

Erklärung physikochemischer Vielteilchenprozesse – Ein integratives Review

Problemdarstellung

Das Lernen physikochemischer Konzepte stellt Lernende aufgrund eines hohen Grades an Mathematisierungen und der Betrachtung komplexer Entitäten vieler Teilchen vor große Schwierigkeiten (Peperkorn et al., 2024). Dies resultiert in einer Vielzahl dokumentierter alternativer Vorstellungen (Bain et al., 2014; Bain & Towns, 2016; Natalis & Leyh, 2024). Nach der umfassenden Katalogisierung alternativer Vorstellungen wird nun zurecht gefordert, deren Entstehungsprozesse zu untersuchen, um die Ursachen ihres Auftretens zu identifizieren (Rodriguez et al., 2019).

Eine detaillierte Untersuchung des Argumentationsverhaltens, zum Beispiel in Problemlösesettings, ermöglicht es sprachliche, fachliche und epistemologische Ressourcen zu identifizieren, auf die Lernende bei der Konstruktion einer Erklärung zugreifen und nutzen (Rodriguez, 2024). Mit einem Fokus auf das Lösen mathematischer Probleme im Kontext der Kinetik wurden bereits diverse Arbeiten mit detaillierten Untersuchungen der Argumentationsstrukturen und Erklärungskonstruktion durchgeführt (Towns et al., 2019). Zusätzlich werden aber besondere Anforderungen aufgrund emergenter Eigenschaften, entstehend aus komplexen Vielteilcheninteraktionen, als eine wesentliche und kontextübergreifende Ursache für das Entstehen von alternativen Vorstellungen bei Lernenden diskutiert (Chi, 2023; Tümay, 2016b, 2016a, 2023; Vivas-Reyes et al., 2024). Emergenz als Ursache, bzw. die Schwierigkeit der Erklärung emergenter Eigenschaften resultiert aus dem Problem, dass emergente Eigenschaften des Vielteilchensystems nicht einfach aus den Eigenschaften einzelner Teilchen vorhergesagt, bzw. Erklärt werden können (Luisi, 2002). Welche spezifischen Ressourcen für das Formulieren adäquater Erklärungen dieser aus Vielteilcheninteraktionen resultierenden emergenten Eigenschaften und für das damit verbundene Verständnis erforderlich ist, gilt es herauszufinden.

Nachfolgend wird der aktuelle Fortschritt des laufenden integrativen Reviews zu Erklärungen in der physikalischen Chemie vorgestellt, aktuell absehbare Ergebnisse dargestellt und daran anschließende Arbeitsschritte hin zur Identifizierung notwendiger Anforderungen an das Erklären emergenter Eigenschaften in der physikalischen Chemie (PC) erläutert.

Integratives Review – Erklärungen emergenter Eigenschaften in der PC

Ein integratives Review verfolgt, im Vergleich zum klassischen systematischen Review, einen eher qualitativen Forschungsansatz, welcher gewonnene Daten aus der Literatur kritisch analysiert, und miteinander kombiniert um neue Erkenntnisse, in Form neuer theoretischer Konzepte, zu entwickeln. Es eignet sich für die holistische Betrachtung neuerer Forschungstrends mit dem Ziel einer Synthese bestehender Ergebnisse, dafür ist es notwendig alle notwendigen Informationen aus dafür repräsentativen Publikationen im Auswahlprozess zu extrahieren. Damit unterscheidet sich das integrative Review vom systematischen Review, welches das Ziel verfolgt die Gesamtheit aller verfügbaren Informationen zusammenzufassen (Snyder, 2019; Torraco, 2005).

Forschungsprojekte zur Identifikation tieferliegender Ursachen für das Auftreten alternativer Vorstellungen von Lernenden in der physikalischen Chemie berufen sich zurück auf das in den Reviews zur Thermodynamik und Kinetik formulierten Desiderat. (Bain et al., 2014; Bain & Towns, 2016) In den vergangenen Jahren sind diesbezüglich bereits zahlreiche Erkenntnisse zum Einfluss mathematischer Kenntnisse und Fähigkeiten beigetragen worden (Towns et al., 2019), des Weiteren werden unabhängig von physikochemischen Kontexten Emergenz als Ursache für alternative Vorstellungen diskutiert (Chi, 2023; Tümay, 2016b). Das Review beabsichtigt Erkenntnisse aus Forschungsergebnissen dieser Desiderata zu integrieren, um ein Framework vorzuschlagen, das Anforderungen, in Form von Ressourcen, an Erklärungen von Eigenschaften physikochemischer Phänomene darstellt. Dazu werden zunächst bestehende Erkenntnisse, in Form wissenschaftlicher Publikationen zu Erklärungen und Argumentationen von Lernenden in der physikalischen Chemie analysiert, um nachfolgende Fragen zu beantworten:

1. Welche empirischen Ergebnisse zum Argumentationsverhalten und Erklärungskonstruktion von Lernenden in der physikalischen Chemie liefert die ausgewählte Literatur?
2. Welche theoretischen Perspektiven und Frameworks werden für die jeweilige Untersuchung verwendet und welche spezifischen Erkenntnisse sind dadurch möglich?
3. Welche Ressourcen werden als notwendig für das Konstruieren von Erklärungen in der physikalischen Chemie identifiziert?
4. Inwiefern werden besondere Anforderungen durch Komplexität und Emergenz an Erklärungen in bestehenden Arbeiten berücksichtigt?

student AND (reason* OR expla* OR argue* OR understand* OR erkl* OR versteh* OR argument*) AND (physic* OR thermodynami* OR thermo* OR kineti* OR entrop* OR emerg* OR system* OR complex* OR komplex* OR equilibr* OR gleichgewicht) AND (chemist* OR chemie) (Mai 2025)

Abb. 1, Suchanfrage für das Literaturreview

Die Beiträge wurden online aus drei Datenbanken, ERIC, SCOPUS und BASE, extrahiert (siehe Abb. 1 für Suchstring) und durch die Literaturdatenbank des Erstautors ergänzt. Anschließend an die Datenbanksuche wurden zunächst Duplikate entfernt und mit der Open-Source-Software ASReview ein KI gestütztes Abstractscreening durchgeführt. ASReview sortiert Beiträge nach Relevanz für den Reviewprozess. Basierend auf dem Auswahlverhalten der reviewenden Person werden passende Titel aus dem Datensatz vorgeschlagen. (Van De Schoot et al., 2021) Die initiale Titelauswahl betrug 3482 Titel nach Entfernung von Duplikaten. Es wurden 398 Abstracts gescreent, von denen 67 Beiträge als geeignet für das Volltextscreening ausgewählt wurden. Es wurde eine zufriedenstellende Sättigung erreicht. Aufgrund des Screeningverlaufs (Abb. 2) ist anzunehmen nahezu alle relevanten Beiträge aus dem Datensatz an diesem Punkt extrahiert zu haben, womit das Stoppkriterium erfüllt ist. Ein Titelscreening der übrigen Beiträge hat keine weiteren relevanten Beiträge hervorgebracht. Das Volltextscreening der Auswahl von 67 Titeln hat inklusive Ergänzungen relevanter Beiträge aus der eigenen Sammlung, einer vernetzenden Suche über die Software ResearchRabbit, sowie vorwärts und rückwärtssuche, schlussendlich 50 Titel für die Analyse hervorgebracht. Diese erfüllen folgende Kriterien:

1. *Chemie/Physik*
2. *und Fokus Reasoning oder Erklärung*
3. *und Kontext physikalische Chemie*
4. *und Keine Identifikation von Lernendenvorstellungen*

Der Screeningprozess wurde vom Erstautor allein durchgeführt. Die qualitativ inhaltsanalytische Auswertung des Datensatz wird aktuell durchgeführt.

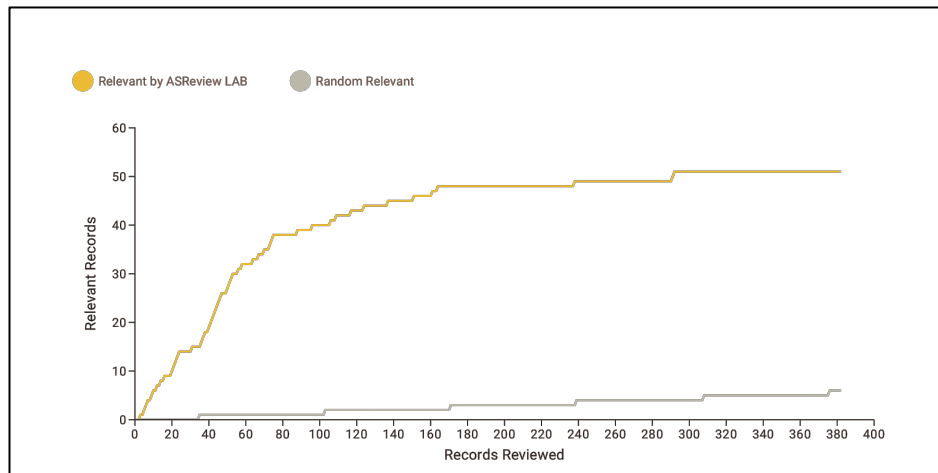


Abb. 2, Sättigungskurve relevanter Beiträge pro gesichteten Beitrag, Auszug aus ASReview

Ausblick – Zu einem Framework für Erklärungen emergenter Eigenschaften in PC

Bereits absehbare sind die umfassenden Ergebnisse zur Ressourcennutzung und Argumentationsverhalten in Problemlösesettings von Lernenden bei mathematischen Problemen der physikalischen Chemie. Zusätzlich ist festzuhalten, dass eine besondere Vielfalt in den theoretischen Zugängen zur Untersuchung des Argumentationsverhalten festgestellt werden kann, welche Erkenntnisse aus sowohl sprachlicher, fachlicher und epistemologischer Perspektive liefern können. Mit dem Ziel diese Erkenntnisse miteinander zu vergleichen und zu einer ersten Konzeption eines Frameworks zusammenzuführen dient dieses Review auch der Vorbereitung einer zukünftigen Erhebung.

In einem ersten Ansatz zur Identifikation produktiver Ressourcen zur Erklärung emergenter Eigenschaften im Kontext der physikalischen Chemie dienen die Erkenntnisse aus dem integrativen Review sowohl in der Fokussierung durch das Analyseframework als auch in der Gestaltung eines geeigneten Erhebungssettings zur hochauflösenden Untersuchung von Argumentationsstruktur und Ressourcennutzung von Noviz:innen und Expert:innen bei der Erklärungskonstruktion.

Literatur

- Bain, K., Moon, A., Mack, M. R. & Towns, M. H. (2014). A review of research on the teaching and learning of thermodynamics at the university level. *Chemistry Education Research and Practice*, 15(3), 320–335. <https://doi.org/10.1039/C4RP00011K>
- Bain, K. & Towns, M. H. (2016). A review of research on the teaching and learning of chemical kinetics. *Chemistry Education Research and Practice*, 17(2), 246–262. <https://doi.org/10.1039/C5RP00176E>
- Chi, M. T. H. (2023). Individualistic and collective causal knowledge structures for understanding sequential and emergent processes. *Frontiers in Education*, 8, 1198362. <https://doi.org/10.3389/feduc.2023.1198362>
- Luisi, P. L. (2002). *Emergence in chemistry: Chemistry as the embodiment of emergence*.
- Natalis, V. & Leyh, B. (2024). Improving the teaching of entropy and the second law of thermodynamics: A systematic review with meta-analysis. *Chemistry Education Research and Practice*. <https://doi.org/10.1039/D4RP00158C>
- Peperkom, Y., Buschmann, J.-K. & Schwedler, S. (2024). Comparing drawing tasks and elaborate single-choice questions in simulation-based learning: How do they facilitate students' conceptual understanding on chemical equilibria? *Chemistry Education Research and Practice*, 25(4), 1030–1051. <https://doi.org/10.1039/d3rp00113j>
- Rodriguez, J.-M. G. (2024). Using analytic autoethnography to characterize the variation in the application of the resources framework: What is a resource? *Journal of Chemical Education*, 101(9), 3676–3690. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.4c00309>
- Rodriguez, J.-M. G., Bain, K., Hux, N. P. & Towns, M. H. (2019). Productive features of problem solving in chemical kinetics: More than just algorithmic manipulation of variables. *Chemistry Education Research and Practice*, 20(1), 175–186. <https://doi.org/10.1039/c8rp00202a>
- Snyder, H. (2019). Literature review as a research methodology: An overview and guidelines. *Journal of Business Research*, 104, 333–339. <https://doi.org/10.1016/j.jbusres.2019.07.039>
- Torraco, R. J. (2005). Writing integrative literature reviews: Guidelines and examples. *Human Resource Development Review*, 4(3), 356–367. <https://doi.org/10.1177/1534484305278283>
- Towns, M. H., Bain, K. & Rodriguez, J.-M. G. (Hrsg.). (2019). It's just math: Research on students' understanding of chemistry and mathematics (Bd. 1316). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/bk-2019-1316>
- Tümay, H. (2016a). Emergence, learning difficulties, and misconceptions in chemistry undergraduate students' conceptualizations of acid strength. *Science & Education*, 25(1–2), 21–46. <https://doi.org/10.1007/s11191-015-9799-x>
- Tümay, H. (2016b). Reconsidering learning difficulties and misconceptions in chemistry: Emergence in chemistry and its implications for chemical education. *Chemistry Education Research and Practice*, 17(2), 229–245. <https://doi.org/10.1039/C6RP00008H>
- Tümay, H. (2023). Systems thinking in chemistry and chemical education: A framework for meaningful conceptual learning and competence in chemistry. *Journal of Chemical Education*, 100(10), 3925–3933. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.3c00474>
- Van De Schoot, R., De Bruin, J., Schram, R., Zahedi, P., De Boer, J., Weijdem, F., Kramer, B., Huijts, M., Hoogerwerf, M., Ferdinands, G., Harkema, A., Willemsen, J., Ma, Y., Fang, Q., Hindriks, S., Tummers, L. & Oberski, D. L. (2021). An open source machine learning framework for efficient and transparent systematic reviews. *Nature Machine Intelligence*, 3(2), 125–133. <https://doi.org/10.1038/s42256-020-00287-7>
- Vivas-Reyes, R., Navarro, D. & Cortes, L. E. (2024). Exploring emergent properties in chemistry education: A philosophical perspective on the molecular revolution. *Journal of Chemical Education*, 101(10), 4173–4181. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.4c00238>