

Nicole Graulich¹
 Ira Caspari¹
 Melissa Weinrich²
 Hannah Sevia²

¹Universität Gießen

²University of Boston Massachusetts

Mechanistisches Denken in der Chemie

Mechanismen sind das Aushängeschild der Organischen Chemie auf dem Hochschulniveau und gleichzeitig die größte Hürde für Studierende. Mechanismen gelten zwar als Erklärung, weshalb und wie ein Phänomen abläuft, es ist jedoch kaum geklärt, was den Umgang damit, das „Mechanistische Denken“, ausmacht. Die angloamerikanische Fachdidaktik (Bhattacharyya, 2013) widmet sich der Thematik, hat aber bisher keine pragmatische Definition erarbeiten können, die sich für die Diagnose und Förderung Mechanistischen Denkens bei Studierenden eignet.

Aufgrund der fehlenden domain-spezifischen Definition mechanistischen Denkens in der Organischen Chemie adaptieren wir einen Ansatz aus der Wissenschaftsphilosophy, um daraus eine handlungsfähige Definition für die Organische Chemie abzuleiten. Dieser Ansatz wurde schon von Arbeitsgruppen aus der Physik- und Biologiedidaktik verwendet (Russ, Scherr, Hammer & Mikeska, 2008; van Mil, Boerwinkel & Waarlo, 2013; Southard, Wince, Meddleton & Bolger, 2016). In vereinfachter Form wurde es bereits für die Analyse von mechanistischen Denkansätzen von Schülern bei Verwendung von Slow-Motion Videos im Chemieunterricht angewendet (Caspari, Graulich, Lieber & Rummel, 2017).

Die Natur von Mechanismen

Die Arbeitsgruppe um Machamer, Darden und Craver (2000) haben sich intensiv dem historischen Wandel, den Begrifflichkeiten und der Verwendung von Mechanismen in der Molekular- und Neurobiologie philosophisch genähert und daraus eine komponenten-basierte Definition eines Mechanismus erarbeitet. Ein regelmäßiges Auftreten eines Mechanismus unter gleichen Voraussetzungen zeigt, dass ein Mechanismus stets von bestimmten Einflussfaktoren, bzw. Komponenten, abhängt und darüber beschrieben werden kann: *Mechanisms are entities and activities organized such that they are productive of regular changes from start or set-up to finish or termination conditions* (Machamer, Darden & Craver, 2000, S. 3). Hierbei stellen die Entitäten alle „Dinge“ dar, die während des Prozesses die Akteure sind und durch Eigenschaften charakterisiert werden. Die Aktivitäten beschreiben den Verlauf eines Mechanismus. Ausgehend von einem Startpunkt durchläuft ein Mechanismus mehrere mechanistische Schritte bis zum Abschluss des Phänomens (Machamer, Darden & Craver, 2000).

Darüber hinaus definiert Darden (2002) die Denkstrategie des „Chainings“, welche die schlussfolgernde Verknüpfung der Komponenten beschreibt. Allgemein beschreiben Craver und Darden (2013) „Chaining“ wie folgt: (...) *first learning something about the mechanism or one of its components and then using that knowledge to make inferences about what came before it or what is likely to come after it* (Craver & Darden, 2013, S. 77). Dies kann, wie im Zitat deutlich wird in unterschiedliche Richtungen verlaufen, zum einen als „Forward Chaining“ und zum anderen als „Backward Chaining“. Beim „Forward Chaining“ schlussfolgert man in Richtung des ablaufenden Mechanismus. Dazu werden Entitäten und ihre Eigenschaften zu Beginn eines Prozesses beobachtet und hieraus Rückschlüsse über andere Entitäten oder Aktivitäten zu einem späteren Zeitpunkt des Mechanismus geschlossen. Analog zum „Forward Chaining“ handelt es sich beim „Backward Chaining“ um ein Schlussfolgern in entgegengesetzter Richtung zum Ablauf des Mechanismus. Beobachtet man beispielsweise innerhalb eines Mechanismus eine Aktivität in einem Folgeschritt, z.B. die

Abspaltung eines Wassermoleküls, lässt sich über „Backward Chaining“ die nötige Aktivität im vorigen Schritt schlussfolgern, hier z.B. die Protonierung einer Alkoholfunktion. Gerade das „Backward Chaining“ ist in der Organischen Chemie eine häufig angewendete Strategie um zwischen möglichen alternativen mechanistischen Schritten denjenigen zu identifizieren, der am häufigsten durchlaufen wird. Kausal begründet ist ein „Backward Chaining“ jedoch erst dann, wenn es die tatsächliche Triebkraft der Reaktion, die Kinetik oder die Thermodynamik des Systems mit einbezieht. Ohne eine solche kausale Begründung bleibt die Strategie des „Backward Chaining“ rein teleologisch. Aus bisherigen Arbeiten ist bekannt, dass besonders Studierende chemische Vorgänge verstärkt teleologisch begründen, d.h. das Produkt eines Vorgangs als Ursache für das Zustandekommen des Vorgangs heranziehen (Talanquer, 2013).

Ziele und Beschreibung der Studie

In einem Kooperationsprojekt mit Melissa Weinrich und Hannah Sevia von der University of Massachusetts Boston haben wir in einer Meta-Analyse von bereits erhobener Daten (Weinrich & Sevia, 2017) untersucht, inwiefern Studierende „Backward Chaining“ Ansätze verwenden und inwiefern diese vergleichbar sind mit denen des Professors des Kurses (Caspari, Weinrich, Sevia & Graulich, 2017). In dieser qualitativen Studie haben 20 Studierenden eines OC II Kurses an einer amerikanischen Universität im Nordosten der vereinigten Staaten und ihr Professor teilgenommen. Der Professor wurde nach für den Kurs typischen mechanistischen Aufgaben gefragt. Diese wurden im Interview den Studierenden gestellt und der Professor wurde gebeten seine Erwartungen an erfolgreiche Studierende beim Lösen der Aufgaben zu im Interview zu schildern. Für die Analyse der „Backward Chaining“ Strategien wurden die Denkansätze bezogen auf die jeweiligen mechanistischen Schritte zwischen den Studierenden und ihrem Professor verglichen und analysiert ob es sich um teleologisches oder kausales „Backward Chaining“ handelt.

Analyse und Ergebnisse

Die Analyse der Daten ergab, dass die Studierenden in allen Fällen, in denen sich „Backward Chaining“ feststellen ließ, dieses teleologisch verwenden und keine kausale Begründung, die thermodynamische oder kinetische Aspekte des Mechanismus mit einbezieht, verwenden.

„Backward Chaining“ zum Protonentransfer der Jones Oxidation	
Beschreibung des Professors	“and then there is a proton transfer, so in here there's lots of, and I go over this in class [...] the reason why this proton (on O1) goes towards this specific alcohol (O3) is because it is a productive part of the mechanism, and it makes the reaction go forward. [...] The reason why I don't put the proton (on O1) on this oxide here (O2), is, even though I can do that, it's not a productive part of the mechanism. It just stays there if I do it. So, I'm going to do it this way (proton transfer to O3).”
Beschreibung der Studierenden	“then what I did is I added the hydrogen from the acid (oxonium ion) to make H₂O (on O3)... I am trying to make it because I remember it has to make H₂O in order for it to be able to push it off the structure” (Student 1) “I know it's this OH this alcohol group (on O3) becomes an H₂O which makes it leave, so it grabs this hydrogen (on O1) and brings this bond right here.” (Student 2)

Tab.1: Ausschnitte aus dem Coding zum „Backward Chaining“

Das verwendete „Backward Chaining“ des Professors zeigt ebenfalls keine kausale Begründung, sondern begründet den dargestellten Schritt teleologisch. Obwohl der Professor, wie im Zitat (Tab 1.) deutlich wird, erwartet, dass Studierenden alternative mögliche Protonentransfers in diesem Schritt der Jones Oxidation bewusst sind, ist seine Begründung für die Darstellung eines spezifischen Protonentransfers lediglich, dass dies „*the productive part of the mechanism*“ ist. In diesem hier gezeigten Kontext wäre kausales „Backward Chaining“ möglich, da die alternativen Protonentransfers vergleichbare Energiebarrieren haben und daher im Gleichgewicht gleichermaßen stattfinden können. Allerdings ermöglicht nur die Protonierung der Alkoholfunktion den Folgeschritt der Wasserabspaltung, welcher dann zu einem energetischen Minimum führt. Diese thermodynamischen Überlegungen bleiben bei den Studierenden und ihrem Professor jedoch außen vor und werden nicht verwendet. Vergleichbare teleologische „Backward Chaining“ Ansätze findet sich auch in den Äußerungen zu anderen typischen Mechanismen wieder.

Obwohl Studierende in der Hälfte der Fälle, vergleichbar wie ihr Professor die mechanistischen Schritte durch „Backward Chaining“ herleiten, geschieht dies, wie auch bei ihrem Professor, ohne eine kausale Begründung. Darüber hinaus findet sich bei den Studierenden keine Beschreibung oder Erwähnung möglicher alternativer Schritte, bei denen sich „Backward Chaining“ zu Unterscheidung der Schritte anbieten würden. In der anderen Hälfte der Fälle verwenden Studierende dasselbe teleologische „Backward Chaining“ in einem Kontext, in dem es kausal nicht anwendbar ist. So möchte beispielsweise eine Studierende für den PCC Mechanismus im Oxidationsschritt Wasser als Base einsetzen und kreiert deshalb im vorherigen mechanistischen Schritt ungeachtet jeglicher chemischer Eigenschaften ein Wassermolekül (Abb. 1).

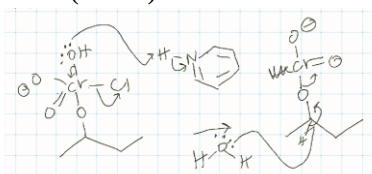


Abb. 1: Unter Verwendung von „Backward Chaining“ vorgeschlagener mechanistischer Schritt einer Studentin für den PCC Mechanismus

Ausblick

Diese Ergebnisse zeigen, dass die Studierenden beim Lernen und Verstehen von organisch-chemischen Mechanismen meist keine andere Wahl haben, als die Mechanismen teleologisch zu memorieren. Häufig erscheinen die dargestellten mechanistischen Schritte auf Ebene der Lewis-Strukturen, auch wenn dieser Schritt in ein theoretisches Minimum führen, unlogisch (siehe Tab. 1). Wie im obigen Beispiel deutlich ist, kann somit ein Protonentransfer nicht, wie man intuitiv erwarten würde, einen Ausgleich von Ladung herbeiführen. Studierende, die versuchen ihr Vorwissen über Eigenschaften von Entitäten heranzuziehen um sich Schritte vorherzusagen, werden, z.B. bei der Jones Oxidation, diese Schritte falsch vorhersagen. Obwohl bekannt ist, dass konzeptuelles „Forward Chaining“ den Erfolg Studierender in Organischer Chemie verbessert (Grove, Cooper & Cox, 2012), wird dieser Aspekt in der Lehre unzureichend kommuniziert.

Die Ergebnisse dieser qualitativen Studie weisen auf grundlegende Defizite in der Kommunikation von domain-spezifischen Denkstrategien in der Lehre der Organischen Chemie hin. Studierenden sollten häufiger die Gelegenheit bekommen alternative Schritte basierend auf ihrem chemisch-konzeptuellen Wissen vorherzusagen, um dann ihr bereits ausgeprägtes „Backward Chaining“ kausal mit thermodynamischen oder kinetischen Abwägungen zu Reaktion zu verknüpfen. Dies erfordert in der Lehre ein Umdenken, weg von kompletten Mechanismen, hin zur verstärkten Betrachtung und Abwägung einzelner Schritte.

Literatur

- Caspari, I., Graulich, N., Lieber, L. & Rummel, L. (2017). „Die Flamme geht da runter“ - Prozessbeschreibungen von Lernenden analysieren. NIU - Chemie, 19-24.
- Caspari, I., Weinrich, M., Sevia, H. & Graulich, N. (2017). This mechanistic step is "productive": organic chemistry students' backward-oriented reasoning. Chemistry Education Research and Practice, Accepted Manuscript.
- Craver, C. F. & Darden, L. (2013). In search of mechanisms: Discoveries across the life sciences. Chicago: University of Chicago Press.
- Darden, L. (2002). Strategies for Discovering Mechanisms: Schema Instantiation, Modular Subassembly, Forward/Backward Chaining. Philosophy of Science, 69, 354-365.
- Grove, N. P., Cooper, M. M. & Cox, E. L. (2012). Does Mechanistic Thinking Improve Student Success in Organic Chemistry? J. Chem. Educ., 89, 850-853.
- Machamer, P., Darden, L. & Craver, C. F. (2000). Thinking about mechanisms. Philosophy of Science, 67, 1-25.
- Russ, R. S., Scherr, R. E., Hammer, D. & Mikeska, J. (2008). Recognizing mechanistic reasoning in student scientific inquiry: A framework for discourse analysis developed from philosophy of science. Science Education, 92, 499-525.
- Southard, K., Wince, T., Meddleton, S. & Bolger, M. S. (2016). Features of Knowledge Building in Biology: Understanding Undergraduate Students' Ideas about Molecular Mechanisms. CBE-Life Sciences Education, 15.
- Talanquer, V. (2013). When Atoms Want. Journal of Chemical Education, 90, 1419-1424.
- van Mil, M. H., Boerwinkel, D. J. & Waarlo, A. J. (2013). Modelling molecular mechanisms: A framework of scientific reasoning to construct molecular-level explanations for cellular behaviour. Science & Education, 22, 93-118.
- Weinrich, M. L. & Sevia, H. (2017). Capturing students' abstraction while solving organic reaction mechanism problems across a semester. Chemistry Education Research and Practice, 18, 169-190.