



Lab@Home: Individualisierte Computerpraktika

F. M. Arnold, J.-O. Joswig*

Theoretische Chemie, Fakultät für Chemie und Lebensmittelchemie, TU Dresden

Abstract

Die im Jahr 2020 aufgetretene Pandemie bedingte auch an den Universitäten einen Lockdown und die Verlagerung der Lehre in den digitalen Raum. Im Bereich der Studiengänge Chemie und Lebensmittelchemie ist dies nur teilweise möglich. Insbesondere die Laborpraktika vermitteln Kernkompetenzen, die nicht anders als in Präsenz erworben werden können. Computerpraktika hingegen können mit guter Konzeption an den heimischen Computer verlagert werden. Wir stellen hier unser Konzept vor, das es möglich gemacht hat, Computerversuche aus den Bereichen der Quantenchemie und Statistischen Thermodynamik als Lab@Home-Computerpraktikum durchzuführen. Individualisierte Aufgabenstellung, kontrollierte Vorproduktion der numerischen Ergebnisse, fortlaufende Kommunikation mit den Studierenden und umfangreiche Nutzung digitaler Lehrmethoden waren dabei die entscheidenden Grundlagen für die erfolgreiche Durchführung.

The pandemic that occurred in 2020 also caused a lockdown at universities and the relocation of teaching to the digital space. In the area of the Chemistry and Food Chemistry degree programmes, this is only partially possible. The laboratory courses in particular convey core skills that cannot be acquired in any other way than in presence. Computer-lab courses, on the other hand, can be relocated to the home computer with a good underlying concept. We present our concept here, which has made it possible to conduct computer experiments from the fields of quantum chemistry and statistical thermodynamics as a Lab@Home computer-lab courses. Individualised tasks, controlled pre-production of numerical results, continuous communication with the students and extensive use of digital teaching methods were the decisive foundations for successful implementation.

*Corresponding author: jan-ole.joswig@tu-dresden.de

1. Einleitung

Ein Teil der Ausbildung in den Studiengängen Chemie und Lebensmittelchemie beschäftigt sich mit dem Fachgebiet der Theoretischen Chemie. Dieser Teil vermittelt die Grundlagen der Quantenmechanik, verschiedene Modelle zur Berechnung von molekularen Eigenschaften sowie Methoden der Elektronenstrukturrechnung. Bedingt durch die Interdisziplinarität dieses Gebiets sind die Studierenden mit Problemstellungen aus Physik, Mathematik und Computeranwendung konfrontiert, die alle zur Bearbeitung chemischer Fragestellungen benötigt werden. Wir haben die Erfahrung gemacht, dass die Vermittlung dieser Zusammenhänge durch praktische Übungen (Hands-On-Kurse) gut funktioniert und schon früh entsprechende Computereperimente entworfen und durchgeführt [1].

Normalerweise fand dieses Computerpraktikum unter Aufsicht zu festgelegten Zeiten in einem gut ausgestatteten Computer-Pool statt. Durch die im Jahr 2020 aufgetretene Pandemie und die Lockdowns waren allerdings Präsenzveranstaltungen gar nicht bzw. nur unter erschwerten Umständen durchführbar. Wir haben uns daher schon früh entschlossen, diesen Bereich unserer Lehrveranstaltungen nach Hause zu verlegen: als Lab@Home. Zugute kam uns dabei die Tatsache, dass heutzutage alle Studierenden mit Computerhardware ausgerüstet sind und wir keine praktischen Versuche im Labor durchführen müssen.

Wir stellen in diesem Artikel unser Konzept der Überführung dieser Computerversuche in individualisierte Versuche vor, die im Homeoffice durchgeführt werden konnten. Die Planung für das Sommersemester 2020 erfolgte innerhalb von 14 Tagen, nachdem die TU Dresden in den Notbetrieb gegangen war. Wir haben unser Konzept, das nun bereits im zweiten Jahr erfolgreich läuft, stetig weiterentwickelt und an individuelle Gegebenheiten verschiedener Lehrveranstaltungen angepasst.

2. Computerpraktika

Unser vorliegendes Konzept haben wir auf zwei Praktika der Studiengänge Bachelor Chemie und Lebensmittelchemie angewendet.

Beide Praktika sind in den Modul-Kanon der Physikalischen Chemie (PC) eingebunden und sollen hier kurz beschrieben werden: Das Modul PC2 („Theorie der chemischen Bindung“) findet als Pflichtmodul beider Studiengänge im dritten Semester statt und beschäftigt sich mit den Grundlagen der Quantenmechanik (Schrödinger-Gleichung, Teilchen im Kasten, harmonischer Oszillator, Wasserstoffatom, Molekülorbital-Theorie, Hückel-Theorie) sowie Grundlagen der Elektronenstrukturrechnungen, wie Hartree-Fock-Methode und Dichtefunktionaltheorie. Neben der Vorlesung und einer Seminarreihe wird der Inhalt vor allem im PC2-Computerpraktikum vermittelt, das fünf Computerversuche beinhaltet. Deren Themengebiete sind: (1) Atomorbitale, (2) Ionisierungspotential, (3) Molekülorbitaltheorie, (4) Hückel-Theorie und (5) Schwingungsspektren.

Im sechsten Semester nehmen die Studierenden des Bachelorstudiengangs Chemie außerdem am Pflichtmodul PC3 („Spezielle Physikalische Chemie“) teil, das sich mit den Teilgebieten Photochemie, Elektrochemie, Theoretische Chemie und Statistische Thermodynamik beschäftigt. Auch hier gibt es neben den Vorlesungen und einer Seminarreihe ein Praktikum, das aus zwei gleich großen Teilen besteht: einem Laborpraktikum, das die Teilgebiete Photochemie und Elektrochemie abdeckt, und einem Teil mit Computereperimenten, die sich mit den Teilgebieten Theoretische Chemie und Statistische Thermodynamik beschäftigen.

Beiden Computerpraktika gemeinsam sind deren Modalitäten: Jeder der fünf (PC2) bzw. drei Versuche (PC3) wird durch ein versuchsbezogenes Seminar vorab eingeleitet, in dem die wichtigsten Grundlagen wiederholt und Besonderheiten des Versuchs diskutiert werden. Anschließend gibt es für die Studierenden in einen Zeitraum von vier Tagen die Möglichkeit, einen elektronischen Eingangstest (Antestat) durchzuführen, um die Zulassung zur Durchführung zu erhalten. Die hierbei erreichte Note geht in die Endnote ein.

Für diesen Eingangstest gibt es innerhalb des vorgegebenen Zeitraums zwei Wiederholungsmöglichkeiten. Tabelle 1 fasst wichtige Kenngrößen beider Praktika zusammen.

Tab. 1: Zusammenfassung wichtiger Merkmale der zwei Module, in denen Lab@Home-Computerpraktika durchgeführt wurden. Die Laufzeit bezieht sich auf die Semester unter Pandemie-Bedingungen.

	Modul PC2	Modul PC3
Modultitel	Theorie der chemischen Bindung	Spezielle Physikalische Chemie
Studiengänge	Chemie, Lebensmittelchemie	Chemie
Studierende (2020)	ca. 90 (ca. 45 Zweiergruppen)	ca. 40
Semester	3. (Wintersemester)	6. (Sommersemester)
Anzahl Versuche	5 (+ Vorversuch)	3 (+ Vorversuch)
Laufzeit (2020)	13 Wochen	8 Wochen

Der eigentliche Versuch findet zu einem festgelegten Termin in unserem Computerpraktikumsraum statt, in dem 20 Computerarbeitsplätze mit der notwendigen Software ausgestattet sind. Jeder Versuch wird in Zweiergruppen durchgeführt, die Ergebnisse werden sofort handschriftlich protokolliert, diskutiert und das Protokoll am Ende des Versuchstages abgegeben. Der zeitliche Aufwand für die Studierenden vor Ort beträgt bei guter Vorbereitung etwa vier Stunden pro Versuch.

3. Herausforderungen

Mit dem Beginn eines Lockdowns ungewisser Dauer im Frühjahr 2020 ging die Notwendigkeit einer Entscheidung einher, ob und wie das im Sommersemester angesetzte PC3-Computerpraktikum durchgeführt werden könnte. Insbesondere die Unsicherheit über die Dauer des Lockdowns ließ uns schnell zu der Entscheidung gelangen, das Computerpraktikum nach Hause zu verlegen. Damit konnte die Zeit des harten Lockdowns sinnvoll genutzt werden und es wurden die Zeitblöcke, die für dieses Praktikum vorgesehen waren, frei und konnten den Kollegen für die Durchführung der experimentellen Laborpraktika zur Verfügung gestellt werden. Diese Lösung fand in der Studierendenschaft und unter den Kollegen großen Anklang.

Da die Qualität der Ausbildung auch unter diesen außergewöhnlichen Bedingungen zu gewährleisten war, warf die Verlagerung des Computerpraktikums an den studentischen Rechner als virtuelles Lab@Home-Praktikum eine Reihe von Fragen auf, die im Vorfeld zu lösen waren:

- Ist die bisher verwendete Computational-Chemistry-Software geeignet, auch von un-

erfahrenen Studierenden ohne direkte Betreuung sinnvoll angewendet zu werden?

- Wie ist die korrekte und schnelle Installation der Software auf unterschiedlicher Hardware mit verschiedenen Betriebssystemen zu gewährleisten?
- Wie kann eine (zeitliche) Benachteiligung einzelner Studierender durch leistungsschwache Hardware verhindert werden?
- Wie kann eine asynchrone, aber doch lückenlose Betreuung während der Durchführung der Computerversuche garantiert werden?
- Wie kann erreicht werden, dass sich alle Studierenden selbst mit dem Stoff beschäftigen und die notwendigen Arbeitsschritte eigenständig durchführen?
- Wie können im Homeoffice geschriebene Testate sinnvoll gestaltet werden?

4. Lösungsansatz: Lab@Home

Unser Lösungsansatz für diese Fragen war die Individualisierung des Lab@Home-Computerpraktikums. In diesem Abschnitt erläutern wir zunächst die Einzellösung zu den aufgeworfenen Fragestellungen des vorherigen Abschnitts und geben im anschließenden Abschnitt einen Überblick über die Modalitäten des Lab@Home-Praktikums, die sich nach drei Semestern herauskristallisiert haben.

Die im Computerpraktikum verwendete Computational-Chemistry-Software war auch vor der Pandemie schon das Software-Paket ADF (Amsterdam Density Functional) [2,3]. Über Lehrlicenzen kann mit vielen Computational-Chemistry-Software-Herstellern verhandelt werden. Dieses Programm verfügt über eine

grafische Benutzeroberfläche, auf der Moleküle einfach generiert und alle Parameter der durchzuführenden Berechnung in Drop-Down-Menüs eingestellt werden können (Abb. 1). Da diese Software auf den gängigen Betriebssystemen (MS Windows, Mac OS, Linux) läuft, war sie ideal für unseren Ansatz geeignet. Wir begleiten den Installationsprozess und die Bedienung durch einen Messenger-Dienst-Kanal, aber auch per E-Mail und gegebenenfalls durch Videokonferenzen. Im Allgemeinen treten hierbei keine größeren Probleme auf, da der Installationsprozess dieser kommerziell erhältlichen Software bereits für die drei gängigen Betriebssysteme optimiert ist.

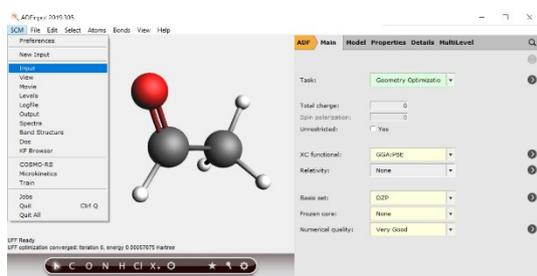


Abb. 1: Grafische Benutzeroberfläche des Programmpakets ADF [2,3]. Moleküle können intuitiv erstellt und Berechnungsparameter in verschiedenen Drop-Down-Menüs eingestellt werden.

Zusätzlich zur Möglichkeit des Lab@Home halten wir aber auch zwei vollständig eingerichtete Desktop-Workstations im Bereich des Campus in Einzelbüros bereit, so dass Studierende ohne die benötigten Hardware-Voraussetzungen die Versuche unter den gegebenen Schutzmaßnahmen jederzeit durchführen könnten. Dadurch erreichen wir ein barrierefreies Computerpraktikum.

Die Installation der Software wird mittels eines Vorversuchs begleitet. In diesem Kurzversuch, zu dem kein Protokoll abgegeben werden muss, erhalten die Studierenden zusätzlich zur Installationsanleitung die numerischen Ergebnisse bestimmter Berechnungen, um diese zu reproduzieren und sich so mit der Software vertraut zu machen. Wir fragen bei diesem Versuch zusätzlich Informationen über die benötigten Rechenzeiten ab. Dadurch können wir die individuelle Hardware abschätzen und bei der Vergabe der Berechnungsparameter darauf achten, dass Studierende mit weniger

leistungsstarker Hardware auch rechentechnisch weniger anspruchsvolle Datensätze zugeordnet bekommen.

Zur asynchronen, lückenlosen Betreuung während der Computerversuche verwenden wir den an der TU Dresden etablierten Messenger-Dienst [matrix] [4]. Der jeweilige Praktikums-Chat-Kanal wird dabei ca. 12 Stunden pro Tag sowohl an Wochentagen als auch an Wochenenden betreut, so dass auf Studierendenseite im Falle von Fragen ein möglichst geringer Zeitverlust während der Bearbeitung der Versuche entsteht. Hierbei sind die Mitarbeiter der Professur für Theoretische Chemie involviert, die sich bei der Betreuung ablösen.

Die größte Herausforderung war die Qualitätssicherung: Während im Computerpool das Wechselspiel zwischen gewünschtem lehrreichem Austausch unter den Studierenden und unerwünschter Weitergabe von Lösungen relativ einfach überwacht werden kann, ist dies in einer Lab@Home-Situation nicht mehr möglich. Wir konnten dieses Problem umgehen, indem wir die Aufgabenstellungen individualisiert haben: Die Studierenden erhielten also individuelle Berechnungsparameter und zu untersuchende Moleküle zugeteilt. Mit diesen werden zwar qualitativ dieselben Ergebnisse erhalten, sie unterscheiden sich aber quantitativ (Abb. 2).

T1: Geometrieoptimierung
 Verwenden Sie bitte für die Berechnung der angegebenen Funktionale (F) und Basisätze (B) für die gezeigten Moleküle.
 Verwenden Sie Molekül 1 für die Aufgaben 1, 2 und 3.

Aufgabe	Molekül 1 (Molekül 1 ebenfalls in Aufgabe 1 & 2)			
	Funktoriel	Basis	Methoden	Methoden
1	HF	P86/3TZP	NOF	PW91/02P
2	HF	BLYP/02P	POC3	OLYP/2P
3	HF	BLYP/02P	COF2	P22/02P
4	HF	P86/3TZP	NCH2	P86/3TZP
5	HF	P86/3TZP	COF2	P86/3TZP
6	CO	BLYP/02P	4D0	BLYP/02P
7	CO	P86/3TZP	COF2	BLYP/02P
8	HF	BLYP/02P	NOF	BLYP/02P
9	CO	P86/3TZP	4D0	PW91/02P
10	HF	OLYP/2P	NCH2	LDZ/2P
11	HF	P86/3TZP	4D0	PW91/02P
12	HF	P86/3TZP	SO2	OLYP/02P
13	HF	BLYP/02P	SO2	LDZ/2P
14	HF	P86/3TZP	4D0	OLYP/2P
15	CO	P86/3TZP	4D0	OLYP/02P
16	HF	OLYP/2P	COF2	BLYP/02P
17	HF	P86/3TZP	PH3	OLYP/02P
18	HF	P86/3TZP	SO2	LDZ/2P
19	HF	P86/3TZP	SO2	PW91/02P
20	CO	BLYP/02P	4D0	LDZ/2P
21	HF	P86/3TZP	SO2	P86/3TZP
22	CO	BLYP/02P	NOF	BLYP/02P
23	HF	P86/3TZP	PH3	LDZ/2P
24	CO	P86/3TZP	NOF	LDZ/2P
25	CO	BLYP/02P	NOF	OLYP/02P
26	HF	BLYP/02P	NCH2	P86/3TZP
27	CO	P86/3TZP	NOF	BLYP/02P

Abb. 2: Individuelle Zuteilung verschiedener Moleküle und Berechnungsparameter (Funktionale, Basisätze) an die Studierenden.

So konnten die Grundlagen für die didaktisch gewünschten Schlussfolgerungen gelegt werden, es mussten aber von allen Teilnehmern die entsprechenden Rechnungen selbständig durchgeführt, also individuelle Ergebnisse produziert werden. Auf diese Weise wurde zur eigenständigen Lösung der Aufgaben animiert

und das Kopieren von Ergebnissen erschwert. Dieser Ansatz hat sich als sehr erfolgreich erwiesen. Zusätzlich wurden alle durch die Studierenden produzierten Datensätze vorab kontrolliert, so dass die Diskussion im Protokoll nicht mit inhaltlich falschen Ergebnissen vorgenommen wurde.

Natürlich hat die Individualisierung einen erheblichen Arbeitsaufwand vorab zur Folge, denn es mussten alle individuellen Datensätze zunächst vorproduziert werden. Dies war nicht nur als Grundlage für die Korrektur nötig, sondern diente auch dazu, bereits im Vorfeld didaktisch ungünstige Kombinationen von Molekülen und/oder Berechnungsparametern herauszufiltern. Praktisch umgesetzt wurde diese Vorproduktion der Ergebnisse durch die Mitarbeiter der Arbeitsgruppe Theoretische Chemie, die die Ergebnisse in geteilten Spreadsheets (Abb. 3) aus dem Homeoffice zusammentrugen und überprüften. Insgesamt wurden auf diese Weise mehrere tausend Datensätze produziert.

Während die kontrollierte Individualisierung des Computerpraktikums zur eigenständigen Beschäftigung mit dem Stoff führte, haben auf der anderen Seite Gemeinschaftsaufgaben eine konstruktive Zusammenarbeit zwischen den Studierenden initiiert.

PES of Ethane Derivative Rotation																
Basic and advanced parameters																
Force con.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	
Rotational Quality	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	
Rot. speed for the used	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	
Molecule: 1,2-dichloroethane																
total energy (kJ/mol)																
ethanol (deg)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
150	151	152	153	154	155	156	157	158	159	160	161	162	163	164	165	166
300	301	302	303	304	305	306	307	308	309	310	311	312	313	314	315	316
450	451	452	453	454	455	456	457	458	459	460	461	462	463	464	465	466
600	601	602	603	604	605	606	607	608	609	610	611	612	613	614	615	616
750	751	752	753	754	755	756	757	758	759	760	761	762	763	764	765	766
900	901	902	903	904	905	906	907	908	909	910	911	912	913	914	915	916
1050	1051	1052	1053	1054	1055	1056	1057	1058	1059	1060	1061	1062	1063	1064	1065	1066
1200	1201	1202	1203	1204	1205	1206	1207	1208	1209	1210	1211	1212	1213	1214	1215	1216
1350	1351	1352	1353	1354	1355	1356	1357	1358	1359	1360	1361	1362	1363	1364	1365	1366
1500	1501	1502	1503	1504	1505	1506	1507	1508	1509	1510	1511	1512	1513	1514	1515	1516
1650	1651	1652	1653	1654	1655	1656	1657	1658	1659	1660	1661	1662	1663	1664	1665	1666
1800	1801	1802	1803	1804	1805	1806	1807	1808	1809	1810	1811	1812	1813	1814	1815	1816
1950	1951	1952	1953	1954	1955	1956	1957	1958	1959	1960	1961	1962	1963	1964	1965	1966
2100	2101	2102	2103	2104	2105	2106	2107	2108	2109	2110	2111	2112	2113	2114	2115	2116
2250	2251	2252	2253	2254	2255	2256	2257	2258	2259	2260	2261	2262	2263	2264	2265	2266
2400	2401	2402	2403	2404	2405	2406	2407	2408	2409	2410	2411	2412	2413	2414	2415	2416
2550	2551	2552	2553	2554	2555	2556	2557	2558	2559	2560	2561	2562	2563	2564	2565	2566
2700	2701	2702	2703	2704	2705	2706	2707	2708	2709	2710	2711	2712	2713	2714	2715	2716
2850	2851	2852	2853	2854	2855	2856	2857	2858	2859	2860	2861	2862	2863	2864	2865	2866
3000	3001	3002	3003	3004	3005	3006	3007	3008	3009	3010	3011	3012	3013	3014	3015	3016
3150	3151	3152	3153	3154	3155	3156	3157	3158	3159	3160	3161	3162	3163	3164	3165	3166
3300	3301	3302	3303	3304	3305	3306	3307	3308	3309	3310	3311	3312	3313	3314	3315	3316
3450	3451	3452	3453	3454	3455	3456	3457	3458	3459	3460	3461	3462	3463	3464	3465	3466
3600	3601	3602	3603	3604	3605	3606	3607	3608	3609	3610	3611	3612	3613	3614	3615	3616
3750	3751	3752	3753	3754	3755	3756	3757	3758	3759	3760	3761	3762	3763	3764	3765	3766
3900	3901	3902	3903	3904	3905	3906	3907	3908	3909	3910	3911	3912	3913	3914	3915	3916
4050	4051	4052	4053	4054	4055	4056	4057	4058	4059	4060	4061	4062	4063	4064	4065	4066
4200	4201	4202	4203	4204	4205	4206	4207	4208	4209	4210	4211	4212	4213	4214	4215	4216
4350	4351	4352	4353	4354	4355	4356	4357	4358	4359	4360	4361	4362	4363	4364	4365	4366
4500	4501	4502	4503	4504	4505	4506	4507	4508	4509	4510	4511	4512	4513	4514	4515	4516
4650	4651	4652	4653	4654	4655	4656	4657	4658	4659	4660	4661	4662	4663	4664	4665	4666
4800	4801	4802	4803	4804	4805	4806	4807	4808	4809	4810	4811	4812	4813	4814	4815	4816
4950	4951	4952	4953	4954	4955	4956	4957	4958	4959	4960	4961	4962	4963	4964	4965	4966
5100	5101	5102	5103	5104	5105	5106	5107	5108	5109	5110	5111	5112	5113	5114	5115	5116
5250	5251	5252	5253	5254	5255	5256	5257	5258	5259	5260	5261	5262	5263	5264	5265	5266
5400	5401	5402	5403	5404	5405	5406	5407	5408	5409	5410	5411	5412	5413	5414	5415	5416
5550	5551	5552	5553	5554	5555	5556	5557	5558	5559	5560	5561	5562	5563	5564	5565	5566
5700	5701	5702	5703	5704	5705	5706	5707	5708	5709	5710	5711	5712	5713	5714	5715	5716
5850	5851	5852	5853	5854	5855	5856	5857	5858	5859	5860	5861	5862	5863	5864	5865	5866
6000	6001	6002	6003	6004	6005	6006	6007	6008	6009	6010	6011	6012	6013	6014	6015	6016
6150	6151	6152	6153	6154	6155	6156	6157	6158	6159	6160	6161	6162	6163	6164	6165	6166
6300	6301	6302	6303	6304	6305	6306	6307	6308	6309	6310	6311	6312	6313	6314	6315	6316
6450	6451	6452	6453	6454	6455	6456	6457	6458	6459	6460	6461	6462	6463	6464	6465	6466
6600	6601	6602	6603	6604	6605	6606	6607	6608	6609	6610	6611	6612	6613	6614	6615	6616
6750	6751	6752	6753	6754	6755	6756	6757	6758	6759	6760	6761	6762	6763	6764	6765	6766
6900	6901	6902	6903	6904	6905	6906	6907	6908	6909	6910	6911	6912	6913	6914	6915	6916
7050	7051	7052	7053	7054	7055	7056	7057	7058	7059	7060	7061	7062	7063	7064	7065	7066
7200	7201	7202	7203	7204	7205	7206	7207	7208	7209	7210	7211	7212	7213	7214	7215	7216
7350	7351	7352	7353	7354	7355	7356	7357	7358	7359	7360	7361	7362	7363	7364	7365	7366
7500	7501	7502	7503	7504	7505	7506	7507	7508	7509	7510	7511	7512	7513	7514	7515	7516
7650	7651	7652	7653	7654	7655	7656	7657	7658	7659	7660	7661	7662	7663	7664	7665	7666
7800	7801	7802	7803	7804	7805	7806	7807	7808	7809	7810	7811	7812	7813	7814	7815	7816
7950	7951	7952	7953	7954	7955	7956	7957	7958	7959	7960	7961	7962	7963	7964	7965	7966
8100	8101	8102	8103	8104	8105	8106	8107	8108	8109	8110	8111	8112	8113	8114	8115	8116
8250	8251	8252	8253	8254	8255	8256	8257	8258	8259	8260	8261	8262	8263	8264	8265	8266
8400	8401	8402	8403	8404	8405	8406	8407	8408	8409	8410	8411	8412	8413	8414	8415	8416
8550	8551	8552	8553	8554	8555	8556	8557	8558	8559	8560	8561	8562	8563	8564	8565	8566
8700	8701	8702	8703	8704	8705	8706	8707	8708	8709	8710	8711	8712	8713	8714	8715	8716
8850	8851	8852	8853	8854	8855	8856	8857	8858	8859	8860	8861	8862	8863	8864	8865	8866
9000	9001	9002	9003	9004	9005	9006	9007	9008	9009	9010	9011	9012	9013	9014	9015	9016
9150	9151	9152	9153	9154	9155	9156	9157	9158	9159	9160	9161	9162	9163	9164	9165	9166
9300	9301	9302	9303	9304	9305	9306	9307	9308	9309	9310	9311	9312	9313	9314	9315	9316
9450	9451	9452	9453	9454	9455	9456	9457	9458	9459	9460	9461	9462	9463	9464	9465	9466
9600	9601	9602	9603	9604	9605	9606	9607	9608	9609	9610	9611	9612	9			

wissen konnten die Aufgaben schneller bearbeiten als unvorbereitete Teilnehmer. Wir haben die Eingangstests daher in Ausgangstests umgewandelt, um den Lernerfolg zu überprüfen und zu belohnen.

Den Herausforderungen, die die Verlegung der Computerpraktika nach Hause mit sich bringt, kann also wie folgt begegnet werden:

- **Eignung der Software:** Das von uns verwendete Programmpaket ADF ist optimal für die Ansprüche des Lab@Home geeignet. Andere Software kann dies auch sein, wurde von uns jedoch nicht getestet. Es empfiehlt sich, auf einfache Installation und intuitive Bedienbarkeit zu achten. Die Möglichkeit des Erwerbs von Lehrlizenzen oder eine freie Lizenzierung ist dabei von Vorteil.
- **Korrekte Installation:** Auch wenn kommerzielle Programme üblicherweise auf eine möglichst zuverlässige Installation ausgelegt sind, haben wir diese mit einem Vorversuch begleitet.
- **Technische Gleichberechtigung:** Abgefragte Rechenzeiten gaben einen Anhaltspunkt für die Leistungsfähigkeit der verwendeten Hardware. Diese konnte so in der Zuordnung der Datensätze berücksichtigt werden.
- **Asynchrone, lückenlose Betreuung:** Ein Messenger-Dienst bietet die optimale Möglichkeit, schnell auf Fragen der Studierenden zu antworten.
- **Eigenständigkeit:** Die Individualisierung der Aufgabenstellungen führt zur eigenständigen Beschäftigung mit dem Stoff. Gemeinschaftsaufgaben motivieren zusätzlich.
- **Ausgangstests statt Eingangstests:** Zur Überprüfung und Belohnung des Lernerfolgs wurden elektronische Abtestate durchgeführt, die in die Versuchs- bzw. Modulnote eingingen.

5. Digitale Betreuung

Nutzung einer Lernplattform: Spätestens mit dem Beginn der Pandemie wurden die Vorteile der Nutzung einer Lernplattform offenbar. Wir

haben die sächsische Lernplattform OPAL bereits zuvor intensiv für unsere Lehre genutzt. Die folgenden Funktionen waren dabei besonders hilfreich:

- **Studentische Registrierung:** E-Mail-Kontakte mit den Studierenden waren so jederzeit möglich.
- **Upload/Download-Ordner:** Die Protokolle wurden per Upload durch die Studierenden abgegeben. Die bewerteten Protokolle konnten zum Download bereitgestellt werden.
- **Elektronische Tests:** Die Ausgangstests wurden mit Hilfe des Testwerkzeugs ONYX durchgeführt. Für Ausgangstests wurde keine Wiederholungsmöglichkeit gegeben. In wenigen Fällen wurde der Versuch mit einem mündlichen Kolloquium abgeschlossen.
- **Forum:** Zunächst wurde das in die Lernplattform integrierte Forum zur Beantwortung von Fragen genutzt. Der Messenger-Dienst hat sich aber als für diesen Zweck geeigneter erwiesen.
- **Klausur:** Abschlussklausuren wurden während der Pandemie als online-Klausuren mit individualisierten Aufgabenstellungen durchgeführt.

Synchrone/asynchrone digitale Vorlesungen:

Alle Vorlesungen der Module wurden aufgezeichnet und waren während des gesamten Semesters über eine Videoplattform (Videocampus Sachsen [5]) des Bildungsportals Sachsen [6] online abrufbar. Dadurch konnte das klassische Vorlesungsformat mit 90 Minuten Frontalunterricht beibehalten werden, denn bei Bedarf konnten die Vorlesungen ganz oder teilweise nachträglich angesehen werden. Die Aufzeichnung erfolgte zum Teil aus dem Hörsaal mit minimaler Präsenz oder vom Laptop über einen Videostreaming-Dienst.

Online-Seminare mit Breakout-Räumen: Eine der größten Herausforderungen war es, die Aufmerksamkeit in Seminaren zu halten, die aus verschiedenen Gründen nicht aufgezeichnet wurden. Dies geschah hauptsächlich durch Unterbrechungen des Vortrags durch Break-

out-Sessions, in denen die Studierenden in zufällig generierten Kleingruppen Aufgaben bearbeiten konnten. Zum Teil betraf dies schon Lösungsansätze der Computerversuche. Dadurch wurde Abwechslung erzeugt und zur eigenständigen Beschäftigung mit dem Stoff angeregt. Die Schwelle, Fragen zu stellen, war in Kleingruppen deutlich reduziert.

Lernvideos: Neben den Online-Seminaren wurden die wesentlichen Inhalte der Versuche in kurzen Videos zusammengefasst, um den Studierenden zu ermöglichen, sich auch nach der jeweiligen Seminarveranstaltung mit den Inhalten zu beschäftigen. Pro Versuch wurden zwei bis drei Videos von je 10 bis 20 Minuten Länge produziert und über die Videoplattform Videocampus Sachsen veröffentlicht.

Digitale Klausur: Eine der größten Herausforderungen war das Stellen einer digitalen Klausur. Während die technischen Voraussetzungen durch die Lernplattform OPAL und das Testwerkzeug ONYX gegeben waren, kam es hier auf eine gute Konzeption der Klausuraufgaben an. Wir haben uns für eine Open-Book-Klausur entschieden (inkl. Internetnutzung), da die Verwendung unerlaubter Hilfsmittel unter den gegebenen Umständen nicht überprüfbar war. Die Fragestellungen wurden entsprechend angepasst, so dass eine Online-Suche nach Lösungen keine Ergebnisse ergab oder zu lange dauerte. Zusätzlich wurden auch hier die Aufgabenstellungen individualisiert und zufällig verteilt und sortiert, so dass auch eine nicht auszuschließende Kommunikation unter den Studierenden zu viel Zeit in Anspruch nehmen würde. Die Notenverteilung hat sich nicht von denen der Vorjahre unterschieden, die Quote an nichtbestanden Prüfungen war jedoch leicht erhöht.

Kommunikation: Als entscheidender Punkt für den Erfolg des Praktikums hat sich die Kommunikation mit den Studierenden erwiesen. Hierbei schien der wichtigste Punkt eine schnelle Beantwortung von Fragen zu sein. Dies war auch der Grund, weswegen wir nach einem Semesterdurchlauf von der Benutzung eines Forums zur Benutzung eines Messenger-Dienstes übergegangen sind, da hier die Benachrichtigungsfunktion bei neuen Inhalten technisch besser umgesetzt ist.

Zur Kommunikation gehörte auch, den Studierenden das Gefühl des Betreut-Seins zu geben: Wir haben daher nicht nur alle Termine, Modalitäten und Praktikumsmaterialien frühzeitig veröffentlicht, sondern auch freitags eine wöchentliche E-Mail mit den Terminen der kommenden Woche und weiteren kurzen Informationen versendet.

7. Lab@Home-Schlüsselemente

Für die erfolgreiche Durchführung eines Lab@Home-Computerpraktikums haben sich für uns folgende Punkte als entscheidend herauskristallisiert:

- Individualisierbare Aufgabenstellungen (quantitativ verschieden, qualitativ analog).
- Gute und permanente elektronische Kommunikation mit den Studierenden.
- Unterstützung der Asynchronizität durch bereitgestellte Lernvideos und Vorlesungsmitschnitte.
- Durchführung elektronischer Tests auch als Vorbereitung auf digitale Klausuren.
- Bereitschaft der Verantwortlichen zu neuen und ungewohnten Lehr- und Bewertungsformaten.

Diese Punkte bedingen einen erhöhten Personal- und Zeitaufwand sowohl bei der Vorbereitung als auch bei der Durchführung. Wir haben abgeschätzt, dass der Aufwand pro Semester bei etwa 1.000 Mitarbeiterstunden, wahrscheinlich aber sogar höher liegt. Hierin ist die benötigte Zeit für gedankliche Vorbereitung und Konzeption nicht einbezogen. Ein gut eingespieltes, nicht zu kleines Team ist daher unbedingt von Nöten.

In kommenden Semestern wird der Aufwand sicherlich sinken, allerdings müssen zum Beispiel die numerischen Ergebnisse bei Software-Updates regelmäßig überprüft werden.

8. Nachhaltigkeit und Diversität

Computerpraktika können generell als nachhaltige Lehrform angesehen werden. Die eigenständige Beschäftigung mit dem Stoff fin-

det ohne Chemikalienverbrauch und sogar unabhängig von vor Ort zur Verfügung stehenden Räumlichkeiten statt. Die Individualisierung brachte einen erhöhten Vorbereitungs- und Betreuungsaufwand mit sich, da mehrere tausend Datensätze produziert und getestet werden mussten. Dieser Prozess kann durch erfahrene Helfer unter Verwendung von scripting zumindest teilweise automatisiert werden. Die Datensätze müssen zwar überprüft werden, sobald ein Software-Update der verwendeten Programme durchgeführt wurde. Im Prinzip stehen sie aber für weitere Jahrgänge zur Verfügung. Auch für zukünftige Präsenzveranstaltungen können sie genutzt werden, da dann zwar eine synchrone Lehrveranstaltung durchgeführt wird, jede teilnehmende Gruppe aber individuelle Aufgabenstellungen erhalten kann.

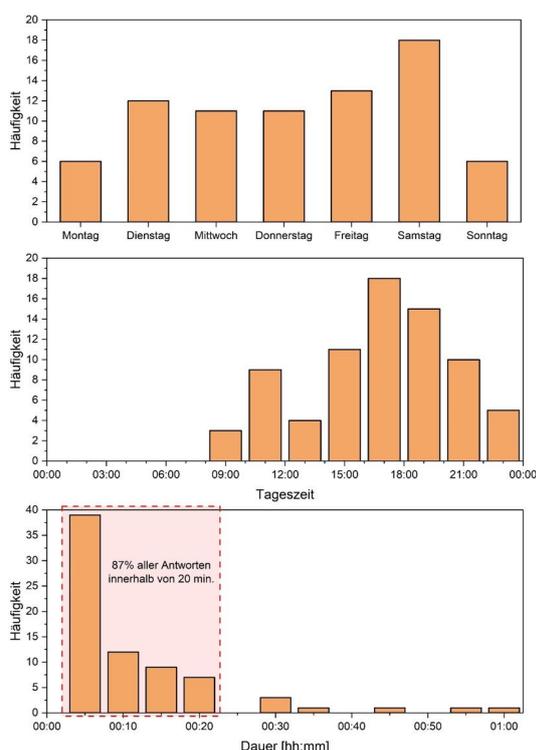


Abb. 5: Statistische Auswertung der Aktivitäten des Messenger-Dienst-Kanals für das Wintersemester 2020/21: Fragenhäufigkeit nach Wochentag (oben) und Tageszeit (Mitte) sowie Antwortzeit durch unsere Mitarbeiter (unten).

Insbesondere die statistische Auswertung des Praktikums-Kanals im Messenger-Dienst [matrix] zeigte, dass das Bearbeitungsverhalten der Studierenden stark vom typischen Tagesablauf mit Präsenzveranstaltungen abwich

(Abb. 5). Die Lab@Home-Aufgaben wurden vermehrt am Wochenende und am Abend durchgeführt. Die Statistik zeigt auch, dass unsere Mitarbeiter es geschafft haben, ca. 90% der gestellten Fragen unabhängig von Wochentag und Uhrzeit innerhalb von 20 Minuten zu beantworten.

Für Studierende, die sich mit besonderen Umständen auseinandersetzen haben, z.B. bei Krankheit oder Abwesenheit, ist die Möglichkeit, ein asynchrones Computerpraktikum zu absolvieren, sicherlich attraktiv. Mit dem gleichzeitigen Angebot des Durchführens vor Ort (durch bereitgestellte, buchbare Hardware im Bereich des Campus) sind unsere Lab@Home-Computerpraktika barrierefrei.

9. Zusammenfassung und Ausblick

Bedingt durch die im Frühjahr 2020 aufgetretene Pandemie und die daraus resultierenden Lockdowns waren wir gezwungen, ein neues Konzept für alle von uns durchgeführten Computerpraktika zu entwickeln. Mittlerweile laufen Lab@Home-Praktika bereits im dritten Semester erfolgreich. Der wichtigste Punkt bei der Entwicklung war die Aufrechterhaltung der Lehrqualität. Wir haben dies erreicht, indem wir die Aufgabenstellungen individualisiert haben. Zusätzlich haben wir für eine gute und permanente Kommunikation mit den Studierenden gesorgt. Hier hat sich ein Messenger-Dienst als vorteilhaft erwiesen. So war es möglich, den sich allein mit dem Stoff beschäftigenden Studierenden ein Betreuungsgefühl zu geben. Positiv aufgenommen wurden vor allem die Asynchronität und die Barrierefreiheit. Zusätzlich zu den zu vermittelnden Themengebieten waren die Studierenden aber auch gezwungen, sich mit computertechnischen Fragestellungen auseinanderzusetzen (Programminstallation, vertiefte Nutzung von Tabellenkalkulationsprogrammen etc.), die ihnen auch außerhalb der Theoretischen Chemie zugutekommen.

Danksagung

Wir danken allen Beteiligten dieses Projekts: Thomas Heine und Antje Völkel, den Systemadministratoren und Doktoranden der Ar-

beitsgruppe Theoretische Chemie, dem Zentrum für interdisziplinäres Lernen und Lehren (ZILL) der TU Dresden, insbesondere dem eLearning-Support, sowie den Studienjahrgängen 2017/2018 des Studiengangs Chemie und 2019 der Studiengänge Chemie und Lebensmittelchemie. Wir danken außerdem der Firma SCM für die Unterstützung mit ADF-Lehrlizenzen.

Literatur

- [1] Computational Chemistry Workbook, T. Heine, J.-O. Joswig, and A. Gelessus, Wiley-VCH (2009), ISBN 978-3-527-32442-2
- [2] G. te Velde, F. M. Bickelhaupt, E. J. Baerends, C. Fonseca Guerra, S. J. A. van Gisbergen, J. G. Snijders and T. Ziegler, Chemistry with ADF, J. Comput. Chem. **22** (2001), 931, DOI: [10.1002/jcc.1056](https://doi.org/10.1002/jcc.1056)
- [3] ADF 2021.1, SCM, Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands, <http://www.scm.com>
- [4] [matrix], Open-Source-Messengerdienst: <https://matrix.org>
- [5] Videocampus Sachsen (gemeinsame Videoplattform sächsischer Universitäten, Hochschulen und der Berufsakademie Sachsen), betrieben von der BPS Bildungsportal Sachsen GmbH: <https://videocampus.sachsen.de>
- [6] Bildungsportal Sachsen, Die sächsische E-Learning-Landesinitiative, <https://bildungsportal.sachsen.de>