



Universität Stuttgart

# Fest, flüssig, gasförmig

---

Arbeitsheft zum  
Workshop

Klassenstufe: 7 – 8

SFB  716

Sonderforschungsbereich 716 | Dynamische  
Simulation von Systemen mit großen Teilchenzahlen

## Impressum

### HERAUSGEBER

Universität Stuttgart  
Sonderforschungsbereich 716  
c/o Institut für Computerphysik  
Allmandring 3  
70569 Stuttgart

### KONZEPT, REDAKTION

Tina Barthelmes, Irene Kreitmeir, Shervin Raafatnia,  
Florian Fahrenberger

### LAYOUT

Tina Barthelmes

### BILDER

Tina Barthelmes, SFB 716  
weitere Bildnachweise auf Seite 30

---

# Fest, flüssig, gasförmig

---

Universität Stuttgart  
Sonderforschungsbereiches 716

Forschungsgebiet: „Dynamische Simulation  
von Systemen mit großen Teilchenzahlen“



# Inhalt

<b>Teilchenmodell</b> .....	7
Teilchenmodell und Stoffeigenschaften	
<b>Vom Grundaufbau der Stoffe</b> .....	7
Verhalten bei verschiedenen Temperaturen	
<b>Wenn der Schnee schmilzt und Wasser kocht</b> .....	8
Teilchenmodell der Aggregatzustände	
<b>Wie verhalten sich die Teilchen?</b> .....	9
Selbst forschen und entdecken	
<b>Wärmeausdehnung von Körpern</b> .....	13
Selbst forschen und entdecken	
<b>Kalte Luft - warme Luft</b> .....	14
<b>Zusammenhang zwischen Druck und Temperatur ...</b>	15
Schau-Experiment	
<b>Siedetemperatur und Umgebungsdruck</b> .....	15
Selbst forschen und entdecken	
<b>Eier kochen ohne Energie zu verschwenden</b> .....	16
<b>Adiabate Phänomene</b> .....	17
Ein phänomenales Paar	
<b>Druck und Temperatur</b> .....	17
Selbst forschen und entdecken	
<b>Luft erwärmen</b> .....	18
<b>Teilchensimulationen im Fokus</b> .....	19
Über die aktuelle Bedeutung	
<b>Simulationen in der Forschung</b> .....	19
Methodik von Teilchensimulationen	
<b>Materie besteht aus vielen Teilchen</b> .....	20
Teilchensimulationen zum Anfassen	
<b>Sehen, was passiert</b> .....	21

Ohne komplexe Rechner gehts nicht	
<b>Viele Teilchen – große Rechner</b> .....	<b>22</b>
Einsatzbereiche für Teilchensimulationen	
<b>Teilchensimulationen in der Praxis</b> .....	<b>23</b>
<b>Antworten zu den Fragen</b> .....	<b>25</b>
<b>Eigene Notizen</b> .....	<b>28</b>
<b>Literatur- und Bildnachweise</b> .....	<b>30</b>

# Vom Grundaufbau der Stoffe

Das Teilchenmodell ist ein einfaches, aber sehr praktisches Modell, um den Aufbau von Stoffen zu beschreiben. Daraus kann man bei ausführlicher Betrachtung viele ihrer Eigenschaften ableiten.



## Aktion

Nehme 7 gleichgroße Münzen und versuche, sie so dicht wie möglich zusammenzulegen!



? Welche Figur ergibt sich?

---



Diese Abbildung zeigt einen Schneekristall unter dem Mikroskop.

? Welche Gestalt hat der Kristall?

---

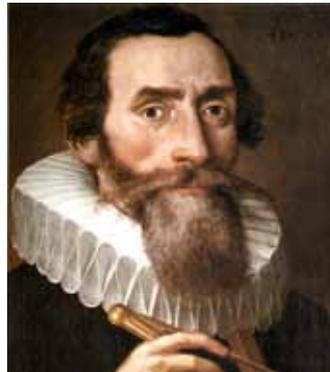


## Überleg' mal!

Wie würde dann wohl das ideale Teilchen aussehen?

Welche Konsequenzen könnte das für den Aufbau der Stoffe aus Teilchen generell haben?

## Aus der Geschichte ...



Johannes Kepler

1611 machte der berühmte Astronom Johannes Kepler seinem Freund Johann Matthäus Wacker von Wackenfels ein originelles Neujahresgeschenk. Er schrieb für ihn das Buch „Vom sechseckigen Schnee“.

Ein kurzer Auszug: „Da stets, wenn es zu schneien anfängt, die ersten Schneeteilchen die Figur von sechsstrahligen Sternen zeigen, muss es eine bestimmte Ursache dafür geben. Denn wäre es Zufall, warum fallen sie nicht fünfstrahlig oder siebenstrahlig, warum immer sechsstrahlig?“

Kepler vermutete dahinter einen Aufbau aus kleinsten Teilchen, idealerweise Kugeln. Und er entdeckte noch mehr: **Das Sechseck ist ein fundamentales Ordnungsprinzip der Natur.** Eines, das die Mathematiker bis heute beschäftigt.

# Wenn der Schnee schmilzt und Wasser kocht



## Aktion

Wir haben Gläser, die gefüllt sind mit



Luft



Salat-  
öl



Erde



Reis



Limo-  
nade



Büro-  
klammern



Jod-  
dampf



Honig



Wie könntest du die Gläser sinnvoll sortieren?

.....

.....

## Fest, flüssig, gasförmig

Es gibt feste, flüssige und gasförmige Stoffe. Wasser ist der bekannteste Stoff, von dem wir alle drei Zustandsformen gut kennen: Eis bzw. Schnee, flüssiges Wasser und Wasserdampf sind drei unterschiedliche Aggregatzustände des gleichen Stoffes Wasser.



Beschreibe, wie sich Schnee bei Sonneneinstrahlung verhält!

.....

.....

.....

.....

## Ein Blick auf die Teilchen

Die Aggregatzustände und ihre Änderungen kann man mit der Vorstellung erklären, dass Wasser aus fast unsichtbar kleinen Teilchen aufgebaut ist, zwischen denen Anziehungskräfte wirken und die sich ständig bewegen.

Die Idee vom Aufbau der Stoffe aus kleinsten Teilchen entstand lange, bevor man die Existenz von Teilchen beweisen konnte. Heute lässt sich durch Experimente sogar genau ermitteln, in welcher Weise die kleinsten Teilchen angeordnet sind.

In den Naturwissenschaften spricht man bei solchen Vorstellungen und Ideen von einem Modell. Das Teilchenmodell beschreibt den Aufbau der Stoffe aus kleinsten Teilchen.

# Wie verhalten sich die Teilchen?

In unserer Umwelt nehmen wir Körper in den drei Zuständen fest, flüssig und gasförmig wahr. Man bezeichnet diese Zustände als die drei Aggregatzustände der Materie. Im Folgenden sind die wesentlichen Eigenschaften von festen, flüssigen und gasförmigen Stoffen gegenübergestellt.



## Überleg' mal!

Die Tabelle sortiert die unterschiedlichen Eigenschaften der Teilchen eines Stoffes in den jeweiligen Aggregatzuständen.



FEST



FLÜSSIG



GASFÖRMIG

ORDNUNG DER  
TEILCHEN  
ABSTAND  
ZWISCHEN TEILCHEN  
TEILCHEN-  
BEWEGUNG  
ANZIEHUNGSKRÄFTE  
ZWISCHEN TEILCHEN

	unregelmäßig	
	Teilchen wechseln die Plätze	
		sind nicht wirksam



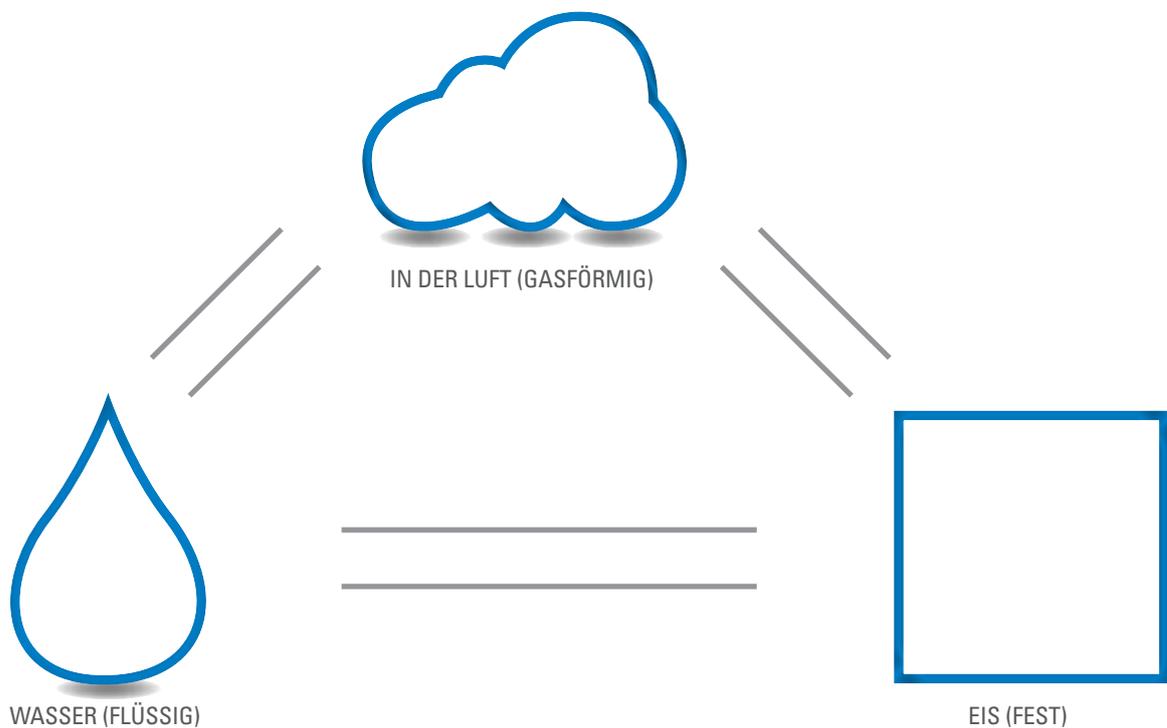
**Ergänze die fehlenden Eigenschaften in der Tabelle!**  
Nutze dabei die folgenden Begriffe:

Abstand sehr groß – regelmäßige Anordnung – sehr stark – sehr schnell, ständige Zusammenstöße – Teilchen berühren sich – Teilchen berühren sich – Teilchen schwingen auf ihren Plätzen – völlig ungeordnet – stark



Zeichne nun für jeden Aggregatzustand das Teilchenmodell ein, beschrifte die Pfeile und gebe ihnen Richtungen! Nutze dabei die folgenden Begriffe:

resublimieren – verdampfen – sublimieren – erstarren – kondensieren – schmelzen



## Schmelzen und Sieden

In der Tabelle findest du Beispiele für Schmelz- und Siedetemperaturen einiger Stoffe:

STOFF	SCHMELZTEMPERATUR IN °C	SIEDETEMPERATUR IN °C
Wasser		
Sauerstoff	-219	-183
Alkohol (Ethanol)	-117	78
Schwefel	119	444
Blei	327	1740
Eisen	1535	2750

Alle Schmelz- und Siedetemperaturen bei Normaldruck.

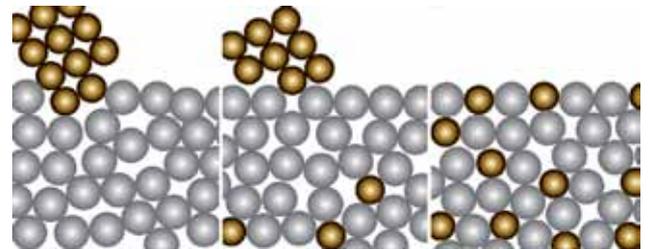


Bei Raumtemperatur ist Wasser flüssig. Bei etwa welcher Temperatur wird es gasförmig? Bei welcher Temperatur fest? Trage die entsprechenden Werte in die Tabelle links ein!



### Überleg' mal!

Diese Abbildung zeigt einen Vorgang aus unserem Alltag.



Welcher Vorgang ist dargestellt?

.....

Woran erkennst du die Aggregatzustände der beteiligten Stoffe?

.....  
.....  
.....



Welche Eigenschaften des Wassers lassen sich mit dem Teilchenmodell beschreiben, welche nicht?

.....  
.....  
.....  
.....  
.....



Warum passen sich Flüssigkeiten der Form eines Gefäßes an, massive Feststoffe aber nicht?

.....  
.....  
.....  
.....

# Zusammenfassung

Materie besteht aus kleinsten Teilchen. Der Raum zwischen den Teilchen ist absolut leer. Die Teilchen verschiedener Stoffe unterscheiden sich in ihrer Größe und ihrer Masse. Zwischen den Teilchen, die ständig in Bewegung sind, wirken Anziehungskräfte. Mit steigender Temperatur bewegen sich die Teilchen heftiger.

In Feststoffen haben die Teilchen eine bestimmte Anordnung: Sie sind dabei dicht gepackt und schwingen um ihre Plätze.

Und natürlich kann nicht nur Wasser seinen Aggregatzustand ändern. Erwärmt man festes Wachs, schmilzt es zuerst, um nach weiterem Erhitzen zu verdampfen.

Auch Metalle schmelzen, z.B. wenn mit Zinn gelötet wird. Nach dem Erkalten sind die Werkstücke dann fest miteinander verbunden.

## Stoffe bestehen aus kleinsten Teilchen,

- die alle eine unterschiedliche Größe und Masse besitzen.
- die sich ständig in Bewegung befinden.
- zwischen denen Anziehungskräfte wirken.
- die sich bei steigenden Temperaturen schneller bewegen.
- die sich beim Erstarren eines Stoffes regelmäßig anordnen.
- die beim Erreichen der Schmelztemperatur ihre Gitterplätze verlassen.
- zwischen denen leerer Raum ist.

## Die Bewegung der kleinsten Teilchen

- ist ungerichtet.
- ist temperaturabhängig.
- ist vom Druck abhängig.
- kommt im festen Aggregatzustand zum Erliegen.

# Wärmeausdehnung von Körpern



## Zauberhafte Haftgläser

Die Wärmeausdehnung von Körpern lässt sich für einen raffinierten Zaubertick benutzen. Deine Zuschauer werden staunen, wenn Gläser plötzlich wie von Geisterhand gehalten in der Luft zusammenkleben.

### Material

- 2 gleich große Gläser
- 1 Teelicht
- 1 Bogen Lösch-/Filterpapier
- Wasser, Streichhölzer, Schere

### Durchführung

Setze das Teelicht in ein Glas und zünde die Kerze an. Schneide nun das Löschpapier kreisrund aus, feuchte es an und lege es auf das Glas mit dem brennenden Teelicht.

Nun setze das andere Glas umgekehrt auf das Papier, so dass beide Glasränder bündig abschließen. Die Flamme geht nach kurzer Zeit aus. Versuche nun, das obere Glas anzuheben.

### Ergebnis

Es wird an dem anderen Glas „kleben“ bleiben, so dass du beide auf einmal hochheben kannst.

### Hintergrund

Die Flamme ist nicht sofort erstickt, sondern hat erst noch den restlichen Sauerstoff in den Gläsern verbraucht. Durch die Poren im Löschpapier kann der Sauerstoff aus dem oberen Glas nach unten dringen und verbrennen. Gleichzeitig erfolgt zwischen den beiden Gefäßen über das Löschpapier ein Austausch von Brenngasen.

Nach dem Erlöschen der Flamme kühlen die Gase ab und ziehen sich dabei zusammen. Auf diese Weise entsteht ein Unterdruck in dem Raum zwischen den Gläsern, der die beiden zusammenhält.



# Kalte Luft - warme Luft



## Plastikflaschen

Warme Luft dehnt sich aus, kalte Luft zieht sich zusammen. Möchtest du diesen Vorgang selbst beobachten? Dann probiere es mit Luft in einer Flasche!

### Material

- Leere Plastikflasche mit Schraubverschluss
- warmes Wasser aus der Leitung
- Gefrierfach, Uhr

### Durchführung

Fülle die Flasche mit warmem Wasser und warte ein wenig. Schüttele das Wasser in die Spüle. Ist die Flasche noch warm? Drehe den Schraubverschluss fest zu und lege die Flasche ins Gefrierfach. Nach etwa zwei Minuten holst du sie wieder heraus.

### Ergebnis

Die Seitenwände der Flasche sind eingedrückt.



### Hintergrund

Die Luft hat sich beim Abkühlen so stark zusammengezogen, dass die Seitenwände der Flasche nach innen eingedrückt sind!

## Zurück zur alten Flasche

Jetzt hast du mehrere Möglichkeiten, die Flasche wieder in ihre ursprüngliche Form zu bringen:

1. Warte ein wenig, bis sich die Flasche und die Luft im Inneren wieder erwärmt haben und sich ausdehnen. Dadurch wird sich die Flasche nach und nach von selbst ausbeulen.
2. Lasse warmes Wasser über die Flasche laufen. Ruckzuck ist sie wieder in ihrer alten Form.
3. Schraube den Verschluss ab. Der Unterdruck, den die kühle Luft in der Flasche erzeugt hat, wird sofort ausgeglichen – mit einem Zischen strömt warme Luft in die Flasche.



## Übrigens

Dasselbe Prinzip lässt auch einen mit heißer Luft gefüllten Benzinkanister beim schnellen Abkühlen schlagartig zusammenziehen.

Passiert so etwas sehr plötzlich und gibt es dabei einen Knall, nennt man das Implodieren.



# Siedetemperatur und Umgebungsdruck



## Himalaya-Ei

Wenn man in München mit einem genauen Thermometer die Siedetemperatur von Wasser misst, so stellt man nicht 100°C, sondern je nach Wetterlage 97 - 98°C fest. Auf einem hohen Berg wie dem Himalaya siedet das Wasser sogar schon knapp über 70°C, auf dem Mont Blanc in Frankreich zumindest bei 83°C!

Nur beim Normal-Luftdruck von 1013 hPa auf Meereshöhe, z.B. in Hamburg, ist die Siedetemperatur exakt 100°C.



## Druck und Siedetemperatur

Der Grund für die abnehmende Siedetemperatur von Wasser mit zunehmender Höhe ist offensichtlich die Abnahme des Luftdrucks.

Wird der Luftdruck über den Normaldruck erhöht, so steigt die Siedetemperatur über 100°C. Fällt der Luftdruck, so fällt auch die Siedetemperatur.



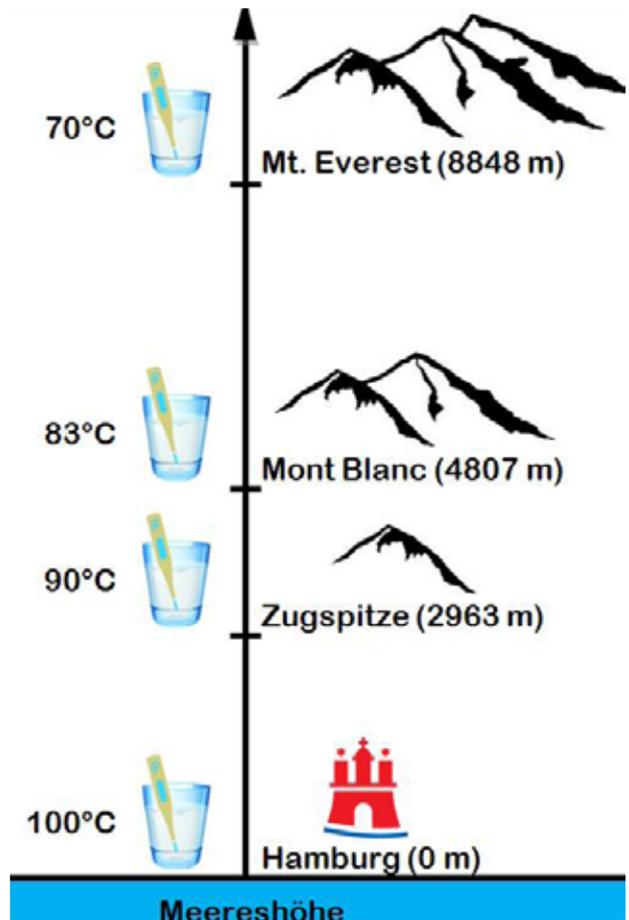
Warum werden beispielsweise Kartoffeln im Schnellkochtopf schneller gar?

.....

.....

.....

.....



# Eier kochen ohne Energie zu verschwenden



## Öko-Eier

Wie Eier mit wenig Energie gekocht werden, verrät dir dieser Versuch.

### Material

- 2 kleine, etwa gleich große Kochtöpfe mit passenden Deckeln
- 2 Eier, Wasser, Stoppuhr

### Durchführung

Gieße je einen halben Liter Wasser in jeden Topf. Damit beide Eier beim Kochen völlig bedeckt sind, kannst du sie vorher probeweise kurz in den Topf legen. Fehlt Wasser, gieße etwas nach. Achte aber darauf, dass beide Töpfe die gleiche Menge Wasser enthalten!

Stelle nun beide Töpfe auf den Herd, decke aber nur einen mit dem Deckel ab und mache beide Herdplatten an. Gleichzeitig startest du die Stoppuhr und wartest ab, in welchem Topf das Wasser zuerst kocht. Du musst auf die Geräusche achten, da du den Deckel des geschlossenen Topfes nicht anheben darfst!



Wenn das Wasser in beiden Töpfen kocht, gibst du mit einem Löffel die Eier hinein und nimmst sie nach 6 Minuten wieder heraus.



Welches Ei ist härter?

### Hintergrund

Durch die Wärme der Kochplatten geraten die Wassermoleküle in stärkere Bewegung. Dabei gelingt es einigen Molekülen an der Oberfläche, den Verband des flüssigen Wassers zu verlassen und als Wasserdampf fortzufliegen. Sie nehmen dann aber jedoch auch einen Teil der vom Herd zugeführten Energie mit.

Im offenen Topf werden sich mehr Teilchen als Dampf verflüchtigen, da sie nicht – wie im anderen der Fall – durch den Deckel daran gehindert werden. Somit ist klar, warum das Wasser im Topf mit Deckel schneller kocht. Verhindert man das „Wegfliegen“ der Wasserdampfmoleküle, verhindert man auch das „Wegfliegen“ der Energie.

**Fazit: Kochen ohne Deckel ist Energieverschwendung.**

# Druck und Temperatur



## Fahrrad-Luftpumpe

Druck und Temperatur hängen zusammen – das beweisen z.B. die ortsabhängigen Siedetemperaturen von Wasser. Ein ganz anderes Kuriosum erlebst du bei der Fahrrad-Luftpumpe.



Nimm die Luftpumpe und schiebe den Kolben mehrmals ganz langsam ein und aus. Spürst du etwas?



Nun schiebe die Luftpumpe mehrmals heftig und schnell zusammen. Wie fühlt sich das an?

## Warum ist das so?

Durch das Pumpen fließt die von uns geleistete Arbeit in das thermodynamische System Luft-Luftpumpe. Das Luftzusammendrücken nennt man in der Physik auch **Kompression**.

Da immer das physikalische Prinzip der Energieerhaltung gilt, muss die Energie aus dem Pumpvorgang irgendwo hin. Hier geht sie direkt auf die Teilchen der Luft in der Pumpe über. Diese

bewegen sich dann, durch die zugeführte Energie schneller. Wir wissen außerdem: Je schneller ein Teilchen, desto höher seine Temperatur. Überträgt man die Energie ganz langsam auf die Luft in der Pumpe, dann können die beschleunigten, wärmeren Teilchen in aller Ruhe die gewonnene Energie wieder als Wärme an die kalte Umgebung abgeben. Das System hat genug Zeit um wieder auf Zimmertemperatur abzukühlen – wir spüren praktisch nichts.

Pumpt man andererseits schnell, bleibt den Teilchen keine Zeit vor dem nächsten Pumpenhub, wieder langsam zu werden wie zu Beginn. Sie kühlen einfach nicht weit genug ab und mit jedem neuen Stoß erhalten sie noch mehr Energie. Sie werden immer schneller und ihre Temperatur steigt immer weiter. Man nennt diesen Vorgang **adiabatische Kompression**.

Sind wir mit Pumpen fertig, merken wir, wie die in die Luftmoleküle gepresste Energie schließlich von der Luftpumpenluft über die Kolbenwand an die Umgebung, z.B. unsere Hand (in Form von Wärme) abfließen kann.

Einen Prozess, bei dem keine Wärme an die Umgebung abfließt, bezeichnet man als **adiabat**. Das Gas ist dabei thermisch komplett nach außen hin isoliert. Diese Isolation erreicht man entweder, wenn man so schnell arbeitet, dass praktisch keine Wärme ausgetauscht werden kann (s. Luftpumpe) oder durch eine gute Isolation des Systems, z.B. mit einer Thermosflasche.



## Übrigens

Es geht auch umgekehrt! Wenn sich ein Gas ausdehnt und dünner wird, lässt der Druck nach und die Temperatur sinkt. Vielleicht ist dir das schon einmal aufgefallen, wenn du im Sommer eine Flasche mit kohlenstoffhaltigem Mineralwasser öffnest.

# Luft erwärmen



## Die Feuerpumpe

Eine Feuerpumpe (auch pneumatisches Feuerzeug oder Luftfeuerzeug genannt) ist ein Apparat zur Feuererzeugung. Weil sich Luft beim sehr schnellen Zusammenpressen (Komprimieren) sehr stark erhitzt, kann sie einen Zünder im Gefäß zum Glühen bringen.

Der Aufbau einer Feuerpumpe ist simpel: In einem langen, dünnen Zylinder, der am Boden verschlossen ist, wird ein Zünder gelegt. Mit Hilfe eines Stabes wird dann von oben ein luftdicht schließender Kolben nach unten gestoßen. Geschieht das sehr schnell, dann entzündet sich der Zünder durch die von der Kompression erzeugte Wärme.



## Das ist der Trick dabei!

Was dabei passiert, wenn man Luft zusammendrückt, kennt ihr vom Fahrrad. Denn wenn ihr mit der Luftpumpe heftig Luft in einen Reifen pumpt, wird die Luftpumpe warm. Dies liegt daran, dass sich Luft, die zusammengedrückt wird, erwärmt. Das ist so ähnlich wie in einem vollen Bus: Wenn ihr dort dicht an dicht steht, wird es euch ja auch schnell warm.

Im Zylinder der Feuerpumpe wird die Luft sehr stark zusammengedrückt und erwärmt sich deshalb auf eine Temperatur von weit über 200°C.



## Wissenswert

Das Prinzip der Feuerpumpe ist für Autos mit Dieselmotor wichtig. Dort wird ein Gemisch aus Diesel und Luft so schnell und heftig verdichtet, bis es zündet.

## Aus der Geschichte



1770 hat ein Monsieur DuMontier aus Frankreich das pneumatische Feuerzeug erfunden. Weil es damals in Europa aber schon bessere Methoden zur Feuererzeugung gab, wurde die Feuerpumpe hier nie so richtig berühmt.

Die Naturvölker in Nordborneo und auf den Philippinen arbeiten allerdings bis heute mit einer Feuerpumpe aus Bambusrohr.

# Simulationen in der Forschung

Simulationen der Wirklichkeit kennt man heute aus Computerspielen oder aus dem Kino. Warum und wann sie für die Wissenschaft von Bedeutung sind, erfährst du auf den folgenden Seiten.

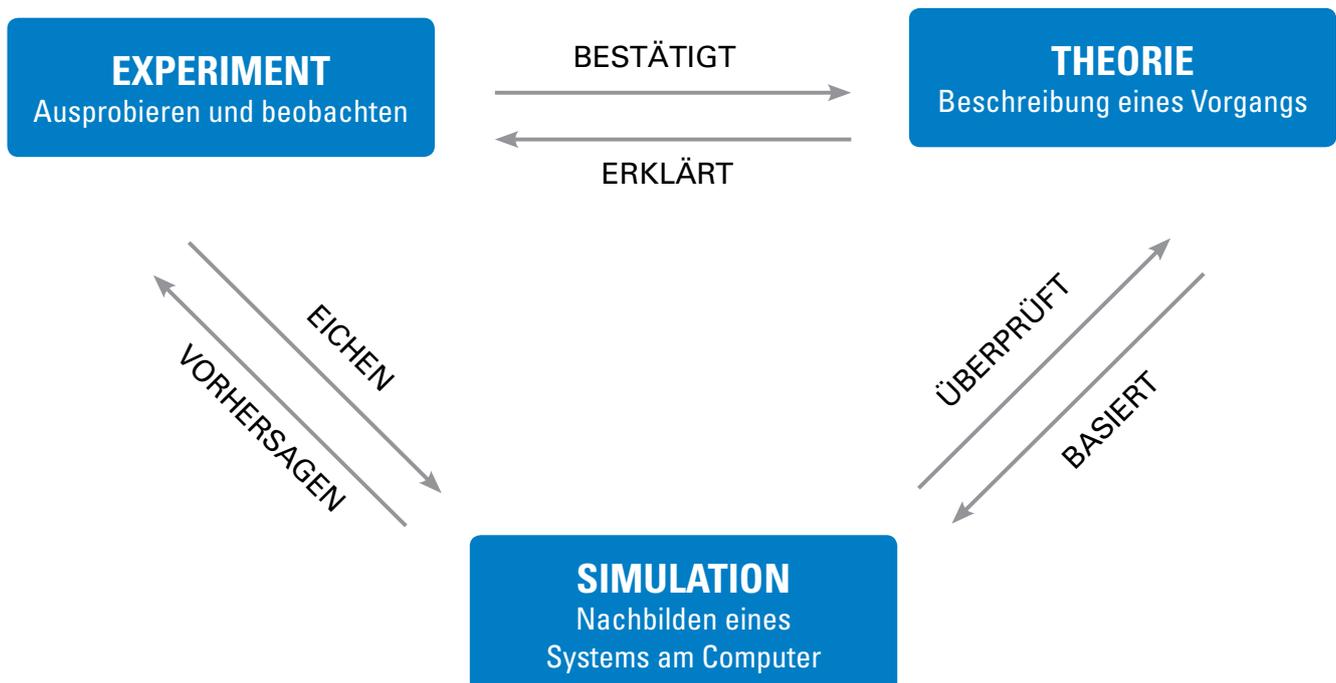
## Drittes Standbein der Wissenschaft

Ursprünglich bestand die wissenschaftliche Arbeit aus zwei Bereichen: aus Experiment und Theorie.

Dabei ist die Theorie dafür da, mit ihren physikalischen Gesetzen zu erklären, was im Experiment passiert. Experimente bestätigen wiederum neue Theorien. Eigentlich ein gutes System. Im letzten Jahrhundert wurden aber die Theorien immer komplizierter und viele Experimente konnten einfach nicht mehr berechnet werden. Außerdem stießen sie an die Grenzen des Machbaren. Sehr kleine, extrem große, zu kalte oder zu heiße Prozesse ließen sich nicht in Versuchsaufbauten nachbilden.

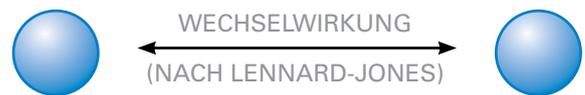
Im gleichen Jahrhundert entwickelten sich immer schnellere Rechenmaschinen und boten neue Möglichkeiten, in dieses Zweigespann einzugreifen. Es wurde möglich, immer kompliziertere Experimente durch Simulationen zu erklären und die Auswirkungen neuer Theorien zu sehen. Inzwischen hat sich die Simulation zum dritten Standbein der Wissenschaft etabliert.

Simulationen sind also nicht nur dazu da, um bereits Bekanntes in Computerspielen schön aussehen zu lassen. Vielmehr helfen sie uns, Einblicke in Phänomene zu gewinnen, die wir nicht direkt im Experiment beobachten oder die wir nicht mehr mathematisch beschreiben können.



# Materie besteht aus vielen Teilchen

Wie vorhin beobachtet, können Eis, Wasser und Wasserdampf unter bestimmten Bedingungen einfach ineinander übergehen. Das liegt daran, dass sie aus genau den gleichen Teilchen bestehen, die einfach nur unterschiedlich verteilt sind.



## Was für Teilchen sind das?

Im genannten Fall handelt es sich um Wassermoleküle. Physiker haben schon seit langer Zeit untersucht, wie sich diese und andere Teilchen zueinander verhalten. Das Problem ist: Sie sind so klein, dass man sie nicht einfach unter dem Mikroskop beobachten kann. Hier schlägt also die Brücke zwischen Theorie und Experiment fehl und wir müssen uns auf Simulationen stützen.

Man kann sich solche Teilchen vereinfacht als kleine weiche Kugeln vorstellen, die sich gegenseitig anziehen, aber natürlich nicht durchdringen können. Je weiter die Kugeln auseinander sind, desto geringer ist die Anziehungskraft. Dieses Modell wurde zuerst von zwei Physikern mit dem Namen Lennard und Jones verwendet und ist deshalb als „Lennard-Jones-Potential“ bekannt. Dieses Modell ist sehr gut geeignet, um die verschiedenen Zustände von Materie (insbesondere den sogenannten Edelgasen) zu beschreiben.

## Und wie simuliert man damit?

Mit dem Lennard-Jones-Potential ist uns bekannt, wie die Teilchen sich gegenseitig beeinflussen. In einer Simulation wird damit vom Computer in sehr kleinen Zeitschritten immer wieder neu der Einfluss auf jedes einzelne Teilchen durch jedes einzelne andere Teilchen ausgerechnet. Dieser Einfluss bewirkt dann eine neue, nur leicht veränderte Position aller Teilchen. Und dann geht das Spiel wieder von vorne los.



Wie berechnet man die Positionen der Teilchen?

.....

.....

.....



Warum bilden schnellere Atome ein Gas?

.....

.....

.....

.....

# Sehen, was passiert

Simulationswerkzeuge berechnen mit dem Lennard-Jones-Potential die Wechselwirkungen zwischen allen Teilchen und bilden diese dann in sehr kleinen Zeitschritten ab.



## Aktion

In unserem Simulationsprogramm könnt ihr Temperatur und Druck direkt anpassen oder euch einfach Punkte auf der sogenannten „Dampfdruckkurve“ aussuchen, indem ihr darauf klickt.



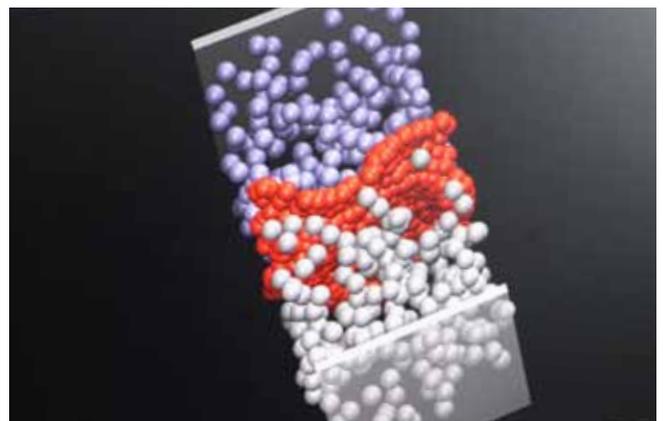
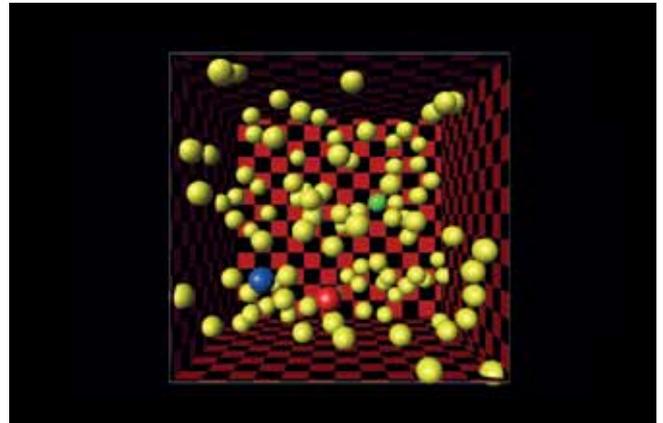
Wie sehen die verschiedenen Zustände aus?

.....

.....

.....

.....



Was passiert, wenn ihr den Simulator mit 300 oder 1000 Teilchen verwendet?

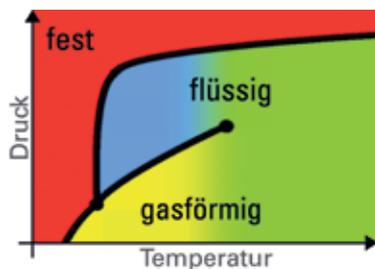
.....

.....

.....

.....

## Dampfdruckkurve



Wenn man den ganzen Bereich für Druck und Temperatur anschaut, ergibt sich ein erstaunliches Bild.

Es gibt zusammenhängende Gebiete, in denen das System immer fest (solid), flüssig (liquid/fluid) oder gasförmig (vapor) zu sein scheint. Diese Gebiete heißen dann „Zustände“ und sie sind durch die Linien der links unten angezeigten Dampfdruckkurve unterteilt.

Ohne komplexe Rechner gehts nicht

## Viele Teilchen - große Rechner

Die gezeigten vereinfachten Modelle aus Kugeln sind nicht ausreichend, um Fragen der Wissenschaft zu beantworten. Forscher müssen die Dinge viel genauer und exakter betrachten.



### Ein Beispiel

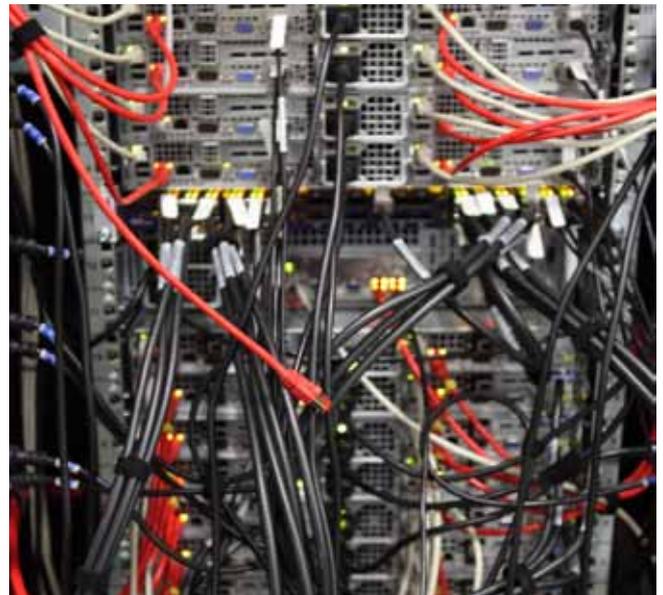
Ein Tropfen Druckertinte enthält mehr als 1 Billionen ( $10^{14}$ ) Atome. Nimmt man für jedes Atom ein Styroporkügelchen von 1 mm Durchmesser, würden diese mehr als 38 Mal die Cheops-Pyramide füllen.

Allein um die Positionen dieser großen Zahl an Atomen zu speichern, würde man mehrere Festplatten benötigen. Will man darüber hinaus betrachten, wie und wann der Tropfen auf dem Papier landet, müssen viele Zeitschritte und verschiedene physikalische Kräfte berechnet werden. Dafür wären weitere Rechner erforderlich.

In der Regel nutzen Forscher und Entwickler heute Großrechner. Dennoch lassen sich aufgrund der großen Datenmengen bislang nur sehr kleine Systeme mit Teilchensimulationen untersuchen.



Ein Blick auf die Großrechner am Höchstleistungsrechenzentrum in Stuttgart.



Großrechner bestehen aus mehreren Rechenkernen, die gleichzeitig genutzt werden.

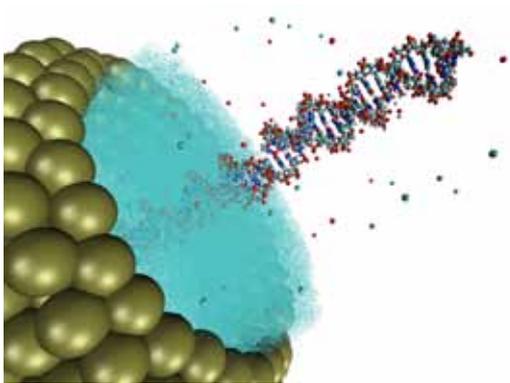
# Teilchensimulationen in der Praxis

Mit Teilchensimulationen lassen sich zahlreiche Fragen aus unterschiedlichsten Fachbereichen beantworten. Hier ein paar Beispiele

## Medizinische Verfahren

Um neue medizinische Verfahren zu entwickeln, ist detailliertes Wissen über Zellvorgänge, Mikroorganismen, Moleküle und biochemische Substanzen unerlässlich. Das menschliche Auge hat in diese Bereiche nur begrenzten Einblick, so dass Simulationen ein unverzichtbares Werkzeug sind.

Am Computer kann überprüft werden, ob ein geplantes Verfahren beim späteren Einsatz funktionieren wird. Sollten spezielle Einflüsse den gewünschten Effekt störend beeinflussen, kann dies in der Simulation erkannt, die Bedingungen entsprechend angepasst und das Verfahren für den Einsatz in der Praxis vorbereitet werden.

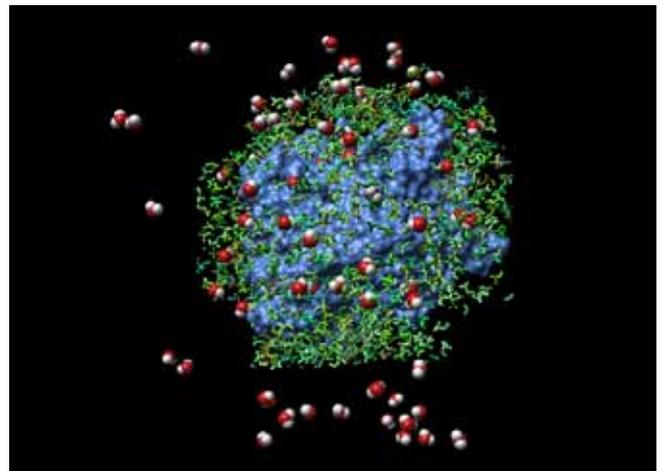


Eine DNA, die durch eine Nanopore transportiert wird – möglicherweise ein neues Verfahren zur Analyse des menschlichen Erbgutes. Die Realisierbarkeit wird aktuell in Simulationen erforscht.

## Pharmazie

Um Medikamente zu entwickeln oder zu verbessern, müssen Pharmazeuten die exakte Form von Proteinen, Viren, Bakterien und von

chemischen Wirkstoffen kennen. Beispielsweise müssen reagierende Antikörper in ihrer chemischen Struktur wie ein Puzzleteil exakt an die Oberfläche eines Virus passen. Virtuelle Bilder machen diese wichtigen Details sichtbar.



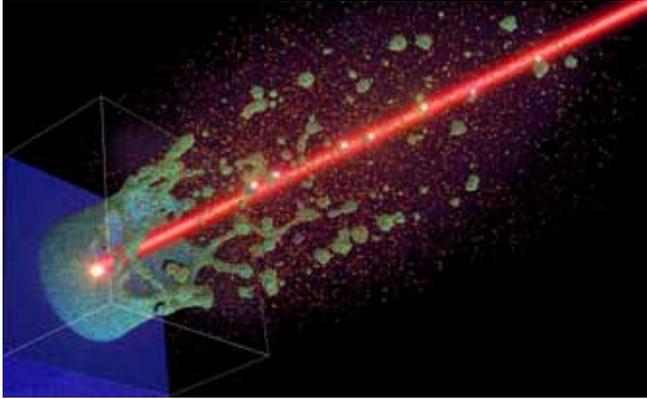
Ein Protein in einem organischen Lösungsmittel.

## Technische und maschinelle Prozesse

Auch bei der Entwicklung neuer Technologien oder maschineller Abläufe überprüfen Computer im Voraus den Erfolg.

Wann und wie muss ein Laser beschaffen sein, um kleinste Bohrungen vorzunehmen? Wann und wie wird Materie durch die Bestrahlung abgetragen?

Diese und ähnliche Fragen lassen sich durch atomare Betrachtung der Vorgänge beantworten. Laser werden heute nicht nur bei Augenlaserbehandlungen und in der Chirurgie eingesetzt, sondern auch zur Bearbeitung von Material. In allen Anwendungen ist wichtig, dass der Laser optimal abgestimmt ist.

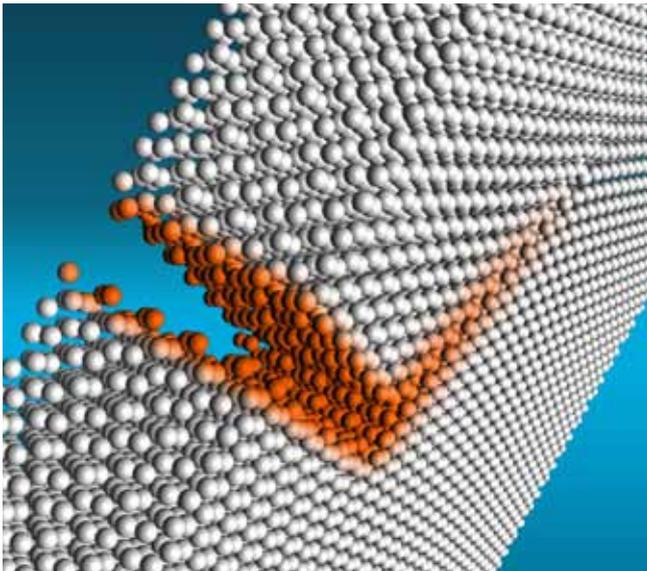


Ein Laserstrahl schleudert eine Teilchenwolke aus einem Festkörper. Computersimulationen zeigen, wie sich die Teilchen bewegen und ob sie dabei möglicherweise unerwünschte Schädigungen vornehmen.

Ein virtueller Blick auf die atomaren Strukturen eines Materials kann klären, ob es in der Praxis standhält bzw. wann und warum es zu Rissen oder gar zu Brüchen kommt.

## Materialdesign

Neue Werkstoffe oder Bauteile müssen beim späteren Einsatz speziellen Bedingungen standhalten, etwa hohem Druck oder extremen Temperaturen.



Ein Riss im Atomgitter von Aluminiumoxid – ein in der Mikroelektronik häufig eingesetzter Werkstoff.

# Antworten zu den Fragen

## ? Welche Figur ergibt sich? Seite 7

Bei dichtester Teilchenpackung ergibt sich ein regelmäßiges Sechseck (Hexagon). Hexagonale Formen sind in der Natur als Grundstruktur sehr häufig anzutreffen, z.B.

- Bienenwaben
- Kristallstrukturen (z.B. Eis und sechsstrahlige Schneeflocken).
- Benzol - eine der wichtigsten Grundstrukturen von organischen Molekülen
- Graphit - hier bildet Kohlenstoff planare Flächen aus Sechsecken.

Packt man kreisrunde bzw. kugelförmige Teilchen ganz dicht, entstehen automatisch 6er-Figuren mit hoher Stabilität.

## ? Welche Gestalt hat der Kristall? Seite 7

sechsstrahliger Stern

## ? Wie könntest du die Gläser sinnvoll sortieren? Seite 8

fest (Erde, Reis, Büroklammern)

flüssig (Honig, Öl, Limonade)

gasförmig (Luft, Joddampf)

## ? Beschreibe, wie sich Schnee bei Sonneneinstrahlung verhält! Seite 8

Schmelzvorgang – allmählicher Übergang von festem Schnee über eine Mischung aus Schnee und Wasser (2 Phasen) zu einer flüssigen Wasserpfütze.

## ? Ergänze die fehlenden Eigenschaften in der Tabelle! Seite 9

### Ordnung der Teilchen

regelmäßige Anordnung | unregelmäßig | völlig ungeordnet

### Abstand zwischen den Teilchen

Teilchen berühren sich | Teilchen berühren sich | Abstand sehr groß

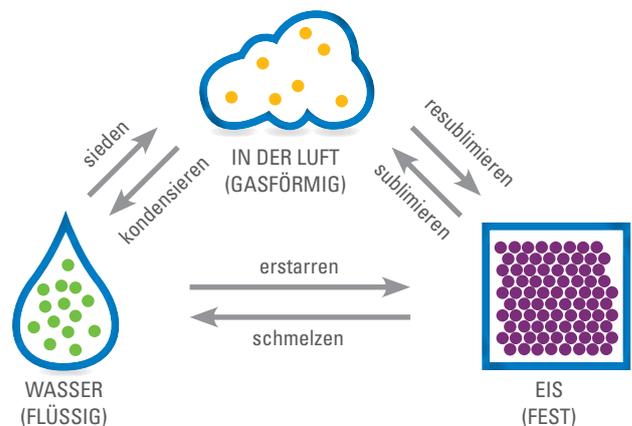
### Teilchenbewegung

Teilchen schwingen auf ihren Plätzen | Teilchen wechseln Plätzen | sehr schnell, ständige Zusammenstöße

### Anziehungskräfte zwischen den Teilchen

wirken sehr stark | wirken stark | sind nicht wirksam

## ? Zeichne nun für jeden Aggregatzustand das Teilchenmodell ein, beschrifte die Pfeile und gebe ihnen Richtungen! Seite 10



 Bei etwa welcher Temperatur wird es gasförmig? Bei welcher Temperatur fest? Seite 10

Wasser | 100 °C | 0 °C

 Welcher Vorgang ist dargestellt? Seite 11

Auflösen eines Zuckerwürfels in einer Flüssigkeit

 Woran erkennst du die Aggregatzustände der beteiligten Stoffe? Seite 11

**Fester Stoff:** Teilchen berühren sich + regelmäßige Anordnung (braun)

**Flüssigkeit:** Teilchen berühren sich + unregelmäßige Anordnung (grau)

 Welche Eigenschaften des Wassers lassen sich mit dem Teilchenmodell beschreiben, welche nicht? Seite 11

Gut, um Übergänge fest-flüssig-gasförmig zu beschreiben, für 6-eckige Kristalle von Eis und Schnee,...Q

Nicht gut für die Dichteanomalie (höchste Dichte der Flüssigkeit bei 4°C obwohl Schmelzpunkt 0°C), Oberflächenspannung,...

 Warum passen sich Flüssigkeiten der Form eines Gefäßes an, massive Feststoffe aber nicht? Seite 11

Feste Stoffe: Teilchen sitzen fest im Gitterverbund, keine Beweglichkeit, schwingen nur auf ihren Plätzen.

Flüssigkeiten: Teilchen können ihre Plätze ändern.

 Warum werden beispielsweise Kartoffeln im Schnellkochtopf schneller gar? Seite 15

In einem Dampfkochtopf schließt der Deckel den Topf luftdicht ab. Im geschlossenen Topf baut sich so ein erhöhter Druck auf (im Vergleich zum normalen Luftdruck außerhalb des Topfs) und die Siedetemperatur des Wassers steigt auf 120°C.

 Welches Ei ist wohl härter? Seite 16

Nach 6 Minuten Garzeit sind beide Eier gleich hart. Es macht keinen Unterschied, ob Wasser sprudelnd kocht oder nur langsam köchelt. Da der Deckel den Topf nicht luftdicht abschließt, steigt der Druck hier kaum über Normaldruck (wie im offenen Topf) an und die Siedetemperatur von Wasser beträgt in beiden Fällen ca. 100°C.

 Spürst du etwas? Seite 17

Man spürt nichts besonders Auffälliges.

**?** Nun schiebe die Luftpumpe mehrmals heftig und schnell zusammen. Wie fühlt sich das an? Seite 17

Die Luftpumpe erwärmt sich.

**?** Wie berechnet man die Positionen der Teilchen? Seite 20

Entsprechend dem zweiten newtonschen Gesetz:

→ Beschleunigung = Kraft / Mass

$$a = \frac{F}{m}$$

Wobei:

→ Geschwindigkeitsänderung = Beschleunigung \* Zeit

$$\Delta v = a * \Delta t$$

→ Ortsänderung = Geschwindigkeitsänderung \* Zeit

$$\Delta s = v * \Delta t$$

So kann man, wenn man die Kräfte kennt, die Beschleunigung berechnen. Mit der Hilfe der Beschleunigung erhält man die Geschwindigkeits- und damit die Ortsänderung.

**?** Warum bilden Atome bei höheren Temperaturen ein Gas? Seite 20

Höhere Temperatur bedeutet schnellere Atome. Die stoßen öfter und stärker aneinander und fliegen weiter weg. So wird die Anziehungskraft zwischen den Atomen kleiner und sie bilden ein Gas.

**?** Wie sehen die verschiedenen Zustände aus? Seite 21

Im gasförmigen Zustand haben die Teilchen großen Abstand voneinander und fliegen fast frei herum.

Im flüssigen Zustand sind die Teilchen dicht beieinander und umtänzeln sich in schnellen Bewegungen.

Im festen Zustand sind die Teilchen auch dicht gepackt, aber in einer Gitterstruktur angeordnet, so dass sie sich nur noch wenig bewegen können.

**?** Was passiert, wenn ihr den Simulator mit 300 oder 1000 Teilchen verwendet? Seite 21

Berücksichtigt man mehr Teilchen, wird die Simulation sehr viel langsamer (quadratisch!).



# Eigene Notizen

A series of horizontal dotted lines for taking notes, arranged in two columns.

# Literatur- und Bildnachweise

## Literatur

BdW-online zur Printausgabe, 1/2011, S. 87, Autor: Beutelspacher.

Blitzgescheit! Neue Experimente. Für Kinder ab 8 Jahren Bosch, Gerald 2008, Gondolino, Taschenbuch.

Chemie heute für SI, Schrödel-Verlag.

<http://www.leifiphysik.de/themenbereiche/temperatur-und-teilchenmodell#Teilchenmodell>.

[http://physik-in-schule-und-alltag.de/ZT\\_Avogadrozahl\\_Physik\\_Unterricht\\_Atomphysik.pdf](http://physik-in-schule-und-alltag.de/ZT_Avogadrozahl_Physik_Unterricht_Atomphysik.pdf).

## Bilder

Seite 7 | Schneekristall

<http://www.physik.wissenstexte.de/mikroskop.htm>.

Seite 7 | Johannes Keppler

[http://de.wikipedia.org/wiki/Johannes\\_Keppler](http://de.wikipedia.org/wiki/Johannes_Keppler).

Seite 11 | Auflösender Zuckerwürfel

Chemie heute für SI, Schrödel-Verlag.

Seite 18 | Feuerpumpe

[http://survival-mediawiki.de/dewiki/index.php/Fire\\_Piston](http://survival-mediawiki.de/dewiki/index.php/Fire_Piston) aus „Naturkräfte und Naturgewalten“, Carl Gottfried Wilhelm Vollmer, Berlin 1857.



Weitere Informationen unter  
[www.sfb716.uni-stuttgart.de](http://www.sfb716.uni-stuttgart.de)

Förderung durch die  
