

MOLIS – ein Lernprogramm für den weiterführenden Chemieunterricht

W. Wagner, Abt. für Didaktik der Chemie,
E-Mail: Walter.Wagner@uni-bayreuth.de

A. Kerber, R. Laue, Lehrstuhl II für Mathematik,
E-Mails: kerber@uni-bayreuth.de, laue@uni-bayreuth.de
Universität Bayreuth, D-95440 Bayreuth

1. Einführung

Ziel der Entwicklung von **MOLIS** ist die Implementierung eines multimedialen interdisziplinären Lehr- und Lernmittels „Modellvorstellungen in der Chemie: Isomerie“, sie wird im Rahmen des MEILE-Projekts von Bayerischen Staatsministerium für Unterricht und Kultus gefördert.

Ausgangspunkt der Entwicklung ist der bereits vorhandene molekulare Strukturgenerator **MOLGEN**, der am Lehrstuhl II für Mathematik ab 1986 für industrielle und wissenschaftliche Anwendungen entwickelt worden ist. Das Programm existiert zur Zeit in der Version 3.5 für Windows95 bzw. Version 4.0 für UNIX. **MOLGEN** soll auch für den visualisierenden, multimedialen Lernprozeß im Bereich Isomerie genutzt und dem Benutzer dadurch interaktives Experimentieren mit Molekülen ermöglicht werden. Zu diesem Zweck wurden **Perl**- und **JAVA**-Programme entwickelt, die es den Benutzern des Lernprogramms **MOLIS** erlauben, mit **MOLGEN** zu kommunizieren.

Zunächst ist eine Schulversion entwickelt worden, die sich zur Zeit im Teststadium befindet. Sie ist aber auch schon Chemiestudenten zugänglich und hat auch hier guten Anklang gefunden.

Das Lernprogramm besteht aus drei Modulen:

- Die **Wissensbasis** umfaßt alle Teile, die mit der Darbietung des neuen Gegenstandes zu tun haben.
- Das **Lehrermodul** bietet auf Wunsch z.B. Hintergrundinformationen und Hilfen bei der Lösung von Aufgaben.
- Mit Hilfe des **Schülermoduls** ist im Idealfall die Erstellung eines individuellen Lernenden-Profiles möglich, z.B. durch Festhalten des Lernweges oder der Erfolgsquote bei der Bearbeitung von Aufgaben.

2. Warum Isomerie?

Das Phänomen der Isomerie bietet sich besonders für den multimedialen Computereinsatz an, da die Lernenden


- in hohem Maße abstraktes Modelldenken und
- räumliches Vorstellungsvermögen benötigen.

Beides wird von den unten angegebenen Tools besser unterstützt, als es herkömmliche 2D-Darstellungen auf dem Papier können. Hier ist ein erstes Beispiel:


Spiegelbildisomerie

Schon wieder Bild (1) und Spiegelbild (2). Probieren Sie auch hier aus, ob beide Moleküle identisch sind, indem Sie Molekül (2) mit der Maus so drehen, daß es mit (1) deckungsgleich wird!

(1)



(2)



Seite 4
von 32

↳

Lexikon

Übersicht

Ende

Lösung

Ohne die Fähigkeit, in der Ebene dargestellte Strukturformeln in Gedanken zu drehen, kann nicht verstanden werden, daß die Formeln (1) und (2) dieselbe Verbindung darstellen. Mit Hilfe der drehbaren 3D-Formeln darunter (pdb-Format, Kugel-Stäbchen-Darstellung) gelingt dies anschaulich und einprägsam.

3. Warum HTML?

Die Verwendung dieser Sprache hat insbesondere die folgenden drei Vorteile:

- HTML macht von Programmierumgebungen und ihrem Pflegestand unabhängig. Die Bearbeitung durch wechselndes Personal wird langfristig auf vielen Ebenen einfacher.
- HTML ermöglicht das Einbinden multimedialer Objekte, z.B.:
- pdb; dieses Format ist sehr leistungsfähig für die 3D-Darstellung einzelner Moleküle, was das Verhältnis zwischen Dateigröße und Vielfalt der Modellarten betrifft, und es ist weit verbreitet.

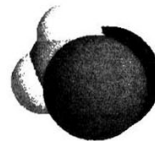
Hier sind drei Modellvorstellungen von Molekülen, verwendet wurde das pdb-Format (ein Wechsel zwischen den unterschiedlichen räumlichen Darstellungsformen ist durch Mausklick möglich):



Stäbchenmodell



Kugel-Stab-Modell



Kalottenmodell

4. Warum VRML?

Diese Erweiterung von HTML dient vor allem der Darstellung dreidimensionaler Welten und ist deshalb für die optische Visualisierung von Konformationen gut geeignet. Hervorzuheben ist insbesondere, daß VRML es gestattet, **mehrerer** 3D-Formeln in der gleichen Umgebung ("Welt"), etwa durch Überlagerung, zu vergleichen:

Spiegelbildisomerie

Auf den ersten Blick sehen die beiden folgenden Moleküle identisch aus:

- ein Kohlenstoffatom verbunden mit jeweils
- einem Wasserstoff-, Fluor-, Brom- und Chlorsubstituenten.

(1)

(2)

Probieren Sie einmal aus, ob beide Moleküle **wirklich** identisch sind (zur Rechenhilfe: Legende: H=weiß, F=rot, Cl=grün, Br=blau). Kreuzen Sie die Ihrer Meinung nach korrekte Aussage unten an!

Seite 1 / 32



Lexikon

Übersicht

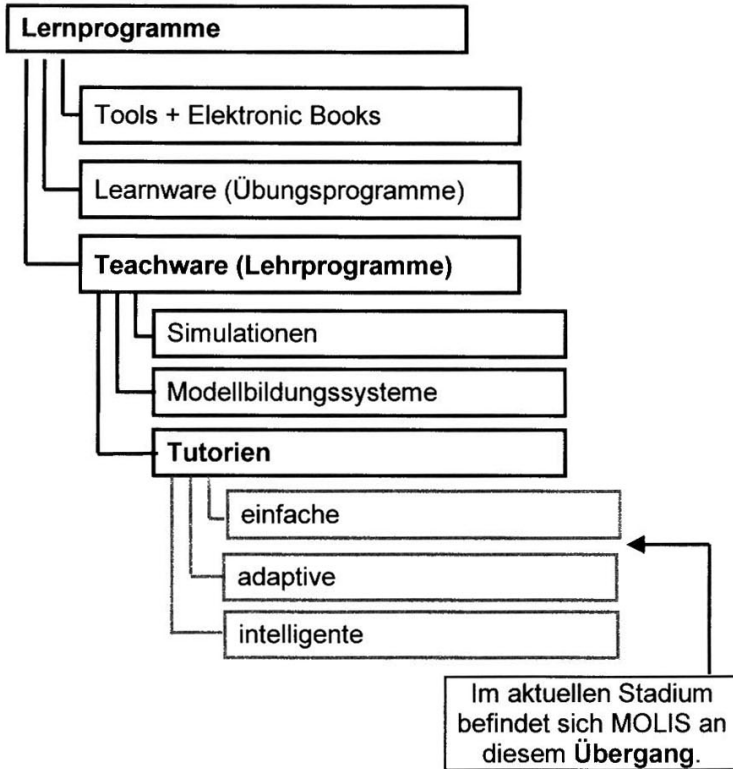


Erste

Übung

Die linke 3D-Formel von (1) kann über die rechte geschoben werden. Durch Drehen der rechten Formel soll geprüft werden, ob die Strukturen (1) und (2) zur Deckung gebracht werden können, d.h. identisch sind.

5. Klassifizierung von Lehr- und Lernsoftware



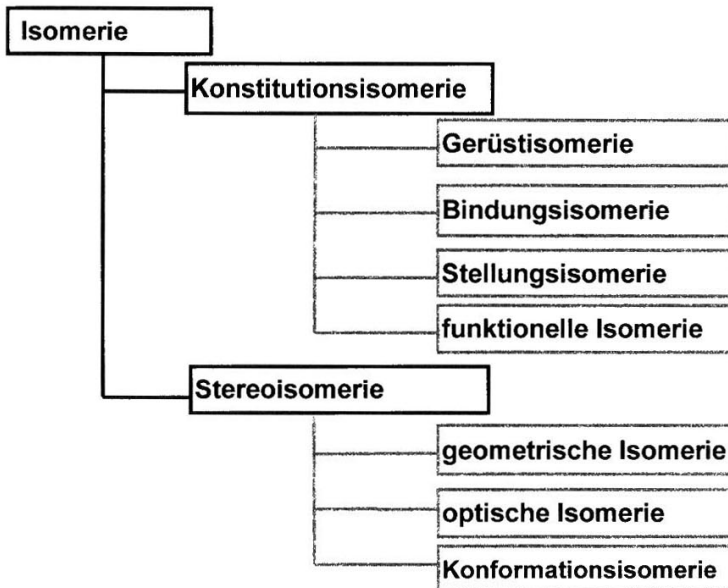
Der Idealfall ist ein intelligentes Tutorium, das eine möglichst realitätsnahe Unterrichtssituation herstellt, indem es sich individuell auf den Lernenden einstellt:

- auf **Vorkenntnisse**
- auf das **Ausmaß** an Lernfortschritt
- auf die **Art der Fehler**.

6. Der Aufbau von MOLIS:

MOLIS besteht zur Zeit aus einem **fachsystematisch orientierten Lehrgang** (kurz vor der Fertigstellung), der für das Grundstudium Chemie einsetzbar und mit einer

kleinen Gruppe von Studenten vorevaluiert ist. Der Lehrgang besteht aus sieben Lerneinheiten, die unabhängig voneinander bearbeitet werden können. Hier zunächst eine Skizze des Aufbaus:



Dabei werden die folgenden Bezeichnungen verwendet:

- Konstitutionsisomerie (Gerüst-, Bindungs-, funktionelle und Stellungsisomerie) und
- Stereoisomerie (Geometrische, Spiegelbild- und Konformationsisomerie).

Ein **Eingangstest** ist vorgesehen. Mit Hilfe einer Übersicht kann der Lernende jederzeit feststellen, an welcher Stelle er sich gerade befindet bzw. welche Teile noch zu bearbeiten sind, um den Lehrgang erfolgreich zu beenden.

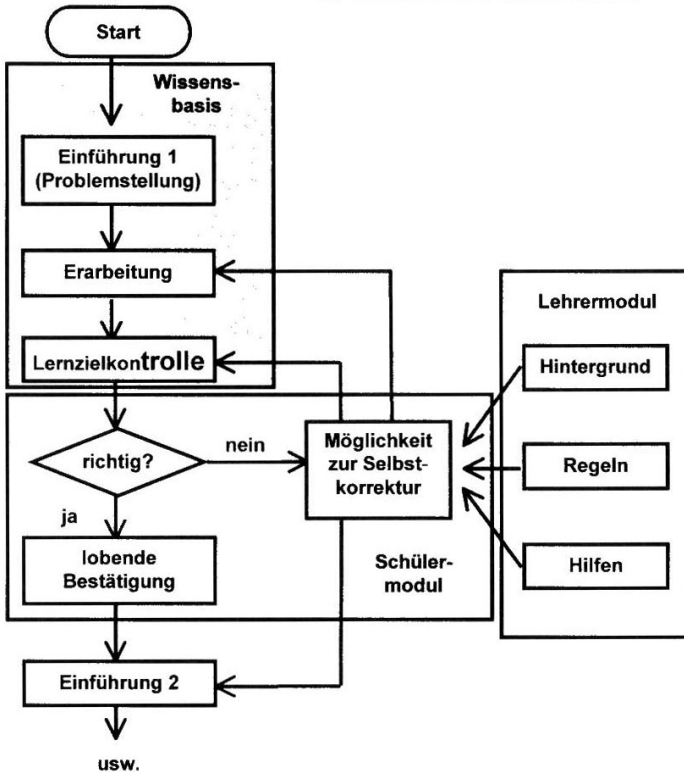
Jede Lerneinheit enthält

- **Sachinformation**; es werden keine zeitlichen Vorgaben zum Erarbeiten eines bestimmten Lernpensums gemacht.
- **Lernzielkontrollen**; Aufgaben auf den Niveaus Reproduktion, Reorganisation und manchmal Transfer erlauben Selbstkontrolle. Der Lernende erhält situationsbezogenes Feedback.

- Einträge in einem **Lexikon-** und einem **Biographien-Teil**; aus jeder Lerneinheit sind diese beiden Teile per Hyperlink von vielen Fachbegriffen, Verbindungsnamen bzw. Autoren aus zu erreichen.

Das Lexikon dient dem Nachschlagen von für den Lernprozeß relevanten Fachbegriffen und Hintergrundinformationen zu Schlüsselverbindungen. Kurzbiographien enthalten die wichtigsten Lebensdaten und Leistungen von beteiligten Wissenschaftlern.

In Planung befindet sich ein problemorientierter bzw. historisch-genetischer Lehrgang sowie die **Differenzierung** in Lehrgänge für den Leistungskurs Chemie an Gymnasien zur Unterrichtsnachbereitung, zur Vorbereitung von Kursarbeiten oder für projektorientierte Lehrgänge und die erste Begegnung mit der Isomerie im Anfangsunterricht Organische Chemie durch computerunterstützte Gruppenarbeit.



Die **Wissensbasis** umfaßt alle Teile des Lernprogramms, die mit der Darbietung des neuen Gegenstandes zu tun haben. Das **Lehrermodul** bietet auf Wunsch z.B. Hintergrundinformationen und Hilfen bei der Lösung von Aufgaben. Mit Hilfe des **Schülermoduls** ist im Idealfall die Erstellung eines individuellen Lernenden-Profiles möglich, z.B. durch Festhalten des Lernweges oder der Erfolgsquote bei der Bearbeitung von Aufgaben.

7. Der Ausgangspunkt: MOLGEN

MOLGEN ist ein Programm zur doppeltenfreien und schnellen Berechnung aller Strukturformeln zu einer vorgegebenen Summenformel und (optional) weiteren Nebenbedingungen wie vorgeschriebene und/oder verbotene Substrukturen, Ringgrößen usw.. Diese Fähigkeiten galt es, für den **visualisierenden, multimedialen Lernprozeß** im Bereich Isomerie zu nutzen. Zu diesem Zweck wurden Perl- und JAVA-Programme entwickelt, die es den Benutzern des Lernprogramms MOLIS ermöglichen, mit MOLGEN zu kommunizieren. Hier ist ein Beispiel: die historische Suche nach der Struktur von Benzol C_6H_6 .

Wollen Sie mit MOLGEN spielen? Dann geben Sie eine Summenformel ein. MOLGEN berechnet die Zahl der Isomere. Dies kann bei größeren Molekülen einige Zeit dauern. Nach höchstens 3 Minuten wird die Rechnung abgebrochen und die Anzahl der bis dahin erzeugten Moleküle ausgegeben.



Summenformel:

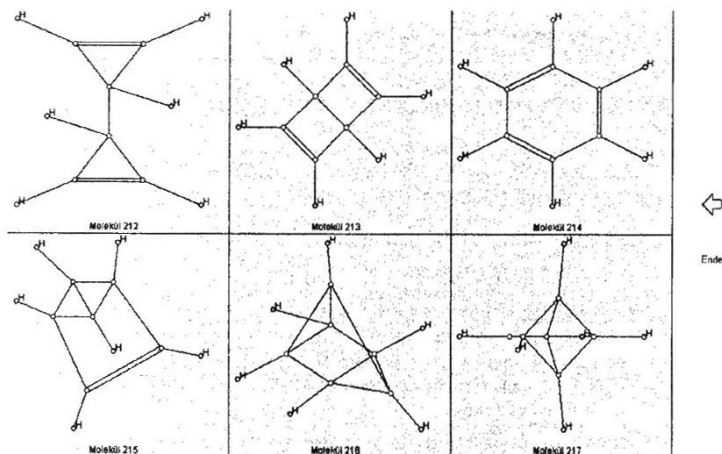
MOLGEN berechnet die Zahl der Strukturisomere im Bruchteile einer Sekunde. Dann wird zunächst die Isomerenzahl auf einer HTML-Seite ausgegeben:

Molgenergebnis

Es gibt 217 Moleküle mit der angegebenen Summenformel C6H6. Wollen Sie sich die Isomere ansehen?



Danach werden die Koordinaten berechnet. Mit Hilfe eines JAVA-Applets lassen sich die molekularen Graphen in eine HTML-Seite übertragen:



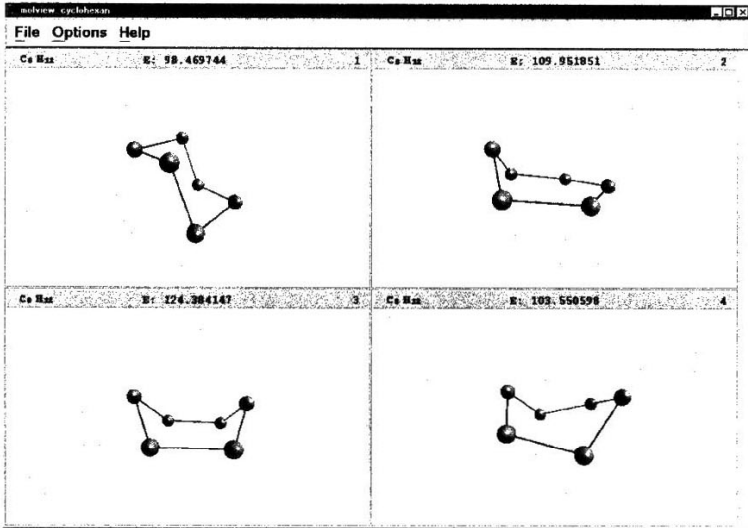
Kanten der Graphen von 6 ausgewählten Benzol-Isomeren

Dargestellt werden zunächst noch keine chemisch korrekten Bindungswinkel. In diesem Beispiel kann man trotzdem Dewar-, Ladenburg- und Kekulé-Benzol erkennen.

Die beim Lernprogramm erarbeiteten und erprobten Techniken wurden bereits eingesetzt, um online-Berechnung von Isomerenzahlen und deren Graphen zu ermöglichen. Sie können das unter folgender URL selber ausprobieren:

<http://btm2d2.mat.uni-bayreuth.de/molgenseite/molstart.htm>

Die neue Version 4.0 von MOLGEN kann aus den Graphen 3D-Strukturen berechnen, also Konformationen, berechnen, automatisch klassifizieren (also die energetischen Minima sortieren) und darstellen.



Beispiel: Konformationen des Cyclohexans.

Über die neuen Funktionen können Sie sich auf der MOLGEN-Homepage informieren:

<http://www.mathe2.uni-bayreuth.de/molgen4/>

Demo-Versionen für die Plattformen Windows95, Windows NT, OS/2, RS6000 und Sun stehen zum Download bereit unter:

<http://www.mathe2.uni-bayreuth.de/molgen/demo.html>

8. Die Anmeldung

Die Lernenden müssen nicht, können sich aber anmelden, hier ist das entsprechende Fenster:

MOLIS - Anmeldung

Herzlich Willkommen !!!

Sie wollen es wagen? Oder müssen Sie?

Damit Sie sich Ihren Lernstoff **individuell** erschließen können, sollten Sie sich mit Ihrem

1. **Benutzernamen** (z. B. Ihr Vorname) und einem
2. persönlichen **Kenntwort** (das Sie sich selbst aussuchen können) anmelden.

Achten Sie bitte auf Groß- und Kleinschreibung!

Durch diese Anmelde-Prozedur besteht die Möglichkeit, daß Sie jederzeit dort weitermachen können, wo Sie vorher das Lehrprogramm verlassen mußten.

WICHTIG: Das Programm merkt sich nur dann die Stelle, an der Sie aufhört nutzen, wenn Sie es auf dem vorgesehenen Weg verlassen, d.h. so oft auf "Einde" klicken, bis Sie aufgefordert werden, das Browserfenster zu schließen.

Wenn Sie sich **nicht anmelden** möchten, können Sie selbstverständlich auch so beginnen, aber alles ohne die eben beschriebenen Möglichkeiten. Sie müssen dann jedesmal wieder von vorne beginnen.

Benutzername:

Kenntwort:

[Ohne Anmeldung beginnen](#)

© Lehrstuhl für Mathematik II, Fakultät für Chemie, Universität Bayreuth, 1997-1999

Seite 2 / 2

⇒

⇐

Ende

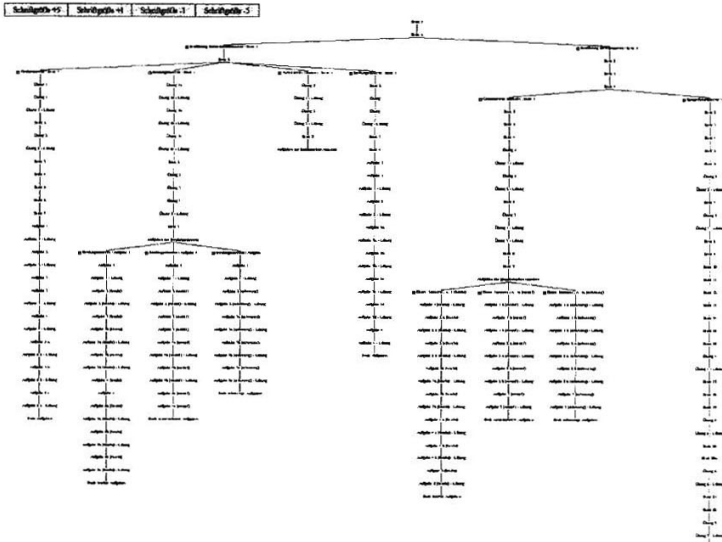
Beim Beenden des Programms wird dann von einer Perl-Routine die letzte besuchte Seite gespeichert, so daß der Lernende beim nächsten Mal an der Stelle fortfahren kann, wo er aufgehört hatte.

Dieses Verfahren wird es ermöglichen, daß Lehrer den Lernweg und mögliche **individuelle Lernschwierigkeiten** ihrer Schüler nachvollziehen und darauf reagieren können.

9. Die Übersicht

Einer der kritischsten Punkte bei größeren Lernprogrammen ist, daß der Lernende schnell die Orientierung verliert.

Mit Hilfe eines JAVA-Applets erhält der Benutzer einen Überblick über die Gesamtstruktur des Lernprogramms:

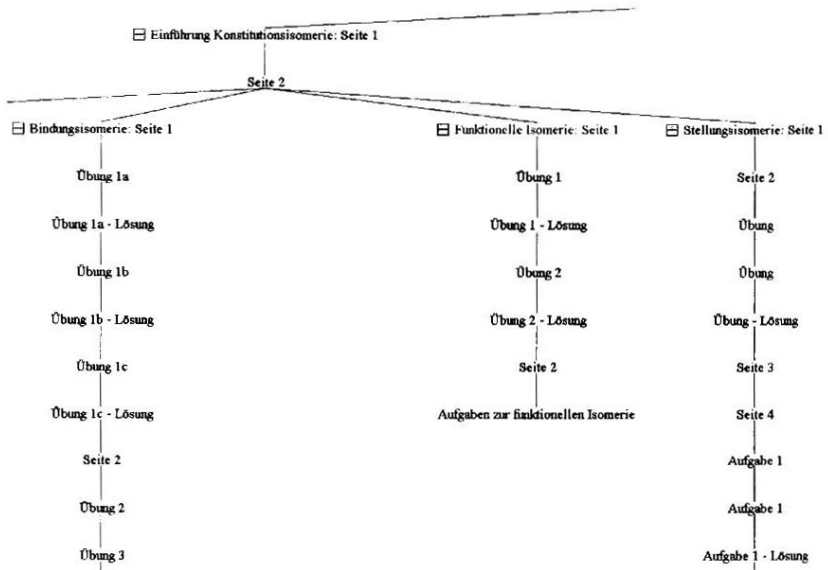


In Verbindung mit diesem Service ist das Anmelden (einloggen) besonders sinnvoll. Man erkennt, daß:

- der Weg "Konstitutionsisomerie - Bindungsisomerie" beschriftet wurde (blau)
- gerade "Seite 2" der Bindungsisomerie bearbeitet wird (rot) und
- noch viel zu tun bleibt (schwarz).

Zusätzliche Leistungen:

- die Einträge sind als **Hyperlinks** ausgeführt, so daß prinzipiell von einem Kapitel des Lernprogramms ins andere gesprungen werden kann;
- Einschränkungen werden machbar sein, etwa Sperrung der Lösungen, sofern die Aufgabe noch gar nicht angegangen wurde.
- Zu realisieren wäre auch eine erzwungene Lernzielvorgabe, so daß der Lernende zu einem bestimmten Zeitpunkt nur eine bestimmte, vom Lehrer für den Zweck ausgewählte Isomerieform bearbeiten kann.



Je nach gewünschtem Maßstab kann die Schriftgröße angepaßt werden.

MOLiS steht ab sofort zum testen für Sie bereit unter:

<http://btm2d2.mat.uni-bayreuth.de/molis/lernprogramm/beginn01.htm>