

Flipped Pathway to Molecular Simulation

Dipl.-Ing. Jan Bode, Prof. Dr-Ing. Gabriele Raabe
Institut für Thermodynamik, Kontakt: G.Raabe@tu-braunschweig.de

Ziele des Projekts

Neu-Konzeptionierung der Vorlesung "Molekulare Modellierung und Simulation biologischer und pharmazeutischer Systeme" zur

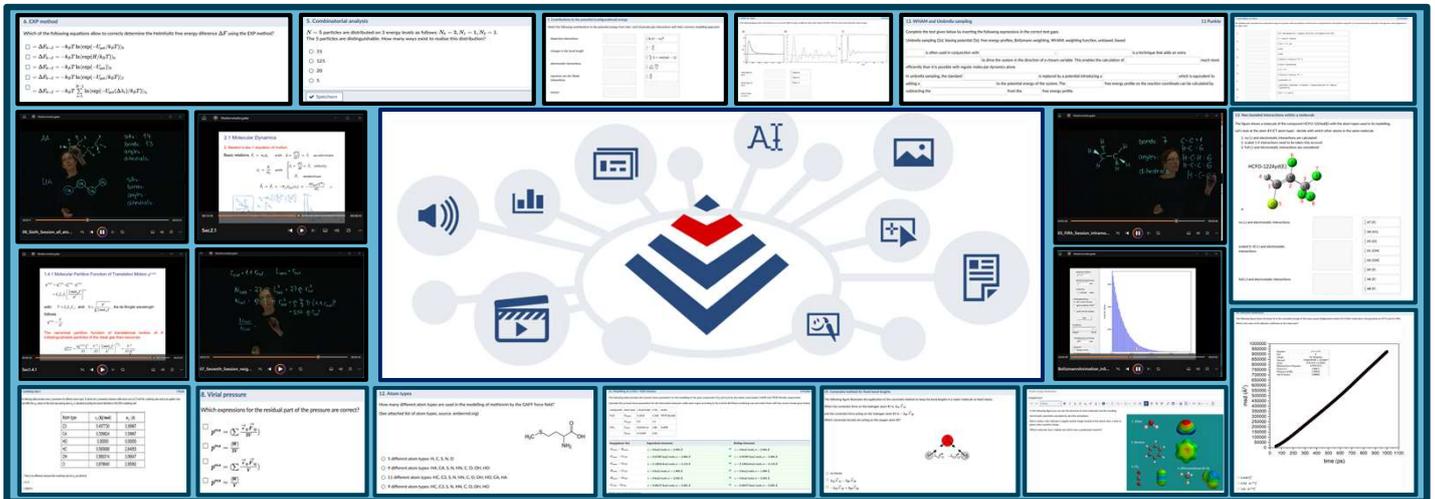
1. Internationalisierung der Vorlesung unter Nutzung von digitalen Tools
2. Stärkung der Handlungskompetenzen der Studierenden zum eigenständigen Bearbeiten von wissenschaftlichen Fragestellungen
3. Stärkung des Praxisbezugs im internationalen Kontext und im Sinne des forschenden Lernens und Lehrens
4. Globales, kompetenzorientiertes Lernen in internationalen Arbeitsgruppen
5. Vermittlung von Future Skills: Umgang mit digitalen Lernmedien, interkulturelle Kommunikation und Kollaboration

Methoden:

- Transferierung der Lehrveranstaltung von der deutschen in die englische Sprache (→ Ziel #1)
- Änderung der Lehrmethode vom präsentierenden Lehren hin zu einem Flipped Classroom Konzept unter Bereitstellung einer umfangreichen Courseware auf Stud.IP zum asynchronen und eigenständigen Lernen (→ Ziele #1,#5)
- In der Vorlesungszeit (synchron): selbstständige Bearbeitung einer praxisorientierten Fragestellung unter Nutzung der erlernten Simulationstechniken (→ Ziele #2,#3) in Gruppenarbeit mit Studierenden von internationalen Partnerinstitutionen (USA, Brasilien, Tansania) (→ Ziele #1, #4, #5)

Ergebnisse

Erstellung der Courseware in Stud.IP:



The image shows a collage of various digital learning materials created for the course. It includes several video thumbnails, slide presentations with mathematical equations and chemical structures, and a central diagram. The central diagram features a stylized logo with a red and blue chevron, surrounded by icons for AI, a bar chart, a speaker, a document, a play button, and a speech bubble, all connected by a circular network of lines.

Ausarbeitung der Simulationsprojekte:

- In Abstimmung mit den Partnern wurden Systeme ausgewählt, für die die Studierenden in Gruppenarbeit Löslichkeitssimulationen und Analysen zur Struktur in Lösung durchführen sollen.
- 6 verschiedene Aufgabenstellungen stehen aktuell für die Gruppenarbeit zur Auswahl: Lösung von drei pflanzlichen Wirkstoffen in den Lösungsmitteln Wasser und Ethanol.
- Jede Gruppe arbeitet an einem System, aber auch Austausch zwischen den Gruppen gefordert.



Besondere Herausforderungen

- Realisierung der synchron durchzuführenden Simulationsprojekte in Gruppenarbeit mit Teilnehmern in 4 Zeitzonen und unterschiedlichen Semesterzeiträumen
- Unterschiedliche technische Voraussetzungen für die Studierenden in den verschiedenen Ländern (z.B. oft instabile Internetverbindung in Tansania)
- Zukünftige Bereitstellung der erforderlichen (HPC) Rechenressourcen für die Durchführung der Simulationsprojekte

Wiederverwendbarkeit

- Die Lehrveranstaltung ist jetzt als Modul „Molecular Simulations of Biochemical Systems“ in den Masterstudiengängen BCI sowie PhV verstetigt, und in CSE beworben.
- Die internationalen Partner möchten sich auch zukünftig beteiligen; bei ausreichenden Kapazitäten könnten weitere nationale und internationale Partner eingebunden werden.
- Die erstellten digitalen Lehrmedien (Courseware) könnten zukünftig auch als MOOC angeboten werden.