

### **Von den Teilchen zur Formel mit Simulation: BIRC im Chemiestudium**

#### **Physikochemie als Stolperstein zu Studienbeginn**

Trotz intensiver Reformbemühungen im Rahmen des Bologna-Prozesses sind die Abbruchquoten im Chemiestudium von 23 % in 1999 auf 43 % in 2012 (vgl. Heublein et al., 2008, S. 10 und 2014, S. 17) deutlich gestiegen. Dabei stellt der Studienstart eine besonders anforderungsreiche Transitionsphase dar: Auf die neuen Studierenden kommen für sie ungewöhnliche Anforderungen in einem bisher unbekanntem Lernumfeld zu. Neben allgemeinen Aspekten wie die Selbstorganisation und der Umgang mit neuen Lernformen ergeben sich aber auch fachspezifische Probleme, die mit den zum Teil ungewohnten Lerninhalten verbunden sind. Die Schwierigkeiten vieler StudienanfängerInnen mit der für sie ungewohnten universitären Mathematik sind literaturbekannt und treffen Studierende unterschiedlichster Fachrichtung (vgl. Dehling et al. 2014; Frettlöh et al. 2014). Im Chemiestudium beziehen sich diese Schwierigkeiten nicht nur auf das Nebenfach Mathematik selber. Von den drei großen chemischen Kerndisziplinen zeichnet sich insbesondere die Physikalische Chemie durch eine besonders intensive Nutzung komplexer mathematischer Handwerkszeuge aus.

Aber nicht nur die geforderten mathematischen Kompetenzen haben das Potential, das Lernen in diesem chemischen Kernfach zu beeinträchtigen (vgl. Schwedler 2017b): Die inhärente Fachstruktur an sich macht das Verständnis physikochemischer Konzepte nicht leicht. Viele dieser Konzepte basieren auf dem dynamischen Verhalten statistischer Entitäten (vgl. Cartier 2009). Daher kann ein beobachtetes Phänomen häufig nicht auf die Eigenschaften eines einzelnen Atoms oder Moleküls zurückgeführt werden. Stattdessen ist eine Betrachtung der komplexen und oft dynamischen Interaktion zwischen vielen Atomen und Molekülen nötig, um ein angemessenes Verständnis des Konzepts zu erreichen. Darüber hinaus ist selbst dieser submikroskopische Zugang zum fachlichen Konzept in der Thermodynamik als sehr abstrakter (vgl. Carson & Watson 2002) und inhärent makroskopischer Wissenschaft nur sporadisch möglich und meist wenig intuitiv. Dazu kommen häufig eng gefasste Gültigkeitsgrenzen und unzureichend gegen die Alltagssprache abgegrenzte Fachbegriffe (vgl. Goedhart & Kaper 2002; Sözbilir 2010).

Die chemiedidaktische Forschung der vergangenen Jahrzehnte zeigt, welche entscheidende Rolle korrekte Vorstellungen auf der submikroskopischen Ebene beim Erlernen der Chemie spielen (vgl. Barke 2006; Marohn 2008). Schon mit Blick auf Konzepte, die nur ein Verständnis einzelner Teilchen erfordern, stellt die korrekte Verknüpfung der makroskopischen, submikroskopischen und symbolischen Ebene eine große Herausforderung dar (vgl. Johnstone 1991, S. 77f.). Es ist daher die Grundannahme dieser Studie, dass die Entwicklung eines korrekten mentalen Modells, eines „subjektiven, anschaulichen, mentalen Vorstellungsbilds als Ausschnitt der Realität“ (Reinfried 2006, S. 39) auf submikroskopischer Ebene für das dynamische Verhalten statistischer Entitäten häufig nicht gelingt, und daher auch eine korrekte Verknüpfung mit der mathematischen Repräsentation nicht gelingen kann. So indizieren aktuelle Forschungen zum Studienbeginn in Chemie (vgl. Kimpel & Sumfleth 2017), dass Schwierigkeiten mit mathematischem Handwerkzeug in der Allgemeinen Chemie oft nicht in mangelnder mathematischer Kompetenz gründen, sondern aus einem mangelnden chemischen Konzeptverständnis resultieren, welches eine gelungene Anwendung vorhandener mathematischer Kompetenzen inhibiert. Für gelingendes Lernen in der Physikochemie sollte also beides vorhanden sein: das konzeptuelle Grundverständnis sowie ausreichende mathematische Kompetenzen.

### Konzept der BIRC-Lerneinheiten

Es ist das Ziel der Lerneinheiten, die Studierenden beim Aufbau von komplexen und dynamischen Vorstellungen auf der submikroskopischen Ebene zu unterstützen und diese Vorstellungen anschließend mit abstrakter mathematischer Repräsentation zu verknüpfen. Auf diese Weise sollen sowohl konzeptuelle Verständnisschwierigkeiten im Umgang mit abstrakten Kernthemen der Physikochemie, als auch die von den Studienanfängern verbalisierte Überforderung beim häuslichen Selbstlernen (vgl. Schwedler 2017b) vermindert werden.

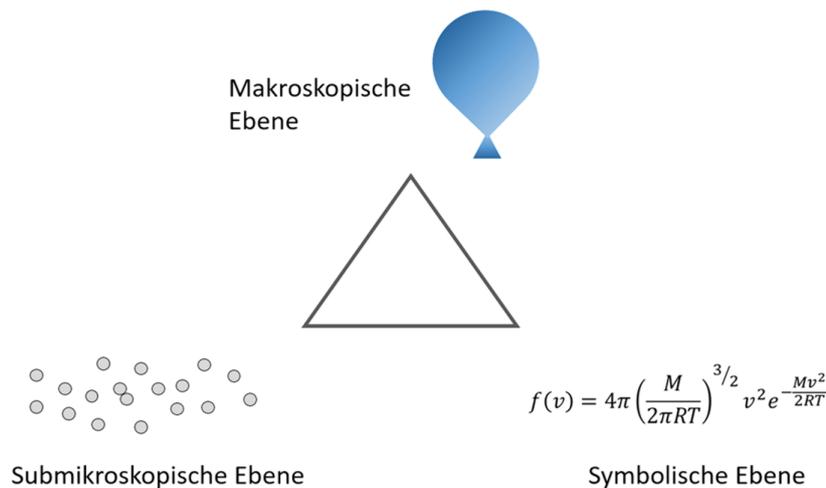


Abb1: Das chemische Dreieck nach Johnstone am Beispiel von Maxwells Geschwindigkeitsverteilung

Maxwells Geschwindigkeitsverteilung ist ein Kernthema der kinetischen Gastheorie aus dem ersten Studienjahr. Abbildung 1 zeigt eine schematische Darstellung der drei Ebenen nach Johnstone zu diesem Thema. Dabei wird deutlich, dass die statische Darstellung kaum in der Lage ist, die dynamische Bewegung einer statistischen Teilchenentität einzufangen. Stattdessen bieten sich computerbasierte Simulationen als Werkzeug an. Sie werden nicht nur von Landriscina (2009 S. 26ff.) als optimale Methode bezeichnet, um mentale Modelle der Lerner zu verändern. Cox (2003) betont, dass sie sich besonders gut dazu eignen, das dynamische Verhalten vieler Teilchen zu visualisieren. Simulationen stellen zudem multiple Repräsentationen dar, so dass der erfahrungsgemäß schwierige Brückenschlag zwischen chemischem Phänomen und mathematischem Modell durch ihren Einsatz gestärkt werden kann.

Daher basiert jede BIRC-Lerneinheit auf einer interaktiven Simulation, die das dynamische Verhalten einer statistischen Teilchenentität in Echtzeit berechnet, darstellt und mit mathematischer Repräsentation verbindet. In drei Schritten werden die Studierenden zunächst mit einer antizipierenden Fragestellung auf der Teilchenebene zu einem physikochemischen Kernkonzept konfrontiert. Dabei sollen sie sich nicht nur ihrer eigenen Vorstellungen bewusstwerden, sondern müssen sich auch bezüglich der antizipierten Lösung positionieren. Im zweiten Schritt können sie die eigene Vorstellung mit Hilfe der interaktiven Simulation überprüfen. Im letzten Schritt erfolgt der Transfer auf die Ebene der abstrakten mathematischen Repräsentation. Die detaillierte Konzeption der BIRC-Lerneinheit zu Maxwells Geschwindigkeitsverteilung wird gerade veröffentlicht (vgl. Schwedler 2017c).

### **Technische Weiterentwicklung**

In bisherigen Arbeiten wurden Prototypen zu verschiedenen physikochemischen Kernthemen mit Hilfe des *java*-basierten Interfaces *molecular workbench* (vgl. Tinker & Xie 2008) des ersten Studienjahrs entwickelt (vgl. Schwedler 2017a). Dieses Interface ermöglicht die Generierung eigener Simulationen mit vergleichsweise geringem Programmieraufwand. Allerdings eignet sich die veraltete Technik der Prototypen aufgrund von digitalen Sicherheitslücken nur für Einzelfallstudien im Labor. Um die Lerneinheiten tatsächlich als individuelles Selbstlernmaterial einsetzen zu können, wurden zwei *java*-basierte Prototypen (zu Maxwells Geschwindigkeitsverteilung (Kinetik) und zum 1. Hauptsatz der Thermodynamik) in eine technisch aktuelle Version überführt. Die Simulationen wurden mit dem Interface *molecular workbench next generation* in javascript erstellt und werden auch dort gehostet. Sie sind eingebettet in *html5*-, *css*- und *javascript*-basierte Lerneinheiten. Die interaktiven Diagramme wurden mit *desmos* generiert und in die Lerneinheiten eingebettet.

Bei der Überführung der Simulationen in die neue Technik stellte sich die Balance zwischen statistischer Aussagekraft der Simulation (hohe Teilchenzahl) und der benötigten Rechnerperformanz als besonders kritisch heraus. Um die Lerneinheiten auch mit weniger leistungsfähigen Rechnern bearbeiten zu können, wurden daher zum Teil erhöhte Schwankungen in den berechneten Simulationsdaten, die durch eine verminderte Teilchenzahl zustande kommen, in Kauf genommen.

Diese technisch überarbeiteten BIRC-Lerneinheiten sind einfach per Browser im Internet abrufbar. Sie sind im Gegensatz zu *java*-Anwendungen sehr sicher und erfordern keine weitere Soft- oder Hardware von Seiten des Users. Die Verwendung aktueller, weit verbreiteter und zukünftig anschlussfähiger Software stellt sicher, dass die Lerneinheiten noch viele Jahre verwendbar bleiben.

### **Einsatz und Evaluation im Feld**

Die neuen Lerneinheiten wurden im WS 16/17 erstmals als Teil der regulären Lehre eingesetzt und Nutzung, Akzeptanz und Lernerfolg der Studierenden erhoben. Das triangulierende Forschungsdesign kombiniert qualitative concurrent-ThinkAloud-Erhebungen zur Verbalisierung internaler Denkprozesse (vgl. van Someren et al. 1994) und qualitative Interviews mit einem quantitativen Pre-Post-Design. Dabei erfolgen Pre- und Post-Test zur Erhebung von Nutzung, Akzeptanz und Einschätzung des Lernerfolgs und der Unterstützung als Paper-and-Pencil Befragung in der ersten und letzten Vorlesung des Semesters. Die Post-Erhebung wird durch Online-Fragebögen im direkten Anschluss an die häusliche Bearbeitung der Lerneinheiten ergänzt.

Erste Ergebnisse indizieren positive Ergebnisse hinsichtlich Nutzung und Akzeptanz der Lerneinheiten. Bezüglich des Lernerfolgs verbalisieren die Studierenden von sich aus Fortschritte hinsichtlich der submikroskopischen Vorstellung und stimmen der verbesserten Verknüpfung dieser Vorstellung mit mathematischer Repräsentation überwiegend zu. Eine ausführliche Analyse des Lernerfolgs der Studierenden zu Maxwells Geschwindigkeitsverteilung wird gerade publiziert (vgl. Schwedler 2017 c).

### **Zusammenfassung und Ausblick**

Das Konzept BIRC soll Studienanfänger beim Selbstlernen im Fach Physikochemie unterstützen. Da sich die *java*-basierten Prototypen nur eingeschränkt zum flächendeckenden Einsatz in der regulären Lehre eignen, wurden zwei Prototypen in eine technisch sichere und einfach handhabbare Version überführt und im WS 16/17 im Modul ‚Physikalische Chemie Basis‘ als Ergänzung zu den Übungsaufgaben eingesetzt. Die Ergebnisse zeigen, dass die Lerneinheiten von den Studierenden gut angenommen werden. In Zukunft soll das Konzept auf eine Datenbank aus 10-12 Lerneinheiten ausgeweitet werden, um die Kernthemen des Semesters abdecken zu können.

**Literatur**

- Barke, H.-D. (2006) Chemiedidaktik. Diagnose und Korrektur von Schülervorstellungen. Springer, Berlin, Heidelberg.
- Carson, E. M. & Watson, J. R. (2002): Undergraduate students' understandings of entropy and Gibbs free energy, *U. Chem. Ed.*, 6, S. 4-12.
- Cartier, S. F. (2009): An Integrated, Statistical Molecular Approach to the Physical Chemistry Curriculum, In: *JoCE* 12 (86) S. 1397-1402.
- Cox, A. J., Belloni, M., Dancy, M. & Christian, W. (2003): Teaching thermodynamics with Physlets® in introductory physics. *Physics Education* 38 (5), 433-440.
- Dehling, H., Glasmachers, E., Griese, B., Härterich, J., & Kallweit, M. (2014): MP<sup>2</sup> - Mathe/Plus/Praxis - Strategien zur Vorbeugung gegen Studienabbruch. *Zeitschrift für Hochschulentwicklung* 9 (S.39-55).
- Frettlöh, D. & Hattermann, M. (2014). Konzeption eines Mathematik-Förderprogramms für Informatikstudierende der Universität Bielefeld. In: Biehler, R.; Hochmuth, R.; Hoppenbrock, A. & Rück, H.- G. (Hrsg.), *Konzepte und Studien zur Hochschuldidaktik und Lehrerbildung Mathematik: Vol. 2. Mathematik im Übergang von Schule zur Hochschule und im ersten Studienjahr*. Berlin und Heidelberg: Springer
- Goedhart, M. J. und Kaper, W. (2002): From chemical energetics to chemical thermodynamics. In: Gilbert, J. K. et al (Hrsg.) *Chemical Education: Towards research-based practice*. Dordrecht: Kluwer, S. 339-362.
- Heublein, U. et al (2008): Die Entwicklung der Studienabbruchquote an den deutschen Hochschulen, HIS-Projektbericht, Hannover.
- Heublein, U., Richter, J., Schmelzer, R. and Sommer, D. (2014) Die Entwicklung der Studienabbruchquoten an den deutschen Hochschulen - Statistische Berechnungen auf der Basis des Absolventenjahrgangs 2012. *Forum Hochschule*. Hannover.
- Heublein, U., Hutzsch, C., Schreiber, J., Sommer, D. and Besuch, G. (2010) Ursachen des Studienabbruchs in Bachelor- und in herkömmlichen Studiengängen. *HIS : Forum Hochschule*, Hannover.
- Johnstone, A. H. (1991): Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem. In: *Journal of Computer Assisted Learning*, 7, S. 75-83.
- Kimpel, L & Sumfleth, E. (2017) Probleme bei der Bearbeitung chemischer Rechenaufgaben. In: Maurer C, editor. *Implementation fachdidaktischer Innovation im Spiegel von Forschung und Praxis*. LIT Verlag, Berlin. 79–82.
- Landriscina F. (2009): Simulation and learning: the role of mental models. In: *Journal of e-Learning and Knowledge Society*. 5 (2), S. 23-32.
- Marohn, A. (2008) "Choice2learn" - eine Konzeption zur Exploration und Veränderung von Lernervorstellungen im naturwissenschaftlichen Unterricht. *ZfDN*, 14, 57–83.
- Schwedler, S. (2017a) Interaktive Simulationen im Chemiestudium: Bridging Imagination and Representation in Chemistry (BIRC). In: Maurer C, editor. *Implementation fachdidaktischer Innovation im Spiegel von Forschung und Praxis*. LIT Verlag, Berlin. 656–659.
- Schwedler, S. (2017b): Was überfordert Chemiestudierende zu Studienbeginn? *Zeitschrift für die Didaktik der Naturwissenschaften*, DOI 10.1007/s40573-017-0064-5.
- Schwedler, S. (2017c): Wie schnell sind die Teilchen denn jetzt? Studienanfänger des Fachs Chemie entwickeln dynamische Vorstellungen zur Maxwellverteilung mit BIRC, *ChemKon*, Manuskript angenommen mit minor revisions.
- Sözbilir, M., Pinarbasiand, T. & Canpolat, N. (2010): Prospective Chemistry Teachers' Conceptions of Chemical Thermodynamics and Kinetics, *Eurasia Journal of Mathematics, Science & Technology Education*, 6(2), 111-120
- Tinker, R. & Xie, Q. (2008): Applying Computational Science to Education: The Molecular Workbench Paradigm, In: *Computing in Science and Engineering*, Band 10, Nr 5, S. 24-27.
- Van Someren, M., Barnard, Y. F., Sandberg, J. A. C. (1994): *The think aloud method – a practical guide to modelling cognitive processes*, London: Academic Press.