

Molekulové simulace umožňují reprodukovat a předvídat chování reálných systémů pomocí zjednodušených modelů. Za posledních 70 let se díky rapidnímu rozvoji počítačů tato metoda stala důležitou součástí různých vědeckých oborů. Díky své rychlosti a nízké cenové náročnosti mohou molekulové simulace pracovat ruku v ruce s reálným experimentem a v některých případech ho i nahradit. Didaktika této progresivní metody je zatím na Přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy v plenkách a její výuka je omezena na magisterské a vyšší studium. V rámci této práce jsme se zaměřili na tvorbu a testování úlohy do praktika z fyzikální chemie, která může sloužit jako první seznámení s molekulovými simulacemi pro studenty chemických bakalářských oborů. Úloha psaná v interaktivním prostředí Jupyter Notebook byla navržena na základě aktuálních pedagogických přístupů badatelské výuky, doplněných vzhledem ke komplexitě výukového obsahu vysokou mírou scaffoldingu. Volba simulace modelu superkritického argonu popsaného Lennard-Jonesovým potenciálem vycházela z požadavku na koncepční jednoduchost a možnost propojení s již známými poznatky. Testování úlohy na 12 studentech umožnilo vytvořit časový plán úlohy, opravit chyby, identifikovat nejčastější problémy a sestavit návrhy na zlepšení úlohy. Byli bychom rádi, kdyby tato úloha byla v budoucnu zařazena do běžné výuky v praktiku z fyzikální chemie, případně do kurzu fyzikální chemie na Přírodovědecké fakultě.