

Chimia 46 (1992) 229–229
© Neue Schweizerische Chemische Gesellschaft
ISSN 0009–4293

EDUCARLO: Monte Carlo – Simulationen für Chemie und Physik

Peter Bützer*

Autoren: *Hanspeter Huber*, Gian Vasta, Institut für physikalische Chemie, Universität Basel Bezugsquelle für die Schweiz und das Fürstentum Liechtenstein: SFIB, Schweiz. Fachstelle für Informationstechnologien im Bildungswesen, Erlachstrasse 21, CH–3000 Bern 9.

Betriebssysteme: MACINTOSH (Apple) alle Modelle, 512 kByte, 2 bit schwarzweiss BildschirmEinstellung, und MS/PC-DOS, 200 kByte, verschiedenste Bildschirme, 3,5' Preis: Fr. 90.– inkl. Handbuch (153 Seiten) exkl. Porto und Verpackung (Schulzimmerlizenz).

Installation: keine Prozedur erforderlich, der Start ist von der Diskette oder der Harddisk direkt möglich.

EDUCARLO simuliert zufällige Vorgänge auf molekularer oder atomarer Ebene, und zwar Chromatografie, Kinetik und Gleichgewicht, *Brown'sche* Bewegung, Diffusion und Effusion, radioaktiver Zerfall und Zerfallsketten. Es ermöglicht, zu nicht beobachtbaren, statistischen Vorgängen Zugang zu erhalten, und spielerisch ein 'Gespür' für die daraus abgeleiteten Gesetzmässigkeiten zu gewinnen. Es ist ein aktives 'Molekularmikroskop' für die ausgewählten dynamischen Prozesse. Man kann bei den verschiedensten Parametern eingreifen, beobachten, und interpretieren. Das Ziel von EDUCARLO ist spielerisches Lernen.

Programmbeschreibung

Es gibt viele Simulationen, und viele dienen dazu, auf dem Bildschirm mit Phänomenen zu spielen, die man besser, eindrucksvoller und im wahrsten Sinne des Wortes begreiflicher in der Realität machen würde. Die Simulationen von EDUCARLO gehören nicht zu dieser Sorte, sie sind ein Werkzeug, ein Molekularmikroskop für dynamische Prozesse, welches Erfahrungen in einem Bereich zulässt, die sonst nicht, oder bestenfalls auf sehr abstrakter, theoretischer Ebene gemacht werden können. Das Programm beschränkt sich auf molekulare, dynamische Prozesse und ermöglicht, drei verschieden gros-

se Abbildungsmaßstäbe, wie wenn man die Objektive eines Mikroskops wechseln würde. Die kinetische Theorie der Wärme kennt die für die Empfindung wichtigen Begriffe 'kalt' und 'warm' nicht; diese Begriffe sind psychologischer oder physiologischer Natur. Die Wärmelehre kennt nur stärkere oder schwächere, chaotische Bewegungen von Teilchen. Es ist lehrreich und eindrücklich zu sehen, und unterhaltsam spielerisch zu erfahren, wie sich bei solch wirren, ungeordneten Vorgängen ein Ausschnitt eines Systems verhält.

Interpretationen können als Gesetzmässigkeiten aus diesen Modellen, aus sogenannten 'Messungen' abgeleitet werden. Bei den didaktischen Hinweisen wird kritisch auf den häufig falschen Computereinsatz in der Ausbildung hingewiesen, es wird aber auch deutlich, wo der Einsatz wirklich sinnvoll und gewinnbringend ist. Bei diesen Programmen ist das der Fall; sie erreichen die selbstgesetzten hohen Zielsetzungen einer computerunterstützten Ausbildung (CBT). Die Bedienung ist sehr einfach, auch wenn man sich in die theoretischen und die physikalisch-chemischen Begriffe einarbeiten muss. Die Programmabläufe sind zwingend, aber bei der Interpretation zeigt sich dann, dass man auch als Lehrer noch einiges dazulernen kann.

Programm-Dokumentation

Das Handbuch ist nicht nur umfangreich, es ist auch inhaltsreich. Es umfasst eine Einführung in die Monte-Carlo-Methode, ein grosses Kapitel mit didaktischen Hinweisen für Anwendung und Demonstration, sowie ein Kapitel Programmbedienung für *Macintosh* und MS-DOS. Das Kapitel: 'Der geschichtliche Hintergrund' macht deutlich, dass die drei Programme nicht zufällig auf derselben Diskette sind. Sie gehören theoretisch zusammen, haben aber auch gemeinsame, historische Wurzeln. Insbesondere diese geschichtlichen Hintergründe sind ein wahrer Genuss. Dies wäre für mich Grund genug, diese Software zu beschaffen. Gleichzeitig wird damit aber auch viel Motivation geliefert, die 'Experimente' auf dem Computer durchzuführen. Das Kapitel: 'Zufall oder Determinismus' geht

auf wissenschaftliche Grundfragen ein, um zu zeigen, dass diese Art von Modellen in vielen Fachbereichen einen wichtigen Platz haben. Ein Kapitel Literatur und eines über Fenster und Menüs vervollständigen die Dokumentation. Die Hinweise sind gut. Man hat kaum Schwierigkeiten bei der Bedienung. Für den Einsatz im Unterricht erhält man Unterstützung: Praktische, detaillierte Beispiele für den Einsatz aller Programme, als Demonstration oder als Schülerübungen.

Arbeiten mit EDUCARLO

Nach dem Start wird man durch das Programm geführt. Beim Mac muss zuerst aber noch der 2 bit Bildschirm eingestellt werden. Es sind eigentlich keine weiteren Anleitungen notwendig. Bei alten Maschinen (Mac-plus) oder 8088-Prozessoren, ist der Ablauf sehr langsam. Manchmal muss die Maustaste (Mac) lange gedrückt bleiben, bis das Fenster wieder auftaucht. Die Bilder sind anschaulich. Die Grenzen treten wohl am ehesten bei den hohen Auflösungen und langsamen Prozessoren auf, wo die sequentiellen statt die simultanen Reaktionen erkannt werden können. Das MAC-Programm ist noch besser in der Bedienung, als die MS-DOS-Version, dafür ist diese farbig. Um das zu ändern, müsste man wohl eine Windows-Version haben. Schüler haben keine Mühe, mit diesen Programmen umzugehen, bei den Interpretationen der Resultate sieht es dann schon etwas anders aus – ein deutlicher Hinweis darauf, dass EDUCARLO eine echte Lücke zu füllen hat, und es auch besser kann, als alle bisherigen Modelle und Hilfsmittel.

ANNOUNCEMENT

28. Symposium für Theoretische Chemie

Brixen (Südtirol), Italien, 25. Sept.–1. Okt. 1992

Das 28. Symposium für Theoretische Chemie wird dieses Jahr von Dr. *Franz Mark* im deutschsprachigen Teil Italiens durchgeführt. Schwerpunkte sind Oberflächenphänomene wie z.B. Chemisorption, neue Moleküle wie Fullerene und Parallelrechnen. Weitere Informationen sind erhältlich bei Dr. *Franz Mark*, Max-Planck-Institut für Strahlenchemie, Stiftstr. 34–36, D–4330 Mülheim an der Ruhr, Tel. 0049 208 304 3697, EM: mark@mpi-muelheim.mpg.dbp.de.

*Korrespondenz: Dr. P. Bützer
Chemisches Laboratorium
Kantonsschule Heerbrugg
CH–9435 Heerbrugg