

JACK: Ein e-learning und e-assessment Tool für die organischen Chemie

Ausgangslage

Digitale fachspezifische Prüfungsaufgaben stellen für Hochschulen weiterhin eine Herausforderung dar. Das Projekt PITCH (Prüfungen innovieren. Transfer schaffen. Chancengerechtigkeit fördern; gefördert von der Stiftung Innovationen in der Hochschullehre) erprobt in 3 Arbeitsfeldern (Digitalisierung, Recht, Disziplin & Didaktik) unter Beteiligung von 14 Fächern neue digitale Prüfungsformate. Für die organische Chemie stehen die digitale Eingabe und die automatisierte Auswertung von fachspezifischen Repräsentationen (Zeichnung molekularer Strukturen und Reaktionsmechanismen) bei der Digitalisierung (Puentedura, 2006) in Fokus.

Toolentwicklung

Um eine digitale Eingabe von Molekülzeichnungen zu ermöglichen, wurde in das e-learning und e-assessment System JACK (Striwe, 2016) der open source Moleküleditor Kekulé.js (Jiang et al., 2016) integriert. Der Moleküleditor basiert auf der von der IUPAC für die organische Chemie geforderten Skelettschreibweise (Brecher, 2008). Für die automatisierte Auswertung studentischer Eingaben werden gezeichnete Moleküle in InChI-Codes (Heller et al., 2015) transformiert. InChI-Codes beschreiben Moleküle unabhängig von der Schreib- bzw. Zeichenrichtung stereochemisch eindeutig. Die aus studentischen Eingaben generierten InChI-Codes werden automatisch mit der hinterlegten Musterlösung abgeglichen, so dass rückgemeldet werden kann, ob eine Eingabe richtig oder falsch ist. Zusätzlich können weitere Lösungen (z. B. typische fehlerhafte Lösungen) und zusätzliches Feedback (z. B. Erklärungen, warum bestimmte Lösungen falsch sind, Johnson & Priest, 2014, oder Musterlösungen, Renkl, 2014) hinterlegt werden. Bei der Entwicklung des Tools wurden zunächst simple Molekülzeichenaufgaben und einfache Reaktionsgleichungen digital umgesetzt. Aktuell werden digitale Aufgaben mit mehreren Reaktionsschritten optimiert und die Umsetzung von Reaktionsmechanismen vorbereitet.

Evaluationsgegenstand

Parallel zur Entwicklung werden Evaluationsstudien durchgeführt, mit dem Ziel die Vergleichbarkeit der Aufgabenschwierigkeit/Personenfähigkeit sowie der kognitiven Belastung zwischen Papierformat und digitalem Format sowie Formatspezifika zu untersuchen. Hierbei wurden zunächst Molekülzeichenaufgaben und in einem zweiten Schritt Chiralitätsaufgaben untersucht. Abschließend diskutiert dieser Beitrag Herausforderungen bei der Digitalisierung von Reaktionsgleichungen und Reaktionsmechanismen.

Ergebnisse der Evaluationsstudien zu Molekülzeichenaufgaben

Erste Studien haben die Personenfähigkeit, die kognitive Belastung und die Usability für simple digitale Molekülzeichenaufgaben („Zeichnen Sie das Molekül zu folgendem IUPAC-Namen.“) im Vergleich zum Papierformat untersucht (Schüßler, Striwe et al., 2024). Die Ergebnisse zeigen, dass für diesen Aufgabentyp für vergleichbare Ergebnisse im digitalen Format eine umfangreiche Einführung in das digitale Tool und regelmäßige Arbeit mit den digitalen Aufgaben im Rahmen der Lehrveranstaltung notwendig sind. Zusätzlich stellt die Skelettschreibweise für die Studierenden im digitalen Format eine Hürde dar, die sie im

Papierformat bisher ohne negative Konsequenzen (z. B. in der Bewertung) umgehen können (Schüßler, Rodemer et al., 2024), weil auch Lösungen, die auf anderen Repräsentationsformen beruhen, akzeptiert werden. Mit Blick auf die Digitalisierung von Klausuren stellt sich daher die Frage, inwiefern die Nutzung der Skelettschreibweise ein Lernziel in der organischen Chemie darstellt und in beiden Formaten konsequent eingefordert wird.

Ergebnisse der Evaluationsstudien zu Chiralitätsaufgaben

In einem nächsten Schritt wurden Aufgabenschwierigkeit und investierte Denkanstrengung (Paas, 1992) für digitale Aufgaben zum Inhaltsbereich Chiralität mit entsprechenden Aufgaben im Papierformat verglichen. Eingesetzt wurden 19 Aufgabenpaare mit jeweils einem digitalen Item und einem vergleichbaren papierbasierten Item. Über drei Semester haben insgesamt 80 Studierende (SoSe: B. Sc. Chemie & B. Sc. Water Science, WiSe: B. LA Chemie) im Rahmen der Übung „organische Chemie“ die Aufgaben bearbeitet. Dabei mussten sie entscheiden, ob Moleküle über ein Chiralitätszentrum verfügen (MC), ob zwei abgebildete Moleküle identisch oder Enantiomere sind (DC), aber auch chirale Moleküle ausgehend von deren IUPAC Namen zeichnen (offen) und die absolute Konfiguration von abgebildeten Molekülen bestimmen (MC). Basierend auf den Studierendenantworten wurde mithilfe von Winsteps (Boone et al., 2014) die relative Aufgabenschwierigkeit der Chiralitätsaufgaben (Pers. Rel. = .82, Aufg. Rel. = .90) sowie ein entsprechender Raschwert für die investierte Denkanstrengung (Pers. Rel. = .93, Aufg. Rel. = .96) bestimmt. Ein Vergleich zwischen Papierformat und digitalem Format mittels *t*-Tests zeigt, dass die Aufgabenschwierigkeit, $t(18) = 2.35$, $p = .031$, $d_{RM} = 0.69$, und die investierte Denkanstrengung, $t(18) = 6.42$, $p = \leq .001$, $d_{RM} = 1.68$, im Papierformat signifikant geringer sind. Papierbasierte Aufgaben sind also leichter und können mit geringerer Denkanstrengung bearbeitet werden. Eine mögliche Ursache für die Formatunterschiede können Notizen und Markierungen sein, die 47 von 80 Studierenden bei der Aufgabenbearbeitung im Papierformat anfertigen. Diese bilden zum Teil Lösungsschritte und Teillösungen ab, die in der Klausurbewertung nicht berücksichtigt werden. Im digitalen Format besteht aktuell keine digitale Notizenfunktion. Mit Blick auf die Digitalisierung von Prüfungen stellt sich daher zunächst die Frage nach der Bedeutung dieser Markierungen und Notizen für die Aufgabenbearbeitung, um in einem weiteren Schritt entscheiden zu können, inwiefern für einen fairen Formatvergleich eine digitale Notizenfunktion ergänzt werden muss.

Herausforderungen bei der Digitalisierung von Reaktionsgleichungen und Reaktionsmechanismen

Technisch können bereits auch komplexere Aufgaben (z. B. simplen Reaktionsgleichungen) digital abgebildet werden. Neben dem Abgleich der InChI-Codes für die Moleküle wird zusätzlich geprüft, welche Moleküle als Edukte (vor dem Reaktionspfeil) und welche als Produkte (hinter dem Reaktionspfeil) dargestellt wurden. Zusätzlich können weitere Reaktionspartner (über dem Reaktionspfeil) und Nebenprodukte (unter dem Reaktionspfeil) berücksichtigt werden. Ein Problem für die automatisierte Auswertung dieser Aufgaben besteht darin, dass für diese Aufgaben keine fachliche Konvention besteht, wie Reaktionsgleichungen dargestellt werden sollen (Werden beispielsweise für die Reaktion von Ethen mit Brom beide Moleküle als Edukte links vom Reaktionspfeil dargestellt? Oder wird lediglich das Ethenmolekül links vom Reaktionspfeil dargestellt und das Brommolekül als weiterer Reaktionspartner über den Reaktionspfeil geschrieben? Theoretisch wäre es auch denkbar, das Brommolekül links vor den Reaktionspfeil und das Ethenmolekül über den Reaktionspfeil zu schreiben). Im Papierformat werden aktuell alle (irgendwie) verständlichen Lösungen akzeptiert. Damit das digitale Tool die verschiedenen Lösungen ebenfalls

akzeptiert, müssen für jede Aufgabe alle denkbaren Lösungsmöglichkeiten hinterlegt werden, was mit erheblichem Aufwand verbunden ist.

Neben der Darstellung der Lösung stellen sich darüber hinaus Fragen nach dem Ziel der Aufgaben und einer damit stringenten Vergabe von (Teil)Punkten (siehe hierzu auch Schindler, 2015; Wunderlich & Szczyrba, 2016). Die Aufgabe „Formulieren Sie die Reaktionskaskaden für die Reaktion von 3,3,5-Trimethylheptan, die mit Brom bei Energiezufuhr abläuft“ erfordert im ersten Schritt, dass Studierende erkennen, dass eine radikalische Substitutionsreaktion abläuft, deren erster Schritt die Radikalbildung durch homolytische Bindungsspaltung am Brommolekül darstellt (Anforderung 1). In einer Teillösung müssen Studierende daher die homolytische Spaltung eines Brommoleküls in zwei Bromradikale bei Energiezufuhr darstellen (Anforderung 2). Obwohl die Aufgabenstellung keine Vorgaben hierzu macht, erwarten Lehrende der organischen Chemie, dass die Darstellung nicht in Textform, sondern mithilfe einer Reaktionsgleichung erfolgt. Studierende müssen daher aus den textlich gegebenen Informationen eine geeignete pikturale Repräsentation generieren (Anforderung 3). Der Aspekt der Energiezufuhr erfordert, dass Studierende Wissen darüber abrufen, welche Energieformen es gibt, welche hier relevant sind, um eine homolytische Bindungsspaltung anzuregen, und wie sie diese piktoral darstellen (Anforderung 4). Darüber hinaus wird in der organischen Chemie erwartet, dass, der Elektronenfluss über Elektronenpfeile veranschaulicht wird (Anforderung 5). Zur exakten Diagnose der Kompetenzen der Studierenden im Lernprozess erscheint ein separates Prüfen dieser Anforderungen über trennscharfe Aufgaben aus fachdidaktischer Perspektive wünschenswert. Das fachtypische Assessment über die Klausur am Ende des Semesters differenziert aber in der Regel nicht. Entweder wird ein Punkt für die vollständig korrekte Lösung vergeben (Variante 1) oder für jedes Symbol, das die Musterlösung enthält, wird ein Punkt vergeben (Variante 2, Abb. 1). Die Vergabe von Teilpunkten erfolgt dabei oft intuitiv.



Abb. 1: Musterlösung mit Hinweisen auf Punktvergabe (Variante 2).

Für die digitale Umsetzung dieser Aufgaben ist dies problematisch, da alle möglichen akzeptierten (Teil)Lösungen hinterlegt werden müssen, ihnen eine (Teil)Punktzahl zugewiesen werden muss und für Teillösungen zusätzlich geregelt werden muss, welche Kombinationen zulässig sind und in welcher Reihenfolge die studentische Eingabe hinsichtlich der hinterlegten Regeln geprüft wird. Je komplexer und unübersichtlicher das Regelwerk für die Prüfung der studentischen Lösung wird, desto fehleranfälliger wird es. Mit Blick auf die sinnvolle und effiziente Digitalisierung von Prüfungen bedarf es hier daher einer Debatte über die Übungs- und Prüfungsaufgabenkultur und eine transparente Aufschlüsselung der Punktvergabe (siehe hierzu auch Schindler, 2015; Wildt & Wildt, 2011; Wunderlich & Szczyrba, 2016). Für die Digitalisierung von Reaktionsmechanismen muss zusätzlich technisch erprobt werden, wie freie Elektronenpaare und Elektronenpfeile zuverlässig ausgewertet werden können.

Literatur

- Boone, W. J., Staver, J. R. & Yale, M. S. (2014). Rasch Analysis in the Human Sciences. Springer Netherlands. <https://doi.org/10.1007/978-94-007-6857-4>
- Brecher, J. (2008). Graphical representation standards for chemical structure diagrams (IUPAC Recommendations 2008). *Pure and Applied Chemistry*, 80(2), 277–410. <https://doi.org/10.1351/pac200880020277>
- Heller, S. R., McNaught, A., Pletnev, I., Stein, S. & Tchekhovskoi, D. (2015). InChI, the IUPAC International Chemical Identifier. *Journal of cheminformatics*, 7, 23. <https://doi.org/10.1186/s13321-015-0068-4>
- Jiang, C., Jin, X., Dong, Y. & Chen, M. (2016). Kekule.js: An Open Source JavaScript Chemoinformatics Toolkit. *Journal of chemical information and modeling*, 56(6), 1132–1138. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.6b00167>
- Johnson, C. & Priest, A. H. (2014). The Feedback Principle in Multimedia Learning. In R. E. Mayer (Hrsg.), *The Cambridge Handbook of Multimedia Learning* (S. 449–463). Cambridge University Press.
- Paas, F. (1992). Training strategies for attaining transfer of problem-solving skill in statistics: A cognitive-load approach. *Journal of Educational Psychology*, 84(4), 429–434. <https://doi.org/10.1037/0022-0663.84.4.429>
- Puentedura, R. R. (2006). Transformation, Technology, and Education [SAMR-Model]. http://hippasus.com/resources/tte/puentedura_tte.pdf
- Renkl, A. (2014). The Worked Examples Principle in Multimedia Learning. In R. E. Mayer (Hrsg.), *The Cambridge Handbook of Multimedia Learning* (S. 391–412). Cambridge University Press.
- Schindler, C. J. (2015). Herausforderung Prüfen: Eine fallbasierte Untersuchung der Prüfungspraxis von Hochschullehrenden im Rahmen eines Qualitätsentwicklungsprogramms.
- Schübler, K., Rodemer, M., Giese, M. & Walpuski, M. (2024). Organic chemistry and the challenge of representations: student difficulties with different representation forms when switching from paper-pencil to digital format. *Journal of Chemistry Education*. Vorab-Onlinepublikation. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.4c00303>
- Schübler, K., Striwe, M., Püschner, D., Lützen, A., Goedicke, M., Giese, M. & Walpuski, M. (2024). Developing and evaluating an e-learning and e-assessment tool for organic chemistry in higher education. *Frontiers in Education (STEM Education)*. Vorab-Onlinepublikation. <https://doi.org/10.3389/educ.2024.1355078>
- Striwe, M. (2016). An architecture for modular grading and feedback generation for complex exercises. *Science of Computer Programming*, 129, 35–47. <https://doi.org/10.1016/j.scico.2016.02.009>
- Wildt, J. & Wildt, B. (2011). Lernprozessorientiertes Prüfen im „Constructive Alignment“. Ein Beitrag zur Förderung der Qualität von Hochschulbildung durch eine Weiterentwicklung des Prüfungssystems. In B. Berendt, A. Fleischmann, N. Schaper, B. Szczyrba & J. Wildt (Hrsg.), *Neues Handbuch Hochschullehre*. DUZ Verlags- und Medienhaus GmbH.
- Wunderlich, A. & Szczyrba, B. (2016). Learning-Outcomes ‚lupenrein‘ formulieren. Zentrum für Lehrentwicklung. *Lehrpfade*. <https://lehrpfade.th-koeln.de/so-gelingt-kompetenzorientierung-in-der-lehre/#learning-outcome>