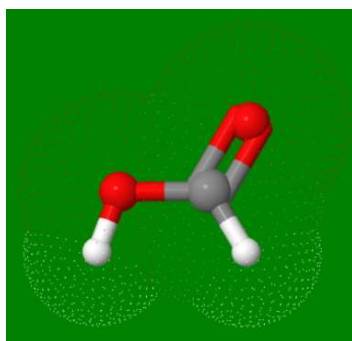


Abb. 24: 3D-Kugel-Stab-Modell der Ameisensäure, mit gepunkteter Oberfläche (ChiLe, o.J.)

Eine weitere Funktion, die zur Verfügung steht, ist die elektrostatische Oberfläche. Eine wichtige Rolle spielt hier die Elektronegativität eines Atoms, das im Molekül gebunden ist.

In Abbildung 25 ist die elektrostatische Oberfläche der Ameisensäure aufgezeigt. Die Funktion „Oberfläche durchsichtig“ (ChiLe, o.J.) ermöglicht, dass die Struktur des Moleküls betrachtet werden kann. In Rot wird der negative Teil des Moleküls und in Blau der positive Teil dargestellt. Im grünen Bereich ist das Molekül neutral.

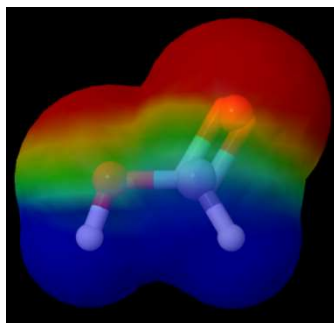


Abb. 25: 3D-Kugel-Stab-Modell der Ameisensäure, mit elektrostatischer Oberfläche – rot = negativ, grün = neutral, blau = positiv (ChiLe, o.J.)

6.2. Reaktionen

Wie bereits oben beschrieben stehen auf der Website animierte Reaktionen zur Verfügung. Diese Animationen sind in 2D, die Moleküle werden also nicht in Modellen dargestellt, sondern die Animation zeigt anhand der Strukturformeln die Reaktion auf. Verschiedene Reaktionen werden so an einem Beispiel Schritt für Schritt aufgezeigt. Es handelt sich hierbei um Reaktionen der Organischen Chemie wie zum Beispiel die E1- oder E2-Eliminierung. Auch wird die Veresterung und die Verseifung in einer allgemeinen Reaktionsgleichung animiert. Die SuS können die Animation immer stoppen und sich die Vorgänge genauer ansehen, des Weiteren ist es möglich, einen Schritt zurück zu gehen, sollte etwas unklar sein. Die Animation kann an jeder Stelle angehalten werden. Ist ein Schritt zu Ende, so stoppt sie. Die SuS können dann den Vorgang wiederholen oder den weiteren Verlauf anschauen. Auch kann das Tempo dem/der Zuschauer/in angepasst werden. Bei manchen Reaktionen wird der Reaktionstyp durch einen kurzen Einführungstext erklärt. Zusätzlich stehen weitere Informationen zur abgebildeten Reaktion unterhalb der Animation zur Verfügung. Wissenswertes über bestimmte Zwischenprodukte können durch das Klicken auf ein „i“ (ChiLe, o.J.) abgerufen werden.

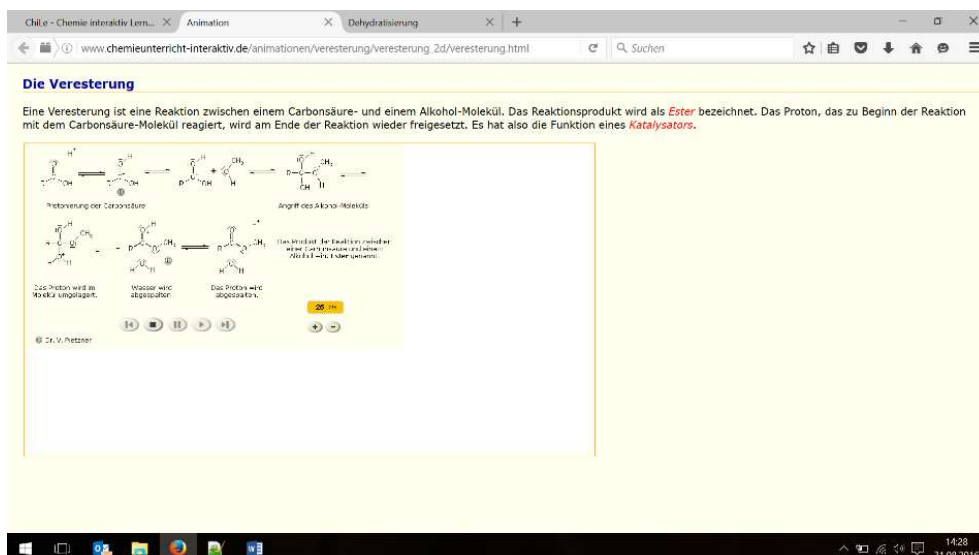


Abb. 26: ChiLe – 2D-Animationen der Veresterung (ChiLe, o.J.)

Die 2D-Animation einer Reaktion wird im Folgendem am Beispiel der Dehydratisierung des 3-Pentanol aufgeführt. Das 3-Pentanol ist ein Alkohol. Die Abspaltung von Wasser gelingt somit am besten wenn Säure und Wärme zugeführt werden. (Wollrab, 2014)

Zu Beginn wird nur das jeweilige Edukt aufgeführt (Abbildung 27). Durch Drücken der Play-Taste erscheint dann der nächste Reaktionsschritt. Zusätzlich zu dem Edukt wird hier noch ein Wasserstoffatom durch H^+ dargestellt. Dieses Proton stellt die für die Reaktion notwendige Säure dar. Elektronenübergänge werden durch einen roten Pfeil dargestellt. In Abbildung 28 ist also zu sehen, dass ein freies Elektronenpaar des Sauerstoffs zum positiv geladenen Proton übergeht.

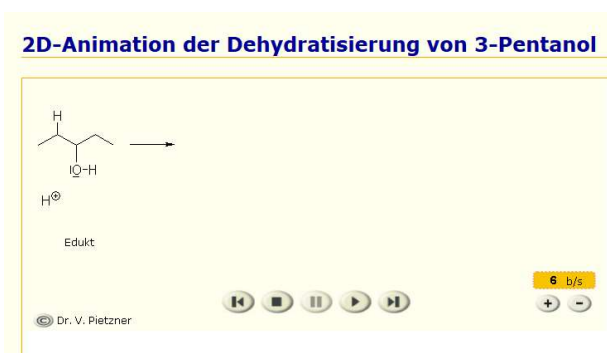


Abb. 27: Dehydratisierung von 3-Pentanol – Startbild (ChiLe, o.J.)

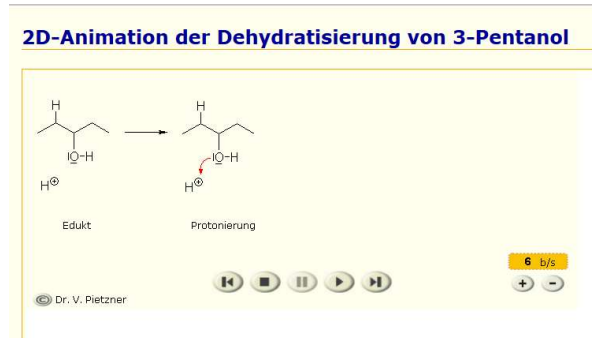


Abb. 28: Dehydratisierung von 3-Pentanol – roter Pfeil signalisiert den Elektronenübergang (ChiLe, o.J.)

Das „ $\oplus$ “ am Proton verblasst und gleichzeitig erscheint es dann am positiv geladenen Sauerstoff, sodass die Ladungsverschiebung deutlich aufgezeigt wird. Das Edukt, 3-Pentanol ist somit protoniert. (Abbildung 29).

2D-Animation der Dehydratisierung von 3-Pentanol

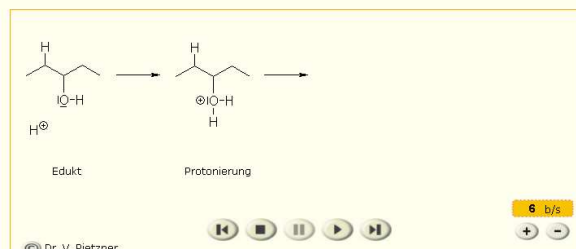


Abb. 29: Dehydratisierung von 3-Pentanol – Ladungsverschiebung (ChiLe, o.J.)

Auch im nächsten Schritt, der Bildung des Carbenium-Ions wird der Elektronenübergang mit einem roten Pfeil gekennzeichnet (Abbildung 30) und die positive Ladung wird verschoben. Die Abspaltung des Wassermoleküls ist deutlich in dieser Darstellung zu sehen (Abbildung 31).

2D-Animation der Dehydratisierung von 3-Pentanol

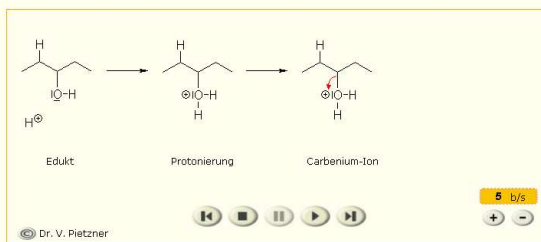


Abb. 30: Dehydratisierung von 3-Pentanol – Elektronenübergang am protonierten 3-Pentanol (ChiLe, o.J.)

2D-Animation der Dehydratisierung von 3-Pentanol

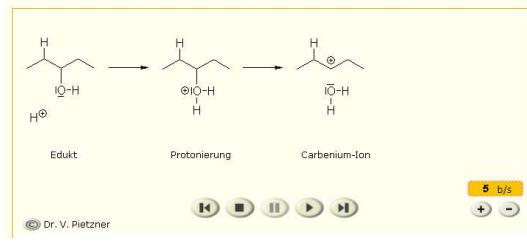


Abb. 31: Dehydratisierung von 3-Pentanol – Ladungsverschiebung am protonierten 3-Pentanol (ChiLe, o.J.)

Im letzten Schritt ist schlussendlich noch die Ausbildung der Doppelbindung (Abbildung 32) und die Abspaltung des Protons (Abbildung 33) vom Carbeniumion aufgezeigt. Auch hier wird die Übertragung des Elektrons wieder mit einem roten Pfeil sowie die Ladungsverschiebung aufgezeigt. In einem Carbeniumion liegt ein Kohlenstoffatom vor, das drei Bindungen ausbildet und positiv geladen ist. (Wollrab, 2014)

2D-Animation der Dehydratisierung von 3-Pentanol

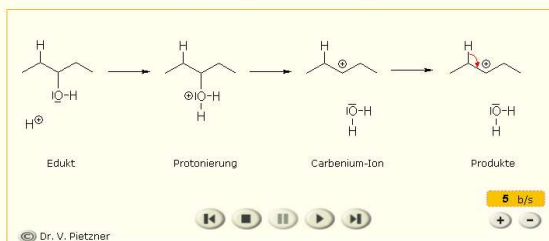


Abb. 32: Dehydratisierung von 3-Pentanol – Elektronenübergang am Carbeniumion (ChiLe, o.J.)

2D-Animation der Dehydratisierung von 3-Pentanol

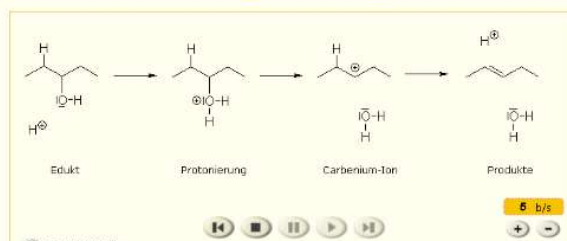


Abb. 33: Dehydratisierung von 3-Pentanol – Abspaltung des Protons (ChiLe, o.J.)

7. Modelle zum Anfassen

Im Folgenden werden zwei Molekülbaukästen genauer betrachtet. Zum einen wird ein Baukasten beschrieben, mit welchem Kugel-Stab-Modelle zusammengebaut werden können. Zum Anden wird ein Molekülbaukasten aufgezeigt, der Moleküle im Orbitalmodell darstellt. Bei den Modellen zu Molekülen und den Reaktionsmechanismen werden Beispiele aus den verschiedenen Anleitungen bzw. Lehrerheften entnommen.

7.1. Molekülbaukasten – Kugel-Stab-Modell

Nachfolgend wird der Molekülbaukasten von Cornelsen Experimenta genauer beschrieben. Mit Hilfe dieses Baukastens können, laut Anleitung, verschiedene Moleküle im Kugel-Stab-Modell zusammengebaut werden. Mit dem Molekülbaukasten 1 können aliphatische Verbindungen dargestellt werden (CorEx, o.J.a). „Organische Verbindungen mit geraden oder verzweigten Kohlenstoffketten“ (Lexikon der Biologie, 1999) werden als aliphatische Verbindung bezeichnet.

Tabelle 1: Materialliste der Molekülbaukästen 1 und 2 (CorEx, o.J.b)

Bauteile/ Atommodelle	Form	Farbe	Wertigkeit
Molekülbaukasten 1			
Verbindungsstück	Hohlzylinder	grau	
Wasserstoff (H)	Kugel	weis	einwertig
Sauerstoff (O)	Kugel	rot	zweiwertig
Chlor (Cl)	Kugel	grün	einwertig
Stickstoff (N)	Kugel	blau	dreiwertig
Kohlenstoff (C)	Kugel	schwarz	vierwertig
Molekülbaukasten 2			
Verbindungsstück	Hohlzylinder	grau	
Benzolring	Sechseck	schwarz	
Universalbausteine	Kugel	grau	einwertig
Schwefel (S)	Kugel	gelb	zweiwertig/ sechswertig
Sauerstoff (O)	Kugel	rot	zweiwertig
Stickstoff (N)	Kugel	blau	dreiwertig/ fünfwertig
Kohlenstoff (C)	Kugel	schwarz	vierwertig
Phosphor (P)	Kugel	violett	fünfwertig

Der Molekülbaukasten 2 dient zur Erweiterung und muss deshalb immer zusammen mit dem ersten eingesetzt werden. Stehen beide Baukästen zur Verfügung, können laut Be-

schreibung die verschiedensten Verbindungen aus der organischen Chemie zusammengebaut werden. Der Molekülbaukasten 2 mit enthaltenem Benzolring soll ermöglichen, aromatische Kohlenwasserstoffe darzustellen. (CorEx, o.J.b)

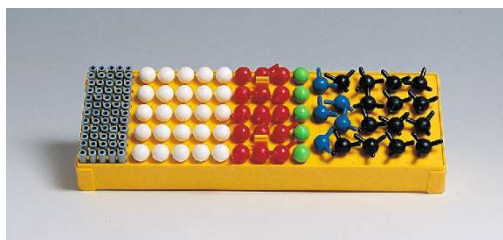


Abb. 34: Molekülbaukasten 1 (CorEx, o.J.a)

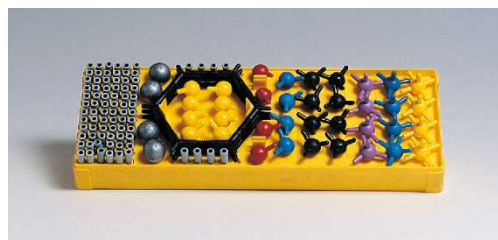


Abb. 35: Molekülbaukasten 2 (CorEx, o.J.b)

Auf den einzelnen Atommodellen sind die verschiedenen Symbole der Atome eingeprägt, sodass die SuS die Bauteile verwenden können ohne die Farbe jedes Atommodells auswendig wissen zu müssen.

Beim Kauf der Molekülbaukästen erhält man sowohl eine Schüleranleitung als auch ein Lehrerheft. Nach einer kurzen Einleitung werden in der Schüleranleitung verschiedene wichtige organische Verbindung aufgezeigt. Neben der Summenformel und Strukturformel ist, wie in Abbildung 36 zu sehen, auch das fertig gebaute Molekül abgebildet. Die SuS können so das Molekül nachbauen oder weitere Verbindungen derselben Art zusammensetzen. (CorEx, 2008a)

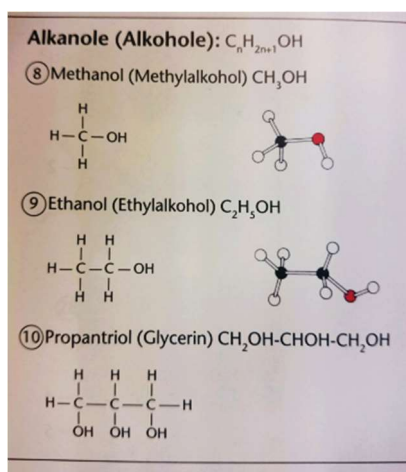


Abb. 36: Schüleranleitung zu Molekülbaukasten 1 und 2 – Auswahl wichtiger Verbindungen, Alkohole (CorEx, 2008a)

Im Lehrerheft werden zu Beginn die Vor- und Nachteile des Kugel-Stab-Modells aufgeführt und die Einsatzgebiete des Molekülbaukastens 1 und 2 werden erläutert. Funktionelle Gruppen, bei denen ein gutes räumliches Vorstellungsvermögen nötig ist, wie die Sulfon- oder Nitrogruppe, werden in diesem Heft nochmals explizit in richtiger und falscher Bauweise dargestellt (Abbildung 37). (CorEx, 2008b)

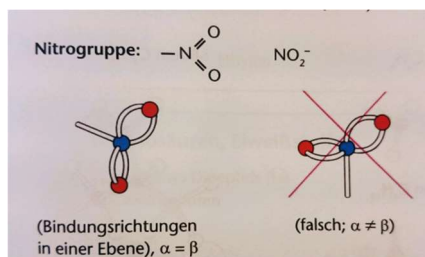


Abb. 37: Lehrerheft zu Molekülbaukasten 1 und 2 –
Darstellung von Verbindungen, Nitrogruppe (CorEx, 2008b)

Anschließend sind, wie in der Schüleranleitung, verschiedene wichtige Verbindungen als Summenformel und fertig gebautes Molekül abgebildet. Im Lehrerheft sind außerdem Verbindungen aufgezeigt, die nicht in der Anleitung für die SuS stehen. Es handelt sich hierbei meist um größere, komplexe Moleküle, wie zum Beispiel das Glycerin. Auch werden Reaktionen, die mithilfe des Molekülbaukastens „nachgebaut“ werden können, aufgezeigt. (CorEx, 2008b)

Beide Molekülbaukästen kosten jeweils 35,40 € einschl. MwSt (CorEx, o.J.a/b). Um diese Modelle im Unterricht einzusetzen braucht es keine weiteren Materialien.

7.1.1. Molekül

Wie bereits oben beschrieben steht eine Vielzahl an Atommodellen zur Verfügung. Geht man nach der Anleitung, so können hiermit verschiedene, insbesondere organische Verbindungen, zusammengebaut werden. Hierbei werden die SuS dazu aufgefordert die abgebildeten Moleküle nachzubauen. In Abbildung 38 ist beispielhaft ein Modell des Methanols abgebildet. Die freien Zapfen an der Kugel bedeuten, dass an dieser Stelle ein Elektron fehlt, graue Verbindungsstücke stellen somit ein bindendes Elektronenpaar dar (CorEx, 2008b).

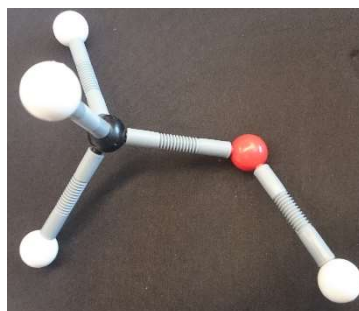


Abb. 38: CorEx Molekülbaukasten 1:
Kugel-Stab-Modell des Methanols

Doppel- und Dreifachbindungen können aufgrund der biegsamen Verbindungsstücke dargestellt werden (Abbildung 39 & 40). In Abbildung 40 ist Ethin dargestellt. Mit der Beschaffenheit der Bauteile wird die plane Struktur des Moleküls wiedergespiegelt.

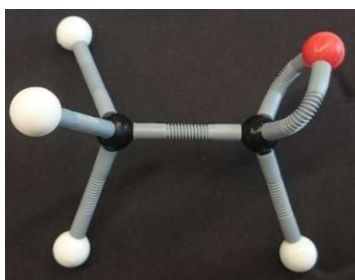


Abb. 39: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell des Ethanal



Abb. 40: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell des Ethins

Da die Verbindungsstücke zwischen den Atomen drehbar sind ermöglichen sie somit eine Betrachtung verschiedener Stereoisomere. Insbesondere Konfigurationsisomere und Konformationsisomere eines Moleküls können so genauer untersucht werden. Unter Verwendung des Molekülbaukastens 1 und 2 können diese Isomere direkt miteinander verglichen werden. In Abbildung 41 sind die beiden Konfigurationsisomere der Milchsäure dargestellt. Links ist die D-Milchsäure und rechts die L-Milchsäure abgebildet. Die unterschiedliche Verortung der OH-Gruppe wird so für die SuS offensichtlich aufgezeigt. (Helmholtz Zentrum für Umweltforschung, 2006)

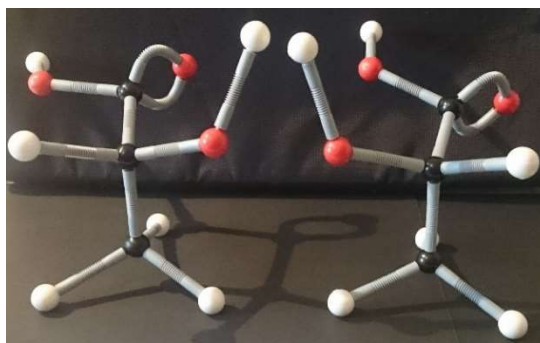


Abb. 41: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell der D-Milchsäure (links) und L-Milchsäure (rechts)

Die Konformationsisomerie ist ebenfalls eine Untergruppe der Stereoisomerie. Betrachtet man beispielsweise ein Alkan, das Ethan, so gibt es zwei besondere Formen der Konformationsisomerie. Die Atome im Molekül können gestaffelt oder ekliptisch angeordnet sein. Hierbei werden nur die Wasserstoffatome bzw. deren Atommodelle genauer untersucht. Die räumliche Anordnung der Atome spielt hierbei eine große Rolle. Bei der gestaffelten Form (Abbildung 42) stehen die Wasserstoffatome „auf Lücke“ (Latscha et

al., 2016, S. 42). Ist die Konformation ekliptisch (Abbildung 43), so sind die Wasserstoffatome direkt hintereinander angeordnet. Es gibt allerdings nicht nur diese beide Konformationen, es existieren unendlich viele andere Anordnungen. (ebd.)

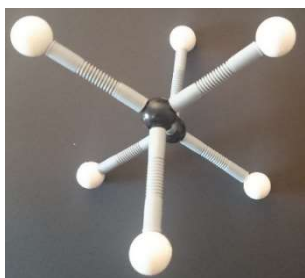


Abb. 42: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell des Ethans, Wasserstoffmodelle sind gestaffelt angeordnet

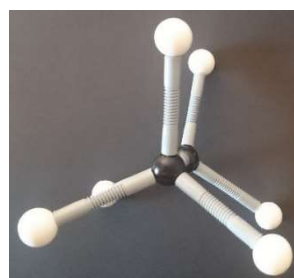


Abb. 43: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell des Ethans, Wasserstoffmodelle sind ekliptisch angeordnet

Mit dem Molekülbaukasten 2 können noch weitere, komplexere organische Verbindungen dargestellt werden. Durch das Modell des Benzolrings können viele aromatische Verbindungen zusammengebaut werden. Zwar können aromatische Kohlenwasserstoffe auch mit dem Inhalt des Molekülbaukastens 1 zusammengesetzt werden, allerdings sind hierbei die Doppelbindungen zwischen den Kohlenstoffen fest und die für diese Verbindungen typischen delokalisierten π -Elektronen (Wollrab, 2014) werden nicht berücksichtigt. In der Abbildung 44 sind beide Möglichkeiten des Benzols aufgeführt.

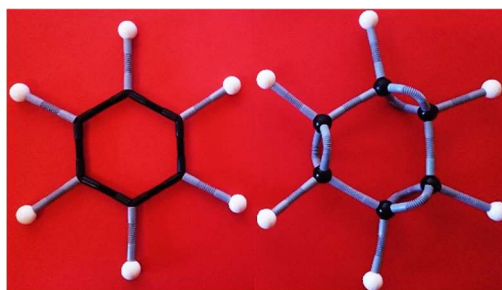


Abb. 44: CorEx Molekülbaukasten 1 (rechts) und 2 (links): Kugel-Stab-Modell des Benzols

Im Molekülbaukasten 2 sind, wie bereits oben beschrieben, sogenannte Universalbausteine. Sie sind einwertig, grau und etwas größer als die anderen Kugeln bzw. Atome. Sie können nicht nur dazu verwendet werden Atome darzustellen, die nicht im Baukasten enthalten sind, wie zum Beispiel Natrium oder Fluor. Ebenso können sie dazu eingesetzt werden, Reste in Verbindungen darzustellen. Werden zum Beispiel im Unterricht funktionelle Gruppen behandelt, besteht die Möglichkeit eine allgemeine Form aufzuzeigen. Die Aufmerksamkeit der SuS wird somit ganz auf den Aufbau der funktionellen Gruppe gerichtet. In der Abbildung 45 sind zwei funktionelle Gruppen aufgezeigt, deren

Struktur mithilfe der Molekülbaukästen verglichen werden kann. Links ist ein Aldehyd dargestellt. Rechts ist ein sogenanntes Keton abgebildet. Der graue Universalbaustein steht für einen beliebigen Alkylrest. Dieser Rest entsteht aus einem Alkan, wenn ein Wasserstoff weggenommen wird. (Wollrab, 2014)

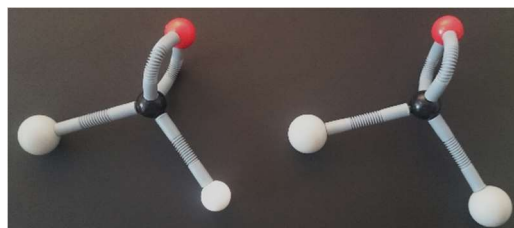


Abb. 45: CorEx Molekülbaukasten 1: Kugel-Stab-Modell funktioneller Gruppen – links = Aldehyd, rechts = Keton

7.1.2. Reaktionen

Stehen beide Molekülbaukästen zur Verfügung, so können viele verschiedene, organische Reaktionen aufgezeigt werden. Im Folgenden wird dafür die Substitution am Benzolring exemplarisch durchgeführt. Im Anschluss wird die elektrophile Substitution durch Salpetersäure am Benzolring aufgezeigt.

An aromatischen Verbindungen laufen häufig elektrophile Reaktionen ab, aufgrund der delokalisierten π -Bindung. Der Benzolring wird von einem Elektrophil, in diesem Fall Salpetersäure, angegriffen. Dieses elektrophile Molekül greift „elektronenreiche“ (ebd.) Moleküle an und löst so eine elektrophile Reaktion aus (ebd.). In Abbildung 46 sind die beiden Edukte, das Benzol und die Salpetersäure im Kugel-Stab-Modell dargestellt.

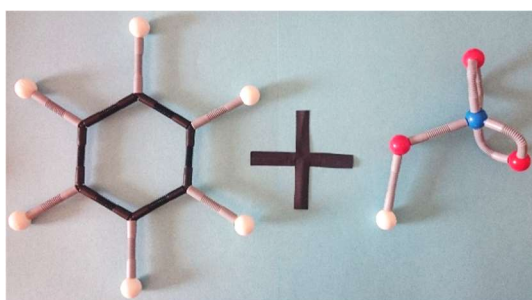


Abb. 46: CorEx Molekülbaukasten 1 & 2: Elektrophile Substitution am Benzolring mit Salpetersäure – Edukte

Im nächsten Reaktionsschritt geht das Elektrophil mit einem Kohlenstoff des Benzolrings eine σ -Bindung ein, unter Bildung eines Carbenium-Ions. Die positive Ladung des Kohlenstoffs im Ion ist delokalisiert, und es entsteht ein σ -Komplex (ebd.). In Abbildung 47 sind die mesomeren Grenzstrukturen des σ -Komplexes aufgezeigt. Das E steht in diesem Beispiel für die Salpetersäure.

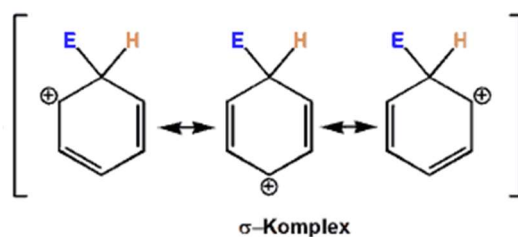


Abb. 47: CorEx Molekülbaukasten 1 & 2: Mesomere Grenzstrukturen des σ -Komplexes bei einer elektrophilen Substitution am Benzolring

Der Komplex stabilisiert sich, wenn ein Wasserstoffatom mithilfe einer Base abgespalten oder ein anderes Atom oder ganze Atomgruppen (Lexikon der Chemie, 1998c). Bei der Reaktion von Benzol mit Salpetersäure wird das Proton unter Bildung von Wasser durch das Hydroxidion, das von der Salpetersäure kommt, abgespalten. In Abbildung 48 sind die beiden Edukte, das Nitrobenzol und das Wasser im Kugel-Stab-Modell dargestellt.

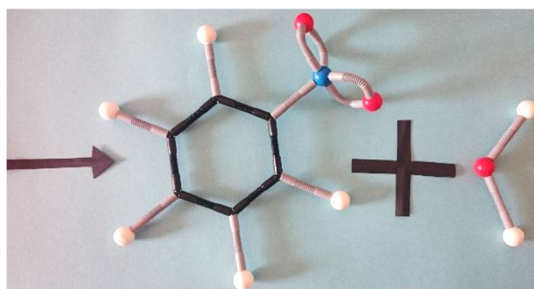


Abb. 48: CorEx Molekülbaukasten 1 & 2: Elektrophile Substitution am Benzolring mit Salpetersäure – Produkte (Nitrobenzol & Wasser) im Kugel-Stab-Modell

7.2. Molekülbaukasten – Orbitalmodell

In diesem Kapitel wird ein Molekülbaukasten beschrieben, der Moleküle im Orbitalmodell darstellt. Der Orbitalmodellbaukasten groß von ZEPTER besteht aus zwei Aufbewahrungskästen. Mit Hilfe dieses Molekülbaukastens lassen sich, laut Anleitung, Modelle der Orbitaltheorie zusammenbauen. Es ist nicht nur möglich, den Grundzustand eines Atoms aufzuzeigen, auch können Doppel- und Dreifachbindungen zusammengesteckt werden. Des Weiteren eignet sich der Baukasten dazu die Protonierung und Hybridisierung aufzuzeigen. Außerdem bietet dieser Molekülbaukasten die Möglichkeit der charakteristischen Darstellung von s-, p- und d-Orbitalen. Aufgrund der Größe der Bauteile und der leuchtenden Farben sind die Modelle auch aus der Entfernung gut erkennbar. Alle Bauteile geben modellhaft, wie in Kapitel 4.3. erklärt, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen an. (Conatex Lernsysteme, o.J.)

In den Aufbewahrungskästen finden sich gelbe Keulen, die eine C-H σ -Bindung darstellen sollen. Ebenso sind rote, größere Keulen vorhanden, die Elektronenwolken abbilden

sollen, Es handelt sich hierbei um die Darstellung von nicht bindenden Elektronenpaare eines Atoms. Zur Veranschaulichung der Hybridisierung befinden sich ebenfalls geschrumpfte Keulen bzw. Orbitale im Baukasten. Es gibt Atommodelle zu Wasserstoff- (weiß), Stickstoff – (blau), Sauerstoff- (rot) und verschiedene Modelle des Kohlenstoffatoms, sowie C-C σ -Bindungen. Die Kohlenstoffatommodelle unterscheiden sich zum einen in der Anzahl ihrer Löcher. Ebenso sind die Winkel zwischen diesen Löchern unterschiedlich. So gibt es zum Beispiel Atommodelle des Kohlenstoffs mit insgesamt fünf Löchern, wobei zwischen diesen drei Mal ein Winkel von 120° gemessen werden kann und zwei Mal ein Winkel von 90° . In Tabelle 2 sind alle Modelle des Kohlenstoffatoms aufgelistet.

Tabelle 2: Eigenschaften der Kohlenstoffatommodelle (Conatex Lernsysteme, o.J)

Anzahl der vorhandenen Kohlenstoffatommodelle	Anzahl der Löcher	Winkel
5	5	3 x 120° und 2 x 90°
6	6	6 x 90°
1	8	6 x 60° und 2 x 90°
9	8	8 x 109°

Um weitere σ -Bindungen aufzuzeigen sind Steckverbindungen im Molekülbaukasten. Diese Steckverbindungen werden eingesetzt, wenn σ -Bindungen aufgezeigt werden sollen, für die es kein spezielles Bauteil gibt. Es handelt sich hierbei um einfache gerade Stangen aus Metall. Die sogenannten „Bananen“ (ebd.) werden beim Zusammenbauen einer π -Bindung benötigt. Der Name leitet sich aus der Form und Farbe ab. Es handelt sich hierbei um gelbe, gebogene Bauteile, die an den Enden zusammenlaufen. Auch gibt es Modelle, die Protonen darstellen. Diese ermöglichen es, laut Anleitung, die Protonierung bestimmter Verbindungen aufzuzeigen. Vervollständigend ist noch ein dz²-Ring im Molekülbaukasten enthalten. (ebd.)

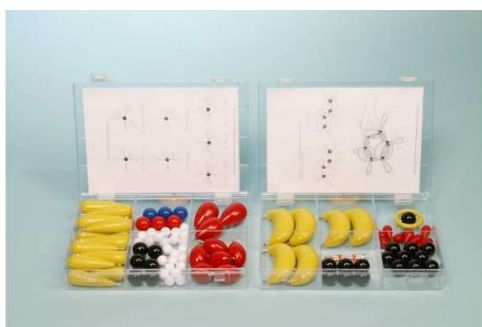


Abb. 49: ZEPTER Orbitalbaukasten (Conatex Lernsysteme, o.J)

Dieser Molekülbaukasten enthält ebenfalls eine Anleitung. Sie zeigt nicht nur Moleküle auf. Hier wird zum Beispiel auch die Hybridisierung eines Kohlenstoffatoms (Abbildung 50) Stück für Stück erklärt. Sowohl Orbitalmodelle sind beispielhaft abgedruckt als auch ein Orbitaldiagramm, das zum einen die steigende Energie der Orbitale verdeutlicht und zum anderen aufzeigt, welche Orbitale mit wie vielen Elektronen besetzt sind.

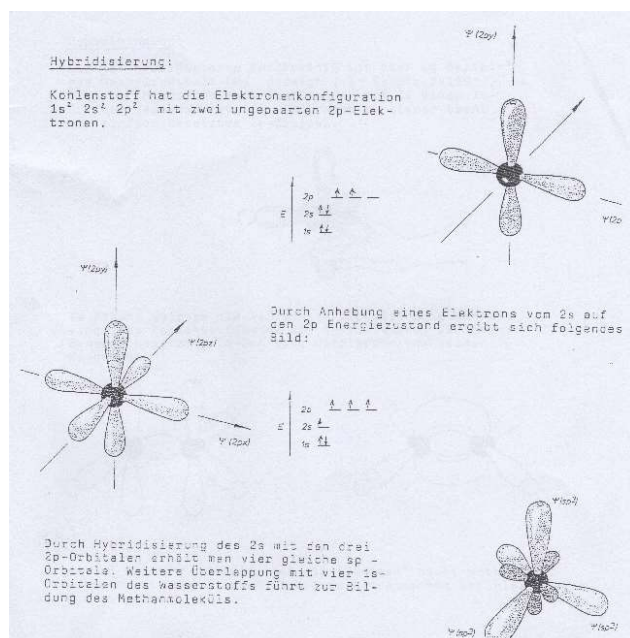


Abb. 50: Foto der Anleitung - ZEPTER Orbitalbaukasten (Zepter Orbitalbaukasten)

Auch wird die Ausbildung von Zwei- und Dreifachbindungen sowie die Protonierung in der Anleitung aufgeführt. Dieser Orbitalmodellbaukasten kostet ca. 470,00 € (Conatex Lernsysteme, o.J.). Zum Einsatz im Unterricht wird kein weiteres Material benötigt.

7.2.1. Moleküle und Atome

Wie in Kapitel 4.3 beschrieben kommt es bei der Hybridisierung zu einer Vermischung der Orbitale. Im Grundzustand des Kohlenstoffs sind die 1s- und 2s- Orbitale voll besetzt und im 2p-Orbital befinden sich 2 Elektronen (Brown et al., 2011). Die schwarze Kugel in Abbildung 51 zeigt das 2s-Orbital des Kohlenstoffs. Die zwei gelben Keulen die mit Elektronen besetzten 2p-Orbitale.



Abb. 51: ZEPTER Orbitalbaukasten: Kohlenstoffatom im Grundzustand

Nun wird ein Elektron des 2s-Orbitals angehoben und das dritte 2p-Orbital somit mit einem Elektron besetzt (ebd.). In Abbildung 52 ist das daran zu erkennen, dass auch das letzte 2p-Orbital durch die gelben Keulen dargestellt wird.

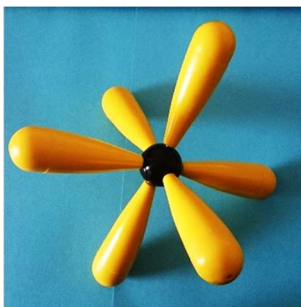


Abb. 52: ZEPTER Orbitalbaukasten:
Kohlenstoffatom im angeregten Zustand

Nun kommt es zur Mischung der 2s- und 2p-Orbitale und es entstehen sp^3 -Orbitale (ebd.). In Abbildung 53 ist das Kohlenstoffatom mit seinen vier sp^3 -Orbitalen dargestellt. Die Orbitale bestehen aus einer größeren Keule (gelb) und einer kleineren Keule (rot).



Abb. 53: ZEPTER Orbitalbaukasten: Hybridisiertes Kohlenstoffatom mit sp^3 -Orbitalen

Mit diesem Orbitalmodellbaukasten sollen sich insbesondere Kohlenwasserstoffe darstellen lassen. In Abbildung 54 ist das Ethan abgebildet. Die schwarzen Bauteile stellen auch hier den Kohlenstoff bzw. das 2s-Orbital dar. Die gelben und roten Keulen sind die sp^3 -Hybridorbitale und stellen somit die C-H σ -Bindung dar. Das rote, ovale Bauteil bildet die C-C σ -Bindung ab. Die weißen Bauteile am Ende der gelben Keulen stellen das 1s-Orbital des Wasserstoffs, dar.



Abb. 54: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ethans

Auch mit diesem Modell ist es möglich die Konformationsisomerie zu betrachten. Abbildung 55 zeigt das gestaffelte Isomer und Abbildung 56 die ekliptische Anordnung des Wasserstoffs im Ethan.

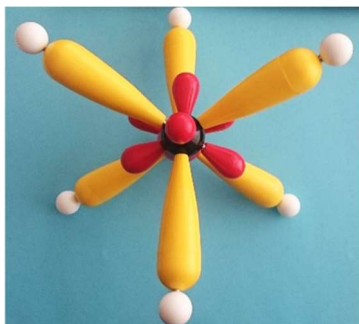


Abb. 55: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ethans (gestaffelt)

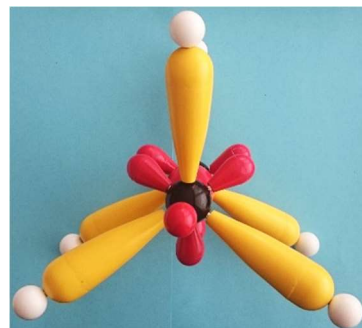


Abb. 56: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ethans (ekliptisch)

In Abbildung 57 ist das Ethen abgebildet. Eine Doppelbindung besteht aus einer σ - und einer π -Bindung (ebd.). Die σ -Bindung zwischen den Kohlenstoffbauteilen ist wie in den obigen Modellen durch das rote, ovale Bauteil dargestellt. Die π -Bindung wird durch die nicht hybridisierten p-Orbitale ausgebildet. Sie sind hier mithilfe der gelben „Bananen“ über und unterhalb der Verbindungssachse aufgezeigt.

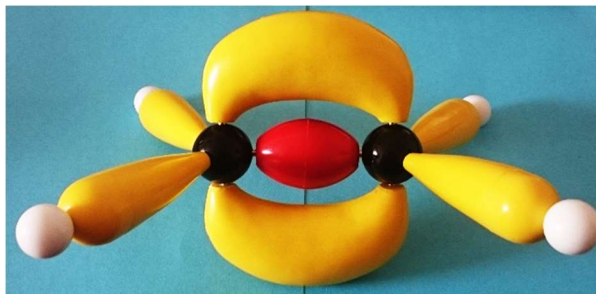


Abb. 57: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ethens

Auch ermöglicht dieser Orbitalmodellbaukasten die Darstellung von Dreifachbindungen (Abbildung 58). Die Bindungen bestehen aus einer σ - und zwei π -Bindungen. Die π -Bindungen werden hier durch zwei nicht hybridisierte p-Orbitale ausgebildet, die sich überlappen (ebd.). Die überlappenden Orbitale werden auch hier durch die „Bananen“ dargestellt.

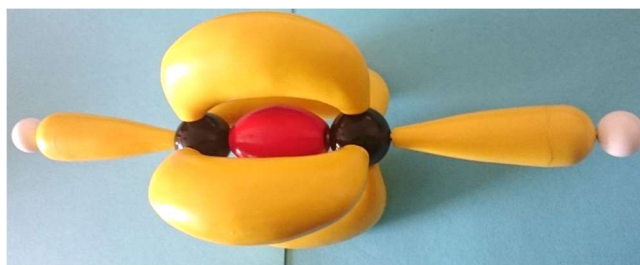


Abb. 58: ZEPTER Orbitalbaukasten: Orbitalmodell des Ethins

Weitere Bindungen, außer den C-H oder C-C σ -Bindungen werden mit Steckverbindungen aufgezeigt. In Abbildung 59 ist das Ammonium abgebildet. Die Steckverbindungen stehen hier für die σ -Bindungen zwischen dem Stickstoff und dem Wasserstoff.

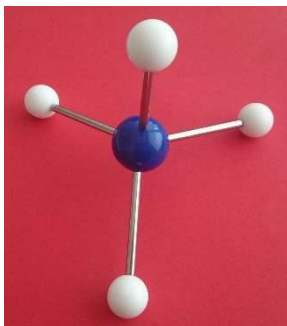


Abb. 59: ZEPTEP Orbitalbaukasten:
Orbitalmodell des Ammoniums

7.2.2. Reaktionen

Die Ausbildung einer Doppelbindung kann mit diesem Orbitalmodellbaukasten auch schrittweises aufgezeigt werden. In Abbildung 60 ist das Ethan mit den nicht hybridisierten p-Orbitalen abgebildet, gelbe Keulen ohne Wasserstoff (weiße Kugeln).

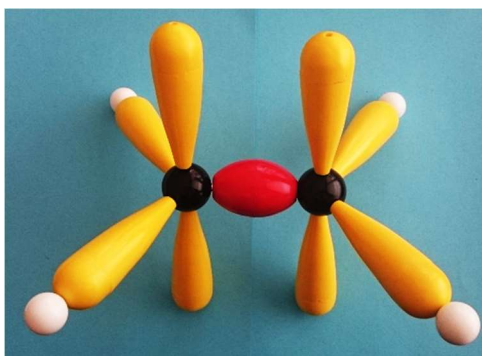


Abb. 60: ZEPTEP Orbitalbaukasten: Orbitalmodell
des Ethens mit nicht hybridisierten p-Orbitalen

Im nächsten Schritt wird dann die Doppelbindung ausgebildet und mit den „Bananen“ genauer beschrieben. Diese Bauteile beschreiben die Überlappung der nicht hybridisierten p-Orbitale des Kohlenstoffs. (Abbildung 57)

Auch die Ausbildung der Dreifachbindungen können schrittweise aufgezeigt werden. In Abbildung 61 ist ein Kohlenstoffatom mit sp-Hybridorbitalen abgebildet. Hier sind die Hybridorbitale mit den roten Keulen dargestellt. Zwei sp-hybridisierte Kohlenstoffatome verbinden sich mit einer σ -Bindung – rotes, ovales Bauteil. Die nicht hybridisierten p-Orbitale werden hier wieder durch die gelben Keulen gezeigt (Abbildung 62).

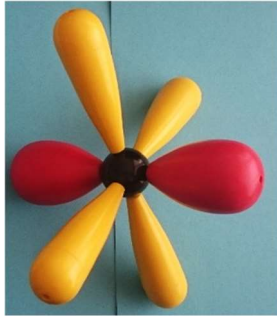


Abb. 61: ZEPTER Orbitalbaukasten:
Orbitalmodell des sp-hybridisierten
Kohlenstoffatoms

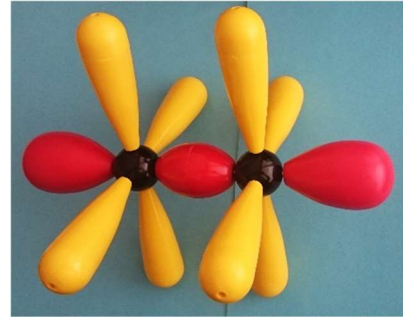


Abb. 62: ZEPTER Orbitalbaukasten:
Orbitalmodell des Ethins mit nicht
hybridisierten p-Orbitalen

Die π -Bindungen werden nun von den nicht hybridisierten p-Orbitalen ausgebildet. Mit den „Bananen“ kann dies verdeutlicht und genauer betrachtet werden (Abbildung 57).

Eine weitere Reaktion, die mithilfe des Orbitalmodellbaukastens aufgezeigt werden kann, ist die Protonierung. In Abbildung 63 ist das Wassermolekül abgebildet. Die zwei roten großen Keulen verdeutlichen die freien Elektronenpaare.



Abb. 63: ZEPTER Orbitalbaukasten:
Orbitalmodell des Wassermoleküls

Wird nun ein Wasserstoff gebunden (Abbildung 64) entsteht ein Oxoniumion (H_3O^+). Es wird durch eine weitere weiße Kugel an einem der freien Elektronenpaar – rote Keulen – dargestellt.



Abb. 64: ZEPTER Orbitalbaukasten:
Orbitalmodell des Oxoniumions

8. Vergleich – Pro und Contra der verschiedenen Molekülmodelle

Betrachtet man den *Preis*, so scheinen die online Modelle von ChiLe die erste Wahl zu sein. Dabei muss allerdings beachtet werden, dass ein Computer und eine funktionierende Internetverbindung benötigt wird. Ist alles an der Schule vorhanden, sind keine weiteren Investitionen nötig. Bei der Anschaffung der Molekülbaukästen 1 und 2 muss man mit ca. 70,00 € pro Set rechnen. Noch teurer wird es beim Orbitalmodellbaukasten. Mit ca. 470,00 € pro Baukasten ist dieser die teuerste Variante im Vergleich.

Die *Bedienung* der computervisualisierten Modelle ist einfach. Die Funktionen sind gut erklärt und können durch Klicks an- und ausgeschaltet werden. Auch ist es für den Anwendenden möglich, alle Seiten des Moleküls zu betrachten. Die Bauteile des Kugel-Stab-Molekülbaukastens lassen sich gut zusammenstecken und wieder auseinander bauen. Lediglich bei Doppel- oder Dreifachbindungen erfordert es etwas Kraft die Verbindungsstücke in die richtige Position zu biegen. Wird der Molekülbaukasten öfter verwendet geht auch das einfacher. Auch beim Orbitalmodellbaukasten lassen sich die Verbindungen gut zusammenstecken und wieder auseinander bauen. Atommodelle mit einer π -Bindung zu verbinden erfordert etwas Geschick, da sich die gelben „Bananen“-Bauteile schnell verhaken bzw. die Steckverbindungen nicht immer genau in das dafür vorgesehene Loch am Atommodell passen.

Betrachtet man die *Verkürzungsmerkmale*, so sind diese beim Molekülbaukasten von CorEx identisch mit denen in Kapitel 4.2 beschriebenen. Beim Kugel-Stab Molekülbaukasten sind alle Atome gleich groß. Hinzu kommt, dass es keine Unterscheidung zwischen π - und σ -Bindung gibt. Wird dieses Modell im Unterricht eingesetzt und das Orbitalmodell noch nicht behandelt, wissen die SuS häufig nicht, dass eine Doppel- bzw. Dreifachbindung aus unterschiedlichen Bindungstypen besteht. Auch beim Onlinemodell hat das Kugel-Stab-Modell dieselben Verkürzungsmerkmale. Wird das Molekül im Klotzenmodell angezeigt, so sind wie in Kapitel 4.1 beschrieben die Bindungsachsen nicht zu sehen. Beim Orbitalmodellbaukasten sind ebenfalls alle Atome gleich groß. Baut man die Moleküle nach der Anleitung, so kommt ergänzend hinzu, dass die gelben Keulen, die die C-H σ -Bindung darstellen sollen, auch für andere σ -Bindung genutzt werden können. Zum Beispiel stellt diese Keule im Wassermolekül eine O-H σ -Bindung dar.

In Anbetracht der *Subjektivierungsmerkmale* ist anzumerken, dass die Modelle von ChiLe zum einen dazu verwendet werden können, die Strukturen der Moleküle zu betrachten. Bindungswinkel oder die Anordnung der Atome im Molekül können genauer untersucht werden. Die Möglichkeit, die elektrostatische Oberfläche der Moleküle zu betrachten, ermöglicht es weiterhin Dipole und deren Ladungen genauer zu erforschen. Die animierten Reaktionen zeigen beispielhaft einige chemische Vorgänge auf, die dann

von den SuS auf bestimmte Reaktionen übertragen werden können. Der Kugel-Stab-Molekülbaukasten kann einerseits aliphatische Verbindungen aufzeigen. Des Weiteren ermöglicht der Molekülbaukasten 2 die Betrachtung des Benzols und einiger Derivate. Der Orbitalmodellbaukasten kann im Unterricht zur Veranschaulichung der Orbitaltheorie verwendet werden. Einige organische Verbindungen und insbesondere die Hybridisierung werden mit diesem Baukasten visualisiert.

Bei der Betrachtung der *irrelevanten Zutaten* haben alle Modelle eines gemeinsam, die Farbe der Atome dienen lediglich zum besseren Verständnis und einer guten Übersicht. Beim Original ist so etwas nicht zu finden. Beim online Modell kommt zusätzlich noch dazu, dass hinter den Symbolen der Atome ein # mit einer Zahl steht. Auch die zweifarbigen Verbindungen zwischen den Atomen werden als irrelevante Zutaten bezeichnet. Die Bauteile des Molekülbaukastens von CorEx bestehen aus Kunststoff, wobei die Verbindungsstücke biegsam sind. Im Orbitalmodellbaukasten sind die Verbindungsstücke und die Zapfen an den Bindungen bzw. an den Protonen aus Metall, alle anderen Bauteile sind aus hartem Kunststoff. Zusätzlich sind die Bauteile, die die Bindungen darstellen in unterschiedlichen Farben eingefärbt.

Sowohl das online Modell als auch der Modellbaukasten1 und 2 sind *Lehr-Modelle*. Sie eignen sich dazu, chemische Sachverhalte, Personen zu erklären, die nicht der Wissenschaft angehören. Das Orbitalmodell ist ein *Curriculum-Modell*. Es ist anspruchsvoller als ein Lehr-Modell, dennoch nicht zur Entwicklung und Überprüfung von Theorien geeignet, da die Anzahl an Atommodellen und möglichen Molekülen, die zusammengebaut werden können, sehr gering ist.

Reaktionen können mit Einschränkungen mit jeder der drei Modellarten durchgeführt werden. Bei ChiLe gibt es nur 10 Reaktionen, die betrachtet werden können. Allerdings werden hier nicht nur die Reaktionen, sondern auch alle Zwischenschritte, sowie übertragene Elektronen, aufgezeigt. Beim Molekülbaukasten von CorEx können Reaktionen durchgeführt werden. Zwischenschritte oder Grenzstrukturen, wie in 7.1.2 beschrieben sind allerdings nicht zu sehen, da keine Ladungen an den Atomen erkenntlich gemacht werden können. Der Orbitalmodellbaukasten ermöglicht es, Reaktionen von Atomen, also die Bildung bestimmter Moleküle, modellhaft aufzuzeigen, ebenso die Ausbildung von Mehrfachbindungen. Reaktionen, bei denen zwei oder mehr Moleküle beteiligt sind, sind allerdings nur sehr begrenzt möglich.

In der *Handhabung* zeigen sich verschiedene Unterschiede. Ein großer Nachteil beim computervisualisierten Modell ist, dass die SuS die Moleküle nicht selbstständig zusammenbauen können. Nur die bereits fertigen und vorgegebenen Moleküle können genauer betrachtet werden. Wird der Computer im Chemieunterricht eingesetzt, so müssen

häufig die Räume gewechselt werden, da in einem Chemieunterrichtsraum nicht genügend PCs vorhanden sind.

Das heißt, einen Versuch durchzuführen und anschließend die Reaktion oder die beteiligten Moleküle am Computermodell zu betrachten ist logistisch schwieriger. Bei einem Raumwechsel geht viel Unterrichtszeit verloren. Bei der vorgestellten Computervisualisierung lassen sich die Symbole der Elemente zwar anzeigen, dennoch gibt es hier Schwierigkeiten. Die Buchstaben sind in derselben Farbe wie die jeweiligen Atommodelle. Wird das Molekül von allen Seiten betrachtet kommt es schnell dazu, dass das Elementensymbol nicht mehr lesbar ist, weil die Buchstaben dann vor der Darstellung des Atoms oder der Bindung liegt. Animierte Reaktionen zu betrachten ist schwierig, da es zum einen nur 10 Reaktionen gibt und zum anderen die 3D-Animationen aufgrund technischer Mängel kaum zu verwenden sind. Bei Mehrfachbindungen wird nicht zwischen σ - und π -Bindungen unterschieden. Wurde die Orbitalmodelltheorie im Unterricht noch nicht besprochen stellt dies kein größeres Problem dar. Wird die Lewis-Schreibweise im Unterricht angewendet, werden Doppel- und Dreifachbindungen mit mehreren Strichen oder Stäben dargestellt (Seilnacht, o.J.). Die animierte Darstellung der Moleküle erlaubt eine Betrachtung von allen Seiten. Des Weiteren können, wie bereits erwähnt, die Symbole der Atome eingeblendet werden, sodass für die SuS deutlich wird, welche Atome im Molekül gebunden sind, ohne die Farbe jedes Atoms auswendig zu kennen. Es besteht die Möglichkeit durch einen einfachen Klick zwischen zwei Molekülmodellen zu wählen um, je nach Fragestellung, die Struktur des Stoffes genauer zu untersuchen. Zusätzlich kann durch eine gepunktete Oberfläche der Moleküle sowohl das Kugel-Stab-Molekülmodell betrachtet werden, gleichzeitig werden aber auch die Atomgrößen angezeigt. Verstehen die SuS einen Schritt der animierten Reaktion nicht, können sie durch das Vor- und Zurückspulen Schritte wiederholen oder bei Bedarf überspringen. Ein weiterer Punkt bei der Betrachtung der computeranimierten Reaktionen ist, dass hier nicht nur Moleküle „zusammengesteckt“ werden, sondern beispielsweise Elektronenübergänge und temporäre Ladungen an einem Molekül aufgezeigt werden. Ein letzter wichtiger Punkt bei der Betrachtung von computervisualisierten Modellen ist die Motivation der SuS. Der Einsatz von Computern im Unterricht kann auf die SuS motivierend wirken. Die Darstellungen im online Modell sind nicht starr, sondern dynamisch und können sich den SuS bzw. der Fragestellung anpassen und unterstützen die Interaktivität, die sich positiv auf die Motivation der SuS auswirkt (Deimann, 2002).

Beim Kugel-Stab-Molekülbaukasten ist ein großer Nachteil, dass Zwischenschritte bei Reaktionen, wie zum Beispiel Grenzstrukturen bestimmter Moleküle, nicht betrachtet werden können. Es gibt zwar für den Benzolring ein eigenes Bauteil, die Verbindungen

zwischen den Kohlenstoffen sehen allerdings gleich aus wie andere Verbindungsstücke. Sie unterscheiden sich lediglich in der Farbe. Hier besteht also die Gefahr, dass die SuS die Bindungen im Benzolring als σ -Bindungen identifizieren und die delokalisierte π -Elektronenwolke vernachlässigen. Werden Reaktionen mithilfe dieses Baukastens aufgezeigt, so können zwar Atommodelle oder Teile des Molekülmodells ausgetauscht werden, Elektronenübergänge o.ä. können allerdings nicht verdeutlicht werden. Wie beim computervisualisierten Modell werden auch hier π - und σ -Bindungen nicht unterschieden. Als weiteren negativen Punkt ist noch anzumerken, dass die Elementensymbole der Atome auf den Modellen bzw. Kugeln in der gleichen Farbe aufgedruckt sind und sie daher manchmal etwas schwierig zu lesen sind. Ein großer Vorteil dieses Molekülbaukastens liegt darin, dass eine Vielzahl organischer Verbindungen zusammengebaut werden können. Die Verortung der Zapfen an den Atommodellen führt beim Zusammenstecken der Moleküle dazu, dass deren Struktur und räumliche Anordnung genauer untersucht werden können. Die Zapfen an den Kugeln geben genau an, wie viele Elektronen an einem Molekül fehlen, um die Oktettregel zu erfüllen. Auch die Anleitung, also das Lehrer- und Schülerheft, das mit den Molekülbaukästen geliefert wird, ist ein großes Plus. Die Instruktionen und Beispiele helfen nicht nur den SuS beim Zusammenbauen verschiedener Moleküle. Auch die Lehrkräfte erhalten zum einen Tipps, wie der Baukasten eingesetzt werden kann und zum anderen werden sie auf die Fehler aufmerksam gemacht, die beim Zusammenbauen entstehen können. Der größte Vorteil dieses Molekülbaukastens besteht jedoch darin, dass die SuS selbstständig verschiedene Verbindungen zusammenbauen können.

Beim Orbitalmodellbaukasten ist die Anleitung sehr widersprüchlich. Die gelben Keulen werden als C-H σ -Bindung beschrieben. Wird aber beispielsweise das Wassermolekül nachgebaut, so werden diese auch für die Darstellung der O-H σ -Bindung verwendet. Des Weiteren werden diese Keulen zum einen dazu verwendet hybridisierte Orbitale aufzuzeigen, gleichzeitig stellen sie aber auch nicht hybridisierte p-Orbitale dar. Die SuS können diese so visuell nicht auseinanderhalten. Auch werden die roten, großen Keulen, die Elektronenwolken darstellen sollen, bei der Erklärung der Dreifachbindung verwendet um sp -Hybridorbitale darzustellen. Wird der Orbitalbaukasten eingesetzt, um die Hybridisierung des Kohlenstoffatoms nachzuvollziehen, so sind zwei verschiedene Modelle des Kohlenstoffs dafür nötig. Zu Beginn wird eine schwarze Kugel mit sechs Löchern verwendet um die nicht hybridisierten p-Orbitale, also die gelben Keulen darzustellen. Werden nun aber die Hybridorbitale dargestellt, muss eine schwarze Kugel, die den Kohlenstoff darstellen soll, verwendet werden, die acht Löcher hat. Schon die Anwesenheit verschiedener Kohlenstoffmodelle kann bei den SuS zur Verwirrung führen. Nun

muss das Modell mitten in einer Reaktion noch ausgetauscht werden. Für die Darstellung der C-C σ -Bindung und der überlappenden p-Orbitale, die dann die π -Bindung ausbilden, gibt es Bauteile. Andere Bindungen, wie zum Beispiel die C-H σ -Bindung o.ä., werden aber nicht durch Überlappungen aufgezeigt. Das s-Orbital des Wasserstoffmodells berührt lediglich das hybridisierte Orbital des Kohlenstoffs. Wird die Protonierung des Wassers nach der Anleitung durchgeführt, wird das Proton einfach auf die rote Keule aufgesteckt, die zu Beginn eigentlich als Bauteil beschrieben wird, das ein nicht bindendes Elektronenpaar darstellen soll. Beim Kauf des Orbitalmodellbaukastens wird damit geworben, dass weiterhin auch 1s- und d-Orbitale betrachtet werden können. Auch nach genauerem betrachten und der Auseinandersetzung mit der Anleitung ist das mit diesem Baukasten nicht möglich. Auf der letzten Seite der Anleitung ist der Benzolring mit den Bauteilen des Baukastens abgebildet. Ein Nachbauen ist allerdings mit einem Exemplar des Orbitalmodellbaukastens nicht möglich, da nur fünf Kohlenstoffmodelle mit fünf Löchern zur Verfügung stehen und für den Benzolring sechs Kohlenstoffe nötig sind. Auch könnte es zur Verwirrung der SuS kommen bei der Bezeichnung der weißen Kugeln mit Loch bzw. den weißen Kugeln mit Steckverbindung. Die ersten werden als Wasserstoffmodell bezeichnet und die zweite Variante wird als Protonen beschrieben. Hier könnte es dazu kommen, dass die SuS davon ausgehen, dass das zwei verschiedene Stoffe sind. Das Ethan kann wie in Kapitel 7.2.1 dargestellt mit den kompletten Hybridorbitalen dargestellt werden. Ein solches Orbital wird dabei durch eine gelbe Keule und eine geschrumpfte rote Keule dargestellt. Möchte man nun Alkane mit einer längeren Kohlenstoffkette aufzeigen, so können die Hybridorbitale nur noch durch die gelben Keulen dargestellt werden, da es nicht genügend kleine rote Keulen gibt. Die dazu gelieferte Anleitung ist nur in schwarz-weiß erhältlich. Es ist daher manchmal etwas schwer die nötigen Bauteile zu erkennen, auch weil sie von Hand o.ä. gezeichnet sind und somit nicht immer identisch aussehen. Trotz aller Nachteile werden die verschiedenen Bindungsarten bei diesem Baukasten deutlich unterschieden. Es gibt σ - und π -Bindungen. Und die Hybridisierung eines Atoms kann mit dem Orbitalmodellbaukasten genauer betrachtet werden.

9. Fazit

Alle beschriebenen Teilchenmodelle haben ihr Vor- und Nachteile. Je nach Fragestellung empfiehlt es sich, verschiedene Modelle zu verwenden. Im Vergleich wird jedoch sehr deutlich, dass der Orbitalmodellbaukasten nicht für SuS geeignet ist. Die widersprüchliche Anleitung ist nicht nur für die SuS verwirrend, auch beim Erstellen dieser

Bachelorarbeit ist schnell aufgefallen, dass es nicht einfach ist diesen Baukasten zu verstehen. Des Weiteren ist er sehr teuer und sollte, so wie er im Moment angeboten wird, nicht im Unterricht eingesetzt werden.

Sowohl der Molekülbaukasten von CorEx als auch die online Molekülmodelle hingegen sind für den Unterricht zu empfehlen. Bei der Vermittlung von chemischen Sachverhalten sind beide Modelle auf der „submicro“ Ebene einsetzbar.

Insbesondere mit dem Molekülbaukasten können experimentell beobachtete Phänomene mithilfe von Modellen beschrieben werden. Die Computermodelle besitzen weiterhin die Eigenschaft, dass es fast unbegrenzte Flexibilität in der Darstellung gibt. Verschiedene Teilchenmodelle können ausgewählt werden, Oberflächen transparent gestaltet werden und elektrostatische Eigenschaften genauer untersucht werden. Ebenso ist der Modellcharakter beim Computer nochmals höher einzustufen. Bei einem realen Modell kommt es schneller zur Verwechslung zwischen Modell und tatsächlichem Objekt als bei einem animierten Modell.

Es zeigt sich also, dass es durchaus sinnvoll ist, Computermodelle von Molekülen oder Reaktionen im Unterricht einzusetzen. Es sollte allerdings nicht darauf verzichtet werden, dass die SuS mit einem Molekülbaukasten selbstständig Moleküle zusammenbauen um eigenständig die Struktur der Moleküle zu erforschen.

In Kapitel 5 wurde das Molecular Modelling angesprochen. Anschließend an diese Arbeit wäre es interessant herauszufinden, ob dies auch eine Möglichkeit ist, Computermodelle im Chemieunterricht einzusetzen. Hierbei würde noch optimiert dazukommen, dass die Molekülmodelle selbstständig zusammengesetzt werden können. Je nach Veranlagung und Interesse kann dies allerdings eine anspruchsvolle Aufgabe für die SuS sein. Es schließt sich die Frage an, ob es Computermodelle beispielsweise zur Orbitalmodelltheorie gibt.

10. Glossar

Aldehyd	Aldehyde sind Verbindungen, die eine sogenannte Aldehydgruppe (-COH) enthalten (Lexikon der Chemie, 1998b).
Dehydratisierung	Unter einer Dehydratisierung versteht man die Abspaltung vom Wasser aus einem Molekül (Wollrab, 2014).
Elektronegativität	Die Elektronegativität gibt an wie stark ein Atom die bindenden Elektronen in einem Molekül anzieht (Brown et al, 2011).
Elektrostatisch potenzielle Energie	Die „elektrostatisch potenzielle Energie [ist die Energie], die durch die Wechselwirkungen zwischen geladenen Teilchen entsteht“ (Brown et al., 2011, S.165)
Elektrophil	Ein Elektrophil ist eine chemische Verbindung, die als „elektronenliebend“ bezeichnet werden kann (Lexikon der Chemie, 1998e).
Keton	Die funktionelle Gruppe des Ketons ist die Ketogruppe (-CO), die sehr ähnlich der Aldehydgruppe ist, weshalb auch einige gleiche Reaktionsmechanismen wie bei den Aldehyden ablaufen (Lexikon der Chemie 1998c).
Konfigurationsisomerie	Konfigurationsisomerie ist eine Untergruppe der Stereoisomerie. Die Isomere unterscheiden sich in der räumlichen Anordnung von einzelnen Atomen oder ganzen Atomgruppen. Ein Augenmerk wird hierbei zum Beispiel auf die Anordnung von Doppel- oder Dreifachbindungen gelegt (Lexikon der Chemie, 1998a).
Konformationsisomerie	Die Konformationsisomerie ist eine Untergruppe der Stereoisomerie. Hierbei werden Isomere betrachtet, die, bei gleicher Konfiguration, durch die Rotation einer C-C-Einfachbindung zustande kommen (Lexikon der Chemie, 1998a).
Oktettprinzip/ Oktettregel	Das Oktettprinzip ist das Streben jedes Atoms sich mit 8 Valenzelektronen zu umgeben. Das heißt, dass jedes Atom acht Elektronen in der äußeren Schale anstrebt (Lexikon der Chemie, 1998f).
Protonierung	Bei der Protonierung lagert sich ein Proton, ein Wasserstoffatom, an eine chemische Verbindung an (Academic, 2012).
Stereoisomere	Die Stereoisomerie beschäftigt sich mit der räumlichen Anordnung der Atome und Atomgruppen in einem Molekül (Lexikon der Chemie, 1998a).
Substitution	Bei einer Substitution werden in Verbindungen Atome oder ganze Atomgruppen durch andere Atome oder Atomgruppen ausgetauscht. Es gibt drei Arten von Substitutionen, die radikalische Substitution, die nucleophile oder die elektrophile Substitution (Lexikon der Chemie, 1998d).

11. Literatur

- Academic (2012). Protonierung. http://universal_lexikon.deacademic.com/147742/Protonierung [23.09.2016]
- Alteso (o.J.). Reaktionsmechanismen der Organik. Die Elektrophile Substitution am Aromaten. <http://www.alteso.de/reaktionsmechanismen/die-elektrophile-substitution-am-aromaten> [08.09.2016]
- Barke, H.-D., Harsch, G., Marohn, A. & Krees, S. (2015). Chemiedidaktik kompakt. Lernprozesse in Theorie und Praxis (2. Auflage). Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag.
- Brown, L.B., LeMay, H. E. & Bursten, B. E. (2011). Chemie. Studieren kompakt (10. Auflage). München: Pearson Deutschland GmbH.
- Conatex Lernsysteme (o.J.). Zepter Molekülbaukästen. https://www.conatex.com/catalog/chemie/molekulmodelle/zepter_molekulbaukasten/product-orbitalbaukasten_gross/sku-1103090#.V9aw9K0nblo [12.09.2016].
- CorEx, Cornelsen Experimenta (o.J.a). Molekülbaukasten 1. http://shop.corex.de/Sekundarstufe/Chemie/Sch%C3%BClerexperimentierger%C3%A4te/Molek%C3%BClmodelle/18474-Molek%C3%BClbaukasten_1 [12.09.2016].
- CorEx, Cornelsen Experimenta (o.J.b). Molekülbaukasten 2. http://shop.corex.de/Sekundarstufe/Chemie/Sch%C3%BClerexperimentierger%C3%A4te/Molek%C3%BClmodelle/31810-Molek%C3%BClbaukasten_2 [12.09.2016].
- CorEx, Cornelsen Experimenta (2008a). Schüleranleitung Molekülbaukasten 1 und 2. Berlin: Cornelsen Experimenta.
- CorEx, Cornelsen Experimenta (2008b). Lehrerheft. Molekülbaukasten 1 und Molekülbaukasten 2. Berlin: Cornelsen Experimenta.
- Deimann, M. (2002). Motivationale Bedingungen beim Lernen mit Neuen Medien. edoc.sub.uni-hamburg.de/informatik/volltexte/2009/53/pdf/B_239.pdf#page=61 [22.09.2016]
- Eilks, I., Flintjer, B., Krilla, B., Hartwig, M., & Wagner, W. (2004). Computer und Multimedia im Chemieunterricht heute. Einordnung aus didaktischer und lerntheoretischer Sicht. CHEMKON, 11(3), 121-126.
- Eilks, I & Bindernagel, A. (2008). Modelle und Modelldenken im Chemieunterricht. https://www.researchgate.net/publication/262976600_Modelle_und_Modelldenken_im_Chemieunterricht [16.09.2016].
- Glossardatenbank (2008). Kalottenmodell. http://mars.geographie.uni-halle.de/mlucampus/geoglossar/terme_datenblatt.php?terme=Kalottenmodell [27.08.2016].
- Hammond, G. S., Osteryoung, J., Crawford, T. H. & Gray, H. B. (1979). Modellvorstellungen in der Chemie: Eine Einführung in die allgemeine Chemie. Berlin: Walter de Gruyter & Co..
- Helmholtz Zentrum für Umweltforschung (2006). Der Milchsäure auf der Spur. <https://www.ufz.de/index.php?de=35728> [03.09.2016].
- Kultusministerkonferenz (2005). Bildungsstandards im Fach Chemie für den Mittleren Schulabschluss. Beschluss vom 16.12.2004. München, Neuwied: Wolters Kluwer Deutschland GmbH.
- Latsche, H. P., Kzmaier, U. & Klein, H. (2016). Organische Chemie. Chemie-Basiswissen II (7. Auflage). Heidelberg, Berlin: Springer Verlag.
- Lexikon der Biologie (1999). aliphatische Verbindungen. <http://www.spektrum.de/lexikon/biologie/aliphatische-verbindungen/2074> [01.09.2016].
- Lexikon der Chemie (1998a). Stereoisomerie. <http://www.spektrum.de/lexikon/chemie/stereoisomerie/8711> [02.09.2016].

- Lexikon der Chemie (1998b). Aldehyde. <http://www.spektrum.de/lexikon/chemie/aldehyde/235> [09.09.2016].
- Lexikon der Chemie (1998c). Ketone. <http://www.spektrum.de/lexikon/chemie/ketone/4866> [09.09.2016].
- Lexikon der Chemie (1998d). Substitution. <http://www.spektrum.de/lexikon/chemie/substitution/8828> [06.09.2016].
- Lexikon der Chemie (1998e). Elektrophil. <http://www.spektrum.de/lexikon/chemie/elektrophil/2865> [08.09.2016].
- Lexikon der Chemie (1998f). chemische Bindungen. <http://www.spektrum.de/lexikon/chemie/chemische-bindung/1700> [23.09.2016]
- Pfeiffe, P., Lutz, B. & Bader, H. J. (2002). Konkrete Fachdidaktik. Chemie. München, Düsseldorf, Stuttgart: Oldenbourg Schulbuchverlag GmbH.
- Saborowski, J. (2000). Computervisualisierung und Modelldenken. Konzeptionelle Grundlagen und fachdidaktische Konsequenzen für den Chemieunterricht. Köln: Jörg Saborowski Verlag.
- Seilnacht (o.J.). Chemische Zeichensprache. <http://www.seilnacht.com/Lexikon/psymbol.htm> [22.09.2016].
- Wawra, E., Dolznig, H. & Müllner, E. (2010). Chemie erleben. Anorganische, organische und analytische Chemie (2. Auflage). Wien: Facultas Verlags- und Buchhandels AG.
- Wollrab, A. (2014). Organische Chemie. Eine Einführung für Lehramts- und Nebenfachstudenten (4. Auflage). Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag.

12. Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass

- die Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel benutzt wurden,
- alle Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus anderen Quellen übernommen wurden, als solche kenntlich gemacht wurden,
- die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegt wurde.

Lüneburg, 30.09.2016

Miriam Kälber