



# JElements

Programmdokumentation

JAVA STARS 2006 – Sun Microsystems Award

Gruppe: JElements

Schule: Carl-Miele-Berufskolleg des  
Kreises Gütersloh

Projekt: Periodensystem der Elemente

<b>Bundesland</b>	Nordrhein-Westfalen
<b>Teamnummer</b>	199
<b>Schulnummer</b>	179589
<b>Schulname</b>	Carl-Miele-Berufskolleg des Kreises Gütersloh
<b>Schulform</b>	Berufsfachschule Informationstechnischer Assistent
<b>Name des Teams</b>	JElements
<b>Projektname</b>	Periodensystem der Elemente
<b>Projektkurzbeschreibung</b>	Ein komplettes Periodensystem der Elemente mit ausführlichen Informationen und einigen neuartigen Präsentationsarten der Orbitalbesetzung (Ton- und Kreis-Orbitaldarstellung)
<b>Unterrichtsfächer</b>	Programmieren, Chemie, Physik
<b>Gruppenmitglieder</b>	Holger Johanndeiter, Jahrgang 1988 Bastian Sieker, Jahrgang 1987 Andre Arlt, Jahrgang 1987
<b>Lehrer</b>	Andreas Blomberg

## Inhaltsverzeichnis

<b>1 Projektbeschreibung</b>	<b>4</b>
1.1 Programmbeschreibung.....	4
1.2 Thema.....	4
1.3 Nutzen für den Unterricht.....	5
1.4 Arbeitsumgebung.....	6
1.5 Installation & Ausführen.....	6
<b>2 Lösungskonzept</b>	<b>7</b>
2.1 Aufbau der Programmoberfläche.....	7
2.2 Sound.....	9
2.2.1 MIDI-Modus.....	9
2.2.2 Sinuswellen-Modus.....	10
<b>3 Programmarchitektur</b>	<b>11</b>
3.1 Klassendiagramm des Periodensystems.....	11
3.2 Sequenzdiagramm beim Auswählen eines Elements.....	12
<b>4 Benutzerschnittstelle</b>	<b>14</b>
4.1 Periodensystem.....	14
4.2 Kreis-Orbitaldarstellung.....	15
4.3 Darstellung als Graph.....	17
4.4 Exportieren.....	18
<b>5 Quellen</b>	<b>18</b>

# 1 Projektbeschreibung

Hier soll ein kurzer Überblick über das Programm und eine kleine Einführung in das Thema (Der Aufbau der Atome) gegeben werden.

## 1.1 Programmbeschreibung

Das Programm bietet zum einen alle Daten eines gewöhnlichen Periodensystems (Ordnungszahl, Symbol, Schmelzpunkt, etc.) und zusätzlich einige besondere Präsentationen der Besetzung der Orbitale, die normalerweise entweder sehr trocken oder sehr unübersichtlich ist.

Wir glauben eine Darstellung gefunden zu haben, die gleichzeitig aussagekräftig und anschaulich ist. Dazu dient zum einen die Visualisierung in der Kreis-Orbitaldarstellung und die Wiedergabe als Ton.

Damit man die Daten auch in anderen Programmen, wie z.B. Excel, verwenden kann, kann man die Daten der Elemente auch in eine CSV<sup>1</sup>-Datei exportieren.

## 1.2 Thema

Ein chemisches Element ist ein Stoff, der sich nicht weiter teilen lässt und nur aus Atomen mit der gleichen Anzahl Protonen (Kernladungszahl) besteht. Bereits im antiken Griechenland dachten sich die Philosophen, dass die Welt aus gewissen unteilbaren Dingen bestand und nannten sie daher „atomos“ - unteilbar. Aber bis ins späte Mittelalter waren nur sehr wenige chemische Elemente bekannt – hauptsächlich Metalle wie Eisen und Kupfer. Bis zum Ende des 19. Jahrhundert wurden dann so gut wie alle natürlich vorkommenden Elemente entdeckt und es stellte sich langsam die Frage, wie man die entdeckten Elemente ordnet.

Zuerst wurde nach der Atommasse geordnet, diese Methode ist allerdings nicht sehr übersichtlich. 1869 erfanden dann Dimitri Iwanowitsch Mendelejew (1834–1907) und Lothar Meyer (1830–1895) beinahe gleichzeitig und unabhängig voneinander das heutige Periodensystem, indem sie die Elemente nach Atommassen ordneten und gleichzeitig Elemente mit ähnlichen Eigenschaften untereinander ordneten.

Diese Gruppen haben ähnliche Eigenschaften, weil sie auf ihrer äußersten Schale dieselbe Anzahl Elektronen haben (Valenzelektronen).

Weil die Atommasse aber mit dem jeweiligen Isotop schwankt, ordnet man die Elemente nach Anzahl der Protonen im Kern.

Bei dem Periodensystem der Elemente handelt es sich also um eine Auflistung der chemischen Elementen geordnet nach Kernladungszahl und Valenzelektronen.

Im Orbitalmodell bewegt sich das Elektron in einem bestimmten Abstand (der „Schale“) in einer bestimmten Form (der „Orbitaltyp“) um den Atomkern. Die verschiedenen Orbitaltypen unterscheiden sich im Spektrellinienbild und können unterschiedlich viele Elektronen beherbergen.

<sup>1</sup> <http://de.wikipedia.org/wiki/CSV-Datei>

Ein bestimmtes Orbital ist also z.B. kugelförmig (s) und in einem Abstand von  $n = 2$  (2. „Schale“) um den Kern.

Um das Periodensystem in unserem Programm zu benutzen reicht es, das Bohrsche Schalenmodell zu kennen, für die Kreis-Orbitaldarstellung ist es hilfreich zu wissen, was die Orbitale bedeuten.

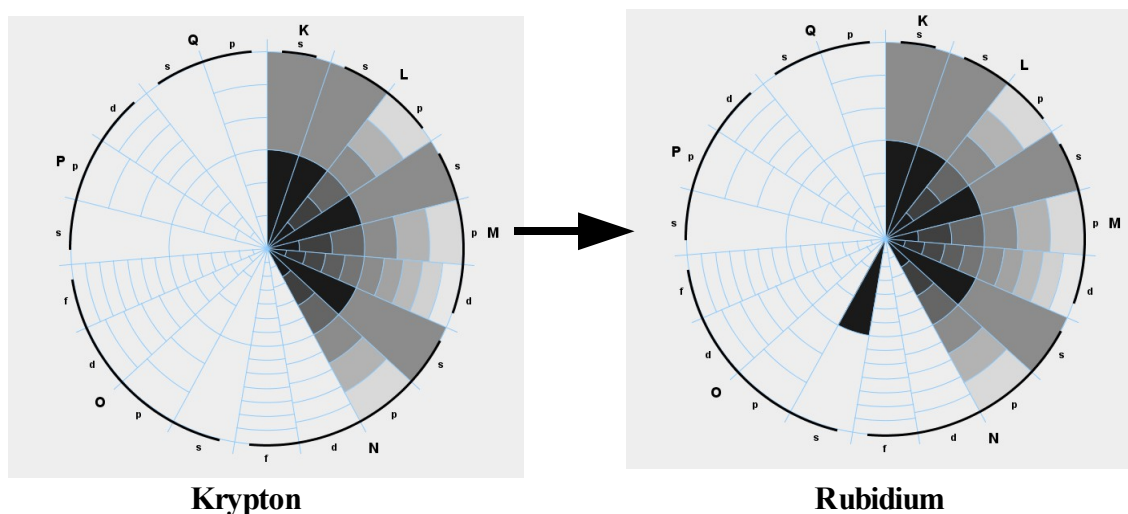
Die Besetzung dieser Orbitale bezeichnet man als Elektronenkonfiguration. Sie wird normalerweise entweder als ein Bild einer Menge Elektronen, die um einen Atomkern kreisen dargestellt, was bei größeren Elementen allerdings sehr unübersichtlich ist, oder als Text, z.B. für Nickel  $[\text{Ar}]3d^84s^2$ . Das bedeutet, dass Nickel dieselbe Elektronenkonfiguration wie das Edelgas Argon aufweist und zusätzlich 8 Elektronen auf dem Orbital 3d und 2 auf dem Orbital 4s.

In JElements wird die Elektronenkonfiguration auf bessere Art dargestellt, mehr dazu in „4.2 Kreis-Orbitaldarstellung“.

### 1.3 Nutzen für den Unterricht

JElements kann in allen Unterrichtsfächern, die das Periodensystem der Elemente benutzt werden, hauptsächlich also die Chemie. Man kann dort alle relevanten Daten zu bekannten und unbekanntem Elementen schnell und einfach nachschlagen. Darüber hinaus bietet es sich an, um den Aufbau und die Besetzung der Schalen der Atome zu erklären und verstehen.

Zum Beispiel kann man mithilfe der Kreis-Orbitaldarstellung sehr leicht die Behauptung, dass die äußere Schale nie mehr als 8 Elektronen enthält beweisen. Dazu wählt man ein Edelgas, z.B. Krypton, weil Edelgase immer eine voll besetzte äußere Schale haben. Zählt man die Elektronen in der äußersten Schale (N), sieht man, dass es 8 sind. Geht man nun in der Liste ein Element weiter, auf Rubidium, sieht man, dass das nächste Elektron in die O-Schale geht, also ist die neue äußerste Schale die O-Schale und in der N-Schale waren nie mehr als 8 Elektronen als sie die äußerste Schale war.



Natürlich sollte ein Lehrer JElements nur als Veranschaulichung und nicht als Beweis benutzen.

Durch die Möglichkeit, die Elemente auch als Ton wiederzugeben, können die Schüler mit allen Sinnen die Elemente kennen lernen.

## 1.4 Arbeitsumgebung

Entwickelt wurde JElements unter Microsoft Windows XP und Ubuntu 6.10 GNU/Linux (<http://www.ubuntu.com>) mithilfe von Eclipse 3.2 ([www.eclipse.org](http://www.eclipse.org)). Um die UML-Diagramme zu erstellen wurde Omondo EclipseUML Free Edition (<http://www.eclipseuml.com/>) benutzt. Getestet wurde unter diesen Systemen.

## 1.5 Installation & Ausführen

Um das Programm auszuführen ist nichts weiter nötig als ein korrekt installiertes Java Runtime Environment mindestens Version 5. Wichtig: Ist das JDK mehrmals auf einer Maschine installiert worden, ohne dass die alten Installationen sauber entfernt wurden, so kann es Probleme mit dem Hardwarezugriff, insbesondere dem Sound, geben.

Anschließend muss man nur die Datei „JElements.jar“ mit einem Doppelklick starten.

Wir haben besonders darauf geachtet, keine systemspezifischen Bibliotheken zu verwenden, damit das Programm auf möglichst vielen Betriebssystemen läuft und damit die Installation möglichst einfach ist.

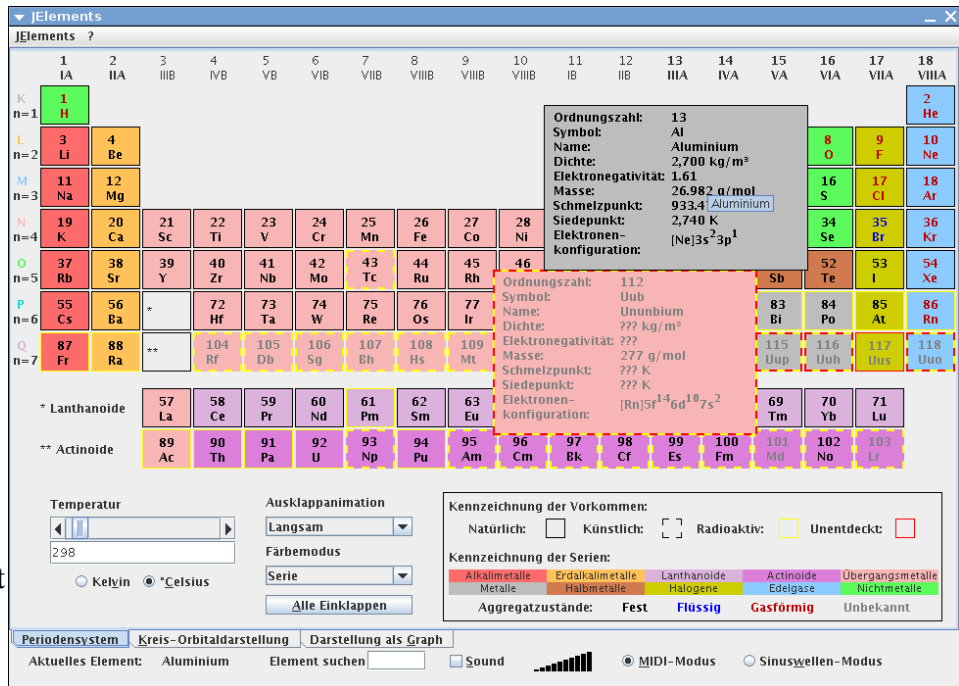
# 2 Lösungskonzept

## 2.1 Aufbau der Programmoberfläche

Die Benutzeroberfläche besteht aus 3 Hauptteilen.

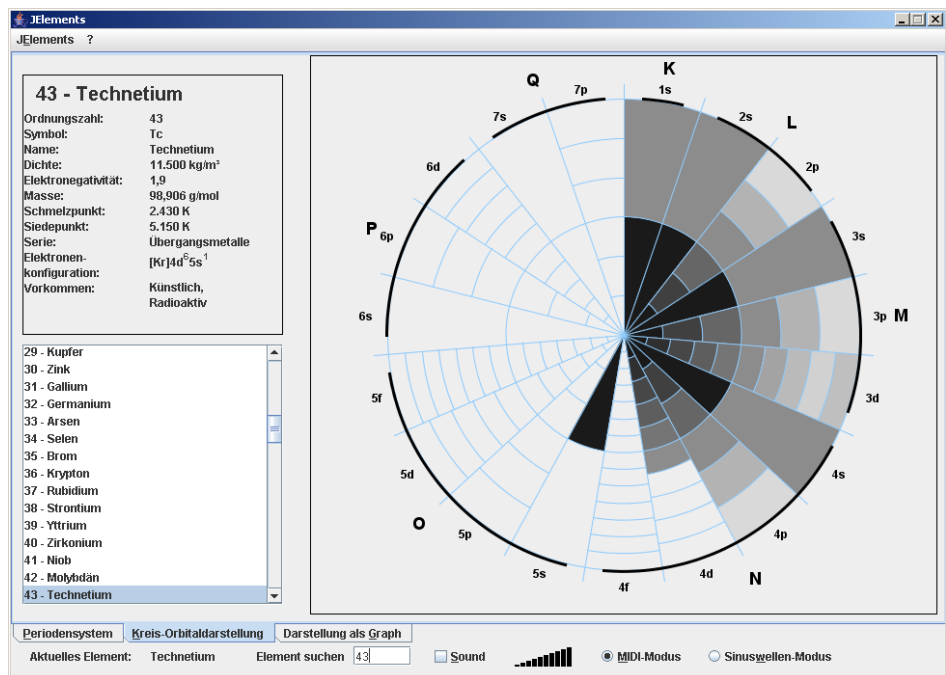
### Periodensystem

Diese Übersicht bietet alle Daten eines Periodensystems der Elemente. Man kann die aktuelle Temperatur ändern und so sehen, bei welcher Temperatur welche Elemente fest, flüssig oder gasförmig sind. In Menü unter JElements → Optionen kann man die Färbung ändern. Die Darstellung orientiert sich am Periodensystem von Wikipedia [1]. Als Datenreferenz wurde hauptsächlich [2] benutzt.



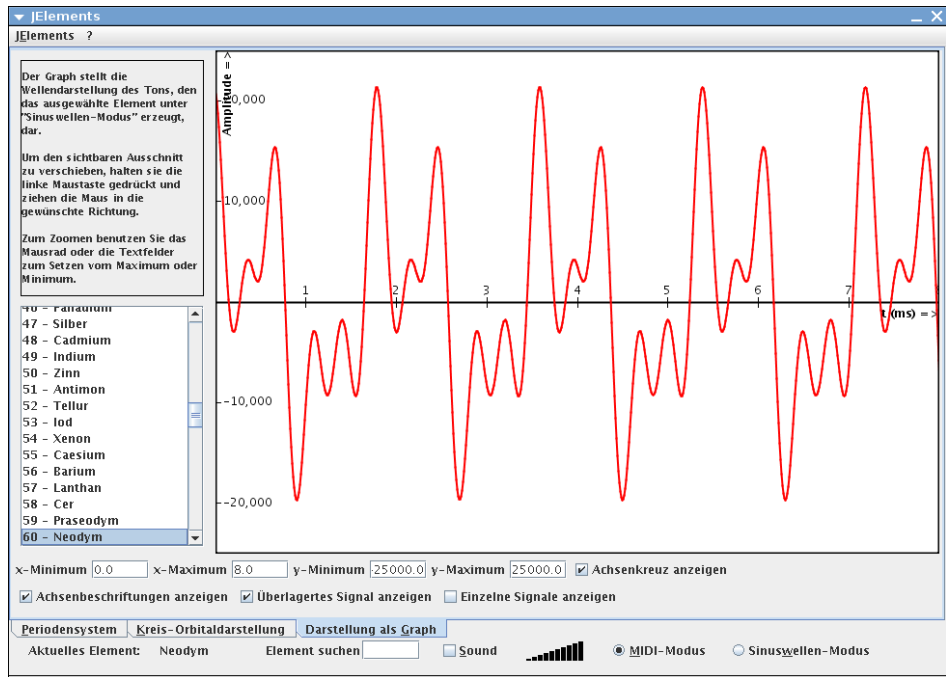
### Kreis-Orbitaldarstellung

In dieser Darstellung wird die Elektronenkonfiguration der einzelnen Elemente im Detail graphisch angezeigt. Man kann hier die Elemente aus einer Liste auswählen und es werden dieselben Informationen wie im Periodensystem zu den Elementen angezeigt.



### Graphendarstellung

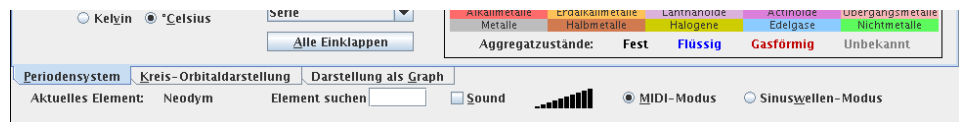
In der Graphendarstellung wird für jedes Atom eine einzigartige Schwingung erzeugt. Diese Schwingung ist eine Überlagerung aus sinusförmigen Grundschwingungen. Die Grundschwingungen hängen mit den Elektronenbesetzungen der Orbitale zusammen. Die Schwingung ist dieselbe, die im Sinuswellen-Modus als Ton wiedergegeben wird.



Außerdem gibt es noch:

### Infopanel

Im Infopanel sind einige allgemeine Funktionen und die Tonwiedergabe realisiert. Es wird das aktuelle Element angezeigt und man kann über „Element suchen“ leicht Elemente nach der Ordnungszahl, dem Symbol oder dem Anfang des Namens finden. Man muss also nicht den kompletten Namen eingeben.



Im Menü gibt es weiterhin:

Hilfe (F1)	Hier wird ein Bild des Periodensystems mit einer kurzen Beschreibung der wichtigsten Funktionen angezeigt.
Export (F2)	Hier kann man die Daten von den Elementen in eine CSV-Datei exportieren. Diese kann nachher z.B. in einem Tabellenkalkulationsprogramm weiterverarbeitet werden.

## 2.2 Sound

Es gibt 2 verschiedene Soundmodi:

- MIDI-Modus
- Sinuswellen-Modus

### 2.2.1 MIDI-Modus

Im MIDI-Modus wird für jede Schale ein MIDI-Ton generiert und hintereinander abgespielt. Wenn die Wiedergabe von vorne anfängt gibt es eine kurze Pause. Die Höhe eines Tons wird zum einen durch die Schale bestimmt (höhere Schalen haben einen höheren Ton) und durch die Anzahl der Elektronen auf der Schale (je mehr Elektronen auf der Schale sind, desto höher der Ton). Zum Verständnis des Tons reicht also bereits das Bohrsche Schalenmodell.

Es wird bei der Berechnung der Tonhöhe somit durch alle besetzten Schalen eines Elements iteriert.

Die K-Schale ist dabei Schale Nummer 0.

Die genaue Formel zur Berechnung der Tonhöhe ist:

$$4 * \text{AnzahlElektronenMomentaneSchale} + 15 + \text{NummerDerMomentanSchale} * 6$$

Wenn die Anzahl der Elektronen in einer Schale größer als 18 ist, wird diese Anzahl erst auf 18 herunter gerechnet und gerundet. Daher kann man daher unter den letzten 32 Elementen nicht alle voneinander unterscheiden. Dieser Kompromiss war erforderlich, damit auch bei den anderen Elementen eine saubere akustische Unterscheidung möglich ist. Die wissenschaftliche Untermauerung der Tonwiedergabe war im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich und könnte in der Version 2.0 folgen.

Ausnahmen in der Elektronenbesetzung der Schalen werden berücksichtigt.

### 2.2.2 Sinuswellen-Modus

Im Sinuswellen-Modus wird für jedes Orbital anhand der Anzahl der Elektronen eine Sinuswelle erzeugt, die in Frequenz, Phase oder Amplitude einzigartig ist. Diese Sinuswellen werden in der Tonwiedergabe überlagert und ausgegeben. Man kann also anhand des Tons jedes Element genau unterscheiden. Die Unterscheidung der niedrigeren Elemente ist einfacher als die der höheren, da die Tonhöhe mit der Ordnungszahl größer wird. Die Schwingung des erzeugten Tons kann man in der Darstellung als Graph ansehen.

Für die Verständnis des Sinuswellen-Modus ist also Verständnis des Orbitalmodells nötig. Ausnahmen in der Elektronenbesetzung der Schalen werden berücksichtigt.

Es wird jeweils durch alle besetzten Orbitale eines Elements iteriert. Das Orbital 1s ist das Orbital Nummer 1. Das Orbital 6d ist Nummer 19.

Die Frequenz der Schwingung wird mit folgender Formel berechnet:

$$\text{AnzahlElektronenMomentanesOrbitale} * 100 + (\text{GesamtAnzahlOrbitale} * 100 * 4) * (\text{NummerDesMomentalenOrbitals} / \text{GesamtAnzahlOrbitale})$$

Die Amplitude:

$$5000 - \text{NummerDesMomentalenOrbitals} * 200$$

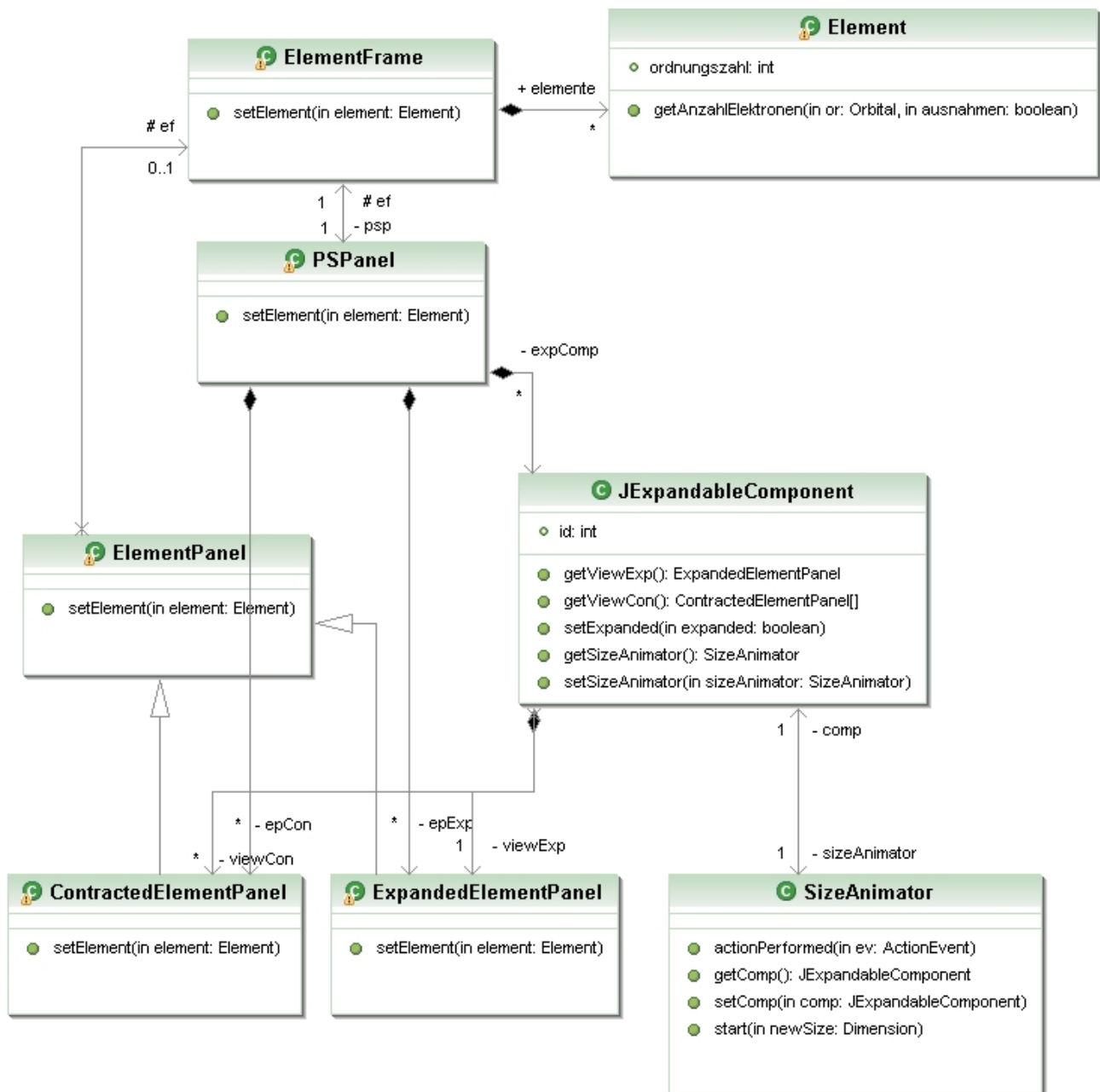
Die Phasenverschiebung:

$$360 / \text{GesamtAnzahlOrbitale} * \text{NummerDesMomentalenOrbitals}$$

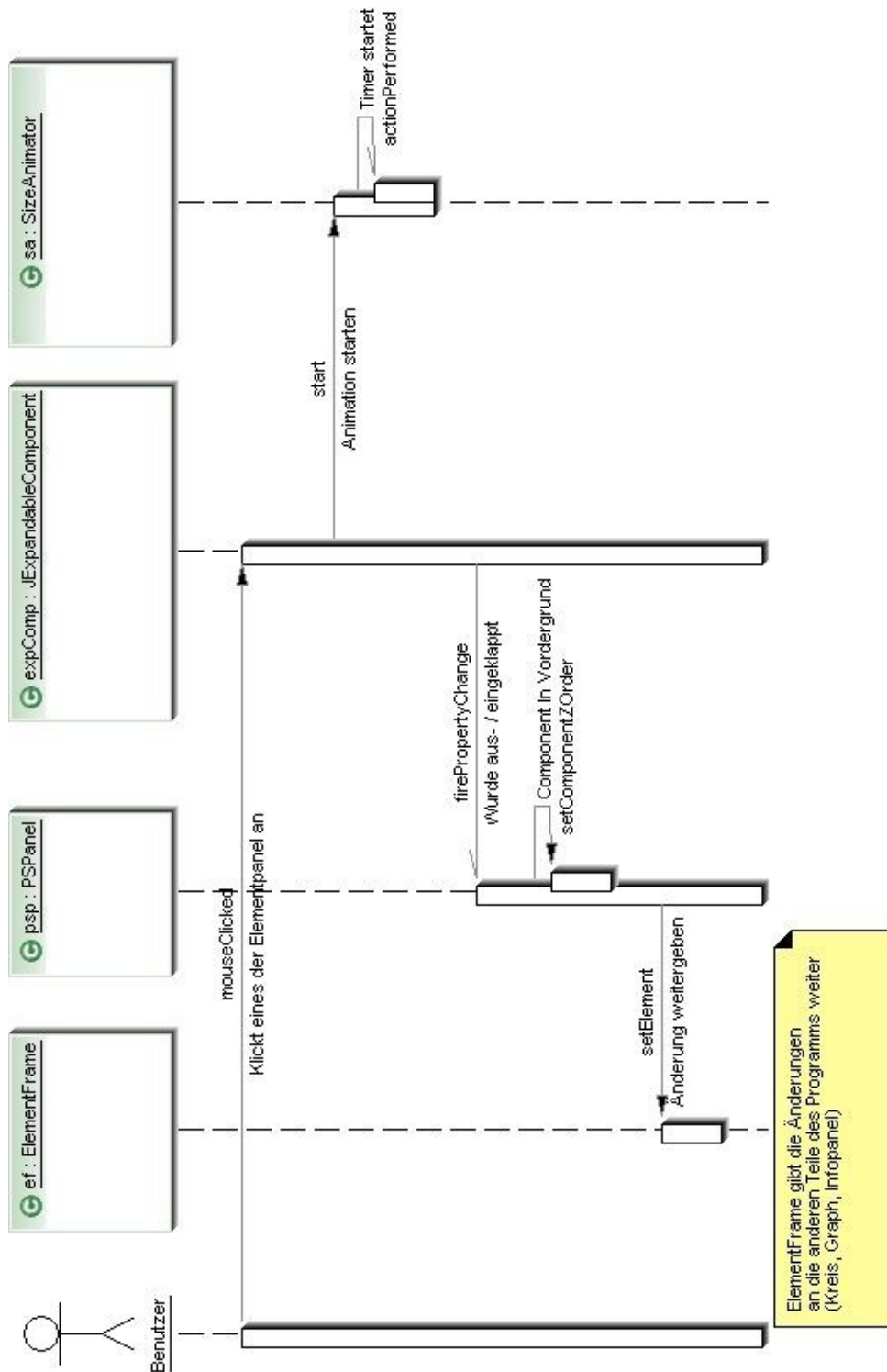
### 3 Programmarchitektur

#### 3.1 Klassendiagramm des Periodensystems

Unten ist ein stark vereinfachtes UML-Klassendiagramm der Klassenstruktur zur Darstellung des Periodensystems angegeben. Es wurden nur die Beziehungen und die wichtigsten Methoden und Eigenschaften eingezeichnet, weil sie für die Darstellung des Periodensystems am wichtigsten sind.



### 3.2 Sequenzdiagramm beim Auswählen eines Elements



Man sieht den Ablauf beim Auswählen eines Elements im Periodensystem durch den Benutzer. Die Verknüpfung zwischen dem Periodensystem und den einzelnen JExpandableComponents erfolgt über einen `PropertyChangeListener` für die Eigenschaft „expanded“ - ausgeklappt - des JExpandableComponents. Andere Programme könnten JExpandableComponent also ebenso leicht benutzen. Um das Element des JExpandableComponent zu identifizieren, hat er die Eigenschaft `id`, die in JElements die Ordnungszahl des jeweiligen Elements ist.

Eine vollständige Darstellung des Programms in UML würde den Umfang dieser Dokumentation bei Weitem sprengen.

# 4 Benutzerschnittstelle

## 4.1 Periodensystem

Im Periodensystem kann man allgemeine Informationen über alle Elemente des Periodensystems abrufen. Dazu klickt man auf eines der Elemente, woraufhin die Darstellung des entsprechenden Elements vergrößert wird und zusätzliche Daten, z.B. Schmelzpunkt, Siedepunkt, Elektronegativität und die Elektronenkonfiguration sichtbar werden. Falls der Ausklappvorgang stockt, sollte man unter „Ausklappanimation“ Langsam auswählen. Das Vorkommen und die Serie des Elements kann man anhand der Färbung und des Rahmens sehen. Die Bedeutung der jeweiligen Farbe, bzw. des Rahmens kann man in der Legende unten rechts erfahren. Die Schriftfarbe gibt Auskunft über den Aggregatzustand bei der unten links eingestellten Temperatur (Alt + T). Am Anfang ist dieser Wert auf Standardtemperatur<sup>2</sup> (25°C). Man kann dort auch zwischen Kelvin (Alt + V) und Celsius (Alt + C) wechseln. In der vergrößerten Elementdarstellung wird der Wert dann ebenfalls in Kelvin, bzw. Celsius angezeigt.

The screenshot shows the JElements application window. At the top, it displays the periodic table with elements color-coded by group and state. Below the table are two rows of Lanthanoids and Actinoids. The bottom section contains several control panels:

- Temperatur Einstellungen:** A slider set to 298, with radio buttons for Kelvin and Celsius (Celsius is selected).
- Ausklappanimation:** A dropdown menu set to "Langsam".
- Färbemodus:** A dropdown menu set to "Serie".
- Alle Einklappen:** A button to collapse all elements.
- Kennzeichnung der Vorkommen:** Checkboxes for "Natürlich" (checked), "Künstlich", "Radioaktiv", and "Unentdeckt".
- Kennzeichnung der Serien:** A legend with color-coded boxes for Alkalimetalle, Erdalkalimetalle, Lanthanoide, Actinoide, Übergangsmetalle, Metalle, Halbmetalle, Halogene, Edelgase, and Nichtmetalle.
- Aggregatzustände:** Legend for "Fest", "Flüssig", "Gasförmig", and "Unbekannt".

At the bottom, there are tabs for "Periodensystem", "Kreis-Orbitaldarstellung", and "Darstellung als Graph". The "Aktuelles Element" is set to "Wasserstoff". There are also checkboxes for "Sound", "MIDI-Modus", and "Sinuswellen-Modus".

2 <http://de.wikipedia.org/wiki/Standardtemperatur>

Die Gruppen lassen sich oben ablesen. Fett gedruckte Gruppen sind Hauptgruppen. Der Tooltip der Gruppen gibt den vollen Namen der Gruppe an. Links kann man ablesen, um welche Periode es sich handelt.

Meistens ist es bequemer, anstatt das Element im Periodensystem zu suchen, einfach die Ordnungszahl, das Symbol oder den Anfang des Namens in das „Element suchen“ Feld unten in der Mitte (Alt + F).

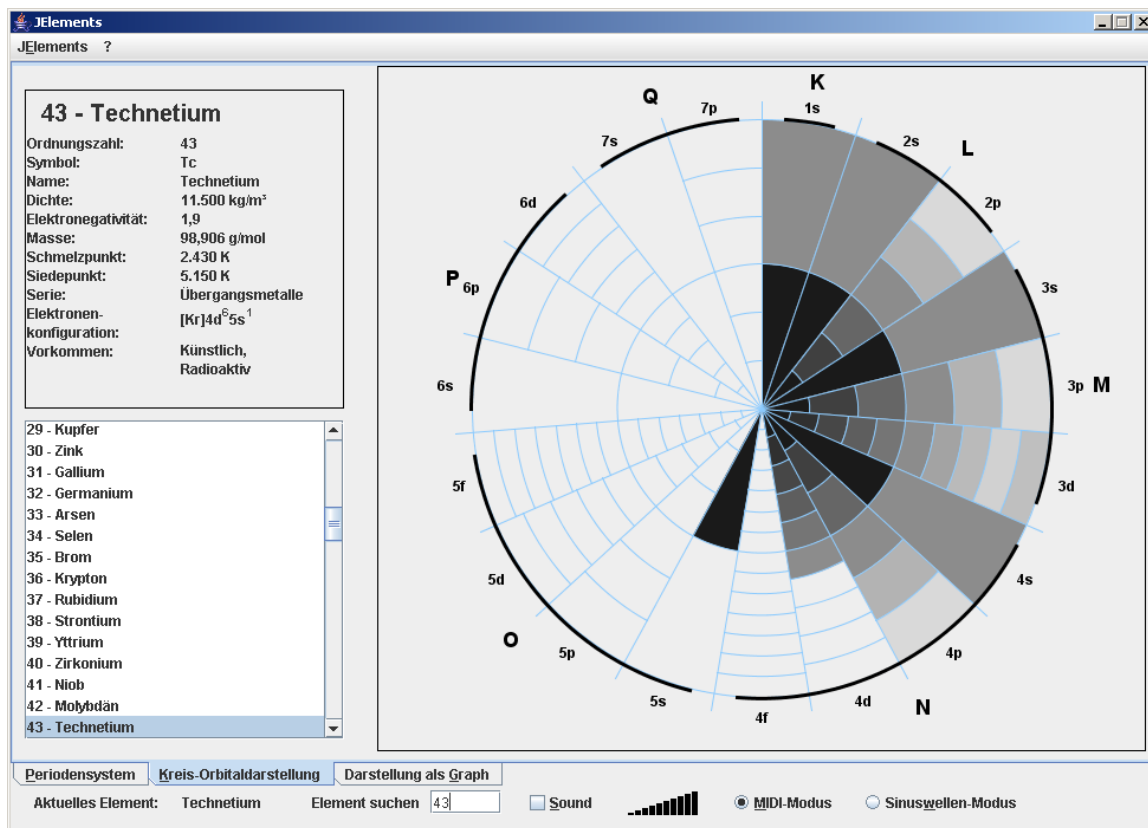
Es gibt 3 verschiedene Färbemodi für die Elemente:

- Serie: Die Serie bestimmt die Farbe (siehe Legende)
- Äußerste Schale Die äußerste, besetzte Schale (Valenzschale) bestimmt die Färbung
- Elektronegativität Der Grad der Elektronegativität bestimmt die Färbung (je höher, desto satter die Farbe)

Die noch nicht bekannten Elemente 112 – 118 haben nur vermutete Eigenschaften und Platzhalter als Namen.

## 4.2 Kreis-Orbitaldarstellung

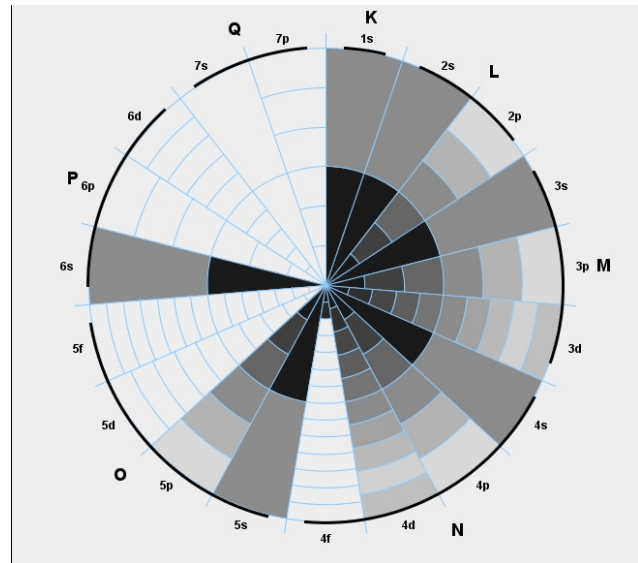
In der Kreis-Orbitaldarstellung wird die Besetzung der Orbitale eines Atoms im Detail übersichtlich dargestellt.



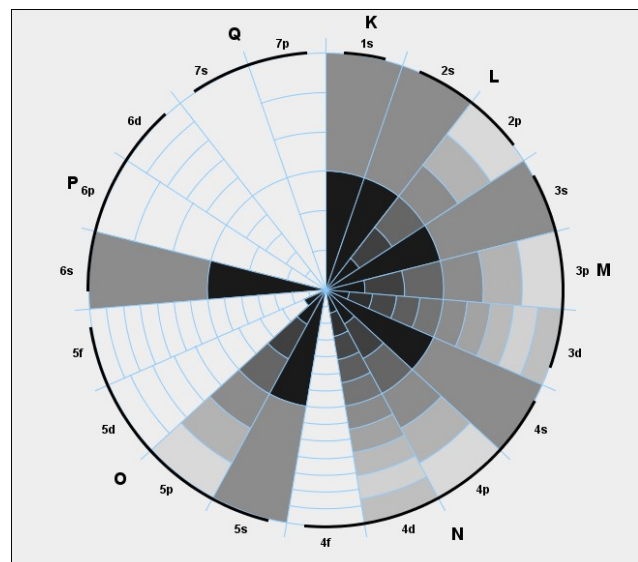
Kennt man nur das Bohrsche Schalenmodell, kann man auch nur auf die Schalenangaben achten

und so die Besetzung der Schalen bei den Atomen herausfinden.

Weil ein Atom immer zuerst das Orbital mit dem niedrigsten Energieniveau besetzt, die Reihenfolge der Energieniveaus der Orbitale aber nicht mit der alphabetischen Reihenfolge übereinstimmen, treten manchmal Lücken auf, z.B. wird das 4f-Orbital erst nach dem 6s-Orbital aufgefüllt, wie zu sehen bei Cer (rechts).



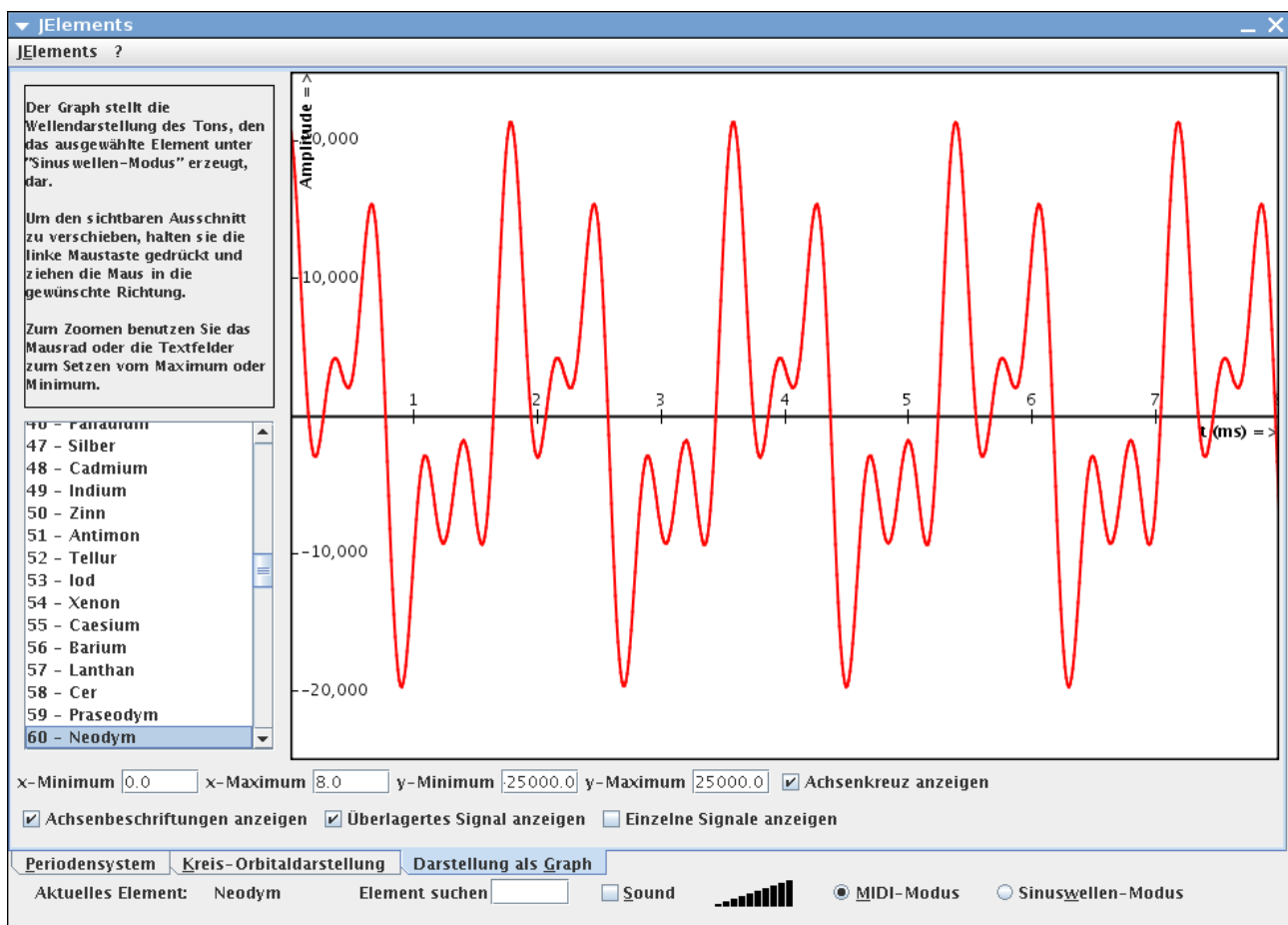
Bei dieser Besetzung treten allerdings auch Ausnahmen von der Regel aufgrund von energetisch günstigen Zuständen vor allem bei halb- und vollbesetzten Unterschalen auf. Diese Ausnahmen treten vermehrt in den Nebengruppen auf. Zum Beispiel bei Lanthan ist das letzte Elektron, nachdem das 6s-Orbital voll besetzt ist, im 5d-Orbital, statt wie nach der Regel im 4f-Orbital. Beim nachfolgenden Element, Cer, befinden sich 2 Elektronen im 4f-Orbital.



In der Liste links kann man Elemente auswählen oder auch einmal im Schnelldurchlauf durch alle Elemente gehen, um zu sehen wie sich die Orbitalbesetzung ändert. Schaltet man dazu den Ton an, kann man sehr gut die Veränderung hören. Im Panel darüber werden dieselben Informationen wie im Periodensystem angezeigt.

### 4.3 Darstellung als Graph

In der Darstellung als Graph wird der Ton, der im Sinuswellen-Modus zu hören ist als Graph dargestellt. Die Formel ist unter 2.2.2. Man sieht, dass dabei rechteckförmige Schwingungen erzeugt werden. Man kann den sichtbaren Ausschnitt des Graphen verändern indem man mit der Maus den Graph in die gewünschte Richtung „zieht“. D.h. man klickt auf das Graphfenster, hält die Maustaste gedrückt und bewegt die Maus in die entgegengesetzte Richtung zu der gewünschten. Mit dem Mausrad kann man einen größeren oder kleineren Ausschnitt sichtbar machen. Unter dem Graph ist es möglich die einzelnen Wellen, die die Gesamtwellen ergeben, sichtbar zu machen. Links befindet sich, wie bei der Kreis-Orbitaldarstellung, eine Liste mit allen Elementen, darüber allerdings eine Hilfe zur Bedienung des Graphen.



## 4.4 Exportieren

Damit man die Daten von JElements auch in anderen Anwendungen benutzen kann, kann man sie in eine CSV-Datei exportieren. Man erreicht das Export-Fenster entweder über das Menü oder mit F2.

Im Bereichs-Textfeld gibt man an, welche Elemente man exportieren möchte. Dazu gibt man die Ordnungszahlen der Elemente, die man exportieren möchte, durch Semikolons getrennt, ein. Man kann auch einen ganzen Bereich exportieren indem sie [Anfang]-[Ende] schreibt.

Beispiel: 5;9;14-26 exportiert Elemente 5, 9 und 14 bis 26. Im Pfad-Textfeld gibt man den Pfad und den Dateinamen der Datei an, in die exportiert wird.

Wenn keine Dateiendung angegeben wird, wird automatisch .csv an den Dateinamen angehängt.

Anschließend wählt man aus, welche Attribute der Elemente man exportiert haben möchte und drückt OK. Die dann erzeugte CSV-Datei kann man z.B. in einem Tabellenkalkulationsprogramm weiterverwenden.



## 5 Quellen

[1] <http://de.wikipedia.org/Periodensystem>

[2] Periodensystem pocketcard ([http://www.media4u.com/shop/product\\_detail.php?spid=222](http://www.media4u.com/shop/product_detail.php?spid=222)), Börm Bruckmeier Verlag, Stand 2005

[3] Gerthsen, Physik, Springer Verlag 1995