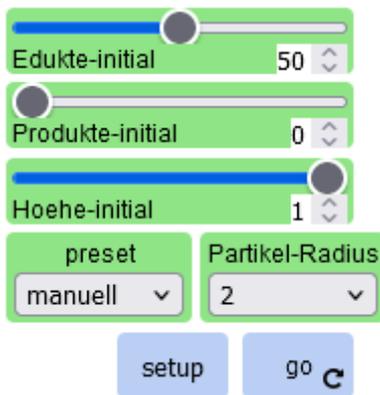


Jumping Beans interaktiv

Vorbereitet wird die Simulation mit dem Button [setup], gestartet mit [go].

Mit den Sliders lassen sich vor dem Setup Einstellungen vornehmen, wobei die Sliders oberhalb des Setup-Knopfes nur vor dem Setup wirken, die anderen auch während der Simulation. Mit Preset kann auch auf vordefinierte Einstellungen zurückgegriffen werden.

- setup: Neustart mit neuen Einstellungen
- go: Simulation starten und pausieren
- Preset:
 - "manuell": es werden die Einstellungen der Sliders übernommen
 - z bedeutet, dass die Edukte energetisch höher liegen, während mit
 - s die Produkte energetisch höher liegen.
 - Entropisch links bedeutet, dass die seitliche Ausdehnung der Edukte grösser ist, so dass es dort für ein gegebenes Teilchen mehr Realisierungsmöglichkeiten gibt.



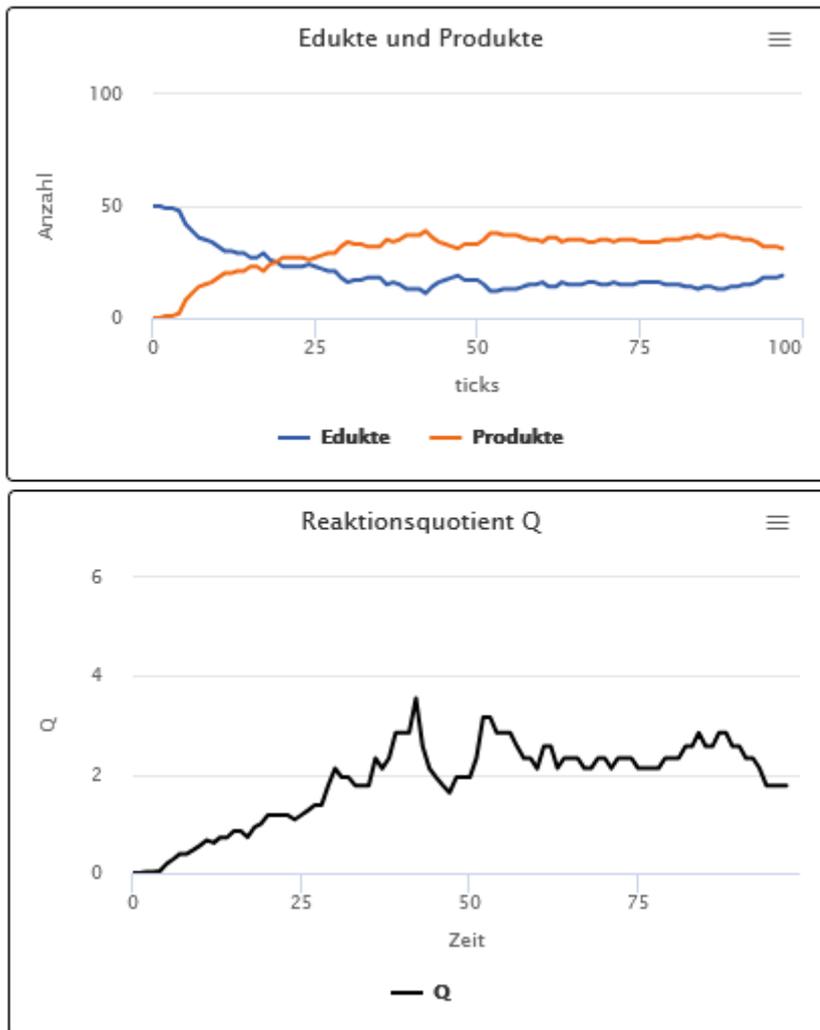
Mit folgenden Sliders und Buttons können auch während der Simulation Veränderungen vorgenommen werden. Die Einstellungen der oberen vier Sliders werden erst übernommen, wenn [update] angeklickt wird.

The image shows a control panel for a simulation. It features four sliders at the top, each with a green bar and a black knob. Below the sliders are several control elements:

- A blue button labeled "update".
- Two green checkboxes, both checked, labeled "Farbwechsel?" and "Kollisionen?".
- A green checkbox labeled "Spur?" which is unchecked, next to a blue button labeled "clear trace".
- A slider labeled "Gravitationsbeschleu..." with a value of 3.
- A grid of six blue buttons: "20% Kühlen", "20% heizen", "+ 10 Edukte", "+ 10 Produkte", "- 10 Edukte", and "- 10 Produkte".

- Spur?: Man für ein bestimmtes Teilchen die Spur einzeichnen lassen
- Farbwechsel?: Wenn dieser Schalter eingeschaltet wird, werden alle Teilchen beim Wechsel des Niveaus neu eingefärbt, so dass auf der Eduktseite alle Teilchen cyan gefärbt sind, auf der Produktseite alle magenta. Zudem verfärben sich die Teilchen je nach Geschwindigkeit, was sich allerdings nicht ausschalten lässt.

Die Abbildungen rechts zeigen die Anzahlen der Teilchen über dem linken bzw. rechten Energieniveau und den Reaktionskoeffizienten Q .



Was stellt das Modell dar?

Das physikalische Modell der jumping beans (oder hüpfender Atome) hilft, eine Reihe von Phänomenen auf der molekularen Ebene zu erkunden und zu verstehen.

- Dynamisches Gleichgewicht
- Luftdruck (barometrische Höhenformel)
- Unter welchen Bedingungen läuft eine Reaktion vollständig und irreversibel ab?
- Verschiebungen von Gleichgewichtssystemen nach Le Chatelier durch Hinzufügen oder Entfernen von Reaktanden, durch Heizen oder Kühlen.
- weshalb laufen exotherme Reaktionen bevorzugt ab, und zwar besonders, wenn Energie an die Umgebung abgegeben wird. Was geschieht mit der Anzahl Realisierungsmöglichkeiten mit / ohne Energieabgabe.
- Bei welchen Einflüssen ändert sich die Gleichgewichtskonstante und bei welchen nicht?
- Der Einfluss der Energie, der Entropie und der Temperatur auf die Gleichgewichtslage. Dabei dient der Höhenunterschied als Analogie für potentielle Energieunterschiede auf mikroskopischer Ebene, was unter Umständen mit der Enthalpie gleichgesetzt werden kann. Die seitliche Ausdehnung jedes Energieniveaus dient als Maß für die Anzahl Realisierungsmöglichkeiten, was logarithmiert die

Entropie ergäbe. Die kinetische Energie der Teilchen dient als Mass für die Temperatur.

- Prozesse können adiabatisch geführt werden und dann wieder auf die ursprüngliche Temperatur gekühlt werden und der Unterschied veranschaulicht.
- Wenn ein System im Gleichgewicht gekühlt wird, so nimmt nicht nur die kinetische Energie ab, sondern auch die potentielle (Hüpfhöhe) und zudem verschiebt sich das Gleichgewicht, wenn die Aktivierungsenergie nicht zu gross ist. Was also ist ein thermisches Gleichgewicht? Welche Freiheitsgrade sind daran beteiligt und welche nicht? Was ist der Unterschied zwischen Wärme und Temperatur?
- usw. usf.

Was kann man ausprobieren?

Mögliche Fragestellungen:

- Wann kann man in der Grafik die Gleichgewichtskonstante K ablesen?
- Wie wirken sich Heizen, Kühlen, Hinzufügen und Wegnehmen von Teilchen auf das Gleichgewicht bzw. die Gleichgewichtskonstante K aus?
- Suche einstellungen für eine Reaktion, so dass die Reaktion irreversibel ist und keine Rückreaktion festzustellen ist.
- Wie verändert sich der Luftdruck (das Teilchenverheltnis zwischen den Niveaus), wenn man den Höhenunterschied verdoppelt und vervierfacht?
- Suche Einstellungen für eine entropisch günstige aber energetisch ungünstige Reaktion, bei der das Gleichgewicht gerade etwa in der Mitte liegt, K also etwa 1 ist.
- Wie kann es sein, dass in der heissen Kerzenflamme (im Gleichgewicht) elementarerer Wasserstoff und Sauerstoff auftreten, in den Verbrennungsgasen dann aber nicht mehr?
- Schalte die Kollisionen aus und die Spur ein und überprüfe anhand der Spur, ob die Energieerhaltung gewährleistet ist, auch wenn das Teilchen das Niveau wechselt.
- Was geschieht, wenn du die Gravitationskonstante auf Null setzt?
- Versuche, das Teilchen mit der Spur zu beschleunigen (oder zu bremsen), in dem du zu geeigneten Zeitpunkten die Gravitationskonstante hoch- und herunterschraubst.

Kommandozeile

Bereich der y-Achse eines Plots kann in der Kommandozeile angepasst werden:

```
set-current-plot "Edukte und Produkte"  
set-plot-y-range 0 2
```

Dabei kann man auch mehrere Befehle in einer Zeile hintereinander schreiben:

```
set-current-plot "Q" set-plot-y-range 0 2
```

Mit den Aufwärts- und Abwärtspfeilen können vorhergehende Befehle zurückgeholt werden.

Mit folgenden Befehlen kann ein Plot gelöscht und dann die Zeit auf Null gesetzt werden:

```
set-current-plot "Edukte und Produkte"
```

```
reset-ticks  
clear-plot
```

In einer Zeile für beide Plots:

```
set-current-plot "Edukte und Produkte" clear-plot set-current-plot "Q"  
clear-plot reset-ticks
```

Druch den Befehl reset-ticks wird die Zeit wieder auf 0 gesetzt. Dadurch werden die Blitzchen, die beim der Kollision der Teilchen mit der Wand entstehen, eingefroren. Sie können entfernt werden mit

```
ask flashes [set birthday 0]
```

Werte können vorgegeben werden mit set:

```
set E-kin-fix 320
```

Alle Partikel können cyan gefärbt werden mit

```
ask particles [set color cyan]
```