



Université de Liège
Faculté des sciences
Collège de doctorat en Didactique des sciences

Spécialité : Didactique de la chimie

THÈSE DE DOCTORAT

Présentée par

Hamad KAROUS

En vue de l'obtention du grade de Docteur en sciences

Analyse didactique du développement des compétences en modélisation en chimie dans l'enseignement secondaire supérieur

Soutenue publiquement devant le Jury composé de :

Professeur Loïc Quinton	ULiège	Président
Dr. Pierre-Hugues Stefanuto	ULiège	Secrétaire
Professeure Annick FAGNANT	ULiège	Membre
Professeur Dominique VERPOORTEN	ULiège	Membre
Professeur Klemens KOCH	Pädagogische Hochschule PHBern	Membre
Professeur Jérémy DEHON	UNamur	Membre
Professeur Bernard LEYH	ULiège	Promoteur

Année académique 2025-2026

Unité de Recherche Interfacultaire DIDACTIfen
Place Cockerill, 3 4000 Liège
www.didactifen.uliege.be

*« C'est ce que nous pensons
déjà connaître qui nous empêche souvent d'apprendre »
Claude Bernard (1813 - 1878)*

Titre : *Analyse didactique du développement de compétences en modélisation en chimie dans l'enseignement secondaire supérieur*

Résumé :

Cette thèse étudie l'impact de la modélisation sur la compréhension conceptuelle des élèves en chimie générale, cinétique chimique et thermodynamique, dans une approche constructiviste. Les recherches, menées auprès d'élèves du secondaire supérieur (15 à 18 ans), évaluent leurs compétences en modélisation et leur développement conceptuel. Les résultats montrent que la modélisation schématique améliore la compréhension des liens entre les représentations macroscopiques, microscopiques et symboliques. L'analyse des schémas scientifiques présents dans les manuels scolaires a révélé des lacunes dans les représentations, influençant la capacité des élèves à interpréter et concevoir des modèles. Des séquences didactiques basées sur la modélisation, intégrant des protocoles expérimentaux et des outils interactifs en ligne, ont renforcé l'autonomie et le raisonnement scientifique des élèves. L'introduction de l'échelle "Transmission du Raisonnement Logique" (TRL) a permis d'évaluer et de favoriser le développement des compétences de modélisation, incluant l'auto-évaluation. Cette recherche souligne l'importance de la modélisation, de l'auto-évaluation et de l'intégration technologique pour l'apprentissage conceptuel en chimie.

Mots-clés : *Modélisation, changement conceptuel, enseignement secondaire, modélisation schématique, ingénierie didactique, outils interactifs, échelle TRL.*

Abstract:

This thesis examines the impact of modeling on students' conceptual understanding in general chemistry, chemical kinetics, and thermodynamics within a constructivist approach. The research, conducted with upper secondary students (aged 15 to 18), evaluates their modeling skills and conceptual development. The results show that schematic modeling enhances the understanding of the links between macroscopic, microscopic, and symbolic representations. Analysis of scientific diagrams in textbooks revealed deficiencies in representations, affecting students' ability to interpret and design models. Didactic sequences based on modeling, integrating experimental protocols and interactive online tools, have strengthened students' autonomy and scientific reasoning. The introduction of the "Transmission of Logical Reasoning" (TRL) scale has enabled the evaluation and enhancement of modeling skills, including self-assessment. This research highlights the importance of modeling, self-assessment, and technological integration for conceptual learning in chemistry.

Keywords: *modeling, conceptual change, secondary school, schematic modeling, didactic sequence, interactive tools, TRL scale.*

Remerciements

Je voudrais tout d'abord adresser mes vifs remerciements à mon promoteur, Professeur Bernard LEYH, qui m'a permis de travailler sur ce sujet vaste et passionnant, et m'a encadré avec une bonne humeur constante, une exigence inégalée et une patience illimitée pendant ces longues années. Ses conseils judicieux et son sens de la pédagogie m'ont été d'une aide précieuse lors de cette thèse. Je lui suis également profondément reconnaissant pour sa confiance sans faille.

Mon deuxième remerciement n'en est pas moins grand puisqu'il revient à Madame Brigitte NIHANT, pour m'avoir fait l'honneur d'assurer le suivi de cette thèse, ainsi que pour les grandes qualités humaines dont elle sait faire preuve, et les intéressantes discussions scientifiques que nous avons eues ensemble. J'ai été ravi d'avoir travaillé sous sa supervision et sa bienveillance. Outre son appui scientifique, elle a toujours été là pour me conseiller et m'orienter incessamment afin de mener à bien mes recherches scientifiques dans une thématique assez délicate.

Je souhaite aussi adresser ma reconnaissance et mes remerciements à tous mes collègues de l'enseignement secondaire, notamment Kathy Mawet, Françoise Derwa, François Pirét, Betty Guilliams et Naima Said qui n'ont pas hésité une seule seconde à m'ouvrir la porte de leurs classes respectives afin de mener les enquêtes nécessaires à l'élaboration de mes travaux, et en ayant accepté de collaborer infailliblement tout en apportant l'aide et le soutien indispensable à la réussite de mes travaux de recherche.

Je ne peux pas aussi oublier tous les élèves de divers établissements de l'enseignement secondaire et appartenant aux différentes écoles qui ont participé sérieusement et efficacement aux différentes activités, enquêtes, questionnaires, exercices et méthodes, contribuant ainsi à la réussite de la mise en œuvre de nouvelles méthodes pédagogiques proposées d'apprentissage de la chimie au sein des écoles secondaires.

Je suis particulièrement très reconnaissant envers Docteur Sabri Mekaoui qui m'a soutenu tout au long de cette thèse, et qui m'a encouragé de continuer malgré les circonstances, ce qui m'a permis de ne jamais dévier de mon objectif final. Je lui exprime sincèrement toute ma gratitude pour les nombreux encouragements qu'il m'a prodigués.

Ce travail n'aurait pu être mené à bien sans l'aide précieuse de plusieurs personnes. J'exprime ma profonde gratitude à la Professeure Marie-Noëlle Hindryckx et à Catherine Vieujean pour leurs conseils toujours aussi pertinents.

Je remercie également mon cher frère, Docteur Lamine Karous, pour son soutien quotidien indéfectible et son enthousiasme contagieux à l'égard de mes travaux de recherche comme de la vie en général. Ces remerciements ne peuvent s'achever, sans une pensée pour ma mère, mon père et mes frères et sœurs. Leurs encouragements sont pour moi les piliers fondateurs de ce que je suis et de ce que je fais.

Enfin, j'adresse mes remerciements les plus respectueux aux honorables membres du jury qui ont acceptés de lire, d'examiner et de juger mes travaux de recherche présentés dans ce manuscrit de thèse.

Tables de matières

Remerciements.....	i
Tables de matières.....	iii
Listes des figures	vi
Introduction générale.....	1
1 Point de départ et état actuel de la question	1
2 Objectifs.....	3
3 Plan d'étude.....	5
3.1 Analyse des représentations scientifiques	5
3.2 Appliquer des ingénieries didactiques.....	6
3.3 Modélisation informatique	9
3.4 S'auto-évaluer avec une échelle pédagogique.....	10
4 Références.....	13
Chapitre 1 : Les origines de la recherche	18
1 Modèle comme outil didactique.....	19
1.1 Modèle et constructivisme philosophique : réflexions épistémologiques préalables 19	
1.2 Cerner la notion de modèle scientifique : Du langage des arts à celui de la didactique	22
1.3 Caractérisation d'un modèle scientifique	22
1.4 A la rencontre des modèles dans un cours de chimie	27
2 Le processus de construction de modèles : réflexions didactiques	37
2.1 Aptitudes à développer	37
2.2 Revue sélective de la littérature didactique	38
2.3 Modélisation comme support pour le changement conceptuel.....	42
2.4 Le schéma scientifique, un outil didactique et / ou une source d'obstacles épistémologiques ?	43

3	Ingénieries didactiques pour un enseignement basé sur la modélisation.....	46
3.1	Caractéristiques d'une ingénierie didactique.....	46
3.2	Objectifs des ingénieries didactiques développées dans ce travail	51
4	Multimédia pour apprendre la chimie.....	52
4.1	Rôle des multimédia dans l'apprentissage	52
4.2	Des cas concrets d'utilisation de multimédia dans l'apprentissage de la chimie..	53
4.3	Conclusions	61
5	Auto-évaluation : échelle TRL.....	63
6	Références.....	65
Chapitre 2 : Perspectives didactiques de la modélisation schématique en chimie		
	73	
1	Cadre de la recherche	73
2	Analyse de modèles schématiques proposés dans des manuels scolaires.....	76
2.1	Critères d'analyse des modèles schématiques.....	76
2.2	Applications : quelques exemples d'illustrations dans les manuels scolaires de chimie	78
2.2.1	Le modèle corpusculaire	78
2.2.2	Le modèle atomique	89
2.2.3	Le modèle en couches.....	95
2.3	Conclusions de cette analyse.....	100
3	Références.....	104
4	Article scientifique publié	106
4.1	Résumé	106
4.2	Abstract	107
Chapitre 3 : Ingénieries didactiques sur la cinétique chimique		
	108	
1	Objectifs.....	108
2	Questions de recherche	110
3	Description de la séquence constituant l'ingénierie didactique	111

4 Références.....	121
5 Article scientifique 1	123
5.1 Résumé	123
5.2 Résumé graphique	123
6 Article scientifique 2	124
6.1 Résumé	124
6.2 Résumé graphique	124
Chapitre 4 : Ingénierie didactique relative à la thermochimie	168
1 Objectifs.....	168
2 Questions de recherche	172
3 Description de la séquence constituant l'ingénierie didactique	172
4 Références.....	180
5 Article scientifique 3	183
5.1 Résumé	183
5.2 Résumé graphique	183
Introduction.....	185
Research Question.....	186
Chapitre 5 : Échelle TRL « Transmission du Raisonnement Logique ».....	208
1 Objectifs.....	208
2 Questions de Recherche	209
2.1 Description de l'Étude	209
3 Article scientifique 4	211
3.1 Résumé	211
Conclusions et perspectives	250
Perspectives pour de futures recherches	257
Références	259
Annexes : Supplementary material	260

Listes des figures

Figure 1 : Différents acteurs et composantes lors du processus d'acquisition de compétences de modélisation chez les élèves	4
Figure 2 : Plan d'étude associé aux différentes parties de la thèse.....	5
Figure 3 : La triade fondamentale du modèle scientifique	23
Figure 4 : Modèle en couche de l'atome de magnésium	26
Figure 5 : Modèle des orbitales atomiques	26
Figure 6 : Les avantages de l'apprentissage de la chimie avec les technologies	62
Figure 7 : Un exemple d'une modélisation submicroscopique.....	114
Figure 8 : Structure géométrique de l'état de transition	115
Figure 9 : Diagramme énergétique de l'évolution de la réaction de substitution nucléophile	116
Figure 10 : Schéma d'organisation de l'ingénierie didactique proposée	118
Figure 11 : Ordre chronologique de récolte de données	120
Figure 12 : La modélisation des effets thermiques : des expériences aux concepts.	173
Figure 13 : Un exemple illustrant le lien entre les notions de température et chaleur	174
Figure 14 : Modélisation pour illustrer la relation entre la température et l'énergie thermique.....	176
Figure 15 : Expériences sur les transferts de chaleur lors des transformations physico-chimiques.....	177
Figure 16 : Schéma d'organisation de l'ingénierie didactique proposée	178
Figure 17 : Ordre chronologique de récolte de données	179

Introduction générale

Sommaire

1	Point de départ et état actuel de la question	1
2	Objectifs.....	3
3	Plan d'étude.....	5
3.1	Analyse des représentations scientifiques	5
3.2	Appliquer des ingénieries didactiques.....	6
3.3	Modélisation informatique	9
3.4	S'auto-évaluer avec une échelle pédagogique.....	10
4	Références.....	13

Cette introduction générale présente les grandes lignes des travaux de recherche qui ont été menés tout au long de notre projet de thèse. Nous décrirons tout d'abord l'état de la question telle que nous pouvons la rencontrer dans la littérature scientifique. Ensuite, nous expliquerons nos objectifs de recherche pour terminer en détaillant le plan d'étude.

1 Point de départ et état actuel de la question

La modélisation est une démarche omniprésente dans la recherche en sciences expérimentales (biologie, chimie et physique) et en didactique de ces disciplines. Elle en constitue un élément épistémologie majeur [1-3]. Par exemple, dans l'enseignement de la physique et de la chimie dans le cycle secondaire en Belgique francophone, la notion de modèle revient très fréquemment dans les manuels et apparaît quasiment dans chaque Unité d'Acquis d'Apprentissage (UAA) des référentiels scolaires, notamment dans le cadre des compétences à développer chez les élèves [4]. Il en est de même en Communauté Germanophone de Belgique [5]. L'encadré ci-dessous illustre la prédominance du concept de modèle dans les référentiels de chimie pour les sciences générales en Communauté Française de Belgique [4].

Modélisation dans le cadre de l'enseignement de la chimie

- ☐ S'approprier des concepts fondamentaux, des modèles et des principes
- ☐ Évaluer la portée et les limites des modèles et des principes
- ☐ Conduire une recherche et utiliser des modèles
- ☐ Utiliser des procédures expérimentales
- ☐ Bâtir un raisonnement logique
- ☐ Utiliser des procédures de communication
- ☐ Résoudre des applications numériques
- ☐ Utiliser les outils mathématiques et informatiques adéquats
- ☐ Comprendre que les connaissances actuelles en sciences ont une histoire

Comme le souligne Giere (1988) [6]:

‘What science provides for ‘scientific explanations’ is a resource consisting of sets of well- authenticated models. How people deploy those models in the process of constructing or understanding explanations depends on the extra scientific context.’ (p. 105)

La recherche en didactique des sciences propose une large réflexion sur l’usage de la modélisation en classe de sciences [7-22]. Depuis quelques années, l’accent mis sur le rôle central des modèles ne cesse de renforcer considérablement l’authenticité des programmes de sciences. En effet, l’apprentissage par modélisation dans l’enseignement des sciences a été, depuis l’an 2000, le thème d’un numéro spécial de l’*International Journal of Science Education* [23] et aussi un numéro spécial sur les représentations dans *Chemistry Education Research and Practice* [24].

Beaucoup de travaux ont apporté différents éclairages et points de vue sur la notion de modèle chez les chercheurs et les enseignants de sciences [25-33]. Plusieurs travaux [12, 16, 21, 33, 47] et en particulier Maia et Justi [34] insistent sur l’importance de faire construire par les élèves leurs propres modèles explicatifs. Il apparaît ainsi que les tâches de modélisations peuvent être très variées, ce qui implique que les enseignants doivent prendre conscience des enjeux et s’interroger sur la nature du processus mis en œuvre par les élèves dans les différentes activités de modélisation [16, 35-43].

2 Objectifs

Il nous paraît important de conscientiser les enseignants quant au rôle central du processus de modélisation en sciences et aux relations que celui-ci entretient avec la transposition didactique. Il ne peut qu'en résulter une vision plus authentique des sciences auprès des élèves et donc des futurs citoyens, quel que soit le domaine d'activité que ceux-ci choisiront. Il est incontestablement indispensable que chaque élève prenne conscience du rôle et du statut des modèles dans la connaissance que nous avons du monde [36, 44-46]. On ne peut, dans l'optique d'une pédagogie privilégiant le rôle d'acteur de l'élève, se contenter de lui présenter des modèles historiques établis dont on soulignerait les différentes qualités, insuffisances et perspectives d'évolution. Il faut également que les élèves créent leurs propres modèles et qu'ils en évaluent la pertinence en les confrontant à la réalité expérimentale. Pour comprendre en profondeur ce concept, ils ne doivent pas être seulement des consommateurs de modèles, ils doivent aussi en être les concepteurs. Ils doivent modéliser [15-16, 47-48].

On comprendra ainsi, tout au long des travaux présentés dans cette thèse, que l'acquisition de compétences de modélisation est à la fois un but en soi, permettant d'atteindre une compréhension authentique du processus de construction des connaissances scientifiques, et un moyen didactique puissant stimulant la compréhension conceptuelle et soutenant, lorsque c'est requis, le changement conceptuel.

Dans le cadre de notre étude, nous nous proposons de présenter les problématiques, qui seront détaillées dans le chapitre 1, autour des deux types d'acteurs que sont les élèves et les enseignants impliqués dans le processus de modélisation.

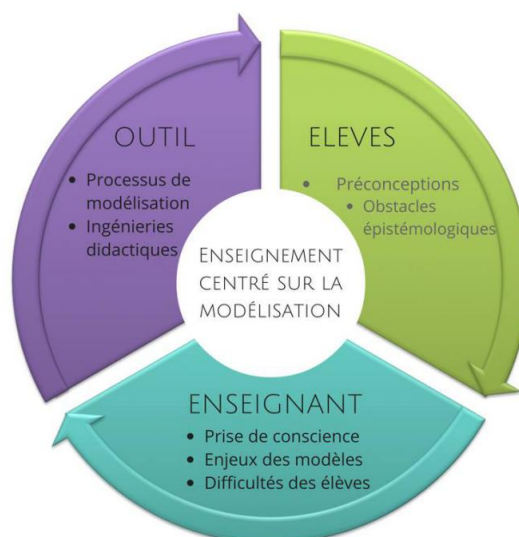


Figure 1 : Différents acteurs et composantes lors du processus d'acquisition de compétences de modélisation chez les élèves

La figure 1 représente de manière synoptique le processus que nous visons à établir. Ce dernier comprend trois éléments : les élèves chez lesquels nous cherchons à stimuler le changement conceptuel en présence de certaines conceptions alternatives, les enseignants pour lesquels une prise de conscience est importante et finalement les outils, principalement basés sur la modélisation de situations expérimentales, qui serviront à atténuer l'appréhension face à la démarche, et à corriger ou inhiber les préconceptions qui viennent à l'encontre de l'apprentissage envisagé [12, 49-50].

Ainsi, le but d'un enseignement centré sur la modélisation est de faire progresser les élèves depuis le stade de leurs capacités spontanées de raisonnement et de leurs préconceptions – qui vont être identifiées par l'examen de la littérature scientifique et au travers d'enquêtes – vers un modèle cible établi par transposition didactique. Le but de nos ingénieries didactiques est d'enrichir le raisonnement scientifique des élèves afin de réduire l'obstacle épistémologique qu'ils rencontreront lorsqu'ils seront amenés à modéliser des observations de faits expérimentaux au niveau moléculaire. Les élèves doivent devenir capables de faire évoluer leurs modèles en fonction des différentes étapes du dispositif didactique (première phase d'expérimentation, mise en commun et confrontation des interprétations, deuxième phase d'expérimentation...).

Cette recherche nous a également conduit à mesurer les faiblesses de certaines schématisations et à comprendre comment celles-ci peuvent engendrer des conceptions erronées susceptibles de rendre l'apprentissage ultérieur plus difficile, en particulier dans l'enseignement supérieur. Nous avons en outre abordé la question liée à l'évaluation et à l'autoévaluation de la progression des compétences de modélisation chez les élèves en mettant en place une nouvelle échelle pédagogique.

3 Plan d'étude

Notre travail de recherche a pour but de couvrir plusieurs axes qui sont illustrés dans la figure 2 ci-dessous :

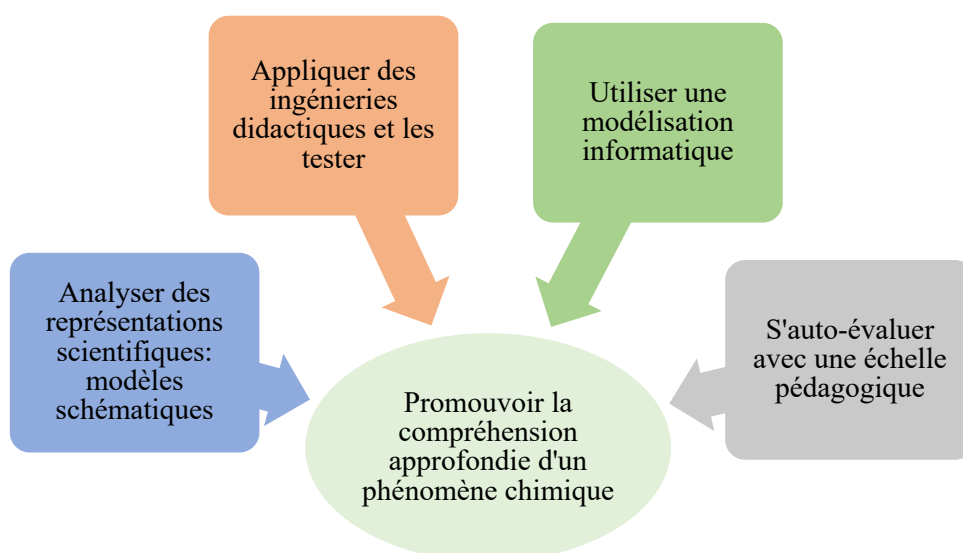


Figure 2 : Plan d'étude associé aux différentes parties de la thèse

3.1 Analyse des représentations scientifiques

Dans leur apprentissage des sciences et, en particulier, de la chimie, les élèves de l'enseignement secondaire rencontrent la modélisation le plus souvent d'abord sous une forme iconique : nous parlerons dans ce cas de modèles schématiques ou de représentations schématiques. Il s'agit de représentations graphiques nécessairement simplifiées, comme nous le détaillerons dans les chapitres ultérieurs, de phénomènes chimiques, dans lesquelles le niveau submicroscopique, un des trois sommets du triangle de Johnstone, joue un rôle essentiel [51]. Dans

une première étape, nous avons donc analysé diverses représentations scientifiques schématiques d'un double point de vue : (i) la qualité des représentations apparaissant dans les ouvrages de référence utilisés dans un cadre scolaire, autrement dit, les manuels scolaires ; (ii) les capacités des élèves à interpréter de tels modèles schématiques et à en concevoir par eux-mêmes.

La qualité des modèles schématiques présentés par les manuels scolaires a été évaluée sur la base de critères qui seront discutés en détail dans la première partie du chapitre 2. Les exemples choisis se réfèrent au modèle corpusculaire, depuis la constitution de la matière jusqu'à la structure électronique des atomes. La maîtrise de la modélisation par des élèves des 2^e et 3^e degrés (classes de 4^{ème}, 5^{ème} et 6^{ème} année de l'enseignement secondaire ; grades 10 à 12) fait l'objet de la seconde partie du chapitre 2. Nous y abordons les questions de recherche suivantes :

- Comment les capacités des élèves à analyser, c'est-à-dire à interpréter et à extraire des informations de modèles schématiques de référence se comparent-elles de la 4^e à la 6^e année ?
- Comment les élèves passent-ils progressivement d'une description macroscopique d'un phénomène à une interprétation basée sur un modèle au niveau moléculaire ?
- Existe-t-il une corrélation entre la capacité à interpréter une représentation schématique de référence et les compétences de modélisation autonome ?

Conceptual change in chemistry schematic modelling: *a cross-sectional study of 10th–12th-grade Belgian students*, Hamad Karous, Brigitte Nihant, and Bernard Leyh, Canadian Journal of Chemistry, Vol. 100, No. 8, pp. 633 - 648 [52].

3.2 Appliquer des ingénieries didactiques

Par la suite, nous nous sommes attachés à concevoir des séquences de leçons qui s'inscrivent dans des ingénieries didactiques basées sur la modélisation schématique. Deux ingénieries visant à encourager et suivre le développement de compétences de modélisation chez les élèves de l'enseignement secondaire ont été

proposées et testées dans plusieurs écoles de niveau secondaire de l'enseignement général. Les résultats de ces recherches sont présentés dans les chapitres 3 et 4.

Nous avons entre autres mis l'accent sur l'insertion de protocoles expérimentaux dans les différentes sections de la séquence. Ces investigations expérimentales ont pour but de susciter les raisonnements spontanés des élèves et d'amener ceux-ci à construire leurs connaissances de manière autonome. Il s'agit donc de laisser plus d'autonomie aux élèves en proposant des activités plus ouvertes via des tâches de modélisation.

Dans les référentiels de la Fédération Wallonie-Bruxelles, l'Unité d'Acquis d'Apprentissage (UAA) n°6 se divise en deux parties, l'une dédiée à la thermochimie et l'autre à la cinétique. Afin de promouvoir une étude plus approfondie, nous avons choisi, en concertation avec les enseignants de plusieurs écoles secondaires qui ont aimablement accepté de collaborer, de mettre à l'épreuve nos deux séquences didactiques englobant l'ensemble de cette UAA6.

Dans le domaine de la recherche littéraire, un ensemble d'études a mis en lumière les préconceptions souvent associées aux concepts fondamentaux de cinétique [53-61] et de thermochimie [62-65]. Ces préconceptions, qui peuvent être des obstacles à une compréhension approfondie, ont suscité l'intérêt de nombreux chercheurs. Certains d'entre eux ont cherché à remédier à ces problèmes en développant des approches didactiques ciblées.

Concernant la cinétique, plusieurs études [54-58,66] se sont concentrées sur l'élaboration de stratégies pédagogiques visant à améliorer la compréhension des élèves. Ces initiatives ont souvent inclus des méthodes d'enseignement spécifiques, des exemples concrets et des activités pratiques pour aider les apprenants à surmonter leurs préconceptions et à développer une compréhension plus approfondie des processus cinétiques.

Parallèlement, des recherches ont également été menées dans le domaine de la thermochimie [63, 64], avec des efforts similaires pour élaborer des approches didactiques novatrices. Ces initiatives ont eu pour objectif d'améliorer la compréhension des élèves en mettant l'accent sur des méthodes d'enseignement

interactives, l'utilisation d'expériences pratiques et la clarification des concepts souvent mal compris.

Malgré le constat que ces études n'étaient pas très nombreuses, la reconnaissance croissante des préconceptions dans les domaines de la cinétique et de la thermochimie a conduit à des efforts notables pour améliorer les approches didactiques existantes. Notre contribution à ce domaine de recherche consiste à mettre en place une séquence pédagogique dédiée à la thermodynamique. Cette séquence vise à approfondir la compréhension conceptuelle de notions cruciales telles que la température, la chaleur, l'énergie thermique, la capacité calorifique et l'enthalpie. Notons que ces notions n'ont pas été traitées simultanément de manière approfondie dans les études antérieures.

En ce qui concerne la séquence consacrée à la cinétique, ses objectifs didactiques prioritaires sont définis de deux manières. Premièrement, il s'agit de modéliser une réaction chimique élémentaire en tant que résultat d'une collision efficace entre les molécules de réactifs. Cela inclut l'élaboration de la définition de la vitesse de réaction et l'explication, à partir de la modélisation submicroscopique, des divers résultats expérimentaux macroscopiques liés aux facteurs cinétiques. Ces objectifs reflètent ainsi les trois sommets du triangle de Johnstone [51]. Deuxièmement, nous avons cherché à encourager les élèves à découvrir de manière autonome le concept de collision efficace, en les incitant à construire un modèle du complexe activé (état de transition) pour une réaction spécifique (substitution nucléophile) [66-68].

Ainsi, notre initiative vise à combler les lacunes identifiées dans la littérature en développant des approches didactiques novatrices et en mettant l'accent sur des concepts qui n'ont pas encore fait l'objet d'une exploration approfondie dans des études antérieures.

Chaque section de notre séquence pédagogique donnera lieu à une proposition d'article, visant à documenter et à partager les résultats de nos travaux de recherche. Tout au long de notre démarche, nous nous efforcerons de focaliser notre attention sur les interrelations et les distinctions entre la thermochimie et

la cinétique. Notre objectif ultime est de remédier aux problèmes didactiques identifiés dans la littérature spécialisée [69-74] et de contribuer à une meilleure compréhension des concepts fondamentaux de la chimie chez les élèves.

À travers ces ingénieries didactiques, nous voulons d'abord développer des capacités de modélisation schématique incluant les modèles moléculaires et les mouvements liés à l'agitation thermique. Nos questions de recherche se résument comme suit. Les activités proposées stimulent-elles les capacités des élèves à

- fournir des explications scientifiquement adéquates pour les facteurs influençant la vitesse d'une réaction chimique, sur la base d'une représentation moléculaire ;
- réaliser la modélisation moléculaire de la théorie des collisions et du complexe activé en impliquant des aspects géométriques et énergétiques ?
- fournir des explications correctes et une modélisation moléculaire pour les différents concepts thermochimiques et les processus d'échange de chaleur ;

Nous accordons également une attention particulière aux aspects quantitatifs, qui englobent la définition mathématique de la vitesse d'une réaction ainsi que sa mesure, au sein de notre séquence pédagogique. Nous évaluons la capacité des élèves à interpréter des données empiriques, qu'elles soient présentées sous forme de graphiques ou de tableaux, et à établir des relations mathématiques entre les paramètres pertinents.

Une autre dimension que nous explorons à toutes les étapes de nos deux séquences concerne la manière dont la compréhension par les élèves des concepts chimiques fondamentaux influe sur leur progression dans l'apprentissage de la thermochimie et de la cinétique chimique. Nous cherchons à comprendre comment une solide base de connaissances en chimie contribue de manière significative à leur compréhension des concepts plus avancés, renforçant ainsi la pertinence et l'efficacité de notre approche pédagogique.

3.3 Modélisation informatique

De nombreuses revues publient régulièrement des recherches liées à l'innovation et au développement de modélisations et de simulations pour soutenir

les élèves dans la compréhension de concepts scientifiques. Ces dernières sont majoritairement approchées par l'outil informatique [29, 75-77]. Ces travaux montrent bien la diversité des cadres théoriques utilisables dans les différents contextes de recherche éducatifs. Ils incitent à réfléchir aux fonctions des modèles et abordent la question de l'enseignement de la modélisation et de la simulation. Cela montre la nécessité de poursuivre une recherche active dans ce domaine afin de mieux connaître la manière dont on peut enseigner et faire apprendre en construisant, en manipulant et en adaptant des objets (réels ou virtuels) dans un but de modélisation scientifique.

Les ingénieries didactiques que nous avons développées ont été renforcées simultanément par une approche informatique comportant des animations et des tests en ligne qui accompagnent les élèves tout au long de chaque séquence.

Durant les différentes étapes de l'approche que nous avons testée, nous avons inséré des liens d'accès et des code QR dans les documents des élèves. Il est attendu de ces derniers qu'ils les ouvrent et réalisent les travaux associés à domicile avant d'entamer la prochaine étape de la séquence.

Nous évaluons l'impact de l'utilisation d'activités sur un site Web interactif sur la compréhension de la thermochimie et de la cinétique par les élèves, en mettant en lumière les liens entre les niveaux macroscopique et submicroscopique. Cette approche interactive vise à améliorer la visualisation et la compréhension des concepts scientifiques, offrant ainsi une perspective innovante sur l'enseignement des sciences.

3.4 S'auto-évaluer avec une échelle pédagogique

Dans le cadre de notre engagement envers le développement des compétences de modélisation, nous avons approfondi notre compréhension de l'évaluation, mettant particulièrement l'accent sur l'auto-évaluation en vue d'une amélioration continue. Pour concrétiser cette vision, nous avons créé une échelle pédagogique TRL (Transmission du Raisonnement Logique). Cette échelle a été spécifiquement conçue pour évaluer la progression de la capacité de raisonnement logique chez les élèves tout au long de leurs activités d'apprentissage [78-80].

Dans le processus de développement de cet outil, nous nous sommes consacrés à des questions de recherche cruciales, nous focalisant notamment sur l'évaluation des compétences en modélisation à travers l'utilisation de l'échelle TRL. Nous nous sommes interrogés sur la manière dont cette échelle permet de mesurer la progression des compétences des apprenants dans le domaine complexe des activités de modélisation. Nous avons également cherché à comprendre la perception des élèves à l'égard de l'échelle TRL et comment ils la perçoivent dans le contexte de leur apprentissage.

Cette démarche nous a procuré une compréhension plus nuancée de la dynamique de l'évaluation des compétences en modélisation. Elle a également permis d'intégrer le point de vue des apprenants, mettant en lumière l'utilité significative de l'échelle TRL dans leur processus d'apprentissage. Cette approche innovante renforce non seulement la qualité de l'évaluation des compétences, mais enrichit également la relation entre les apprenants et l'outil pédagogique, créant ainsi un environnement propice à une amélioration constante.

Pratiquement, nous avons travaillé dans le cadre d'un cours basé sur des activités de modélisation en collaboration avec des enseignants de deux écoles de l'enseignement secondaire au niveau de la cinquième année (5^e année secondaire en option sciences générales de l'enseignement général). Quatre phases (introductive, principale, d'approfondissement et complémentaire) ont été proposées et la progression des élèves a été évaluée sur la base de l'échelle TRL pour chacune de ces phases.

Le chapitre 5 décrit de manière détaillée l'étude préliminaire consacrée au développement de cette nouvelle échelle pédagogique.

Dans cette thèse, la modélisation est considérée selon une double perspective déjà développée dans les sections précédentes. Elle est considérée à la fois comme un objet d'apprentissage, faisant l'objet d'un enseignement et d'une analyse spécifiques. Par ailleurs, sans être réduite à un simple outil instrumental, la modélisation est également mobilisée comme un levier pour soutenir la compréhension des phénomènes et de l'évolution des conceptions des élèves. Cette

double fonction structure l'ensemble de la recherche et justifie l'articulation entre les cadres théoriques, les dispositifs mis en place et les analyses présentées dans les différents chapitres.

4 Références

- [1] Gilbert, J.K. (2004). Models and Modelling: routes to more authentic science education, *Int. J. Sci. Math. Educ*, 2, 115–130.
- [2] Chamizo, J.A. (2011). A New Definition of Models and Modeling in Chemistry's Teaching. *Sci. Edu.*, 22 (7), 1613-1632.
- [3] Gilbert, J. & Justi, R. (2016). *Modelling-Based Teaching in Science Education*; 9, Basel, Switzerland: Springer.
- [4] Communauté Française Wallonie–Bruxelles. Compétences et Savoir Requis en Sciences Générales, (2014), http://www.gallilex.cfwb.be/document/pdf/40140_001.pdf.
- [5] Ministerium der Deutschsprachigen Gemeinschaft. Rahmenplan, Naturwissenschaften (2015), https://ostbelgienbildung.be/PortalData/21/Resources/downloads/schule_ausbildung/schulische_ausbildung/rahmenplaene_neu/Rahmenplan_NAWI.pdf.
- [6] Giere, R. N. (1988). *Explaining science: A cognitive approach*. Chicago: University of Chicago Press
- [7] Rouse, W., B. & Morris, N. M. (1986). On looking into the black box: Prospects and limits in the search for mental models. *Psychological Bulletin*, 100, 349-363.
- [8] Modell, H.I. (2000). How To Help Students Understand Physiology? Emphasize General Models. *Advances in Physiology Education*, 23 (1), 101-107.
- [9] Martinand, J. L. (1996). Introduction à la modélisation. Paper presented at the Actes du séminaire de didactique des disciplines technologiques, Cachan Paris.
- [10] De Vecchi, G. (2006). *Enseigner l'expérimental en classe : pour une véritable éducation scientifique* Paris: Hachette éducation.
- [11] Pospiech, G. & Fischer, H.E. (2021). Physical–Mathematical Modelling and Its Role in Learning Physics. In: Fischer, H.E., Girwidz, R. (eds) *Physics Education. Challenges in Physics Education*. Springer.
- [12] Machado, J. & Braga, M. (2018). Secondary Students' Modelling Conceptualisation in Situations Related to Particle Dynamics: A Clinical Perspective. *Int. J. Sci. Educ.*, 40, 1606–1628.
- [13] Bongers, A., Beauvoir, B., Streja, N., Northoff, G. & Flynn, A.B. (2020). Building Mental Models of a Reaction Mechanism: The Influence of Static and Animated Representations, Prior Knowledge, and Spatial Ability. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 21, 496–512.
- [14] Chittleborough, G. & Treagust, D.F. (2007). The Modelling Ability of Non-Major Chemistry Students and Their Understanding of the Sub-Microscopic Level. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 8, 274–292.
- [15] Lazenby, K. & Becker, N.M. (2021). Evaluation of the Students' Understanding of Models in Science (SUMS) for Use in Undergraduate Chemistry. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 22, 12–29.
- [16] Fuhrmann, T., Schneider, B. & Blikstein, P. (2018). Should Students Design or Interact with Models? Using the Bifocal Modelling Framework to Investigate Model Construction in High School Science. *Int. J. Sci. Educ.*, 40, 867–893

- [17] Ferguson, J.P., Tytler, R. & White, P. (2022). The Role of Aesthetics in the Teaching and Learning of Data Modelling. *Int. J. Sci. Educ.*, 44, 753–774.
- [18] Chang, H.-Y., Liu, C.-C., Wen, C.-T., Chang, M.-H., Fan Chiang, S.-H. & Hwang, F.-K. (2023). The Effect of the Cyclic Curricular Design of Modelling-Based Instruction with Virtual Labs. *Int. J. Sci. Educ.*, 0, 1–27.
- [19] Blanco-Anaya, P., Justi, R. & Díaz de Bustamante, J. (2017). Challenges and Opportunities in Analysing Students Modelling. *Int. J. Sci. Educ.*, 39, 377–402.
- [20] Justi, R.S. & Gilbert, J.K. (2002). Modelling, Teachers' Views on the Nature of Modelling, and Implications for the Education of Modellers. *Int. J. Sci. Educ.*, 24, 369–387.
- [21] Prins, G.T., Bulte, A.M.W., Van Driel, J.H. & Pilot, A. (2008). Selection of Authentic Modelling Practices as Contexts for Chemistry Education. *Int. J. Sci. Educ.*, 30, 1867–1890.
- [22] Namdar, B. & Shen, J. (2015). Modeling-Oriented Assessment in K-12 Science Education: A Synthesis of Research from 1980 to 2013 and New Directions. *Int. J. Sci. Educ.*, 37, 993–1023.
- [23] International Journal of Science Education, vol. 22, Issue 9 (2000).
- [24] Chemistry Education Research and Practice, vol. 20, issue 4 (2019).
- [25] Grosslight, L., Unger, C., Jay, E. & Smith, C. (1991). Understanding models and their use in science: Conceptions of middle and high school students and experts. *J. Res. Sci. Teach.*, 28 (9), 799-822.
- [26] Lopes, J. & Costa, N. (2007). The Evaluation of Modelling Competences: Difficulties and potentials for the learning of the sciences. *Int. J. Sci. Educ.*, 29 (7), 811–851.
- [27] Van Driel, J.H. & Verloop, N. (1999). Teachers' knowledge of models and modelling in science. *Int. J. Sci. Educ.*, 21, 1141-1153.
- [28] Justi, R., & Gilbert, J., K. (2000). History and philosophy of science through models: some challenges in the case of 'the atom'. *Int. J. Sci. Educ.*, 22 (9), 993-1009.
- [29] Ergazaki, M., Komis, V., & Zogza, V. (2005). High-school students' reasoning while constructing plant growth models in a computer-supported educational environment. *Int. J. Sci. Educ.*, 27 (8), 909–933.
- [30] Richard K., C, Bev F. & Ian T. (2005). The role of models/and analogies in science education: implications from research, *Int. J. Sci. Educ.*, 27 (2), 183–198.
- [31] Chiu, MH., Lin, JW. (2019). Modeling competence in science education. *Discip. Interdiscip. Sci. Educ. Res.*, 1, 12.
- [32] Philipp, S.B., Johnson, D.K. & Yeziarski, E.J. (2014). Development of a Protocol to Evaluate the Use of Representations in Secondary Chemistry Instruction. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 15, 777–786.
- [33] Rodriguez, J.M.G., Stricker, A.R. & Becker, N.M. (2020). Students' Interpretation and Use of Graphical Representations: Insights Afforded by Modeling the Varied Population Schema as a Coordination Class. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 21, 536–560.
- [34] Maia, P. F. & Justi, R. (2009). Learning of Chemical Equilibrium through Modelling-based Teaching. *Int. J. Sci. Educ.*, 31 (5), 603–630.
- [35] Sari, M.P. & Putri, R.E. (2023). Science Student Teachers' Understanding about Atom: An Investigation on Prior Knowledge. In Proceedings of the AIP Conference Proceedings; *American Institute of Physics Inc.*, 2673.

- [36] Harrison, A.G. & Treagust, D.F. (1996). Secondary Students' Mental Models of Atoms and Molecules: Implications for Teaching Chemistry. *Sci. Educ.*, 80, 509–534.
- [37] Ryoo, K., Toutkoushian, E. & Bedell, K. (2018). Exploring Different Types of Assessment Items to Measure Linguistically Diverse Students' Understanding of Energy and Matter in Chemistry. *Chem. Educ. Res. Pract.* 19, 149–166.
- [38] Capps, D.K. & Shemwell, J.T. (2020). Moving beyond the Model as a Copy Problem: Investigating the Utility of Teaching about Structure-Preserving Transformations in the Model-Referent Relationship. *Int. J. Sci. Educ.*, 42, 2008–2031.
- [39] Dumon, A. & Mzoughi-Khadhraoui, I. (2014). Teaching Chemical Change Modeling to Tunisian Students: An “Expanded Chemistry Triplet” for Analyzing Teachers' Discourse. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 15, 70–80.
- [40] Justi, R. & Gilbert, J. (1999). A cause of a historical science teaching: use of hybrid models. *Sci. Educ.*, 83, 163–177.
- [41] Abd-El-Khalick, F. & Ledermann, N., G. (2000). Improving Science Teachers' Conceptions of Nature of Science: A Critical Review of the Literature. *Int. J. Sci. Educ.*, 22, 665-701.
- [42] Vázquez-Alonso, A., García-Carmona, A., Manassero-Mas, M.A. & Bennàsar-Roig, A. (2013). Science Teachers 'Thinking About the Nature of Science: A New Methodological Approach to Its Assessment. *Res. Sci. Educ.*, 43, 781-808.
- [43] Gilbert, J.K. & Justi, R. (2018). Introducing Modelling into School Science. In: Yeo, J., Teo, T., Tang, K.S. (eds) *Science Education Research and Practice in Asia-Pacific and Beyond*. Springer, Singapore.
- [44] Wu, M.Y.M. & Yeziarski, E.J. (2022). Secondary Chemistry Teacher Learning: Precursors for and Mechanisms of Pedagogical Conceptual Change. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 24, 245–262.
- [45] Wang, C.Y. & Barrow, L.H. (2013) .Exploring Conceptual Frameworks of Models of Atomic Structures and Periodic Variations, Chemical Bonding, and Molecular Shape and Polarity: A Comparison of Undergraduate General Chemistry Students with High and Low Levels of Content Knowledge. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 14, 130–146.
- [46] Xue, S., Sun, D., Zhu, L., Huang, H.W. & Topping, K. (2022). Comparing the effects of modelling and analogy on high school students' content understanding and transferability: the case of atomic structure. *J. Balt. Sci. Educ.*, 21, 325–341.
- [47] Blanco-Anaya, P., Justi, R. & Díaz de Bustamante, J. (2017). Challenges and Opportunities in Analysing Students Modelling. *Int. J. Sci. Educ.*, 39, 377–402.
- [48] Brown D. E. (2018). Implicit Conceptual Dynamics and Students' Explanatory Model Development in Science. Amin, T. G. & Levrini, O. In *Converging Perspectives on Conceptual Change. Mapping an Emerging Paradigm in the Learning Sciences*, London, and New York: *Eds., Routledge*, (pp. 123-131).
- [49] Wu, M.Y.M. & Yeziarski, E.J. (2022). Pedagogical Chemistry Sensemaking: A Novel Conceptual Framework to Facilitate Pedagogical Sensemaking in Model-Based Lesson Planning. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 23, 287–299.
- [50] Niaz, M., Aguilera, D., Maza, A. & Liendo, G. (2002). Arguments, Contradictions, Resistances, and Conceptual Change in Students' Understanding of Atomic Structure. *Sci. Educ.*, 86, 505–525.

- [51] Johnstone, A. H. (1991). Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem. *J. Comput. Assist. Learn*, 7, 75–83.
- [52] Karous, H., Nihant, B. & Leyh, B. (2022). Conceptual change in chemistry schematic modelling: a cross-sectional study of 10th–12th-grade Belgian student. *Can. J. Chem.*, 100, 8, 633 - 648.
- [53] Bain, K. & Towns, M.H. (2016). A review on the teaching and learning of chemical kinetics. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 17, 246-262.
- [54] Kirik, Ö.T & Boz, Y. (2012). Cooperative learning instruction for conceptual change in the concepts of chemical kinetics. *Chem. Educ. Res. Prat.*, 13, 221-236.
- [55] Murni, H. P., Azahr, M., Ellizar, E., Nizar, U.K. & Gutspatni, G. (2022). Three levels of chemical representation-integrated and structured inquiry-based reaction rate module: Its effect on students' mental models. *J. Turk. Sci. Educ.*, 19 (3), 758-772.
- [56] Chairam, S. Somsook, E. & Coll, R.K., (2009). Enhancing Thai students' learning of chemical kinetics. *Res. Sci. Technol. Educ.*, 27 (1), 95-115.
- [57] Yalçinkaya, E., Taştan-Kırık, Ö., Boz, Ö. & Yıldırım, D. (2012). Is case-based learning an effective teaching strategy to challenge students' alternative conceptions regarding chemical kinetics? *Res. Sci. Technol. Educ.*, 30 (2), 151-172.
- [58] Calik, M., Kolomuç, A. & Karagölge, Z. (2010). The effect of conceptual change pedagogy on students' conception of rate reaction. *J. Sci. Educ. Technol*, 19, 422-433.
- [59] Gegios, T., Salta, K. & Koinis, S. (2017). Investigating high-school chemical kinetics: the Greek chemistry textbook and students' difficulties. *Chem. Educ. Res. Prat.*, 18, 151
- [60] Copper, C., L. & Koubek, E. (1999). An experiment to demonstrate how a catalyst affects the rate of a reaction. *J. Chem. Educ.*, 76 (12), 1714–1715.
- [61] Justi, R. (1991). Chapter 13 Teaching and Learning Chemical Kinetics. *Chemical Education: Towards Research-based Practice*, 293–315.
- [62] Barker, V. & Millar, R. (1999). Students' reasoning about chemical reactions: What changes occur during a context-based, post-16 chemistry course? *I. J. Sci. Educ.*, 21, 645–665.
- [63] Herrington, D. (2011). The Heat Is On: An Inquiry-Based Investigation for Specific Heat. *J. Chem. Educ.*, 88, 1558–1561.
- [64] Bopegedera, A. M. R. P. & Perera, K. N. R. (2017). “Greening” a Familiar General Chemistry Experiment: Coffee Cup Calorimetry to Determine the Enthalpy of Neutralization of an Acid– Base Reaction and the Specific Heat Capacity of Metals. *J. Chem. Educ.*, 94, 494–499.
- [65] Baran, M. & Sozbilir, M. (2018). An Application of Context- and Problem-Based Learning (C-PBL) into Teaching Thermodynamics. *Res. Sci. Educ.*, 48, 663–689.
- [66] Cachapuz, A.F.C. & Maskill, R. (1987). Detecting changes with learning in the organization of knowledge: Use of word association tests to follow the learning of collision theory. *Int. J. Sci. Educ*, 9, 491-504.
- [67] Ghirardi, M., Marchetti, F., Pettinari, C., Regis, A. & Roletto, E. A. (2014). Teaching Sequence for Learning the Concept of Chemical Equilibrium in Secondary School Education. *J. Chem. Educ.*, 91, 59–65.

- [68] Sözbilir, M., Tacettin, P. & Canpolat, N. (2010). Prospective Chemistry Teachers' Conceptions of Chemical Thermodynamics and Kinetics. *Eurasia, J. Math. Sci. Tech. Ed.* 6 (2), 111–120.
- [69] Sozbilir, M. (2004). What makes physical chemistry difficult? Perceptions of Turkish chemistry undergraduates and lecturers. *J. Chem. Educ.*, 81 (4), 573-578.
- [70] Goedhart, M.J. and Kaper, W. (2002). From chemical energetics to chemical thermodynamics. In J.K. Gilbert, O. De Jong, R. Justi, D.F. Treagust, & J. Van Driel (Eds), *Chemical education: Towards research-based practice* (pp.339-362).
- [71] Cakmakci, G., Leach, J. & Donnelly, J. (2006). Students' ideas about reaction rate and its relationship with concentration or pressure. *Int. J. Sci. Educ.*, 28 (15), 1795-1815.
- [72] Stevens, R., Soller, A., Cooper, M. & Sprang, M. Modeling the development of scientific competence in chemistry. *International Conference Cognition and Exploratory Learning in Digital Age* (CELDA 2004).
- [73] Fombona-Pascual, A., Fombona, J. & Vázquez-Cano, E. (2022). VR in Chemistry, a Review of Scientific Research on Advanced Atomic/Molecular Visualization. *Chem. Educ. Res. Pract.* 23, 300–312.
- [74] Guspatni, G. (2021). Student-Generated PowerPoint Animations: A Study of Student Teachers' Conceptions of Molecular Motions through Their Expressed Models. *Chem. Educ. Res. Pract.* 22, 312–327.
- [75] Habiddin, H. & Page, E.M. (2021). Examining Students' Ability to Solve Algorithmic and Pictorial Style Questions in Chemical Kinetics. *Int. J. Sci. Math. Educ.*, 19, 65–85.
- [76] Verhoeff, R.P., Waarlo, A.J. & Boersma, K.Th. (2008). Systems Modelling and the Development of Coherent Understanding of Cell Biology, *Int. J. Sci. Educ.*, 30 (4), pp. 543–568.
- [77] Barab, S.A., Hay, K.E., Barnett, M. & Keating, T. (2000). Virtual solar system project: Building understanding through model building. *J. Res. Sci. Teach.*, 37(7), 719–756.
- [78] Lam, S., Chiang, J. & Parasuraman, A. (2008). The effects of the dimensions of technology readiness on technology acceptance: an empirical analysis. *J. Int. Mark.*, 22, 19-39.
- [79] Lai, M. (2008). Technology readiness, internet self-efficacy and computing experience of professional accounting students. *Campus-Wide Information Systems*, 25, 18-29.
- [80] Walczuch, R., Lemmink, J. & Streukens, S. (2007). The effect of service employees' technology readiness on technology acceptance. *Information & Management*, 44, 206-215.

Chapitre 1 : Les origines de la recherche

Sommaire

1	Modèle comme outil didactique.....	19
1.1	Modèle et constructivisme philosophique : réflexions épistémologiques préalables	19
1.2	Cerner la notion de modèle scientifique : Du langage des arts à celui de la didactique	22
1.3	Caractérisation d'un modèle scientifique	22
1.4	A la rencontre des modèles dans un cours de chimie	27
2	Le processus de construction de modèles : réflexions didactiques	37
2.1	Aptitudes à développer	37
2.2	Revue sélective de la littérature didactique	38
2.3	Modélisation comme support pour le changement conceptuel	42
2.4	Le schéma scientifique, un outil didactique et / ou une source d'obstacles épistémologiques ?	43
3	Ingénieries didactiques pour un enseignement basé sur la modélisation.....	46
3.1	Caractéristiques d'une ingénierie didactique.....	46
3.2	Objectifs des ingénieries didactiques développées dans ce travail	51
4	Multimédia pour apprendre la chimie.....	52
4.1	Rôle des multimédia dans l'apprentissage	52
4.2	Des cas concrets d'utilisation de multimédia dans l'apprentissage de la chimie..	53
4.3	Conclusions	61
5	Auto-évaluation : échelle TRL.....	63
6	Références.....	65

Afin de définir le cadre de notre analyse du processus de modélisation en général et dans un cours de chimie de l'enseignement secondaire en particulier, il nous paraît opportun de commencer par une brève réflexion épistémologique sur l'apparition du concept de modèle dans les sciences expérimentales (biologie, chimie et physique) et de préciser ensuite quelles sont les caractéristiques qui lui sont peut-être plus spécifiquement attachées dans le domaine de la chimie. Nous terminerons par des réflexions d'ordre didactique quant au développement de compétences de modélisation chez les élèves de l'enseignement secondaire. Des ingénieries didactiques [1] promouvant l'acquisition de compétences de modélisation dans le cadre de la cinétique chimique et de la thermochimie feront

l'objet des chapitres 3 et 4. Le chapitre 5 présentera des résultats préliminaires d'une approche originale d'évaluation de la progression conceptuelle des élèves.

Ce chapitre vise ainsi à préciser les fondements théoriques mobilisés dans cette recherche, en particulier les notions de modèle, de modélisation et de représentation, afin de disposer d'un cadre d'analyse cohérent pour l'étude des dispositifs mis en œuvre et des productions des élèves présentées dans les chapitres suivants.

1 Modèle comme outil didactique

1.1 Modèle et constructivisme philosophique : réflexions épistémologiques préalables

Deux grandes options quant à la nature de la connaissance scientifique sont en présence. Pour les uns, la connaissance résulte d'investigations et de découvertes mettant en œuvre des moyens de plus en plus sophistiqués et permettant de cerner toujours mieux la réalité du monde, telle qu'elle est « en soi ». Cette conception, héritée du 16^e siècle et entre autres de Francis Bacon (1561-1626), qui affirmait que "...omnium enim consensu veritatem temporis filiam esse"¹ (Novum Organum I, 84), envisage la science comme une enquête basée à la fois sur des faits – c'est son aspect empirique – et sur des inductions et déductions humaines – c'est sa dimension rationaliste – en vue de dévoiler la Vérité dont l'humanité est censée se rapprocher progressivement, certes avec des soubresauts et des retours provisoires en arrière, mais, dans une telle vision foncièrement optimiste, le temps en quelque sorte travaille pour nous. Les théories découvertes, même partiellement, sont alors partie intégrante du monde tel qu'il est (le monde « en soi »). Ce qu'il s'agit de connaître est donc préexistant dans l'objet étudié. Si notre connaissance est nécessairement imparfaite, nos théories sont néanmoins au minimum un reflet du monde tel qu'il est dans sa réalité profonde.

¹ « Car tous s'accordent sur le fait que la vérité est fille du temps »

D'autre part, la confrontation entre les approches empiristes, plutôt anglo-saxonnes et représentées entre autres par John Locke (1632-1704) et David Hume (1711-1776), et rationalistes, plutôt françaises et attachées à la personnalité de René Descartes (1596-1650) et à sa vision "cartésienne", ainsi que le succès incontestable de la physique newtonienne (Isaac Newton, 1642-1726), mèneront à la grande réflexion synthétique d'Immanuel Kant (1724-1804). Pour Kant, si la connaissance repose indubitablement sur l'expérience sensible, elle n'est toutefois possible que parce que nous sommes intrinsèquement – *a priori* – capables de percevoir les objets dans l'espace, de suivre leur évolution dans le temps et d'établir des schémas d'organisation des faits d'expérience (des perceptions) basés sur des catégories telles la quantité, la qualité, la relation (cause et effet, par exemple), et la modalité (nécessaire, contingent, possible, impossible). C'est ce dont nous sommes capables, mais, en retournant l'argument, nous ne sommes capables que de cela.

Nous ne pouvons donc envisager la réalité qu'au travers des prismes de nos formes *a priori* de la sensibilité – temps et espace – et de l'entendement ("*Verstand*") – les catégories mentionnées précédemment. La réalité en soi nous échappe, seuls nous sont accessibles les phénomènes que nous organisons en une connaissance construite sur la base de nos formes *a priori*. De ce point de vue, une théorie ou un modèle ne représentent plus, à un moment donné, une vision encore immature de la réalité en soi, vision que l'on espère rendre progressivement plus conforme à cette réalité ultime.

Il s'agit au contraire de représentations construites pour donner du sens aux phénomènes, c'est-à-dire les extraire de leur contingence apparente pour faire apparaître leur nécessité. On peut accorder à Kant la paternité du constructivisme philosophique – le statut de notre connaissance du monde est d'être une construction – et à Jean Piaget (1896-1980) celle du constructivisme pédagogique, qui souligne que le processus d'apprentissage est une construction plus qu'une réception. Lev Vygotski (1896-1934) a, quant à lui, posé les bases du socio-constructivisme, en mettant en évidence le rôle des interactions sociales dans le développement intellectuel de l'apprenant.

Se pose évidemment, même dans une vision pédagogique constructiviste, la question de la réalité de ces modèles et théories. S'agit-il uniquement de constructions destinées à "sauver les phénomènes" ou présentent-ils quand même quelque connexion avec la réalité en soi ? C'est toute la question du concept de "réalité" en philosophie contemporaine des sciences [3], discussion que nous passerons sous silence ici. Nous ne pouvons toutefois éluder la question de l'évaluation des théories et des modèles. Certains sont incontestablement plus adéquats que d'autres. Pour les départager, divers critères doivent être sélectionnés. Nous y reviendrons dans la section 1.3.

Il faut aussi aborder la question de la distinction entre les concepts de théorie et de modèle, distinction qui est parfois assez floue. On peut admettre qu'une théorie est plus englobante, dans la mesure où son domaine d'applicabilité est plus large que celui d'un modèle [2]. Au sein d'une même théorie, par exemple la théorie quantique, différents modèles peuvent être construits : pensons à ceux de l'oscillateur harmonique ou de l'oscillateur de Morse. A côté de ces exemples plutôt clairs, d'autres désignations sont plus discutables : doit-on parler de la « théorie » de Brønsted-Lowry ou vaudrait-il mieux adopter dans ce cas le terme de « modèle » ?

Dans la suite de ce chapitre, nous considérerons et essayerons de définir plus précisément des représentations dont le cadre d'applicabilité en chimie est plus limité que ce qu'on considère d'habitude comme des théories et nous utiliserons donc le terme de « modèle ». Signalons encore, pour conclure ces quelques considérations épistémologiques, que la question de la réalité des théories ne se pose guère pour les modèles dont le caractère construit est particulièrement souligné. La suite de cette première section va nous permettre de cerner de mieux en mieux les caractéristiques et fonctions d'un modèle scientifique.

1.2 Cerner la notion de modèle scientifique : Du langage des arts à celui de la didactique

Afin de cerner une définition adéquate du concept de modèle, consultons tout d'abord le dictionnaire historique de la langue française [4] (Figure 1).

MODÈLE n. m. est un emprunt fait par le langage des arts (1542, *modelle*) à l'italien *modello* « figure destinée à être reproduite » (av. 1550), issu du latin tardif **modellus*, altération du latin *modulus* (→ module, moule).

Modèle, à partir du sens initial de « figure à reproduire », s'est étendu (1563) à toute représentation réduite d'une construction, d'un objet destiné à être reproduit en plus grand. Sur un plan abstrait, il a été appliqué à une chose (1576), à un être (av. 1680) présentant au plus haut degré les caractéristiques d'une espèce, d'une catégorie, d'une qualité. L'idée est réalisée dans la locution courante le, un modèle du genre et dans l'emploi de modèle en apposition avec le sens de « parfait en son genre » (1837 ; 1832 la capitale-modèle). L'époque classique met l'accent sur l'idée normative de « ce qui doit être imité » en parlant d'une personne remarquable, exemplaire (av. 1648), idée réalisée dans des locutions comme servir de modèle (1689), sur le modèle de (1690) et, ultérieurement, prendre modèle sur (1847).

- Cependant, le mot a continué d'être employé dans le vocabulaire des arts avec le sens de « personne qui pose pour un peintre, un sculpteur » (1676) à partir duquel il a pris celui de « personnage réel dont s'inspire un écrivain » (1785). Il est passé dans le vocabulaire de la mode où il a été éclipsé par mannequin.
- Au XIX^e s. apparaît le sens de « type de fabrication » (1841), contemporain de l'avènement de la production industrielle en série.
- Le dernier sens est celui de « système représentant les structures essentielles d'une réalité », d'usage didactique en physique, en économie (1940, en anglais, *model*), dans la plupart des sciences humaines et en mathématiques, par exemple dans théorie des modèles (d'où modéliser, ci-dessous). L'anglais *model* est attesté dans ce sens dès 1913 (N. Bohr) ; l'emploi en français a dû suivre peu après.

Figure 1 : Définition du concept de modèle [4]

Deux catégories de significations méritent d'être mises en exergue :

- (i) L'idée de "représentation" est présente dans la définition ancienne de "chose ... présentant au plus haut degré les caractéristiques d'une espèce, ..." et dans celle, plus contemporaine, de "système représentant les structures essentielles d'une réalité". C'est cette définition de modèle, conforme au constructivisme philosophique, qui, précisée et complétée, reçoit, nous semble-t-il, l'assentiment assez général de la communauté scientifique actuelle.
- (ii) L'idée normative de « ce qui doit être imité » mérite aussi d'être mentionnée car, à l'opposé de l'approche constructiviste, elle témoigne d'une conception plus platonicienne de la réalité, le modèle scientifique étant alors en quelque sorte le prototype, la forme intelligible parfaite, à laquelle participent, par imitation, les objets de nos expériences.

1.3 Caractérisation d'un modèle scientifique

Nous admettrons donc qu'un modèle représente "les structures essentielles d'une réalité". Nous entendons par là les structures qui forment l'essence de la

réalité telle qu'elle est révélée par l'expérience – nous reviendrons sur cette relation à la réalité empirique – et qui en constituent dès lors la part nécessaire. Modéliser consisterait alors fondamentalement à distinguer le nécessaire du contingent. La question essentielle est alors : existe-t-il une distinction non équivoque, liée à la nature des choses, entre l'essence et l'arbitraire ? Quand Galilée choisit de négliger les frottements pour étudier la chute des corps, sur quoi se base-t-il ? Il nous semble qu'il se fonde sur une intuition qui est que les mouvements dans le vide doivent être simples et identiques pour tous les corps² et donc qu'ils doivent répondre à une loi générale. Cet exemple illustre le fait que, bien souvent, le choix de la simplification répond à l'intuition de la possibilité de relier par un raisonnement logique les phénomènes à une loi suffisamment générale, loi qui doit aussi nécessairement permettre de faire des prédictions. Apparaît ainsi la triade fondamentale du modèle scientifique: simplification délibérée – généralisation nomologique – prédiction (Figure 3).

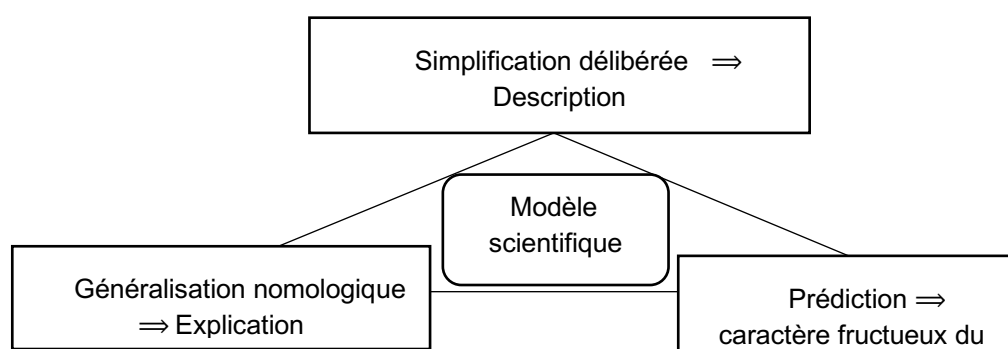


Figure 3 : La triade fondamentale du modèle scientifique

Néanmoins, les frottements, négligés par Galilée et par tout professeur de physique dans bon nombre de situations, ne sont pas si contingents que cela. Ils peuvent être pris en compte par une modélisation plus sophistiquée. Considérons

² L'idée n'était pas neuve et apparaissait déjà, par exemple, chez Lucrèce, qui reprend la doctrine d'Epicure : "*Omnia quapropter debent per inane quietum aequae ponderibus non aequis concita ferri*" (De Natura Rerum, Livre II, 238-239) : "Aussi tous les atomes, emportés à travers le vide inerte, doivent se mouvoir avec une vitesse égale malgré l'inégalité de leur poids", Traduction d'A. Ernout, Les Belles Lettres, Paris (2009). Galilée y apporte bien entendu la contribution mathématique que l'on connaît, au travers d'un raisonnement géométrique.

encore un autre exemple, utilisé fréquemment dans l'enseignement, le modèle du gaz parfait. On y assimile les particules gazeuses à des points matériels³ et on néglige les interactions entre ces entités. On peut ainsi, assez aisément, déduire la loi des gaz parfaits reliant la pression, le volume et la température d'une quantité de matière gazeuse donnée.

Ces deux exemples illustrent l'idée de *parcimonie*⁴ dans la construction d'un modèle : obtenir une loi simple, valable dans un contexte déterminé que l'on se définit ("*fit for purpose*"). On établit ainsi une adéquation entre un but poursuivi - un certain domaine de validité – et l'effort que l'on consent à fournir dans la démarche rationnelle. On conçoit également qu'il est possible de faire évoluer un modèle. La mécanique des fluides a développé tout un attirail conceptuel pour décrire le mouvement des corps dans un fluide (l'air par exemple) et il est possible de prendre en considération, bien qu'approximativement, les interactions entre particules, afin de mieux reproduire les résultats de mesures expérimentales. Un modèle est donc également évolutif.

Un modèle est toujours lié à une situation empirique que l'on cherche à conceptualiser ou à une situation-problème que l'on souhaite résoudre. Comme l'affirment Kermen et Méheut [5], sur la base de travaux antérieurs de Tiberghien [6] et de Walliser [7], "The model mediates between the theoretical field which it interprets and the empirical field which it formalises." Le modèle du gaz parfait illustre bien ce rôle médiateur entre le champ théorique – la mécanique newtonienne – et le champ empirique des mesures des fonctions d'état (pression, volume, température) d'un gaz. La relation modèle – loi – expérience est également mise en exergue par Sensevy et al. [8], dans la ligne des travaux de Cartwright [9] : "Science produces explanatory models of the world, but not of the world as it

³ On notera que dans bon nombre d'articles et de manuels, on décrit les particules d'un gaz parfait par analogie avec des boules de billard, sans préciser que l'on néglige en fait leur volume propre.

⁴ On retrouve là le principe méthodologique bien connu du "rasoir d'Ockham" (Guillaume d'Ockham, 1285/1290-1347) : "*Frustra fit per plura quod fieri potest per pauciora*". (« C'est en vain que l'on fait avec beaucoup ce que l'on peut faire avec peu »)

is, rather of the world as it is reconstructed in the experimental enclosure." Cette approche s'éloigne d'une conception platonicienne de "lois intrinsèques de la nature" pour défendre une position où les lois n'ont de valeur que dans le cadre de modèles, développés eux-mêmes pour rendre compte d'une réalité expérimentale dont les conditions opératoires sont conçues par un chercheur ou une communauté de chercheurs travaillant dans le cadre d'un paradigme donné [10].

Les caractéristiques que nous avons identifiées (simplification délibérée, parcimonie, généralisation nomologique, caractère prédictif, caractère évolutif) peuvent être aisément illustrées dans un cours de l'enseignement secondaire. Le modèle en couches concentriques de la structure électronique de l'atome (Figure 4), appelé souvent improprement modèle de Bohr, résulte bien d'une *simplification délibérée* liée à une volonté de *parcimonie*, qui est ici à la fois de nature scientifique et – surtout – didactique : on y ignore les sous-couches et les orbitales (Figure 5) que la mécanique quantique permet, elle, d'introduire : le modèle est donc *susceptible d'évoluer*. Le *domaine de validité est dès lors limité* : on ne pourra ainsi expliquer la position des métaux de transition dans le tableau périodique. Ce modèle offre toutefois un *cadre conceptuel général* pour comprendre les propriétés des éléments des groupes A et il permet d'expliquer et de *prévoir* le comportement global de diverses grandeurs physico-chimiques comme les énergies d'ionisation ou les rayons atomiques et ioniques.

Le modèle des gaz parfaits permet également d'illustrer notre propos. Les élèves pourront comprendre qu'il est parfaitement adéquat pour exprimer le volume de gaz carbonique dégagé par une combustion : on néglige alors les interactions entre molécules de CO₂ non polaires. En revanche, lorsqu'on cherchera à expliquer les différences de température d'ébullition entre les alcools et les alcanes à même nombre d'atomes de carbone, on devra tenir compte des interactions intermoléculaires liées à la présence de ponts hydrogène.

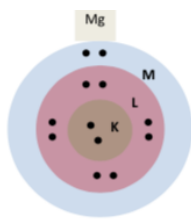


Figure 4 : Modèle en couche de l'atome de magnésium

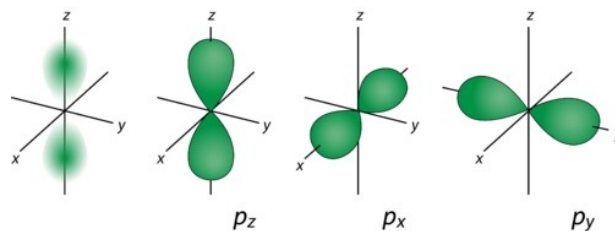


Figure 5 : Modèle des orbitales atomiques

Il existe de nombreuses propositions de définition du concept de modèle scientifique dans la littérature didactique. Justi et Gilbert [11], par exemple, soulignent que "There is, in our reading, no unique definition of 'model' used by scientists from different specialist areas. The expression 'scientifically acceptable view of model' as used in this paper was constructed by us from an overview of the literature. It means a view in which a model: (i) is a non-unique partial representation of an object, an event, a process or an idea; (ii) can be changed; (iii) is used for enhancing visualisation, as a way of both supporting creativity and favouring understanding, in making predictions about behaviour or properties; and (iv) is accredited by adequate groups in society." Cette proposition, qui reprend l'essentiel des caractéristiques que nous avons évoquées, révèle également une dimension supplémentaire que nous n'avons pas encore abordée: la dimension sociale. Un modèle tire son autorité du crédit qu'il reçoit d'une communauté scientifique, c'est-à-dire d'un groupe socialement constitué. Cet aspect est particulièrement important dans l'évaluation de modèles concurrents. Tous ne se valent pas et si certains survivent mieux que d'autres, c'est parce qu'ils sont plus conformes aux critères que nous avons décrits et qu'ils ont, mieux que d'autres, permis à la communauté scientifique concernée de progresser.

Dans le cadre de cette thèse, ces caractéristiques constituent un cadre théorique de référence qui nous a permis de préciser le statut du modèle scientifique, de situer notre propre conception de la modélisation en contexte scolaire et d'éclairer l'analyse des situations d'enseignement ainsi que des formes de modélisation développées par les élèves.

1.4 A la rencontre des modèles dans un cours de chimie

Plusieurs recherches internationales [12-15] ont établi que la plupart des enseignants n'ont qu'une compréhension superficielle de la manière multidimensionnelle et complexe – au sens où l'entend Edgar Morin [16] – dont se construisent les connaissances scientifiques. Peu se sont questionnés quant à leur propre vision de ces connaissances : vision plutôt platonicienne ou plutôt constructiviste ? Beaucoup auront dès lors tendance, sans doute inconsciemment, à présenter les choses comme une réalité "telle qu'elle est" sans bien faire ressortir que la transposition didactique qu'ils proposent à une étape donnée du cursus – le modèle atomique "en couches" en troisième année (grade 9), par exemple – correspond également à une étape dans le processus évolutif de modélisation.

Le danger est alors que les élèves perçoivent ces différentes transpositions didactiques comme des vérités successives à apprendre et à reproduire chez le professeur X puis chez le professeur Y, vérités entre lesquelles ils n'identifieront pas nécessairement les liens et qui pourront même leur paraître contradictoires, instillant dans leur esprit un doute, sinon quant à l'entreprise scientifique, du moins quant à la confiance que méritent leurs enseignants.

Il nous paraît dès lors important de conscientiser les professeurs quant au rôle central du processus de modélisation en sciences [17] et aux relations que celui-ci entretient avec la transposition didactique. Il ne peut qu'en résulter une vision plus authentique des sciences auprès des élèves et donc auprès des futurs citoyens, quel que soit le domaine d'activité que ceux-ci choisiront. A cet effet, la formation des futurs professeurs devrait faire prendre conscience aux professeurs des caractéristiques essentielles d'un modèle, que nous avons esquissées plus haut et que nous reprenons, dans une perspective didactique, de manière systématique ci-dessous, en les illustrant par divers exemples. Le tableau 1 présente ces exemples de manière synoptique.

Un modèle est une **création humaine**. Il est donc essentiel que les élèves aient l'occasion de construire eux-mêmes des modèles destinés à représenter les phénomènes qu'ils rencontrent. La dernière partie de ce chapitre tente de cerner

les écueils et les perspectives de cette entreprise. Les formes de ces modèles peuvent être diverses, comme nous le discuterons plus loin. L'important est que les élèves perçoivent que (i) ils doivent faire preuve de créativité pour se reconstruire une image du monde qui leur permette de l'appréhender et (ii) que leur représentation du monde est dictée par des choix et des simplifications. C'est l'objet du point suivant.

Un modèle est une *représentation délibérément simplifiée d'une réalité*. L'utilisation de modèles en sciences est inévitable puisque ceux-ci permettent de franchir le pas entre la perception empirique du réel et une connaissance. Les deux aspects doivent être soulignés : le modèle doit décrire la réalité – nous reviendrons sur ce caractère descriptif – mais il doit aussi la simplifier pour en extraire ce qui semble essentiel. Les élèves doivent comprendre qu'il faut coller au réel mais le voir avec des yeux qui cherchent à trouver la structure générale, les grandes tendances qui permettent d'organiser la connaissance. Un modèle n'est donc pas "la" réalité. Comme le souligne André Giordan [18] "Les modèles conventionnels de la cellule, de l'atome, de la molécule, de l'ADN, pour ne prendre que quelques-uns parmi les plus célèbres, ne sont pas la réalité comme le croient le grand public et même certains enseignants scientifiques ; ce sont des outils élaborés à des fins de description et de compréhension." Prenons deux exemples centraux en chimie.

(i) L'équation chimique est une démarche de modélisation quotidienne du chimiste. Lorsqu'on écrit $H^+(aq)$ ou $H_3O^+(aq)$ dans une équation décrivant une réaction acide-base, on simplifie incontestablement la réalité en désignant une entité mal définie – l'ion hydronium hydraté – par un symbole reconnu de tous. On pourra décider de ne faire intervenir dans une équation chimique, par exemple pour une réaction d'oxydo-réduction, que les espèces dites "actives" en omettant les ions spectateurs. Or ceux-ci jouent inévitablement un rôle, ne serait-ce qu'en déterminant la force ionique, dont on peut, selon le but poursuivi, négliger ou non l'influence. Une équation chimique est donc bien une représentation simplifiée, symbolique et polysémique d'une réalité plus complexe, la réaction chimique proprement dite.

(ii) Les éléments chimiques sont tous différents mais, en les organisant d'une certaine manière sur la base de certains critères – masses atomiques et formules des oxydes –, Mendeleïev a pu créer un tableau qui structure le réel et lui donne ainsi un sens. Ce tableau périodique peut donc être considéré comme un modèle. Le choix des critères relève d'une intuition qui s'est révélée fructueuse puisqu'on a pu, ultérieurement, interpréter la structure du tableau sur la base du modèle des orbitales atomiques. On sait aussi que la proposition de Mendeleïev n'est pas la seule et que de nombreuses tentatives similaires ont vu le jour au 19^e siècle. Toutes n'ont pas eu le succès du tableau de Mendeleïev. Ceci montre le caractère relatif d'un modèle et conduit à les considérer les schémas comme des formes particulières de représentations, participant, au même titre que d'autres modèles en chimie, à la structuration et à l'intégration de phénomènes complexes, et constituant de ce fait des supports privilégiés pour l'analyse des processus de modélisation en contexte d'enseignement. Ce caractère relatif sera approfondi dans la suite de notre réflexion.

(iii) Un modèle présente ***un caractère relatif et évolutif***. En sciences, les connaissances reposent sur des données expérimentales et sur un cadre interprétatif. Le savoir peut toujours être remis en cause par de nouvelles expériences et/ou par une nouvelle façon de conceptualiser le donné empirique. Un modèle est donc toujours relatif, sa validité n'étant que temporaire, sous réserve de données et d'idées nouvelles. Celles-ci peuvent rendre un modèle totalement inadéquat ou requérir qu'il soit adapté : un modèle est donc susceptible d'évoluer. Prenons encore un exemple en chimie. Le modèle des acides et des bases d'Arrhenius ne permet pas d'expliquer le comportement basique de l'ammoniac ou des ions carbonates. Il a donc fallu le remplacer par le modèle de Brønsted-Lowry. Le modèle d'Arrhenius reste toutefois adéquat si on le restreint à un domaine de validité limité : il explique alors très bien le comportement, en solution aqueuse, des acides protiques forts et faibles et le comportement basique des hydroxydes. Cet exemple illustre une autre dimension, liée toutefois à la première, celle du caractère relatif d'un modèle. Même surpassé par d'autres plus performants, un modèle peut rester utile dans un champ dont l'extension est limitée. Il est convoqué pour résoudre une

classe de problèmes à un niveau donné et il serait absurde de vouloir l'appliquer à un niveau supérieur.

Un modèle présente *une fonction descriptive*. Comme nous l'avons déjà signalé, vu son aspect simplificateur, un modèle ne décrit qu'une partie d'une réalité. L'élaboration d'un modèle fait souvent appel à des modes de pensée par analogie. En chimie, cette analogie consiste très fréquemment à transposer des images macroscopiques à la réalité atomique ou moléculaire. En voici quelques exemples.

(i) Les molécules d'un gaz parfait sont assimilées à des points matériels, donc à des sphères rigides dont on fait tendre le rayon vers zéro et la masse volumique vers l'infini tout en conservant la masse constante. L'analogie avec des boules de billard est ici évidente.

(ii) Le mouvement de vibration des molécules diatomiques est assimilé à celui d'un ressort reliant des masses, que l'on supposera ponctuelles et qui représentent les noyaux, avec une force de rappel obéissant à la loi de Hooke. Un tel modèle du vibreur harmonique néglige bien entendu la possibilité que les molécules, pour autant qu'elles soient suffisamment excitées, se dissocient.

(iii) Les modèles moléculaires de type "ball-and-stick" sont censés représenter à notre échelle la réalité moléculaire. Certains aspects sont conformes à la réalité, le facteur d'échelle étant pris en considération : les rayons des sphères correspondent aux rayons atomiques⁵ et les tiges figurant les liaisons correspondent aux longueurs moyennes de liaison⁶. De tels modèles permettent donc de se représenter l'encombrement stérique des molécules et sont irremplaçables pour visualiser

⁵ Signalons que la notion de "rayon atomique" est en elle-même un modèle, la densité électronique diminuant asymptotiquement de façon exponentielle par rapport au noyau.

⁶ Représenter une liaison par une tige consiste à imaginer que la densité électronique est concentrée dans le segment internucléaire, ce qui est également un modèle. La liaison chimique n'est pas un objet, c'est le résultat d'interactions attractives entre électrons et noyaux et répulsives entre noyaux et entre électrons.

certain aspects de la réactivité chimique. Les liaisons y sont toutefois rigides, ce qui ignore les mouvements de vibration. Les rotations internes sont libres, ce qui permet d'illustrer les réarrangements conformationnels menant, par exemple, à la formation de pelotes statistiques pour les chaînes polymériques. D'autres aspects peuvent également être pris en considération : la formation de ponts hydrogène, par exemple.

(iv) Les possibilités de visualisation graphique sur écran ont permis de faire évoluer remarquablement ces modèles moléculaires. D'une part, les échelles sont respectées de manière beaucoup plus précise. D'autre part, on peut aisément passer d'une forme de représentation à une autre, par exemple des modèles "ball-and-stick" aux modèles compacts ("space filling") en fonction du but poursuivi. On peut également modéliser l'approche de molécules différentes susceptibles de réagir entre elles. Le modèle ne décrit plus alors seulement les structures, il explique aussi pourquoi la réaction emprunte tel chemin plutôt que tel autre. Nous aborderons cet aspect dans notre projet didactique au chapitre 3. Expliquer est donc une autre fonction essentielle d'un modèle.

Un modèle présente *une fonction explicative*. Un modèle permet d'expliquer un phénomène en ayant recours, dans les cas les plus simples, à une mise en relation causale entre deux paramètres dont les variations sont liées, l'un des paramètres étant la cause et l'autre l'effet. Quelques exemples illustrent notre propos.

- (i) Une augmentation de la température absolue d'un gaz (cause) dans une enceinte de volume constant a pour effet d'augmenter proportionnellement la pression du gaz : ce résultat expérimental peut être déduit directement du modèle du gaz parfait. Bien entendu, la proportionnalité n'est qu'approximative et, surtout à température modérée et pression élevée, des mesures précises mettront au jour des déviations qu'un modèle plus précis – celui de van der Waals, par exemple – pourra reproduire.
- (ii) La fréquence de vibration d'une molécule de D_2 – molécule de dideutérium - est égale à celle de H_2 divisée par $\sqrt{2}$, ce que le modèle du vibreur harmonique permet

aisément de déduire, car il établit une relation entre la fréquence de vibration, la masse des atomes et la constante de force de la liaison.

(iii) Les différents modèles de la réactivité chimique – modèles collisionnels, théorie de l'état de transition – visent à établir une relation entre la constante de vitesse, grandeur accessible par l'expérience, et divers paramètres. Ceux-ci sont soit liés à la structure des molécules et de l'état de transition (géométrie, fréquences de vibration), soit contrôlables par l'expérimentateur : température, force ionique, acidité du milieu, par exemple.

Nous voyons, par ces différents exemples, que ***le caractère explicatif est souvent lié à l'outil mathématique*** : une relation mathématique est établie entre des grandeurs observables qui, selon le contexte expérimental, jouent le rôle de cause ou d'effet.

En lien direct avec sa fonction explicative, un modèle comporte aussi ***une dimension prédictive***. En sciences, on emploie des modèles pour faire des prédictions quant au comportement des phénomènes. Le but poursuivi est de prendre une décision ou d'étendre notre connaissance du système ou encore de résoudre une situation-problème. Nous retrouvons ici la fonction remarquable de l'outil mathématique. ***Plus les modèles sont mathématisés, plus leur caractère prédictif est élevé.***

(i) Ceci apparaît clairement dans la présentation didactique qui est généralement adoptée pour traiter les concepts d'acide et de base. Une première étape de la modélisation est purement qualitative. Il s'agit d'expliquer, sur une base moléculaire, en quoi les acides et les bases sont différents. Un premier modèle, celui d'Arrhenius, est introduit, pour montrer assez rapidement ensuite ses insuffisances. Le modèle de Brønsted-Lowry permet de remédier à celles-ci. Dans ce modèle, la réaction acide-base est décrite comme un transfert de proton de l'acide – le donneur – vers la base – l'accepteur. Il s'agit bien d'un modèle, c'est-à-dire d'une représentation simplifiée : on détourne son attention des changements structuraux des autres parties des molécules impliquées, que l'on considère comme gelées dans la réaction de transfert de proton. Ce modèle est descriptif et, jusqu'à un certain

point, explicatif. Il rend ainsi bien compte du fait que l'ammoniac ou un anion carbonate présentent un caractère basique. Il est toutefois relativement peu prédictif. C'est ici qu'intervient la deuxième étape du processus de modélisation, qui correspond aussi à la deuxième partie de l'approche didactique. Faisant appel à la théorie thermodynamique des équilibres chimiques, on introduit la notion de constante d'acidité qui permet de faire des prédictions quantitatives quant au degré d'avancement des réactions acide-base.

(ii) Un autre modèle très utilisé en chimie de base est le modèle VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion) de R. Gillespie [19]. On y représente les molécules comme un ensemble de paires électroniques correspondant soit à des liaisons soit à des paires libres. Des règles basées sur la minimisation des répulsions entre paires électroniques sont établies pour prévoir le type de géométrie tridimensionnelle – linéaire, coudée, tétraédrique, pyramidale etc. – de molécules et d'ions moléculaires. La représentation proposée est assurément simplifiée et le domaine de validité est limité. Dans certains cas, les prédictions ne sont pas univoques. Ce modèle présente néanmoins, dans le cadre de cours de chimie de l'enseignement secondaire et du premier cycle supérieur, un caractère prédictif tout à fait satisfaisant en regard de l'investissement didactique consenti, conformément au principe de parcimonie déjà évoqué plus haut.

La discussion qui précède a montré que les modèles diffèrent par la **forme de la représentation adoptée**. Quatre aspects méritent encore d'être relevés.

(i) Dans chaque discipline spécifique, le souci de rendre compréhensible un système ou un phénomène peut conduire à une **représentation matérielle**, c'est-à-dire une maquette, soit en diminuant fortement l'échelle – la maquette d'un avion, par exemple –, soit en l'augmentant considérablement – modèle matériel d'un virus, modèles moléculaires. Ces représentations illustrent les fonctions descriptives et explicatives d'un modèle.

(ii) Les **outils mathématiques** permettent de mener des hypothèses descriptives du modèle, traduites en propositions mathématiques, à des relations entre grandeurs physiquement observables. Reprenons l'exemple des réactions acide-

base. A partir du moment où un acide est décrit comme un donneur de proton, on peut établir une équation chimique traduisant ce phénomène et lui appliquer le formalisme mathématique de la thermodynamique des systèmes en équilibre.

(iii) Les ***simulations numériques*** jouent un rôle de plus en plus important dans le processus de modélisation. Ils sont essentiels en recherche mais aussi en didactique. De nombreux logiciels disponibles aisément sur internet permettent de modéliser le comportement d'un gaz au niveau particulaire, l'évolution de différentes grandeurs observables (pression, conductivité, pH etc.) en fonction d'un ou de plusieurs paramètres expérimentaux, ou encore un appareil en fonctionnement [20].

De telles simulations sont descriptives et permettent même de décrire ce qui est inaccessible à la perception immédiate, c'est-à-dire le niveau atomique et moléculaire. Elles permettent aussi d'expliquer et de prédire. L'utilisation de l'outil mathématique est cruciale même si elle est camouflée pour l'utilisateur dans le programme informatique qui pilote la simulation : c'est alors une boîte noire. De telles simulations peuvent présenter l'effet pervers d'une si grande ressemblance avec la réalité empirique – les courbes de pH que l'on génère sont similaires à celles que l'on mesure, l'appareil à distiller que l'on voit à l'écran est une copie conforme de celui que l'on peut prendre en main – que l'élève en vient à oublier qu'il s'agit de modèles.

(iv) Un modèle est presque toujours aussi une ***représentation mentale*** et donc abstraite et conceptuelle. Le modèle des gaz parfaits qui assimile les molécules à des masses ponctuelles en est un exemple. Le modèle des orbitales atomiques – fonctions d'ondes monoélectroniques optimisées par une procédure variationnelle (Figure 4) – en est un autre. Dès le moment où on aborde la question des représentations mentales, se pose également celle de l'intersubjectivité. En adoptant une position constructiviste radicale, on pourrait prétendre que ces représentations sont foncièrement individuelles et qu'elles varient en fonction de l'expérience, du degré d'expertise et de l'intérêt de celui qui les développe. Il nous paraît néanmoins que deux aspects au moins viennent tempérer un tel radicalisme :

Un modèle étant explicatif et prédictif se doit d'être confronté à la réalité empirique, donc à des faits intersubjectifs.

Comme nous l'avons déjà signalé, les modèles se développent au sein d'une communauté scientifique ; un modèle est dans une certaine mesure le résultat d'une négociation, ce qui lui confère un statut d'objet socialement reconnu. On rencontre parfois dans la littérature le concept de *modèle exprimé* ("expressed model") ou de *modèle conceptuel* ("conceptual model") pour désigner ce stade de développement et le distinguer des représentations individuelles ("mental models").

Sensevy et al. [8] soulignent que "... the notion of representation itself has to be freed from the mentalism, which is so often inherent in it, to take on a meaning that is both material and public". Les deux derniers mots correspondent exactement aux idées que nous avons mises en avant : confrontation au monde empirique – "material" – et adoption par une communauté scientifique – "public".

L'ancrage socio-culturel de l'apprentissage est également mis en avant par Coll et al.[21]. Ces auteurs insistent sur l'avantage de mettre au point des dispositifs didactiques dans lesquels les élèves peuvent, au sein de petits groupes ou de la classe, confronter et critiquer à la fois les modèles qu'ils développent et ceux des scientifiques chevronnés. Ces approches favorisent non seulement l'apprentissage des concepts mais également la compréhension de la manière dont les modèles exprimés s'élaborent et dont la connaissance se construit ainsi que le développement de la métacognition.

Propriétés d'un modèle	Exemples dans l'enseignement de la chimie en humanités (liste non-exhaustive)
Un modèle est une création de l'esprit humain.	Tous les exemples ci-dessous
Un modèle est une représentation délibérément simplifiée d'une réalité empirique.	Tous les exemples ci-dessous
Un modèle présente un caractère relatif et évolutif.	• Le modèle des acides et des bases d'Arrhenius • Le modèle des acides et des bases de Brønsted-Lowry • Le modèle du gaz parfait
Un modèle présente une fonction descriptive	• Le modèle du gaz parfait • Le modèle du vibreur harmonique pour décrire les vibrations moléculaires • Les modèles moléculaires "ball-and-stick" • Les modélisations de structures moléculaires ou cristallines sur ordinateur
Un modèle présente une fonction explicative	• Le modèle des gaz parfaits et le modèle de van der Waals • Le modèle du vibreur harmonique • Les modèles de la réactivité chimique (modèles collisionnels, théorie de l'état de transition)
Un modèle présente une fonction prédictive.	• Le modèle de Brønsted-Lowry couplé à la théorie des équilibres chimiques • Le modèle VSEPR des géométries moléculaires
Les modèles diffèrent par la forme de la représentation adoptée : • Représentation matérielle • Représentation schématique (aussi désignée comme représentation iconique) • Importance de la mathématisation • Simulations numériques • Modèle mental vs modèle exprimé	• Modèles moléculaires "ball-and-stick" • Schémas de processus de changement de phase ou de dissolution de solutés dans un solvant • Schémas de piles électrochimiques illustrant le mouvement des particules chargées • Thermodynamique des phénomènes à l'équilibre (cas des équilibres acide-base) • Simulations de courbes de pH, d'appareils en fonctionnement etc. • Modèle des orbitales atomiques ou moléculaires

Tableau 1 : Exemples de modèles scientifiques

2 Le processus de construction de modèles : réflexions didactiques

2.1 Aptitudes à développer

Nous avons discuté jusqu'à présent le caractère complexe du concept de modèle scientifique et ses nombreuses dimensions en considérant celui-ci comme un produit fini illustré par de nombreux exemples (Tableau 1) mais en passant sa genèse sous silence : comment construit-on un modèle ? S'il est incontestablement indispensable que, dans un souci de formation scientifique authentique, chaque élève prenne conscience du rôle et du statut des modèles dans la connaissance que nous avons du monde, on ne peut, dans l'optique d'une pédagogie privilégiant le rôle d'acteur de l'élève, se contenter de lui présenter des modèles historiques établis dont on soulignerait les différentes qualités, insuffisances et perspectives d'évolution. Quoiqu'une telle présentation ait toute sa pertinence, comme nous aurons l'occasion de le souligner dans la suite (chapitre 2), elle ne suffit vraisemblablement pas. Il faut également que les élèves créent leurs propres modèles et qu'ils en évaluent la pertinence en les confrontant à la réalité expérimentale et aux critères que nous avons décrits. Pour comprendre en profondeur, de l'intérieur, ce concept, ils ne doivent pas être seulement des utilisateurs de modèles, ils doivent aussi en être les concepteurs. Ils doivent modéliser. Le processus de modélisation en sciences fait appel aux compétences suivantes [12, 13, 18, 25] :

- (i) La compétence en modélisation chez les élèves implique la capacité à établir des connexions entre les différents niveaux d'organisation d'un système, en adoptant une perspective globale. Cette aptitude englobe la compréhension de la fonction descriptive d'un modèle ainsi que la maîtrise de ses différents niveaux, tels que les aspects iconiques et mathématiques ;
- (ii) La capacité de sélectionner les éléments essentiels d'une situation physique ou chimique que le modèle intégrera et d'établir les relations éventuelles entre ces éléments; le développement de cette compétence implique de reconnaître au moins

deux des dimensions d'un modèle: son caractère délibérément simplifié et son aspect relatif ;

(iii) La capacité d'abstraction, permettant de relier les aspects descriptif et conceptuel d'un modèle ; il s'agira, par exemple, de traduire une analogie mécanique (des boules de billard) en un concept abstrait (le modèle du gaz parfait) ;

(iv) La capacité de traduire les éléments d'un modèle en propositions mathématiques et d'en déduire logiquement des propositions susceptibles d'être confrontées à l'expérience ;

(v) Une fois les modèles établis, la capacité de les appliquer pour décrire, expliquer et prédire : c'est le noyau central du concept même de modèle (Figure 3) ;

(vi) L'aptitude à effectuer des allers et retours entre le langage des modèles et le monde empirique afin de faire évoluer les modèles : l'élève devient ainsi conscient du caractère relatif et évolutif des modèles.

2.2 Revue sélective de la littérature didactique

Une analyse de la littérature nous amène à formuler une synthèse de l'état actuel de la question. Synthèse qui reprend diverses conclusions dont la pertinence didactique nous semble avérée et auxquelles nous nous référerons dans notre projet de séquence de leçons des chapitres ultérieurs (chapitres 3 et 4).

(i) Le but d'un enseignement centré sur la modélisation est de faire progresser les élèves depuis le stade de leurs capacités spontanées de raisonnement et de leurs préconceptions – leur "écologie conceptuelle" – vers un modèle cible didactique établi par transposition didactique du modèle scientifique reconnu, en passant par plusieurs modèles intermédiaires présentant à des degrés divers les caractéristiques que nous avons décrites [22]. Ce processus est désigné par les termes « changement conceptuel » (« *Conceptual change* »). De nombreuses théories ont été développées pour formaliser l'ensemble des processus et étapes qui jalonnent ce changement conceptuel [23].

(ii) Schwarz et al. [24] considèrent qu'il est essentiel d'impliquer les élèves dans la construction de leurs propres modèles, plutôt que de travailler directement avec des modèles fournis par les autorités scientifiques. Ils soutiennent également que la

révision et l'amélioration de leurs modèles permet aux élèves de mieux comprendre la nécessité de faire évoluer les modèles scientifiques en fonction des nouvelles découvertes. Clément identifie trois grands types d'information présents dans les modèles, qu'il classe comme suit par ordre croissant de complexité : spatial, causal et dynamique [22]. Même si le vocabulaire change, on retrouve sans peine, dans l'ordre, les aspects descriptif, nomologique et évolutif que nous avons discutés précédemment.

(iii) Justi et Gilbert [25] ont réalisé une enquête auprès de 39 professeurs (dont 10 de l'enseignement fondamental, 10 de l'enseignement secondaire, 10 étudiants stagiaires en enseignement et 9 professeurs d'université) en leur demandant d'identifier les connaissances et les compétences dont les enseignants scientifiques ont besoin pour produire des modèles adaptés. Il en résulte que les compétences de modélisation sont généralement faiblement développées auprès des élèves, entre autres justement parce que les professeurs eux-mêmes n'ont été que peu formés à cette démarche, qu'ils sont donc peu conscients de son importance et dès lors peu enclins à y soumettre leur élèves [5-8, 27-28].

(iv) Une compréhension détaillée des processus cognitifs mis en jeu lors du processus de modélisation par des adolescents fait défaut. Or une telle connaissance est indispensable pour développer des approches didactiques adaptées [22].

(v) Il est généralement admis qu'une des difficultés rencontrées par les élèves en chimie résulte de la nécessité de maîtriser trois niveaux de pensée, les niveaux macroscopique, microscopique et symbolique, souvent résumés par le triangle de Johnstone [26]. Dans le cadre de leur étude de la modélisation des phénomènes d'équilibre chimique, Kermen et Méheut [5] ajoutent une dimension supplémentaire correspondant au niveau empirique décrivant les phénomènes, transformant le triangle en un tétraèdre et illustrant ainsi la complexité des tâches que les élèves doivent réaliser.

(vi) Le processus de modélisation étant difficile à mettre en œuvre, plusieurs auteurs insistent sur la nécessité de favoriser au début du processus l'élaboration des modèles les plus simples, c'est-à-dire les modèles spatiaux ou iconiques, ceux que nous appelons modèles schématiques [27, 28]. Il s'agit entre autres d'encourager les

élèves à représenter schématiquement en parallèle avec l'expression verbale. Cette idée nous paraît aussi compatible avec les travaux de Sensevy et al. [8] qui insistent sur les allers et retours fréquents entre le concret particulier et l'abstrait général dans l'élaboration d'un modèle.

(vii) Une étape essentielle et délicate du processus de modélisation consiste à générer des analogies adéquates. La créativité joue un rôle central dans ce processus. Harrison et Treagust [28] proposent une approche en trois temps – "Focus, Action, Reflection" (FAR) – dans laquelle le professeur fournit, pour un contexte donné et sur la base de l'écologie conceptuelle des élèves, la ou les analogie(s) dont les élèves doivent alors analyser, sous la guidance de l'enseignant, la pertinence.

(viii) La considération précédente fait directement référence au rôle du professeur dans le développement des compétences de modélisation de ses élèves. Certains auteurs, dont Finster [29, 30], insistent sur le fait que l'enseignement de telles compétences se doit d'être situé dans ce que Vygotsky appelle la "zone proximale de développement", c'est-à-dire dans une zone de difficultés où l'élève ne peut relever le défi seul mais le peut avec l'aide de ses pairs plus avancés ou de l'enseignant. Le rôle de l'enseignant pour faire découvrir les caractéristiques d'un modèle scientifique est irremplaçable. Il s'agit d'assurer une véritable guidance épistémologique. Harrison and Treagust [28] soulignent ainsi que "... Grade-11 chemistry students who became creative multiple modellers realized that no model was wholly right and began to see science as more about process thinking than object description" (p. 1013). Ils poursuivent en affirmant qu'il est important que les "teachers carefully assess the conceptual demands that their teaching models place on their students and carefully negotiate each model with their students" (p. 1014). Ou encore: "Analogical models do help learners build understanding, however, the congruence of the students understanding with the teachers' expectations is an open question if teachers do not actively negotiate the analogical model's familiarity and its shared and unshared attributes with the students" (p. 1018). La procédure FAR mentionnée précédemment a été développée dans cette optique.

(ix) Une étude détaillée de Pluta et al. [31] montre qu'il est tout à fait réaliste et efficace de faire évaluer les caractéristiques de modèles par des élèves dès 13-14 ans

(7th grade) après leur avoir présenté divers modèles mais avant toute tentative de modélisation personnelle. La mise en commun des idées des élèves au sein d'une classe permet, dans 80% des cas étudiés, d'identifier des aspects essentiels d'un modèle : niveau descriptif adéquat, pouvoir explicatif, parcimonie. Le caractère prédictif d'un modèle semble plus délicat à faire identifier. On peut imaginer qu'avec des élèves plus âgés, une description encore plus fidèle et complète soit accessible.

(x) La présentation de modèles historiques et la discussion de leur caractère simplificateur, généralisateur et évolutif est un outil pédagogique mis en avant par divers auteurs, dont Justi et Gilbert [32]. Le rôle de modèles didactiques hybrides, mis au point par les enseignants dans une optique didactique est controversé. On manque de données et d'analyses pour évaluer la pertinence de cette approche, qui ne nous paraît pourtant pas dénuée d'intérêt et qui peut se révéler indispensable dans une perspective de transposition didactique.

(xi) Prins et al. [33] ont proposé une série de critères pour une pratique de modélisation authentique avec des élèves de 16-17 ans. Ils mettent en avant : (i) le choix des thèmes en fonction de l'intérêt des élèves pour la question; (ii) une procédure de modélisation compatible avec la structure générale que nous avons donnée plus haut ; (iii) un degré de complexité et de familiarité avec le problème compatible avec le stade de développement cognitif des élèves; (iv) la possibilité de réaliser effectivement au laboratoire l'approche expérimentale que la modélisation vise à conceptualiser. Il existe diverses études répertoriant les intérêts spécifiques des élèves: vie courante, technique, santé, environnement sont régulièrement bien classés [34]. Prins et al. relèvent, sur la base d'études antérieures, que les procédures spontanées de modélisation des élèves ne sont pas foncièrement différentes de celles des scientifiques chevronnés, hormis le niveau de connaissance scientifique [33]. Il leur paraît donc raisonnable de faire appel à des procédures de modélisation authentiques, dont la structure est similaire à celle rencontrée en général en sciences. Le fait de s'adapter au stade de développement cognitif des élèves est tout à fait en résonance avec le positionnement dans la zone proximale de développement mentionné plus haut. La volonté de pouvoir réaliser effectivement les expériences est, nous semble-t-il, essentielle eu égard aux relations étroites entre le monde

empirique et les modèles qui le formalisent. Ces auteurs proposent quelques sujets possibles. En voici une sélection: modélisation des émissions de substances organiques volatiles, modélisation du traitement de l'eau potable, modélisation d'une installation de biogaz. On constatera que ces thèmes se rapportent à la santé ou à l'environnement. Il s'agit aussi de modélisations technologiques, un thème traité par France [35], qui insiste sur le fait que modéliser n'est pas uniquement conceptualiser ou formaliser la réalité empirique mais est aussi une approche pour résoudre des situations-problèmes. On rejoint là la pédagogie par compétences.

(xii) La modélisation à travers des représentations visuelles constitue une approche pratique, étant à la fois authentique et jouant un rôle crucial dans l'apprentissage des sciences, des technologies, de l'ingénierie et des mathématiques (STIM) [36].

2.3 Modélisation comme support pour le changement conceptuel

En accord avec l'approche constructiviste dans laquelle les apprenants construisent leur propre structure cognitive, un processus d'apprentissage résulte d'une séquence d'étapes allant du niveau le plus simple au plus complexe et qui guident l'apprenant tout au long d'un parcours de raisonnement. Le cadre du changement conceptuel décrit ce processus d'adaptation au cours duquel l'élève est confronté à plusieurs situations qui nécessitent de générer et de tester des propositions alternatives [23, 37-40].

De nombreux résultats ont montré que l'apprentissage par la modélisation contribue de manière positive au changement conceptuel, comme nous l'avons déjà évoqué au début de la section 2.2. Le processus de modélisation est considéré comme un moteur de changement conceptuel. La référence aux modèles, et en particulier le processus de modélisation lui-même dans une situation d'apprentissage, contribuent en effet à développer la capacité des élèves à définir leur propre cadre de réflexion en s'appuyant sur le raisonnement, la créativité et la prise de décision autonome. Les études axées sur la pratique concernant le changement conceptuel dans l'enseignement de la chimie ont démarré lentement depuis les années 1997 [41], mais c'est un domaine de recherche qui s'est rapidement développé par après [42-55].

Dans la littérature, plusieurs chercheurs se sont intéressés à l'évaluation de la progression des idées des élèves dans des contextes scientifiques lorsque l'enseignement est basé sur la modélisation [56-62].

Les objectifs d'un enseignement scientifique basé sur des modélisations sont donc de contribuer au développement intellectuel des élèves et de promouvoir leur capacité à former leur propre système de pensée. La construction et l'utilisation des concepts se font selon différents composants interconnectés : systèmes de représentation (langage naturel, langage graphique, mathématiques, etc.) et schémas mentaux (propriétés des concepts, relations entre concepts, opérations avec des concepts, modèles théoriques et modèles de situations-problèmes). Ces activités de modélisation doivent stimuler le raisonnement, les capacités de classification et de catégorisation des informations, ainsi qu'une prise autonome de décision et un développement de la créativité : elles ont un impact direct pour soutenir le processus cognitif des élèves.

Nous présenterons dans cette thèse des outils et des méthodes qui ont été élaborés afin d'évaluer l'évolution des conceptions et des compétences des élèves de 5^e et de 6^e année secondaire durant des séquences d'enseignement fondées sur une approche par modélisation.

2.4 Le schéma scientifique, un outil didactique et / ou une source d'obstacles épistémologiques ?

Dans les disciplines scientifiques, le schéma joue un rôle dont l'importance n'a fait que croître au cours des dernières décennies. Il est communément admis que les schémas explicatifs aident les élèves à visualiser des concepts compliqués et les accompagnent dans la compréhension des notions [63-65].

Néanmoins, le rôle et l'efficacité du schéma restent peu questionnés au niveau de l'enseignement, relativement peu de travaux étant disponibles sur le sujet. Comme nous le discuterons brièvement plus loin et en détail dans le chapitre 2, les représentations schématisques proposées dans les manuels scolaires peuvent même devenir une forme d'obstacle cognitif.

Comme nous le discuterons plus en détail dans le chapitre 2, les schémas utilisés dans les manuels scolaires partagent avec les modèles de nombreuses caractéristiques. Ils font en quelque sorte partie d'une sous-catégorie des modèles. L'utilisation de tels outils conceptuels nécessite donc des procédures d'exécution adéquates pour aider les élèves à construire leurs apprentissages. Dans les manuels scolaires, un modèle est généralement présenté comme une « représentation systématique, simple et provisoire relative à des observations et à des mesures. Cette représentation est faite de signes, de symboles, de formes géométriques ou graphiques, et de mots » [66]. Il est cependant utile de préciser davantage ce que représente un modèle schématique, en nous référant à différentes études qui proposent diverses définitions [67].

- (i) « Un schéma est un moyen de représentation simplifiée, figurée, symbolique et fonctionnelle de réalités perceptibles ou non perceptibles et de relations. » [68]
- (ii) « Le schéma, dessin simplifié et déformé pour une meilleure mise en évidence d'aspects choisis par son concepteur représente le genre d'illustration le plus simple, le plus facile à lire mais, aussi, le moins attractif, car il manque d'affectivité et d'esthétique. » [69].
- (iii) « Le schéma apparaît alors comme un instrument de formalisation et de représentation des savoirs tandis que sa nature analogique le rendrait, pour certains, proche de la métaphore du langage verbal. » [70]
- (iv) Il assure « une médiation entre un concept abstrait et la constitution d'une image mentale de ce concept. » [71]
- (v) « Le schéma permet une représentation claire, simple et efficace de certains aspects d'une théorie ou d'un modèle. » [71]
- (vi) « Contrairement à l'image mentale, le schéma est une représentation, une figuration matérialisée » [70], elle constitue un objet de notre réalité [72].

La nature figurative et analogique du schéma rendrait donc possible la concrétisation de concepts ou de phénomènes difficiles à représenter, ce qui constitue bien le rôle attendu de l'image scientifique [73]. Depuis la fin du 19^{ème} siècle, les pédagogues se sont interrogés sur l'utilité du manuel scolaire. Au cours du temps, on constate que les figurations descriptives et réalistes de situations de

laboratoire font de plus en plus place à des représentations plus schématiques. Le décor disparaît progressivement, au profit des appareils et de la manipulation, les dessins complexes se simplifient et sont remplacés par des dessins au trait simple, accompagnés de quelques mots désignant en langage naturel les produits en cause dans la réaction, se centrant sur les aspects fonctionnels. Actuellement, le dessin est réduit, par exemple, au symbole d'un tube à essai, complété par les formules chimiques [63, 74].

Dans le but de transmettre un savoir, les manuels scolaires comportent évidemment également un programme d'acquisition et d'évaluation du savoir. Le schéma n'y est pas qu'une représentation d'un objet, mais il prend une place de choix dans la construction des connaissances. Le schéma dans les manuels est donc choisi pour son contenu représentatif, dans le but de faciliter l'apprentissage, voire pour un parcours de savoir qui envisage l'élève seul face au manuel. Le schéma peut être une carte conceptuelle synoptique favorisant l'intégration cognitive [65]. On peut faire l'hypothèse qu'une diversification des formes de schématisation constituerait la stratégie la plus adéquate pour favoriser le développement de la pensée de l'élève [75].

Nous avons analysé les schémas et illustrations de plusieurs manuels scolaires belges, français et allemands, en nous concentrant sur la structure atomique au sens large, matière abordée en 3^e année (9^e grade) de l'enseignement général en Belgique francophone. L'analyse que nous avons réalisée fait appel à divers critères et permet d'identifier les forces et faiblesses de ces modèles schématiques et de repérer les sources possibles de préconceptions que pourraient acquérir les élèves. Les résultats de cette étude seront détaillés dans la première partie du chapitre 2. Nous avons également mis au point un questionnaire destiné aux élèves des 2^e et 3^e degrés (classes de 4^{ème}, 5^{ème} et 6^{ème} années, grades 10 à 12) afin d'évaluer leur compréhension en matière de modèles schématiques ainsi que l'évolution temporelle des compétences acquises. Nos résultats quantitatifs et publiés font l'objet de la deuxième partie du chapitre 2.

3 Ingénieries didactiques pour un enseignement basé sur la modélisation.

3.1 Caractéristiques d'une ingénierie didactique

La naissance du concept d'ingénierie didactique se situe dans les années 1980 dans le cadre de la didactique des mathématiques, avec une focalisation sur l'analyse des actions et interactions en salle de classe. Brousseau [76] fournit la définition suivante : "L'ingénierie didactique s'occupe de créer des modèles consistants et pertinents et de réaliser des dispositifs d'enseignement d'une connaissance précise, destinés à décrire ou à prévoir, et à expliquer les événements observables d'un épisode d'enseignement déterminé (situations ou curriculum) observé ou envisagé :

- Observé, afin de recueillir les informations qui permettront d'en rendre compte, d'expliquer *a posteriori* son déroulement et ses résultats, et de permettre sa reproduction
- Envisagé, afin de déterminer les conditions reproductibles (réalisables et communicables) de son déroulement et de ses résultats observables.

L'étude de la consistance et de la pertinence de ces modèles renvoie à un examen critique de tous les concepts relatifs à l'enseignement, à l'apprentissage et à la constitution même de la matière enseignée."

Comme l'expose Artigue [77], le choix même du terme d'ingénierie didactique souligne le parallèle avec le travail de l'ingénieur qui applique un cadre théorique et donc des modèles dont la validité est nécessairement limitée, à la réalisation d'objectifs pratiques qui se situent dans un cadre beaucoup plus complexe. C'est ainsi que le chercheur et le praticien qui conçoivent et mettent en œuvre une ingénierie didactique partent d'un cadre théorique élaboré par les recherches en didactique et le confrontent à la réalité d'une situation réelle d'enseignement dans des conditions souvent qualifiées d'« écologiques ». En développant une ingénierie didactique, on part de l'axiome selon lequel il est possible d'agir de façon rationnelle sur un système d'enseignement en se basant sur des fondements didactiques théoriques mais on souligne tout autant la nécessité de confronter la

théorie à la pratique de classe. Les objectifs d'une ingénierie didactique peuvent tout autant être focalisés sur l'enseignement de concepts que sur l'appropriation de méthodes.

La dichotomie entre le caractère modélisateur, donc simplificateur, des théories didactiques et la complexité des situations d'application est importante. Comme le soulignent Sanchez et Monod-Ansaldi [78], « Cette complexité est liée à la nature même des situations d'apprentissage, par essence non déterministes, auxquelles les travaux en éducation s'intéressent. Dès lors, il serait vain de prétendre contrôler les variables ou être en mesure de les reproduire. On peut néanmoins prétendre à en identifier les éléments signifiants, à caractériser leurs relations et à en inférer non pas des lois, mais des éléments de compréhension, qui, formalisés dans des modèles, donnent du sens aux observations effectuées. »

La définition fournie par Dupertuis et al. [79] nous semble reprendre les éléments essentiels : « L'ingénierie didactique consiste donc à concevoir des situations d'enseignement rationnelles et argumentées sur la base d'analyses (...). Autrement dit, ce sont des propositions d'enseignement découlant d'un questionnement, puis de choix didactiques justifiés par la recherche (...), élaborées par le biais d'une méthodologie qui devient à la fois un produit et un processus itératif ».

Toute ingénierie didactique comporte quatre phases [77,80-81].

- (i) Des analyses préalables examinent les contraintes de nature épistémologique, cognitive, c'est-à-dire liées aux conceptions des élèves ou étudiants, et didactiques pertinentes.
- (ii) La phase de conception de l'événement d'enseignement (leçon ou séquence de leçons) et d'analyse *a priori* définit entre autres les variables macrodidactiques, liées à l'organisation globale de la séquence d'enseignement, et microdidactiques, plus spécifiques au problème traité et à la situation écologique locale [77]. Cette phase se base sur des hypothèses issues du savoir théorique didactique et axées sur les relations élève – milieu – savoir.

- (iii) La phase d'expérimentation est la séquence d'enseignement dans le contexte scolaire. Elle va mener à des productions variées : observation des élèves en classe, interactions élèves – enseignant, travaux produits par les élèves, questionnaires, entretiens etc.
- (iv) La dernière phase est l'analyse *a posteriori* qui consiste à confronter les résultats de l'expérimentation, matérialisés par les données mentionnées ci-dessus, à l'analyse *a priori*. Il s'agit d'identifier et de distinguer les hypothèses validées de celles qui sont invalidées.

L'ingénierie didactique se distingue d'autres approches par sa méthode de validation qui est qualifiée d'interne, dans la mesure où elle repose sur une confrontation des *analyses a priori* et *a postérieure*, par opposition aux validations externes basées sur une comparaison statistique d'un groupe expérimental et d'un groupe contrôle. En effet, les recherches ayant recours à des expérimentations en classe se situent le plus souvent dans une approche comparative avec validation externe basée sur la comparaison statistique des performances de groupes expérimentaux et de groupes témoins [82-85]. Donnons quelques exemples pour illustrer les différences entre validation externe et interne, en commençant par des validations externes.

Yalçinkaya et al.[86] ont étudié l'efficacité de l'apprentissage basé sur des cas concrets de la vie courante sur la compréhension des concepts clés de la cinétique chimique par des élèves de 16-17 ans. Dans ce but deux groupes d'élèves (au total 53) d'un même enseignant ont été arbitrairement définis comme groupe expérimental et groupe témoin. Des pré-tests et post-tests, et des entretiens semi-dirigés ont été utilisés pour collecter des données dans ces deux groupes. L'analyse de ces données avec le test t des échantillons indépendants et l'ANOVA a montré une influence significative de l'approche alternative dans l'apprentissage de la cinétique chimique. Acar & Tarhan [85] ont appliqué cette même méthode de recherche pour montrer l'efficacité de l'apprentissage coopératif dans la compréhension de la liaison métallique chez des élèves de 15 ans de deux classes de sciences d'un même professeur. Ces dernières études ont employé le processus

de validation statistique pour différencier classes expérimentales et classes témoins.

À l'opposé de ces approches répandues dans le monde anglo-saxon, on observe préférentiellement, du côté francophone, des études de cas dont la validation, fondée sur la confrontation entre l'analyse *a priori* et l'analyse *a posteriori*, est essentiellement interne [84, 87, 88]. Molvinger et ses collègues [80] ont développé une ingénierie didactique visant à enseigner la liaison covalente aux élèves de 10^e année en France. Leur approche met en avant l'utilisation de jeux d'apprentissage et de divers registres sémiotiques.

Des travaux similaires existent également dans le monde non francophone, tels que l'étude de Chairam et al. [87], qui a démontré dans quelle mesure l'expérimentation dans le cadre de l'approche par investigation améliore l'apprentissage de la cinétique chimique chez les étudiants thaïlandais de première année de bachelier en sciences. De plus, Case & Fraser [88] ont réalisé une étude évaluant la compréhension du concept de mole chez des étudiants de première année en études d'ingénieur. Des interviews ont été menées auprès de 15 étudiants volontaires afin de diagnostiquer les préconceptions.

Basé sur ces données, un pré-test comportant un questionnaire à choix multiple visant à confirmer les informations obtenues dans ces interviews a ensuite été réalisé. Des activités concrètes visant à opérer un changement conceptuel ont été suivies d'un questionnaire qualitatif et du questionnaire à choix multiple utilisé comme post-test. Une comparaison entre les résultats des pré- et post-tests a permis d'évaluer l'efficacité des activités concrètes proposées aux étudiants.

A l'opposé, une des spécificités de la méthode de l'ingénierie didactique [89] réside donc dans son mode de validation, essentiellement interne, au cours de laquelle on peut évaluer l'efficacité d'une séquence et, partant, la validité des hypothèses théoriques, en comparant, entre autres, l'état cognitif initial et l'état cognitif final des élèves.

Dans les diverses études présentées dans notre travail, les données ont été recueillies à partir des réponses écrites à des questionnaires pré-test, des

documents écrits produits par chaque élève dans chacune des activités d'apprentissage auxquelles ils ont participé durant la séquence didactique, des transcriptions des échanges entre élèves d'un même groupe qui ont eu lieu pendant les séances de modélisations (qui ont été enregistrées par vidéo), des réponses écrites aux questionnaires post-test, dans lesquels les élèves étaient également invités à donner leur avis sur la méthodologie envisagée au cours de la séquence.

Magnusson et al. [90] soutiennent que l'utilisation de ces multiples sources de données est essentielle pour pouvoir analyser l'évolution des connaissances et le changement conceptuel des élèves. L'utilisation de multiples sources de données au cours des différentes phases de cette recherche a également contribué à évaluer la validité interne.

Soulignons pour clore cette présentation générale que si, contrairement à la recherche-action aux visées plus pragmatiques, l'ingénierie didactique permet un ancrage théorique de l'activité pratique d'enseignement, si elle se situe au point d'intersection entre théorie et application, elle laisse toutefois un certain nombre de questions et d'insuffisances en suspens, que d'autres approches cherchent à prendre en compte [78]. C'est le cas de la recherche orientée par la conception (« Design-based research ») qui se distingue de l'ingénierie didactique et de son pendant anglo-saxon appelé « design experiment » par deux aspects fondamentaux [78]:

- (i) Une co-construction des dispositifs d'enseignement par le chercheur et le praticien, menant à un développement professionnel des deux partenaires ;
- (ii) Une optimisation progressive du dispositif étudié par itérations successives intégrées obligatoirement au sein du processus. Cela répond, au moins en partie, à la remarque d'Artigue [77] qui, dans son article de 1988, exprimait la nécessité de se pencher non seulement sur les représentations des élèves mais aussi sur celles des enseignants praticiens, en matière de contenus, de préconceptions des élèves et d'épistémologie.

3.2 Objectifs des ingénieries didactiques développées dans ce travail

Les problématiques et les concepts abordés jusqu'ici justifient l'ingénierie didactique en tant que méthodologie privilégiée pour notre recherche.

Notre objectif est donc d'analyser les préconceptions des élèves et de concevoir des séquences d'enseignement qui permettent aux élèves de participer activement à l'apprentissage de différents concepts de la cinétique chimique et de la thermochimie en vue d'un changement conceptuel adéquat. Deux ingénieries didactiques ont été élaborées pour induire, de manière contrôlée, l'évolution des conceptions des élèves. Ces ingénieries visent essentiellement à :

- Remettre en cause les préconceptions des élèves [91],
- Proposer des activités de construction des savoirs basées sur l'expérimentation [92],
- Faire acquérir aux élèves une certaine aisance dans l'utilisation d'un modèle [93],
- Faire découvrir aux élèves une démarche de modélisation (capacité de modéliser une réalité expérimentale sélectionnée) [94],
- Favoriser l'intégration des représentations moléculaires (submicroscopiques) à des observations et des descriptions macroscopiques [26].

Dans un contexte plus précis, la séquence que nous proposons, par exemple pour la cinétique chimique, permet de :

- Développer des capacités de modélisation faisant appel tant aux représentations iconiques (modèles moléculaires) qu'aux concepts abstraits de collision et d'énergie cinétique et potentielle [94] ;
- Mettre en évidence le fait qu'un modèle simplifie la réalité empirique, tout en reproduisant les caractères essentiels qu'il rationalise [93] ; il repose sur les investigations des élèves eux-mêmes et les représentations qui en découlent ;
- Faire émerger un modèle en mettant en jeu la créativité – guidée par le professeur – des élèves et leur aptitude à négocier ce modèle avec leurs pairs et leur enseignant, [11, 94] ;

- Montrer que les facteurs influençant la vitesse d'une réaction chimique, de manière plus spécifique au thème concerné, peuvent être expliqués sur la base d'une représentation moléculaire dans laquelle les aspects géométriques – orientation d'approche des réactifs – et énergétiques – hauteur de la barrière d'activation – jouent un rôle central ; les élèves découvrent ainsi que la science n'est pas seulement l'accumulation de faits mais aussi – et surtout – la construction de schémas de pensée qui leur donnent un sens.

4 Multimédia pour apprendre la chimie

4.1 Rôle des multimédia dans l'apprentissage

La capacité à traduire des phénomènes chimiques à l'aide de différentes formes de représentation (macroscopique, submicroscopique et symbolique) est indispensable pour une compréhension approfondie des concepts [12, 26, 93].

Les élèves doivent être capables d'expliquer les changements observés au niveau macroscopique par les interactions entre les particules (ions ou molécules). Cependant, des recherches montrent qu'ils n'expliquent pas facilement les phénomènes chimiques au niveau moléculaire [95-97]. Les élèves utilisent fréquemment des symboles sans les comprendre et rencontrent des difficultés à décrire leur signification. Des études similaires indiquent des niveaux de réussite plus élevés pour les questions traditionnelles qui utilisent des symboles et des nombres (comparées à des questions conceptuelles impliquant des particules).

Plusieurs recherches antérieures, détaillées dans les paragraphes qui suivent, ont été examinées afin de concevoir des séquences pédagogiques faisant intervenir les multimédias pour enseigner des concepts de base de chimie. Ces approches, communément désignées sous le terme "Technologies de l'information et de la communication dans l'enseignement" (TICE), cherchent à susciter chez les élèves une distinction nette entre les diverses représentations possibles d'un même phénomène, tout en encourageant une acquisition approfondie de leurs interrelations.

4.2 Des cas concrets d'utilisation de multimédia dans l'apprentissage de la chimie

Nous avons recensé 7 domaines où ce nouvel environnement, le « multimédia », pouvait apporter une plus-value dans l'apprentissage de la chimie. Ces différents avantages seront détaillés dans les paragraphes qui suivent, en s'appuyant à chaque fois sur les méthodes proposées par les différents chercheurs.

a. Multimédia pour modéliser le triple niveau conceptuel

Ardac & Akaygun [98] ont eu recours à la capacité des ordinateurs à afficher des représentations moléculaires qui correspondent à des observations au niveau macroscopique. Cette étude met en évidence les effets de l'utilisation d'un module didactique multimédia comprenant les représentations macroscopiques, symboliques et moléculaires des phénomènes chimiques.

Chaque élève du groupe étudié travaillait sur un ordinateur. On leur a demandé de réfléchir à ce qu'ils observaient et de dessiner des représentations moléculaires après avoir vu chaque image. Ils devaient compléter des parties spécifiques à l'ordinateur ainsi que les brochures accompagnant chaque clip vidéo dans lesquelles ils devaient décrire, dessiner ou commenter le phénomène présenté. Les données obtenues ont servi de sources importantes d'informations (cerner la compréhension de l'élève et les changements en termes de représentations moléculaires au cours de la formation).

Ardac et Akaygun [98] ont mis en évidence que les élèves ayant bénéficié d'un enseignement soutenu par des supports multimédias mettaient un accent plus prononcé sur l'état moléculaire des substances, dépassant ainsi leurs pairs du groupe d'enseignement traditionnel en termes de résultats aux tests et de compétence dans la représentation moléculaire de la matière. Les performances considérablement plus élevées des élèves du groupe-cible, formés avec l'assistance d'outils informatiques, se traduisent par une aisance accrue à utiliser des représentations de particules lors d'entretiens.

Les outils visuels permettent d'illustrer des phénomènes scientifiques abstraits en intégrant des simulations et renforcent ainsi les processus d'apprentissage et d'enseignement. Dans l'exemple qui suit, les auteurs montrent comment les activités d'apprentissage ont contribué à une meilleure compréhension de la structure de la matière et du concept de liaison chimique par les élèves.

Des travaux de recherche [99-102] ont en effet montré les difficultés des élèves par rapport au concept-clé de liaison chimique. Ils vivent et opèrent dans un monde macroscopique de la matière et ne font pas toujours la distinction entre les niveaux macroscopique et submicroscopique. Ils ont tendance à se construire des modèles mentaux non scientifiques [103]. Les modèles informatisés aident les élèves à faire correctement le lien entre le niveau macroscopique et le niveau submicroscopique [102-104].

L'étude de Frailich et al. [105] avait comme but de construire un site basé sur les principes des technologies de l'information afin d'enrichir l'étude de la chimie en termes d'outils pédagogiques, investissant dans l'utilisation des ressources en ligne pour promouvoir la compréhension de phénomènes abstraits, en particulier de la liaison chimique. Cette méthodologie permet en particulier de soutenir les professeurs dans l'enseignement de la chimie au niveau de l'enseignement secondaire, de promouvoir l'intérêt et la motivation des élèves et aussi de renforcer le processus d'apprentissage par un changement d'environnement.

Ces objectifs ont été validés de manière externe (un groupe expérimental et un groupe témoin). Les deux groupes ont suivi le même syllabus, ont utilisé le même manuel et ont fait les mêmes activités. La seule différence est que le groupe expérimental a été exposé au site web. Ces deux groupes ont été soumis à deux tests : un pré-test pour la comparaison du niveau de compréhension de la chimie en général et un post-test pour évaluer la compréhension du concept de liaison chimique par les élèves. Les activités en ligne promeuvent une réflexion de haut niveau pour laquelle les élèves associent la théorie de la liaison chimique apprise en classe aux modèles visuels animés qu'ils observent lors de ces activités en ligne.

Les résultats obtenus ont permis de conclure que les activités d'apprentissage en ligne qui comprenaient des outils de visualisation ainsi que des stratégies d'apprentissage actif et coopératif offraient aux élèves le moyen de construire leur propre savoir par rapport au concept de liaison chimique.

Cette approche de l'apprentissage s'appuie sur la théorie du socio-constructivisme dans ses deux dimensions : d'abord, en mettant l'accent sur l'apprenant plutôt que sur le professeur, le rendant responsable du processus d'apprentissage (Brooks & Brooks, 1993) [106], et en lui permettant une meilleure construction mentale des connaissances nécessaires pour comprendre des résultats expérimentaux. Simultanément, la dimension socio-constructiviste favorise une construction solide des connaissances grâce aux discussions et négociations avec les pairs.

L'apprentissage associé aux multimédias peut donc contribuer à assurer une compréhension approfondie des phénomènes scientifiques, à promouvoir une approche constructiviste par l'utilisation de modèles visuels animés. Mais la contrainte reste au niveau de l'accessibilité : seules les écoles qui possèdent le matériel informatique approprié permettent aux professeurs de mettre au point un environnement d'apprentissage en ligne. Les professeurs doivent intégrer les activités en ligne aux leçons de chimie traditionnelles : ils expliquent au préalable tous les aspects théoriques et les concepts chimiques indispensables. Les élèves sont ensuite activement impliqués par les applications en ligne et ils sont guidés, si nécessaire, par les professeurs.

Les activités en ligne peuvent faire appel à des modèles variés et animés pour rendre compte des différents phénomènes scientifiques, et elles placent les élèves au centre du processus d'apprentissage, contribuant ainsi à une meilleure compréhension des phénomènes étudiés. D'autre part, elles constituent une occasion pour les professeurs d'intégrer une dimension technologique et multimédia novatrice dans leur enseignement et ainsi le rendre plus attrayant et efficace.

b. Multimédia pour motiver les étudiants

Il existe une différence importante en termes de motivation et d'attention des élèves entre un apprentissage basé sur des outils multimédia et un apprentissage basé sur des textes traditionnels. Il y a des indications que les élèves intègrent et se souviennent beaucoup mieux de ce qui est enseigné par de tels outils [107]. Les descriptions verbales peuvent aider les élèves à organiser les informations en une représentation cohérente et à les intégrer à des connaissances existantes. L'efficacité du traitement multimédia est encore plus importante si les élèves sont encouragés à intégrer les différentes représentations d'un même phénomène en un ensemble cohérent. Les professeurs devraient donc profiter du potentiel du multimédia pour aider leurs élèves à créer leurs propres représentations de phénomènes, tout en vérifiant leur cohérence et en favorisant le développement de modèles mentaux corrects et adaptés.

c. Multimédia comme alternative à l'expérimentation

Domingues et al. [108] ont mis en place des séances virtuelles comme support complémentaire afin de dépasser les limitations de l'expérimentation. Deux labos virtuels ont été proposés pour soutenir les expériences. Les étudiants ont eu accès à une plateforme avec des prévisualisations et des simulations. L'efficacité du système mis en œuvre a été évaluée par l'expérimentation directe et l'enquête (par le biais de questionnaires) avec les étudiants suivant le cours de laboratoire de technologie chimique. Une amélioration significative des performances des étudiants au laboratoire de chimie a été observée et 93% d'entre eux jugent que leur laboratoire virtuel est d'une grande utilité. Ce dernier peut jouer un rôle important comme outil complémentaire : s'il ne peut pas remplacer la pratique expérimentale, il en réduit le coût et diminue le temps d'apprentissage.

Par exemple, le « the Vlabs Projet » propose plusieurs activités d'apprentissages en ligne à travers vlabs (<http://vlabs.uminho.pt>) : les élèves peuvent entrer en contact avec des concepts abstraits au niveau moléculaire comme les mécanismes des réactions catalytiques afin de préparer les différentes séances de laboratoires. L'effet positif a été prouvé par comparaison avec des expériences utilisées au

laboratoire de manière traditionnelle : les élèves gagnent en autonomie et en capacité de compréhension. Ces avantages ont également été remarqués par d'autres études [109-111]. De manière générale, 80% des élèves améliorent leurs performances dans les compétences suivantes : interpréter, analyser et discuter des résultats expérimentaux d'une procédure quantitative.

d. Multimédia pour sociabiliser les étudiants

McClean et al. [112] ont montré que le fait de partager des vidéos sur des sites comme Youtube et Vimeo permet d'atteindre certains objectifs éducatifs et d'encourager le développement d'une communauté de chimie en ligne. Cette équipe de recherche détaille les résultats d'un projet qui a été mis en place durant le 1^{er} semestre pour les étudiants de biosciences de l'Université d'Ulster. Un site de partage de vidéos (YouTestTube.com) a été créé pour permettre le téléchargement et le partage de vidéos [113]. Ce site n'est pas ouvert au public, seuls les étudiants qui appartiennent au module peuvent y avoir accès. Ils doivent regarder, évaluer et commenter les vidéos de leurs camarades.

Au début du semestre, les auteurs ont constaté que les étudiants commentaient le côté technique de la vidéo, mais rarement le contenu scientifique. En plus, les étudiants réalisaient des vidéos peu pertinentes dans le cadre d'études scientifiques. Principalement le côté social de YouTestTube était valorisé par rapport au but éducatif [114]. Malgré ces constats, il a été noté une augmentation de la confiance des étudiants dans l'expression de leurs opinions sur le travail de leurs pairs, une réflexion plus approfondie sur le contenu des cours, et une meilleure compréhension des enseignements. Des nouvelles compétences ont été acquises, comme le travail en équipe, le partage de connaissances et l'évaluation des expériences qui ont été créées par des pairs.

e. Multimédia pour améliorer les compétences pratiques de laboratoire

Hensiek et al. [115] ont proposé une méthode numérique pour améliorer et évaluer les compétences pratiques des étudiants en laboratoire à l'aide du système

d'un badge numérique. Les étudiants créent une vidéo de leur pratique expérimentale et la soumettent à l'assistant qui leur offre un feedback individuel afin qu'ils puissent s'améliorer. L'attribution d'un badge numérique permet de certifier l'acquisition d'une série de compétences requises. Une enquête basée sur le PPI (Participant Perception Indicator) a été créée pour chaque badge. Celle-ci se base sur l'auto-efficacité et sur ce que les étudiants peuvent faire, par rapport à ce qu'ils croient pouvoir faire. Elle a permis l'évaluation de l'image qu'ils ont de leurs connaissances (dimension cognitive), de leur confiance (dimension affective), et de leur expérience acquise (dimension psychomotrice) par rapport aux différents aspects liés à l'utilisation d'une burette et d'une fiole jaugée.

Via cet outil, les assistants peuvent voir la construction des connaissances, des compétences et des prises de position que les étudiants devraient pouvoir acquérir.

f. Multimédia dans le cadre de l'apprentissage par investigation basé sur un programme de simulation

Zhang et al. [116] explorent la possibilité d'un apprentissage par investigation soutenu par une simulation informatique. Les auteurs font l'hypothèse qu'un apprentissage scientifique par investigation est efficace sous trois conditions : 1. Le processus d'investigation doit faire sens : l'activation de leurs connaissances antérieures doit permettre aux apprenants d'émettre des hypothèses appropriées pour résoudre le problème posé. 2. Les apprenants doivent être capables d'effectuer des manipulations systématiques de variables, de concevoir et de réaliser des expériences pertinentes et appropriées et de mener un raisonnement scientifique correct. 3. Les principes et les règles découvertes dans le cadre de l'investigation doivent mener à une réflexion plus abstraite et à une généralisation. Se basant sur ces trois hypothèses, trois types de soutien ont été conçus: un soutien interprétatif qui aide les apprenants au niveau de l'accès aux connaissances, de la compréhension et à l'émission d'hypothèses adéquates ; un soutien expérimental qui permet aux apprenants de planifier leurs activités expérimentales, d'effectuer des prédictions et d'interpréter les résultats et un soutien réflexif permettant aux apprenants de mieux prendre conscience des procédures de découverte et de les

soutenir dans la compréhension de notions abstraites. Cette étude a été réalisée afin d'évaluer les effets de ces types de soutien intégrés dans un programme de simulation informatique dont le sujet choisi était la poussée d'Archimède sur des objets immergés. Les résultats sont en faveur du fait que les soutiens intégrés à un environnement de simulation informatique devraient s'orienter vers les trois perspectives qui mènent à un apprentissage significatif, systématique et réfléchi par l'investigation.

Concernant les effets des soutiens interprétatif et expérimental sur un apprentissage basé sur la simulation par des apprenants ayant des capacités de raisonnement différentes, l'on constate que le soutien expérimental aide surtout les apprenants à faible capacité de raisonnement à réaliser des expériences valides (quatre procédures spécifiques : explication par rapport à la conception scientifique expérimentale, identification des objectifs de chaque essai, prévision et comparaison et enfin conclusion). Quant au soutien interprétatif, il aide les apprenants par rapport à la recherche de la signification, à l'activation des connaissances préalables, à l'analyse du problème et à l'accès à une base de connaissances. Ces résultats ont été basés sur trois types de post-tests : test de connaissances principales, test de compréhension intuitive et test d'application flexible.

g. Multimedia destiné à « l'apprentissage en enseignant » « learning by teaching »

Ribosa et Duran [117] ont suivi 44 élèves de 6^{ème} année de l'enseignement fondamental dans l'élaboration de vidéo-tutoriels. Les élèves travaillaient par groupe de deux et devaient créer une vidéo de 4 minutes permettant de répondre à une question concernant un phénomène étonnant. Un guide des rôles de chacun et des fiches d'activités organisées en 5 étapes leur étaient fournis pour créer la vidéo : 1) définition de la question de recherche ; 2) réponses spontanées à la question formulées par les deux membres de l'équipe ; 3) recherche d'informations au cours de laquelle les élèves définissent les concepts clés, recherchent, sélectionnent et comparent des sources d'informations ; 4) élaboration du script

vidéo avec indication de la voix off, des aides visuelles et des questions pour un public potentiel ; 5) production de la vidéo en incluant des questions interactives en utilisant une application comme EDpuzzle.

Le but de l'étude de Ribosa et Duran était de mesurer l'influence de la présence d'un public réel ou virtuel sur l'élaboration des vidéos. Il semblerait que le fait de savoir que les vidéos étaient destinées à un public (elles allaient être déposées sur une plateforme) avait des répercussions sur leur manière de répondre à la question de recherche. Il est aussi probable que la présence d'un public réel (élèves du même âge, ou plus jeune, ou à des familles), aiderait à adapter, préciser les informations, varier les exemples relatifs au thème choisi.

h. L'intelligence artificielle dans l'apprentissage de la chimie

L'émergence récente des outils d'intelligence artificielle (IA), en particulier des systèmes d'IA générative, ouvre de nouvelles perspectives pour l'apprentissage de la chimie, notamment en lien avec les représentations multiples. Ces outils permettent de générer, transformer et adapter des représentations (textuelles, symboliques, schématiques ou visuelles) en fonction des besoins des apprenants. Par exemple, certaines applications peuvent proposer des visualisations dynamiques de phénomènes chimiques, fournir des explications personnalisées ou encore analyser les productions des élèves afin de leur offrir un retour adapté [118-119].

Dans une perspective didactique, ces technologies présentent un potentiel important pour faciliter le passage entre les niveaux macroscopique, submicroscopique et symbolique. Elles permettent également d'instaurer un va-et-vient approfondi entre différentes formes de modélisation en chimie, offrant aux élèves la possibilité d'explorer, de confronter et d'affiner leurs représentations de manière presque illimitée. Cette dynamique peut ainsi favoriser un approfondissement progressif des concepts et une meilleure structuration des connaissances.

Toutefois, leur utilisation soulève aussi plusieurs enjeux, notamment en ce qui concerne la compréhension réelle des concepts, le risque de dépendance aux outils, ainsi que la validation scientifique des contenus générés [119, 120]. Dans le contexte de l'enseignement de la chimie, ces questions sont d'autant plus sensibles que les phénomènes étudiés sont à la fois abstraits et fondés sur des représentations multiples.

4.3 Conclusions

Lorsqu'on compare les effets de l'apprentissage basé sur la simulation multimédia à des méthodes d'apprentissage plus traditionnelles, plusieurs études ont présenté des preuves substantielles soutenant son efficacité [121-122]. Cependant, au-delà de ces résultats positifs, des expériences ont également mis en évidence des défis spécifiques à chaque approche d'apprentissage. En particulier, les apprenants peuvent rencontrer des difficultés significatives lorsqu'ils sont confrontés à la tâche de générer ou d'ajuster des hypothèses pour des expériences mal élaborées, telles qu'un manque de pertinence contextuelle ou une incohérence des paramètres. De même, l'interprétation des données et l'apprentissage par investigation sont des domaines où des obstacles peuvent surgir dans le contexte de l'apprentissage basé sur la simulation multimédia.

Ces observations soulignent la nécessité de poursuivre des recherches approfondies et de mener des expériences plus spécifiques afin de mieux comprendre les origines de ces difficultés et les moyens d'y remédier. En intégrant ces connaissances, les concepteurs pédagogiques peuvent affiner les stratégies d'enseignement, offrant ainsi aux apprenants des outils adaptés pour surmonter ces défis et garantir une expérience d'apprentissage plus enrichissante et efficace.

Jusqu'ici, la plupart des études ont adopté une approche *ad hoc* qui propose des stratégies de soutien bien spécifiques en fonction des difficultés des apprenants. Dans sa dissertation, Zhang [123] décrit les conditions pour un processus d'apprentissage scientifique efficace par la découverte.

La figure ci-dessous récapitule les différents avantages, détaillés dans ce texte, de l'apprentissage de la chimie soutenu par l'approche multimédia.

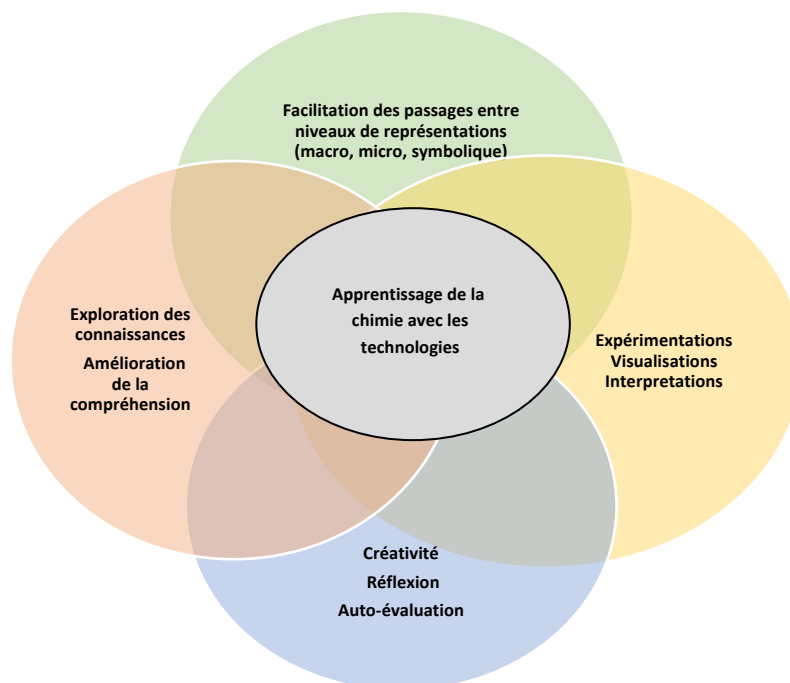


Figure 6 : Les avantages de l'apprentissage de la chimie avec les technologies

Ces innovations technologiques permettent de simplifier et/ou améliorer la représentation de concepts scientifiques en établissant des liens entre les trois niveaux macroscopique, symbolique et moléculaire pour aider les élèves à une meilleure construction du savoir [124]. Ces liens peuvent être réalisés par des expérimentations actives ou des visualisations dont les élèves seront chaque fois invités à interpréter les contenus [123].

Les nouveaux outils technologiques peuvent donner la possibilité aux élèves de s'autoévaluer via des feedbacks individuels et de mettre leur savoir en œuvre en créant et en partageant des vidéos scientifiques [116]. Ils peuvent avoir une image claire de leurs connaissances et acquérir plus de confiance en eux. Les élèves seront donc responsables de leur propre processus d'apprentissage, ce qui va garantir de meilleures constructions mentales donnant sens aux connaissances.

Nous avons intégré cette approche dans la mise au point de nos ingénieries didactiques relatives à la cinétique chimique (chapitre 3) et à la thermochimie

(chapitre 4). Nous avons mis en place des activités en ligne qui permettent aux élèves de s'auto-évaluer et d'assimiler de nouvelles connaissances qui ont été travaillées en classe.

5 Auto-évaluation : échelle TRL

Lors de notre étude du développement des compétences de modélisation, nous sommes aussi interrogés sur l'importance et la place donnée à l'enseignement dans une société fondée principalement sur des aspects économiques. Il nous semble donc opportun de porter le regard sur cette question et d'éveiller l'intérêt des gouvernements qui se sont toujours investis dans les secteurs industriels.

Lors d'échanges avec quelques personnes travaillant dans le domaine spatial, nous avons pris conscience de l'utilisation massive d'une échelle standardisée TRL 'Technological Readiness level', pour évaluer la maturité d'une technologie donnée [125-126]. Cette progression dans la maturité va des principes de base à des niveaux de mise en application de plus en plus performants et larges (proof-of-concept, échelle du laboratoire, prototype industriel, système complet en environnement industriel compétitif). Une analogie avec les compétences scientifiques à acquérir par un élève nous semblent suivre une évolution analogue, des principes de base aux problèmes complexes en milieu réel en passant par des applications plus ciblées. La première chose à laquelle nous avons alors pensé, est l'échelle de Bloom. En effet, celui-ci propose un modèle pédagogique doté d'une classification des niveaux d'acquisition des connaissances. Les objectifs d'apprentissage du domaine cognitif sont ainsi classés en six niveaux. Afin de reprendre l'analogie avec l'échelle TRL, nous avons élaboré une série de niveaux de capacités, entre autres de modélisation, destinée à évaluer le niveau de maturité du "produit" qui dans ce cas est l'élève. Ce dernier doit s'adapter, évoluer dans l'acquisition de compétences bien précises et atteindre une certaine maturité au niveau du raisonnement scientifique. Le fait d'atteindre différents niveaux dans cette échelle graduelle, permet d'assurer la transmission d'un raisonnement logique chez l'élève au cours d'une séquence d'apprentissage.

Par conséquent, les connaissances scientifiques doivent aller au-delà de la mémorisation des faits, des équations et des procédures. Elles doivent dépasser les limites d'une connaissance déclarative et contribuer au développement d'une connaissance applicable et contextualisable. Cela signifie que les élèves doivent développer des compétences de raisonnement logiques et approfondis, 'any cognitive activities that are beyond the stage of understanding and lower level application according to Bloom's taxonomy' (Zohar, 2004, pp. 1–2) [127].

Les différentes compétences acquises peuvent jouer un rôle pour stimuler les différents types d'intelligence de chaque élève. Cette théorie de Gardner [128], permet de mobiliser un maximum de compétences dont les individus disposent pour résoudre différents types de problèmes.

Le dernier chapitre de notre thèse (chapitre 5) présente les résultats d'une expérimentation préliminaire impliquant l'échelle d'évaluation TRL. Il propose une première analyse des avantages identifiés et des difficultés rencontrées et ouvre la voie à quelques perspectives prometteuses.

6 Références

- [1] Brousseau, G. (2013). Introduction à l'ingénierie didactique [en ligne] <http://guy-brousseau.com/2760/introduction> (consulté en 29 août 2023).
- [2] Solar, L. (2019). Introduction à l'épistémologie. Paris, Ellipses.
- [3] Espagnat, B. (1994). Le réel voilé. Analyse des concepts quantiques, Fayard, Le temps des sciences (Paris).
- [4] Rey, A. (2010). Dictionnaire historique de la langue française, Editions Le Robert (Paris).
- [5] Kermen, I. & Méheut, M. (2009). Different models used to interpret chemical changes: analysis of a curriculum and its impact on French students' reasoning. *Chemistry Education Research and Practice*, 10, 24-34.
- [6] Tiberghien, A., Psillos, D. & Koumaras, P. (1995). Physics instruction from epistemological and didactical bases. *Instructional Science*, 22, 423-434.
- [7] Walliser, B. (1977). Systèmes et modèles, Seuil (Paris).
- [8] Sensevy, G., Tiberghien, A., Santini, J., Laubé, S. & Griggs, P. (2008). An Epistemological Approach to Modeling: Cases studies and implications for science teaching. *Science Education*, 92, 424-446.
- [9] Cartwright, N. (1983). How the laws of physics lie, Oxford University Press (Oxford).
- [10] Kuhn, T.S. (1962, 1996). The Structure of Scientific Revolutions, The University of Chicago Press (Chicago).
- [11] Justi, R. & Gilbert, J. (2003). Teachers' views on the nature of models. *International Journal of Science Education*, 25, 1369-1386.
- [12] Lopes, J. B. & Costa, N. (2007). The Evaluation of Modelling Competences: Difficulties and potentials for the learning of the sciences. *International Journal of Science Education*, 29, 811-85.
- [13] Van Driel, J.H. & Verloop, N. (1999). Teachers' knowledge of models and modelling in science *International Journal of Science Education*, 21, 1141-1153.
- [14] Abd-El-Khalick, F. & Ledermann, N.G. (2000). Improving science teachers' conceptions of nature of science: a critical review of the literature. *International Journal of Science Education*, 22, 665-701.
- [15] Vázquez-Alonso, A., García-Carmona, A., Manassero-Mas, M.A. et Bennàsar-Roig, A. (2013). Science teachers' thinking about the nature of science: A new methodological approach to its assessment. *Research in Science Education*, 43, 781-808.
- [16] Morin, E. (1986). La méthode 3. La connaissance de la connaissance, Editions du Seuil (Paris).
- [17] Leyh, B., Avitabile, G. et Kelly, O. (2015) Designing Courses on Nature of Science and History of Science (Chapter 11), In Maciejowska, Iwona; Byers, Bill (Eds.) A Guidebook of Good Practice for the Pre-Service Training of Chemistry Teachers. Published by Jagiellonian University in Krakow, 223-246, https://www.researchgate.net/publication/311679695_Pre-service_Training_for_Chemistry_Teachers_A_Guidebook_of_Good_Practice
- [18] Giordan, A. (1991). The Importance of Modelling in the Teaching and Popularization of Science. *Impact of science on society*, 164, 321-338.
- [19] Gillespie, R.J. (2012). The VSEPR Model of Molecular Geometry, Dover Publications.

- [20] Phet interactive simulations : <https://phet.colorado.edu/fr/> (consulté le 27 janvier 2024).
- [21] Coll, K., France, B. & Taylor, I. (2005). The role of models/and analogies in science education: implications from research. *International Journal of Science Education*, 27, 183-198.
- [22] Clement, J. (2000). Model based learning as a key research area for science education. *International Journal of Science Education*, 22, 1041-1053.
- [23] Amin, T.G. & Levrini, O. *Converging Perspectives on Conceptual Change. Mapping an Emerging Paradigm in the Learning Sciences*; Eds.; Routledge : London and New York, 2018.
- [24] Schwarz, C.V, et al. (2009). Developing a learning Progression for Scientific Modeling: Making Scientific Modeling Accessible and Meaningful for learners. *Journal of Research in Science Teaching*, 46(6), 632-654.
- [25] Justi,R. & Gilbert, J. (2002). Modelling, teacher's views on the nature of modelling, and implications for the education of modellers. *International Journal of Science Education*, 24, 369-387
- [26] Johnstone, A.H. (2010). You Can't Get There from Here. *Journal of Chemical Education*, 87, 22-29.
- [27] Gobert, J.D. (2000). A typology of causal models for plate tectonics: Inferential power and barriers to understanding. *International Journal of Science Education*, 22, 937-977.
- [28] Harrison, A.G. & Treagust, D.F. (2000). A typology of school science models. *International Journal of Science Education*, 22, 1011-1026.
- [29] Finster, D.C. (1989). Developmental instruction: Part 1. Perry's model of intellectual development. *Journal of Chemical Education*, 68, 659-661.
- [30] Finster, D.C. (1991). Developmental instruction: Part II. Application of the Perry model to general chemistry. *Journal of Chemical Education*, 70, 752-756.
- [31] Pluta, W.J., Chinn, C.A. et Duncan, R.G. (2011). Learners' epistemic criteria for good scientific models. *Journal of Research in Science Teaching*, 48, 486-511.
- [32] Justi, R. & Gilbert, J. (2000). History and philosophy of science through models: some challenges in the case of 'the atom'. *International Journal of Science Education*, 22, 993-1009.
- [33] Prins, G.T., Bulte, A.M.W., Van Driel, J.H. et Pilot, A (2008). Selection of authentic modelling practices as contexts for chemistry education. *International Journal of Science Education*, 30, 1867-1890.
- [34] Merzyn, G. (2008). *Naturwissenschaften, Mathematik, Technik – immer unbeliebter?* Schneider Verlag Hohengehren (Baltmannsweiler).
- [35] France, B. (2000). Biotechnology teaching models: what is their role in technology education? *International Journal of Science Education*, 22, 1027-1039.
- [36] Rau, M.A. (2017). Conditions for the effectisness of multiple visual representations in enhancing STEM learning. *Educational Psychology Teview*, 29(4), 717-761
- [37] Carey, S. (2000). Science Education as Conceptual Change. *Journal of Applied Developmental Psychology*, 21(1):13-19.
- [38] Read, J. R. (2004). Children's Misconceptions and Conceptual Change in Science Education, 1–21. Available from <http://acell.chem.usyd.edu.au/Conceptual-Change.cfm> (consulté en 27 janvier 2021).

- [39] Posner, G. J., Strike, K. A., Hewson, P. W., Gertzog, W. A. (1982). Accommodation of a scientific conception: Toward a theory of conceptual change. *Science Education* 66(2), 211-227.
- [40] Vosniadou, S. (1994). Capturing and modeling the process of conceptual change. *Learn. Instr.* 4, 1, 45-69.
- [41] Tyson, M., L, Venville, J., G., Harrison, A., G. & Treagust, D., F. (1997). A Multidimensional Framework for Interpreting Conceptual Change Events in the classroom. *Science Education*, 81, 387–404.
- [42] Beerenwinkel, A. Parchmann, I. and Gräsel, C. (2011). Conceptual change texts in chemistry teaching: A study on the particle model of matter_ *Int. Journal of Science and Mathematics Education*, 9, 1235-1259
- [43] Heddy, B. C. et al. (2018). Developing and validating a Conceptual Change Cognitive Engagement instrument. *Frontiers of Education*, 3, 43.
- [44] Swafiyah, B., Muhammad, B. A., Yamusa, A. Z. (2023). Effect of Conceptual Change Instructional Strategy on Chemistry Students' Performance in Acids and Bases Concepts. *Asean Journal for Science Education*, 21,47-54.
- [45] Sendur, G. and Toprak, M. (2013). The role of conceptual change texts to improve students' understanding of alkenes, *Chem. Educ. Res. Pract.*, 2, 13, 14, 431-449.
- [46] Eymur, G. & Geban, Ö. (2017). The Collaboration of Cooperative Learning and Conceptual Change: Enhancing the Students' Understanding of Chemical Bonding Concepts, *International Journal of Science and Mathematics Education*, 15, 853–871.
- [47] Wu, M-Y. M. and Yezierski, E., J. (2023). Secondary chemistry teacher learning: precursors for and mechanisms of pedagogical conceptual change, *Chem. Educ. Res. Pract.*, 2023,24, 245-262.
- [48] Karonen, M., Murtonen, M., Södervik, I., Manninen, M. et Salomäki, M. (2021). Heuristics Hindering the Development of Understanding of Molecular Structures in University Level Chemistry Education: The Lewis Structure as an Example. *Educ. Sci.* 2021, 11 (6), 258.
- [49] Salame, I. et Casino, P. (2021). Using Chemistry Concepts Inventory to Identify Alternative Conceptions and Their Persistence in General Chemistry Courses. *International Journal of Instruction*, 14, 3, 787-806.
- [50] Taber, K.S. (2019). Alternative Conceptions and the Learning of Chemistry. *Isr. J. Chem.* 59, 450 – 469.
- [51] Criswell B.A. and Rushton, G. T. (2012). Conceptual Change, Productive Practices, and Themata: Supporting Chemistry Classroom Talk. *J. Chem. Educ.* 89, 10, 1236–1242.
- [52] Çalik, M., Ayas, A. & Coll, R. K. (2009). Investigating the Effectiveness of an Analogy Activity in Improving Students' Conceptual Change for Solution Chemistry Concepts. *Int. J. Sci. Math. Educ.* 7, 651–676.
- [53] Özmen, H. (2007). The effectiveness of conceptual change texts in remediating high school students' alternative conceptions concerning chemical equilibrium. *Asia Pacific Educ. Rev.* 8, 413–425.
- [54] Demircioğlu, G., Ayas, A. and Demircioğlu, H. (2005). Conceptual change achieved through a new teaching program on acids and bases. *Chemistry Education Research and Practice*, 6 (1), 36-51.

- [55] Fethiye, K. B., Alipaşa, A. et Muammer, Ç. (2020). Effects of a 5Es learning model on the conceptual understanding and science process skills of pre-service science teachers: The case of gases and gas laws. *Journal of the Serbian Chemical Society*, 85, 4, 559-573.
- [56] Treagust, D. F., Chittleborough, G., & Mamiala, T. L. (2002). Students' Understanding of the Role of Scientific Models in Learning Science. *International Journal of Science Education*, 24, 357-368.
- [57] Maia, P. F. & Justi, R. (2009). Learning of Chemical Equilibrium through Modelling-based Teaching. *International Journal of Science Education*, 31 (5), 603-630.
- [58] Jiang, H. Lu, Y. ant Bi, H. (2020). Modeling Teaching in Study of Galvanic Cells: Upper Secondary School Context. *Journal of Baltic Science Education*, 19 (6) 972-988.
- [59] Tasker, R. (2016). ConfChem Conference on Interactive Visualizations for Chemistry Teaching and Learning: Research into Practice Visualizing the Molecular World for a Deep Understanding of Chemistry. *J. Chem. Educ.* 93, 6, 1152-1153.
- [60] Mendonça, P. C. C. and Justi, R. (2014). An instrument for analyzing arguments produced in modeling-based chemistry lessons. *J. Res. Sci. Tech.* 51, 2, 192-218.
- [61] Devetak, I. Hajzeri, M., Glažar, S.A. and Vogrinc, J. (2010). The influence of different models on 15-years-old students' understanding of the solid state of matter. *Acta Chimica Slovenica*, 57 (4), 904-911.
- [62] Strike, K. A., and Posner, G. J. (1992). A revisionist theory of conceptual change. In Duschl, R. A., and Hamilton, R. J. (Eds.), *Philosophy of Science, Cognitive Psychology, and Educational Theory in Practice*, State University of New York Press, Albany, NY, 147-176.
- [63] Souza, K. Ap F. D. and Porto, P. A. (2012). Chemistry and Chemical Education Through Text and Image: Analysis of Twentieth Century Textbooks Used in Brazilian Context. *Sci & Educ*, 21:705-727.
- [64] Scalco, K. C., Talanquer, V., Kiill, K. B. and Cordeiro., M. R. (2018). Making Sense of Phenomena from Sequential Images versus Illustrated Text. *J. Chem. Educ.* 95, 3, 347-354.
- [65] Vojří, K. and Rusek, M. (2022). Of teachers and textbooks: lower secondary teachers' perceived importance and use of chemistry textbook components, *Chem. Educ. Res. Pract.* 23, 786-798.
- [66] Valk, T., Driel, J. H., & Vos, W. (2007). Common Characteristics of Models in Present-day Scientific Practice. *Research in Science Education*, 37(4), 469-488.
- [67] Bresson, F. (1975). Réflexions sur les systèmes de représentation, *Média.* 73-74, 7-13.
- [68] Peraya, D. & Nyssen, D.C. (1995). Les paratextes dans les manuels scolaires de biologie et d'économie. Une étude comparative. Université de Genève : Cahier n°78.
- [69] [en ligne] <http://communicationorganisation.revues.org/1873?lang=en> (consulté en 22 janvier 2024).
- [70] Vers une théorie des paratextes : images mentales et images maternelles : http://sites.uclouvain.be/grems/pdf/articles/peraya_paratexte1995.pdf (consulté en 3 avril 2016).
- [71] Arnould, P. (1984). Signes et discours dans l'éducation dans l'éducation et la vulgarisation scientifique, z'éditions, 107-115.
- [72] Vezin, F. & Vezin, L. (1985). *Bulletin de psychologie*, XXXXVIII, 368, 71-80.

- [73] Jacobi, D. (1984). Figures et figurabilité de la science dans les revues de vulgarisation scientifique, *Langages*, 75, 23-41.
- [74] Giordan A., Guichard F. & Guichard J. (2001). Des idées pour apprendre. Nice : Z-Editions. Delagrave.
- [75] Tiberghien A. (2002). Des connaissances naïves au savoir scientifique. Lyon : Université Lumière Lyon 2.
- [76] Brousseau, G. (1996). « Fondements et méthodes de la didactique des mathématiques » in J. Brun (dir.), *Didactique des mathématiques*, Lausanne, Delachaux et Niestlé, p. 45-143.
- [77] Artigue, M. (1988). Ingénierie didactique. *Recherches en Didactique des Mathématiques*, 9 (3), 281-308.
- [78] Sanchez, E. et Monod-Ansaldi, R. (2015). Recherche collaborative orientée par la conception. *Education et didactique*, 9 (2), 73-94.
- [79] Edutechwiki [en ligne] https://edutechwiki.unige.ch/fr/Ingénierie_didactique (consulté en 22 janvier 2024).
- [80] Molvinger, K. Lautier, G. et Ayrat, R.-M. (2021). Using Games to Build and Improve 10th Grade Students' Understanding of the Concept of Chemical Bonding and the Representation of Molecules. *J. Chem. Educ.*, 98, 319-329.
- [81] Canu, M., Duque, M. et de Hosson, C. (2017). Active Learning session based on Didactical Engineering framework for conceptual change in students' equilibrium and stability understanding. *European Journal of Engineering Education*, 42 (1), 32-44.
- [82] Chang, C.-Y. & Barufaldi, J. P. (1999). The use of a problem-solving-based instructional model in initiating change in students' achievement and alternative frameworks. *International Journal of Science Education*, 21(4), 373–388.
- [83] Karlotoglou, P., Koumaras, P. & Psillos, D. (1995). Différenciation conceptuelle : un enseignement d'hydrostatique, fondé sur le développement et la contradiction des conceptions des élèves, 63–90.
- [84] Méheut, M. & Psillos, D. (2007). Teaching–learning sequences: aims and tools for science education research. *International Journal of Science Education*, 26 (5), 515–535.
- [85] Acar, B. & Tarhan, L. (2007). Effects of Cooperative Learning on Students' Understanding of Metallic Bonding. *Research in Science Education*, 38(4), 401–420.
- [86] Yalçinkaya, E., Taştan-Kırık, Ö., Boz, Y., & Yıldırım, D. (2012). Is case-based learning an effective teaching strategy to challenge students' alternative conceptions regarding chemical kinetics? *Research in Science & Technological Education*, 30(2), 151–172.
- [87] Chairam, S., Somsook, E., & Coll, R. K. (2009). Enhancing Thai students' learning of chemical kinetics. *Research in Science & Technological Education*, 27(1), 95–115.
- [88] Case, J. M., & Fraser, D. M. (1999). An investigation into chemical engineering students' understanding of the mole and the use of concrete activities to promote conceptual change. *International Journal of Science Education*, 21(12), 1237–1249.
- [89] Morge, L. et Boilevin, J.-M. (2007). Séquences d'investigation en physique-chimie, Collège, Lycée. Clermont-Ferrand: CRDP d'Auvergne.
- [90] Magnusson S., Krajcik J. and Borko H. (1999). Nature, sources and development of pedagogical content knowledge for science teaching, in Gess-Newsome J. and

- Lederman N. G. (ed.), Examining pedagogical content knowledge: the construct and its implications for science education, Boston: Kluwer, pp. 95–132.
- [91] Nahum, T. L., Mamlok-naaman, R. & Hofstein, A. V. I. (2007). Developing a New Teaching Approach for the Chemical Bonding Concept Aligned With Current Scientific and Pedagogical Knowledge, 579–603.
- [92] Jesoph, J., Hesse, III, Charles, W.-A (1992). Students' conceptions of chemical change. *Journal of Research in Science Teaching*, 29, 3, 277-299.
- [93] Justi, R., Teaching and Learning Chemical Kinetics in Gilbert, J.K., De Jong, O., Justi, R., Treagust, D. et Van Driel, J.V., *Chemical Education: Towards Research-based Practice*, 2002, Dordrecht (Netherlands), Kluwer Academic Publishers, 2002, 293-315.
- [94] Gilbert, J. K. (2004). Models and Modelling: Routes to More Authentic Science Education. *International Journal of Science and Mathematics Education*, 2 (2), 115–130.
- [95] Bowen, C.W. (1998). Item design considerations for computer-based testing of student learning in chemistry. *Journal of Chemical Education*, 75, 1172–1175.
- [96] Abraham, M.R., Williamson, V.M., & Westbrook, S.L. (1994). A cross-age study of understanding five chemistry concepts. *Journal of Research in Science Education*, 31, 147–165. Ahtee, M. & Varjola, I. (1998). Students' understanding of chemical reactions. *International Journal of Science Education*, 20, 305–316.
- [97] Haider, A.H. & Abraham, M.R. (1991). A comparison of applied and theoretical knowledge of concepts based on particulate nature of matter. *Journal of Research in Science Teaching*, 28, 919–938.
- [98] Ardac, D. & Akaygun, S. (2004). Effectiveness of multimedia-based instruction that emphasizes molecular representations on students' understanding of chemical change. *Journal of Research in Science Teaching*, 41(4), 317–337.
- [99] Gabel, D. (1996) The complexity of chemistry: Research for teaching 21st century. Paper presented at the 14th international conference in chemical education. Brisbane, Australia.
- [100] Harrison, A. & Treagust, D.F. (2000). Learning about atoms, molecules, and chemical bonds: A case study of multiple-model use in grade 11 chemistry. *Science Education*, 84, 352–381.
- [101] Taber, K.S. (2002). *Chemical misconception: Prevention, diagnosis, and cure: Vol. 1, Theoretical background*. London: Royal Society of Chemistry
- [102] Johnstone, A.H. (1991). Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem. *Journal of Computer Assisted Learning*, 7, 75–83.
- [103] Robinson, W. (2003). Chemistry problem-solving: Symbol, macro, micro, and process aspects. *Journal of Chemical Education*, 80, 978–982.
- [104] Tsapralis, G. (1997). Atomic and molecular structure in chemical education: A critical analysis from various perspectives of science education. *Journal of Chemical Education*, 74, 922–925.
- [105] Frailich, M., Kesner, M. & Hofstein, A. (2009). Enhancing students' understanding of the concept of chemical bonding by using activities provided on an interactive website. *Journal of Research in Science Teaching*, 46(3), 289–310.

- [106] Brooks, J.G. & Brooks, M.G. (1993). In search of understanding: The case for constructivist classrooms. Alexandria, VA: Association for Supervision and Curriculum Development.
- [107] Choi, H. J. & Johnson, S. D (2005). The Effect of Context-Based Video Instruction on Learning and Motivation in Online Courses. *American Journal of Distance Education*, 19, 215.
- [108] Domingues, L., Rocha, I., Dourado, F., Alves, M. & Ferreira, E. C. (2010). Virtual laboratories in (bio)chemical engineering education. *Education for Chemical Engineers*, 5(2), e22–e27.
- [109] Martinez-Jimenez, P., Pontes-Pedrajas, A., Polo, J. and Climent-Bellido, M.S. (2003). Learning in chemistry with virtual laboratories. *Journal of Chemical Education*, 80(3): 346–352
- [110] Woodfield, B.F., Andrus, M.B., Waddoups, G.L., Moore, M.S., Swan, R., Allen, R., Bodily, G., Andersen, T., Miller, J., Simmons, B. and Stanger, R. (2005). The virtual chem lab project: a realistic and sophisticated simulation of organic synthesis and organic qualitative analysis. *Journal of Chemical Education*, 82(11): 1728–1735.
- [111] Dalgarno, B., Bishop, A.G., Adlong, W. and Bedgood, D.R., Jr. (2009). Effectiveness of a virtual laboratory as a preparatory for distance education chemistry students. *Computers & Education*, 53: 853–865.
- [112] McClean, S., McCartan, K. G., Meskin, S., Gorges, B. & Hagan, W. P. (2016). Reflections on “YouTestTube.com”: An Online Video-Sharing Platform To Engage Students with Chemistry Laboratory Classes. *Journal of Chemical Education*, 93(11), 1863–1870.
- [113] McClean, S. & Hagan, W. P. (2010). ‘YouTestTube.com’: Using user-generated video to engage students. *Perspectives on Pedagogy and Practice*, 1, 33–39.
- [114] Madge, C.; Meek, J., Wellens, J. & Hooley, T. (2009). Facebook, social integration and informal learning at university: ‘It is more for socialising and talking to friends about work than for actually doing work’. *Learning, Media and Technology*, 34, 141–155.
- [115] Hensiek, S., De Korver, B. K., Harwood, C. J., Fish, J., O’Shea, K. & Towns, M. (2016). Improving and Assessing Student Hands-On Laboratory Skills through Digital Badging. *Journal of Chemical Education*, 93(11), 1847–1854.
- [116] Zhang, J., Chen, Q. Sun, Y. & Reid, D. J. (2004). Triple scheme of learning support design for scientific discovery learning based on computer simulation: experimental research, (c), *Journal of Computer Assisted Learning*, 20, 269–282.
- [117] Ribosa, J. & Duran, D. (2023). Students’feelings of Social Presence when Creating Learning-by-Teaching Educational Videos for a Potential Audience. *International Journal of Education Research*, 117, 102128.
- [118] Kasneci, E., Sessler, K., Küchemann, S., Bannert, M., Dementieva, D., Fischer, F., Gasser, U., Groh, G., Günemann, S., Hüllermeier, E., Krusche, S., Kutyniok, G., Michaeli, T., Möller, R., Montavon, G., Müller, K.-R., Nutzinger, A., Reich, C., Schmid, U., Seidel, T. & Kasneci, G. (2023). ChatGPT for good? On opportunities and challenges of large language models for education. *Learning and Individual Differences*, 103, 102274.

- [119] Cooper, G. (2023). Examining science education in ChatGPT: An exploratory study of generative artificial intelligence. *Journal of Science Education and Technology*, 32(3), 444-452.
- [120] Zawacki-Richter, O., Marín, V. I., Bond, M. & Gouverneur, F. (2019). Systematic review of research on artificial intelligence applications in higher education, where are the educators? *International Journal of Educational Technology in Higher Education*, 16, 39.
- [121] De Jong T. & Van Joolingen W.R. (1998) Scientific discovery learning with computer simulations of conceptual domains. *Review of Educational Research*, 68, 179–201.
- [122] Lee J. (1999). Effectiveness of computer-based instructional simulation: a meta-analysis. *International Journal of Instructional Media*, 26, 71–85.
- [123] Zhang J. (2000). Simulation-based scientific discovery learning: the internal conditions and the facilitative learning supports. PhD Dissertation, submitted to Beijing Normal University, China.
- [124] Ghirardi, M., Marchetti, F., Pettinari, C., Regis, A. & Roletto, E. (2014). A Teaching Sequence for Learning the Concept of Chemical Equilibrium in Secondary School Education. *Journal of chemical Education*, 91, 1, 59-65.
- [125] Lam, S., Chiang, J. & Parasuraman, A. (2008). The effects of the dimensions of technology readiness on technology acceptance: an empirical analysis. *Journal of International Marketing*, 22, 19-39.
- [126] Walczuch, R., Lemmink, J. & Streukens, S. (2007). The effect of service employees' technology readiness on technology acceptance. *Information & Management*, 44, 206-215.
- [127] Zohar, A. (2004). Higher order thinking in science classrooms: Students' learning and teachers' professional development. Dordrecht, the Netherlands: Kluwer.
- [128] Gardner, H., (1983). *Frames of mind*, New York, Basic Books.

Chapitre 2 : Perspectives didactiques de la modélisation schématique en chimie

Sommaire

1 Cadre de la recherche	73
2 Analyse de modèles schématiques proposés dans des manuels scolaires.....	76
2.1 Critères d'analyse des modèles schématiques.....	76
2.2 Applications : quelques exemples d'illustrations dans les manuels scolaires de chimie	
78	
2.3 Conclusions de cette analyse.....	100
3 Références.....	104
4 Article scientifique publié	106
4.1 Résumé	106
4.2 Abstract	107

1 Cadre de la recherche

Ce chapitre se focalise sur un type d'outil pédagogique très souvent utilisé dans le contexte de l'enseignement et de l'apprentissage et que nous appellerons *modèles schématiques*, car ils ont, comme nous allons le voir, des caractéristiques communes avec les modèles scientifiques définis et discutés dans le chapitre précédent mais en présentent le contenu sous une forme iconique. Il s'agit en effet d'images représentant graphiquement une structure ou un phénomène (chimique dans notre cas, par exemple, la dissolution d'un sel dans l'eau) et pourvues d'annotations explicatives (légende des symboles et équations chimiques).

Ces représentations sont schématiques et donc simplifiées volontairement pour éliminer tout aspect considéré comme contingent ou non essentiel (principe de parcimonie) [1-2]. Elles combinent une dimension descriptive dans la mesure où les principaux aspects de la situation expérimentale sont schématisés (bécher, précipité, etc.) de telle manière qu'une ressemblance avec la réalité macroscopique soit aisément perçue, et une dimension explicative, idéalement au niveau submicroscopique des particules impliquées (atomes, molécules, ions, et électrons),

dans la mesure où le comportement (mouvements et interactions) de ces particules est suggéré si cela est jugé pertinent.

Des distorsions d'échelle – les atomes ne sont pas représentés à la même échelle que, par exemple, le bécher – sont inévitables et souvent implicites, nécessitant des compétences spécifiques de lecture et d'interprétation de la part des apprenants. L'absence de telles compétences peut entraver leur compréhension au cours du processus d'apprentissage. L'interprétation et la production de tels modèles schématiques impliquent de mobiliser les trois niveaux décrits par le triangle de Johnstone : macroscopique, submicroscopique et symbolique [3]. Le rôle explicatif du niveau submicroscopique, qui se concentre sur les particules invisibles et leurs interactions, est central.

Différentes études, entre autres par Eilks et ses collaborateurs [4-5], mettent en avant l'importance de la visualisation, tant statique que dynamique, au niveau submicroscopique, non seulement pour renforcer la compréhension des concepts mais aussi pour induire, si nécessaire, un conflit cognitif en présence de conceptions alternatives, étant donné qu'une approche expérimentale ciblant le niveau en question n'est pas accessible dans l'enseignement secondaire. Ces auteurs discutent néanmoins, exemples à l'appui, un certain nombre de dangers liés à la manière dont les élèves lisent et s'approprient ces représentations visuelles étant donné que, dans une perspective d'apprentissage constructiviste, celles-ci sont nécessairement interprétées à partir des conceptions, scientifiquement admises ou alternatives, que les élèves ont déjà construites soit par leur expérience courante, soit dans le cadre de leurs apprentissages antérieurs. Il est donc essentiel que les modèles graphiques proposés ne créent ni ne renforcent des conceptions alternatives.

Ce chapitre est divisé en deux parties. L'objectif de la première partie est de mener une analyse didactique de différents modèles schématiques sélectionnés dans des supports scolaires (enseignement secondaire) et de niveau premier bachelier (belges, français et allemands) auxquels nous avons eu accès (10 manuels belges, 5 manuels français et 1 manuel allemand). Il s'agit d'abord de déterminer la qualité et l'exactitude des modèles proposés aux apprenants, puis d'analyser comment les faiblesses de certaines schématisations peuvent engendrer des conceptions erronées

susceptibles de rendre l'apprentissage ultérieur plus difficile. Par rapport aux travaux antérieurs de Eilks et al.,[4-5] nous avons cherché à proposer une analyse aussi systématique que possible en identifiant une série de critères évaluant les ressources iconographiques proposées aux élèves : pertinence analogique, absence d'obstacle substantialiste, propriétés fonctionnelles, cohérence avec les modèles reconnus par la communauté scientifique, capacité prédictive et valeur esthétique. Nous avons appliqué cette démarche à une série de figures relatives à la structure corpusculaire de la matière, à laquelle le programme de chimie accorde une importance prépondérante dès le début du cursus (3^e année secondaire, grade 9).

A la suite de cette analyse que l'on pourrait qualifier d'*a priori*, la seconde partie envisage le problème sous l'angle quasi-expérimental [6] et cherche à examiner dans quelle mesure les élèves des trois dernières années de l'enseignement secondaire maîtrisent les compétences nécessaires pour, d'une part, interpréter un modèle schématique de référence, proposé par exemple dans un manuel, et, d'autre part, créer de manière autonome un tel modèle pour décrire un phénomène chimique. Plus précisément, les trois questions de recherche suivantes sont abordées :

- comment les capacités des élèves à analyser, c'est-à-dire à interpréter et à extraire des informations à partir de modèles schématiques de référence évoluent-elles entre la 4^e et la 6^e année de l'enseignement secondaire général ?
- comment les élèves passent-ils progressivement d'une description macroscopique d'un phénomène à une interprétation basée sur un modèle au niveau moléculaire ?
- existe-t-il une corrélation entre la capacité à interpréter une représentation schématique de référence et les compétences de modélisation autonome ?

Cette recherche a été publiée et l'article en question constitue la seconde partie du chapitre.

2 Analyse de modèles schématiques proposés dans des manuels scolaires

2.1 Critères d'analyse des modèles schématiques

Afin d'évaluer de manière systématique la qualité des différents modèles schématiques sélectionnés, nous avons identifié six critères que nous décrivons ci-dessous en mentionnant également leur relation avec les caractéristiques générales des modèles explicitées au chapitre 1 (section 1.3)

- Pertinence analogique :

Considérée comme un moyen de faciliter la compréhension des élèves, la schématisation analogique peut concrétiser des concepts abstraits, les rendre ainsi plus compréhensibles et permettre aux élèves de se construire un schéma mental adéquat. Mais, pour que cette méthode porte ses fruits, il faut créer une analogie appropriée et l'accompagner d'une explication structurée en étant conscient que l'usage d'analogies peut aussi causer l'apparition d'obstacles épistémologiques [7]. Il s'agira donc de vérifier si les analogies, c'est-à-dire les relations entre l'image et la cible que l'image est censée représenter sont évidentes et en quoi elles se réfèrent aux acquis antérieurs des élèves. Ce critère est en relation directe avec plusieurs des propriétés générales d'un modèle : création humaine dont le premier but est descriptif et qui entrevoit des relations de similarité entre deux situations différentes, par exemple une analogie entre niveaux macro- et submicroscopiques, relation nécessairement simplificatrice mais permettant de proposer des explications, voire des prédictions.

- Absence d'obstacle substantialiste

Un modèle schématique est censé représenter une cible qui peut être un objet vu en tant que tel (aspect statique) ou un phénomène (aspect dynamique). Si, en physique, il nous semble que les interactions prennent le pas sur les aspects plus matériels, dans le conscient et l'inconscient des chimistes, par contre, les aspects liés au concept de substance restent primordiaux. L'atome ou la molécule sont vues comme des briques constitutives de la matière. Les liaisons chimiques sont illustrées ou matérialisées comme des tiges ou des ressorts qui lient les atomes de modèles moléculaires.

La question qui se pose alors peut être formulée ainsi : dans quelle mesure le schéma proposé représente-t-il fidèlement à l'échelle, tant qualitativement que quantitativement et sans verser dans une vision substantialiste excessive [7], la réalité submicroscopique dont on espère favoriser l'appréhension par les élèves ? En particulier, les interactions et les mouvements moléculaires sont-ils suggérés de manière suffisamment explicite dans ces modèles schématiques ? Ces aspects sont essentiels car ils gouvernent l'énergie associée aux phénomènes, dans ses deux composantes : énergie potentielle (interactions) et énergie cinétique (mouvements des particules). On voit qu'ici c'est toute la fonction explicative du modèle qui est interrogée, puisque les explications en chimie reposent en bonne partie sur l'interprétation submicroscopique.

- **Aspect fonctionnel : mise en évidence de relations**

Si, en sciences, les relations entre grandeurs scientifiques sont exprimées de manière la plus rigoureuse en langage mathématique, la tendance est de plus en plus, dans l'enseignement secondaire, à contourner l'obstacle formel des mathématiques en utilisant une schématisation dont on espère – naïvement ? – qu'elle atteindra plus aisément le même but. On pourra ainsi représenter graphiquement l'évolution de l'électronégativité à travers le tableau périodique. Face à un schéma scientifique, nous nous posons dès lors la question : représente-t-il de manière satisfaisante, tant scientifiquement que didactiquement parlant, les relations qu'il cible ? On voit que cet aspect fonctionnel est également directement relié à la fonction explicative d'un modèle.

- **Capacité prédictive**

Il s'agit ici d'évaluer la capacité d'une schématisation à prédire correctement d'autres faits que ceux représentés, éventuellement de façon simplement qualitative (évolution de grandeurs physiques, par exemple). Cette capacité est évidemment en lien direct avec l'aspect fonctionnel qui établit des relations entre grandeurs.

- **Lien avec des modèles reconnus**

Comme nous l'avons discuté précédemment, tout modèle et donc aussi tout modèle schématique simplifie le réel pour l'appréhender de manière efficace. Les modèles présentés dans les ouvrages scolaires sont souvent adaptés à des fins

didactiques, que Justi et Gilbert [8] désignent comme « teaching models ». Il faut donc évaluer si les simplifications proposées sont adéquates et clairement identifiables et si elles correspondent à des modèles scientifiques reconnus.

- **Valeur esthétique**

La valeur esthétique des images ne contribue pas seulement à l'attrait visuel d'un manuel. Elle confronte l'élève à une expérience de perception qui le plonge dans le monde de la représentation et complète l'approche purement pragmatique de l'enseignement des sciences [9]. Une esthétique trop prégnante peut toutefois parfois camoufler la faiblesse des objectifs et des contenus didactiques. A l'opposé, une esthétique rébarbative et surannée mine l'objectif pédagogique. L'image ou le schéma proposé combinent-ils une esthétique attrayante, adaptée à la sensibilité du public contemporain, et un contenu scientifique et didactique authentique ? Cette question n'est pas anodine. Elle est aussi très ancienne.

2.2 Applications : quelques exemples d'illustrations dans les manuels scolaires de chimie

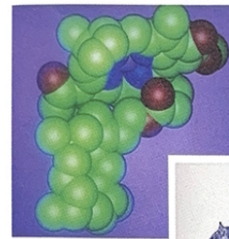
Nous avons sélectionné seize manuels de sciences de l'enseignement secondaire et du début d'études de bachelier et nous avons analysé leurs différents chapitres consacrés à la structure atomique de manière large, afin d'identifier différents schémas qui nous apparaissent discutables. Une fois ces schémas rassemblés, nous les avons classés en trois groupes ; le premier groupe porte sur le modèle corpusculaire, le deuxième groupe est centré sur le modèle atomique, et le dernier regroupe les schématisations du modèle électronique en couche. Afin de ne pas alourdir le texte, nous focaliserons dans chaque cas notre analyse sur les critères qui nous paraissent problématiques.

2.2.1 Le modèle corpusculaire

Le programme de chimie accorde dès le début une place prépondérante à la théorie corpusculaire. La hiérarchie des particules constitutives de la matière (molécule, atome, électron, noyau, proton, neutron, en allant vers le plus élémentaire) et les expériences ayant mené à postuler leur existence sont présentées dès la troisième année (9^e grade), c'est-à-dire dès la rencontre des élèves avec la discipline « chimie ».

Image n°1 : N. Mathys et al. (2003), Sciences 3^e, de boeck (Bruxelles), p. 81, reproduit de Campbell (1998), Biologie, de boeck supérieur (Bruxelles), p.5

a) Modèle de **molécule** de chlorophylle reconstituée en trois dimensions par informatique sur base d'informations obtenues par microscopie électronique. La chlorophylle est une molécule organique.



(a)

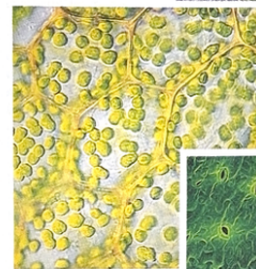
b) **Chloroplaste**, élément de la cellule, observé au microscope électronique. Il est riche en chlorophylle et est le siège de la photosynthèse.



(b)

1 μ m

c) **Cellules** d'une feuille de bouleau observées au microscope électronique.



(c)

10 μ m



(d)

50 μ m

d) Tissu épidermique d'une feuille de bouleau observée au microscope optique.



(e)

e) Feuille de bouleau (**organe**)

f) Tige de bouleau : le tronc



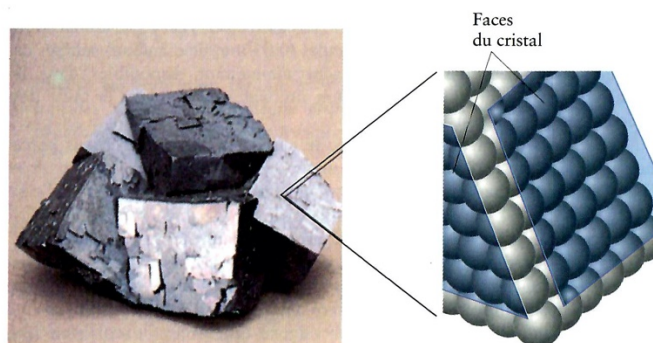
(f)

Le but des auteurs est manifestement ici de mettre en évidence la hiérarchie des niveaux d'organisation depuis la molécule de chlorophylle jusqu'aux objets observables à l'œil nu (feuille ou tige) en passant par les niveaux intermédiaires observables au microscope électronique d'une part et au microscope optique d'autre part.

La difficulté majeure liée à cette figure consiste, à nos yeux, dans la différence entre la première représentation, celle d'un modèle moléculaire de chlorophylle, et les suivantes qui sont des images de microscopie ou des images visibles à l'œil nu.

- (i) Il est certes indiqué que la représentation de la molécule est un modèle obtenu à partir d'expériences de microscopie électronique mais le texte indique que c'est la molécule qui est « reconstituée » et non le modèle qui est construit.
- (ii) La deuxième image représente le résultat d'une observation au microscope électronique. L'élève qui compare les images (a) et (b) éprouvera sans doute des difficultés, sauf si on attire explicitement son attention, à comprendre la différence de statut des deux images. La différence de niveau de représentation entre la molécule (un modèle moléculaire) et les autres images (de microscopie ou simples photographies) pourrait être plus détaillée. L'aspect construit du modèle est en quelque sorte dilué et peu mis en évidence.
- (iii) Les codes de représentation, par exemple l'assimilation des atomes à des sphères et les codes de couleur pour ces atomes ne sont pas explicités. Si la pertinence analogique d'une représentation sphérique des atomes est reconnue, le code de couleurs utilisé tombe dans le piège substantialiste : la majorité des atomes (de carbone et d'hydrogène, en fait) sont représentés en vert – la couleur conventionnelle des atomes de chlore, absent de cette molécule, dans les modèles moléculaires – transmettant le message implicite que ce sont des atomes verts qui constituent la molécule et lui donnent sa couleur, couleur qui apparaît majoritairement dans toutes les images de cette figure, ce qui renforce l'obstacle substantialiste.

Image n°2 : N. Mathys et al. (2004), Sciences 3^e, de boeck (Bruxelles), p.52 (figure reproduite de P.W. Atkins et al (2017). Principes de Chimie, de boeck supérieur)



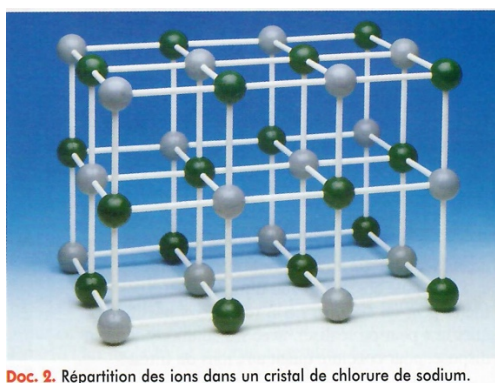
Dans l'exemple de la figure ci-dessus, on se trouve face à un schéma subdivisé en deux parties, à gauche la photographie macroscopique du cristal et à droite l'agrandissement schématique d'une partie de ce cristal et la représentation des atomes constitutifs. La tâche de l'élève est d'établir les liens qui les unissent, de réaliser la transition du niveau visible (macroscopique) au niveau submicroscopique. Les critères les plus pertinents sont ici (i) la pertinence analogique, (ii) le caractère substantialiste et (iii) le caractère prédictif.

- (i) La pertinence analogique repose sur deux aspects : la représentation des atomes par des sphères empilées et la mise en évidence de faces nettes qui établit un pont macroscopique – submicroscopique.
- (ii) Néanmoins, cette représentation n'est pas exempte d'aspects substantialistes. Un tel modèle induit en effet l'image mentale d'un cristal assimilé à un empilement (ici cubique simple, ce qui est loin d'être général) d'atomes représentés comme des sphères – des boules de billard – pleines. Un tel modèle pourra constituer un obstacle lorsqu'il s'agira d'expliquer la liaison et la conduction métallique où les interactions, ignorées ici, jouent un rôle essentiel.
- (iii) On peut donc considérer que l'aspect prédictif de ce modèle schématique est limité. Il permet de prévoir l'aspect macroscopique des faces nettes d'un cristal mais ne permettra pas, parce qu'il se limite à une approche substantialiste, de rendre compte de propriétés fondamentales comme la cohésion et la conduction.

Il est donc essentiel, dans l'exploitation de telles images, de souligner clairement leur aspect de modèle construit dans un but bien précis : si le modèle représenté ici est parfaitement adéquat pour expliquer (ou prévoir) l'apparition de faces nettes sur le cristal macroscopique, ce qui convient à un premier niveau d'enseignement, il se révélera caduc pour expliquer des propriétés électroniques abordées plus tard. Nous évoquons ici un aspect qui nous semble essentiel.

Si on affirme souvent qu'une image vaut mieux qu'un long discours, il nous paraît au contraire que l'image, en particulier l'image scientifique, véhicule trop de présupposés souvent mal assimilés par le néophyte pour qu'on puisse faire l'économie d'une explication discursive de cette image. Si l'image soutient le discours, si elle explore des dimensions complémentaires, si elle parle à l'intelligence visuelle, elle ne peut se concevoir sans un mode d'emploi, sans un guide de lecture.

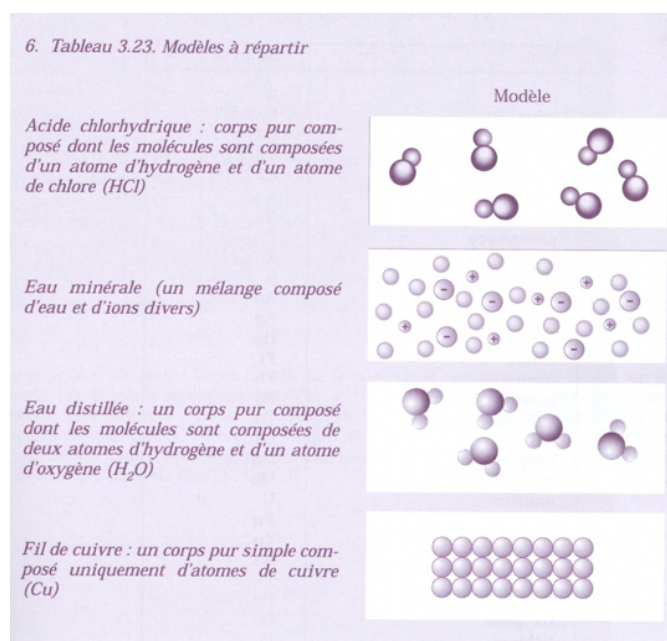
Image n°3 : C. Clavel-Monin et al. (2001), Chimie 1^{re}S, HATIER (Paris), p. 36



Ce modèle schématique représentant la répartition des ions dans un cristal de NaCl permet de faire quelques réflexions concernant (i) l'aspect substantialiste, (ii) l'aspect fonctionnel (mise en évidence de relations), (iii) le lien avec des modèles reconnus et (iv) l'aspect prédictif. Envisageons ces critères à rebours.

- (i) Le schéma permet incontestablement, selon le point de vue choisi, d'expliquer ou de prédire la forme qu'adoptent des cristaux facilement préparés et observés au laboratoire. Il permet aussi de décrire le processus de dissolution. Il représente donc un lien fécond entre la conception particulière et le monde macroscopique.

- (ii) Ce schéma est supposé représenter également une mise en image de concepts bien établis mais qui sont en soi des modèles, car leur définition est conventionnelle : les rayons ioniques. A ce stade, il faut bien constater que le modèle présenté dans l'image en question donne une idée fausse des rayons relatifs des deux ions : 102 pm pour Na^+ et 181 pm pour Cl^- . L'interprétation de l'évolution des rayons ioniques est pourtant une illustration et une application importante du modèle de la structure électronique en couches. Présenter ici aux élèves un modèle qui contredit ce qu'on a expliqué là est regrettable et susceptible de générer des conceptions alternatives. En outre, le fait que les ions Na^+ et Cl^- soient de taille assez différente est justement responsable de la structure du cristal (cubique à faces centrées). Pour des ions de tailles plus voisines, Cs^+ et Cl^- par exemple, une autre structure (cubique simple) apparaît. C'est donc aussi un aspect essentiel du point de vue prédictif. D'où la nécessité de soit respecter les tailles respectives soit, une fois encore, d'accompagner l'image d'un discours explicatif du type : « Ce schéma n'a pas pour ambition de représenter fidèlement les tailles relatives des ions mais seulement leur organisation dans l'espace. »
- (iii) La mise en évidence de relations est ici plus délicate : il s'agit d'une part de visualiser l'organisation spatiale (relations spatiales) et, d'autre part, d'insister sur l'importance des forces électrostatiques pour assurer la cohésion (relations-interactions). Dans l'image, les atomes sont reliés par des traits dont la signification est ambiguë. S'agit-il simplement de guider l'œil pour lui faire bien voir la structure cubique ou s'agit-il de traits de liaison, au sens commun des chimistes, dont on sait qu'ils représentent souvent pour les élèves un obstacle substantialiste, au sens de Bachelard [7], lorsque ces apprenants voient dans la liaison chimique un objet et non le résultat d'interactions ? Ici, encore, on ne peut faire l'économie d'une explication discursive de l'image.

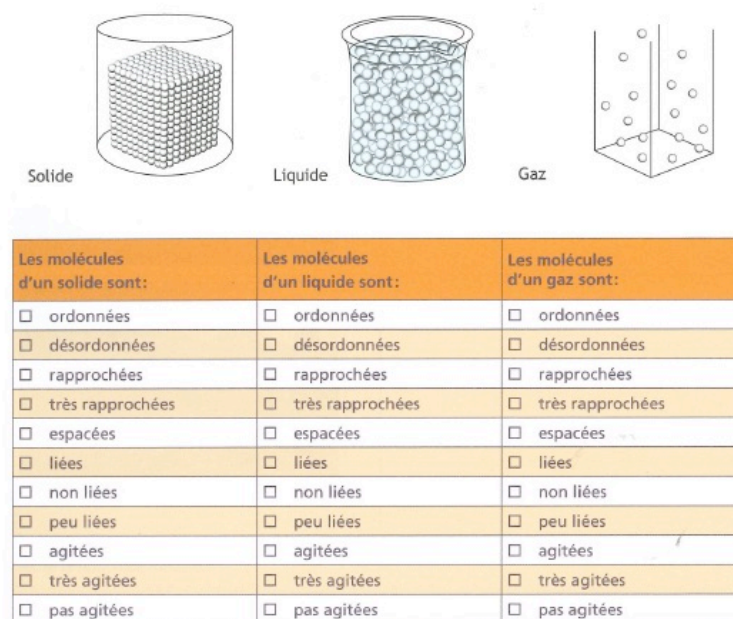


Nous constatons d'abord qu'une légende précise accompagne les modèles schématiques. C'est par contre la manière dont la composante analogique des modèles est traitée qui nous semble ici problématique ainsi que l'aspect substantialiste.

- (i) Les entités submicroscopiques sont décrites, par analogie, comme des sphères rigides mais ces boules de billard désignent tantôt des atomes, tantôt des molécules. On remarque ainsi une incohérence entre la représentation moléculaire des molécules d'eau dans l'eau minérale et distillée : deux modélisations différentes dans une même figure. On comprend que le but des auteurs est, pour l'eau minérale, d'insister sur la notion de mélange alors que pour l'eau pure (distillée), il s'agit de souligner la constitution des molécules. Le changement de registre est toutefois ambigu, comme celui du mot « composé » dans la légende, qui prend des valeurs différentes selon le contexte. Une fois de plus, il importe de bien préciser le niveau de simplification envisagé et le but poursuivi afin que l'élève perçoive qu'une molécule peut tantôt être dessinée comme une sphère, tantôt comme des atomes sphériques connectés.
- (ii) L'aspect substantialiste est ici aussi dominant car aucun mouvement moléculaire ni aucune interaction ne sont suggérés. Cela peut s'expliquer

par le niveau d'études ciblé (3^e année secondaire) mais est néanmoins susceptible d'introduire des conceptions alternatives sur l'origine des différents états d'agrégation et les transitions induites par une modification de température.

Image n°5 : D. Sculier et D. Waterloo (2013), Science 1^e année, de boeck (Bruxelles), p-42

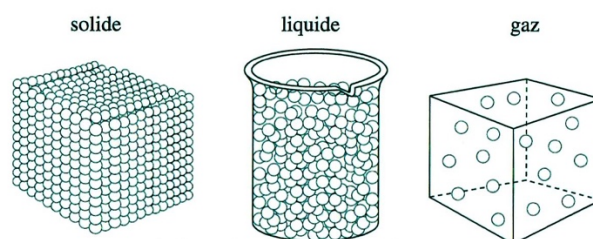


Dans cette schématisation sur les états physiques de la matière (l'eau), les élèves devraient catégoriser l'organisation des molécules dans les trois états de la matière (solide, liquide et gaz). Les deux critères principalement discutables ici sont l'obstacle substantialiste et l'aspect fonctionnel.

- (i) La représentation proposée semble insister sur un aspect des choses : un solide a sa forme et son volume propres, un liquide a un volume propre mais n'a pas de forme propre, un gaz ne possède ni l'un ni l'autre. La représentation des états solide et liquide est toutefois faussée dans la mesure où la différence de masse volumique entre ces deux états d'agrégation est exagérée. Il s'agit d'une erreur très commune dans des manuels élémentaires.
- (ii) Deux aspects essentiels des transitions de phase sont l'évolution de l'agitation moléculaire et l'influence des forces intermoléculaires, que rien ne suggère dans la schématisation proposée, alors que les items à cocher

pour décrire les différents états d'agrégation interrogent l'élève explicitement sur ces deux propriétés. Le problème se situe donc également au niveau de la schématisation, même simplement qualitative, des aspects fonctionnels, c'est-à-dire des relations entre grandeurs physiques, ici la relation entre l'énergie cinétique et la température et l'importance relative de l'énergie cinétique (agitation thermique) et potentielle (interactions intermoléculaires) pour les différents états d'agrégation.

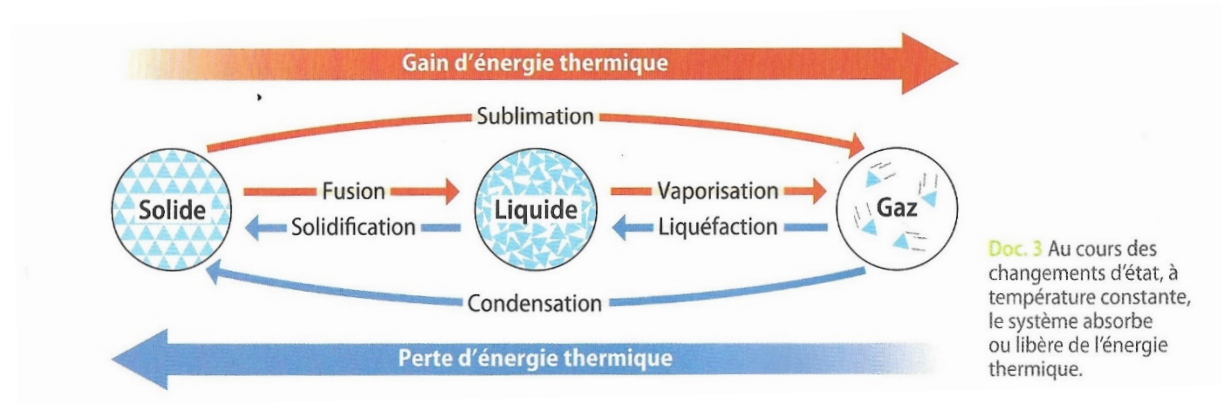
Image n°6 : N.Matthys et al. (2002), Chimie 3^e/4^e, Sciences 1^{er} et 2^e niveaux, de boeck (Bruxelles), p-172



Cette image poursuit les mêmes buts que la précédente. Les mêmes commentaires sont d'application. Ici, il est toutefois difficile de comparer les volumes des phases solide et liquide. On notera que la taille des particules semble changer d'une image à l'autre pour des raisons obscures. En outre, comme dans l'image précédente, rien ne suggère le désordre moléculaire.

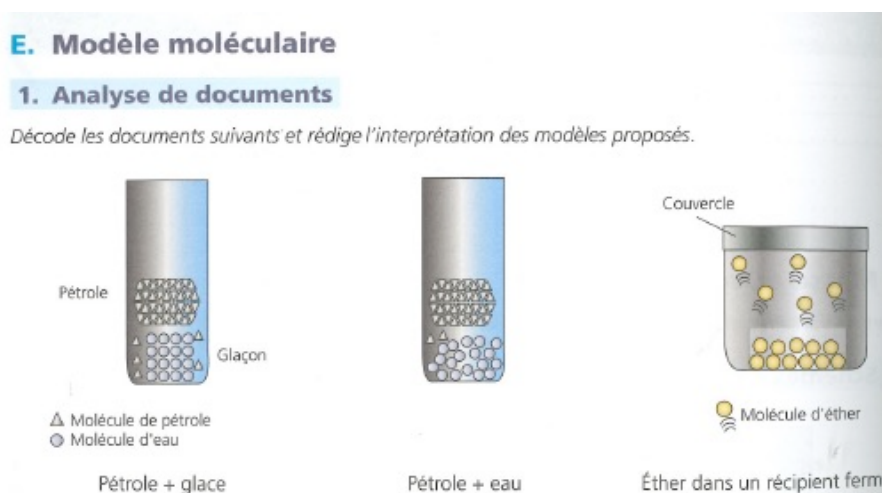
Ces aspects sont mieux pris en compte dans la figure suivante.

Image n°7 : K. Caiveau et D. Dauriac (2019), Physique Chimie 2^{de}, Hatier, p. 100



Les volumes relatifs des phases solide et liquide sont réalistes et la désorganisation du liquide, comparé au solide, est clairement suggérée. L'agitation thermique – mais au sein du gaz uniquement – est également symbolisée et l'évolution de l'énergie thermique est clairement spécifiée. On notera que la signification des ailettes qui suggèrent le mouvement moléculaire n'est pas explicitée dans la légende.

Image n°8 : D. Sculier et D. Waterloo (2013), Sciences et compétences au quotidien 2^e, de boeck (Bruxelles), p-112



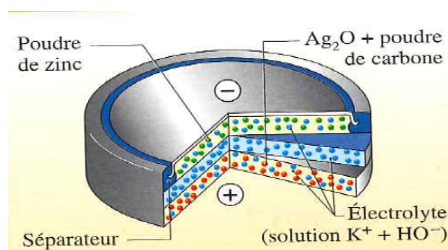
Le schéma proposé, qui fait suite à une activité expérimentale, est relativement complexe et ne permet pas un décodage immédiat. Nous examinerons les critères suivants : pertinence analogique, obstacle substantialiste, aspect fonctionnel, valeur esthétique.

- (i) Dans les deux schémas relatifs au système eau-pétrole, ce sont la pertinence analogique, l'obstacle substantialiste et la valeur esthétique qui nous semblent en cause. Les deux substances paraissent plongées dans un fluide bleu-gris continu dont l'identité reste mystérieuse et qui semble n'avoir qu'une valeur esthétique, malvenue dans ce cas car elle induit la préconception d'un fluide continu et non constitué de particules distinctes. Cet obstacle substantialiste du continuum macroscopique a aussi été relevé par Eilks et ses collaborateurs [4-5]. Si la fusion du glaçon (passage du schéma de gauche à celui du milieu) est claire, le comportement de l'agglomérat de molécules de pétrole n'est pas évident à décoder. On

comprend mal pourquoi plus de molécules de pétrole sont libérées en présence du glaçon. La vision est essentiellement substantialiste, sans référence aux interactions responsables des phénomènes de miscibilité ou de non-miscibilité.

- (ii) Le schéma relatif à la vaporisation de l'éther est le seul qui mette en évidence les mouvements moléculaires et dépasse donc l'obstacle substantialiste mais il le fait seulement pour les molécules en phase gazeuse. Notons que le symbolisme utilisé n'est pas explicité. Un aspect fonctionnel est ici sous-jacent : l'énergie cinétique moyenne des particules est une fonction de la température. Si on suppose, ce qui est vraisemblable, que les auteurs pensent à une situation d'équilibre liquide-gaz, le liquide et le gaz doivent être à la même température et donc présenter une agitation thermique similaire. En suggérant le contraire – un liquide au repos et un gaz agité –, la figure induit donc une conception alternative.

Image n°9 : G. Bessy et al. (1997), Chimie 1^{re}S, Belin (Paris), p-71



Le but de ce schéma est d'illustrer une coupe dans une pile bouton. C'est un modèle purement descriptif qui cherche à établir le pont entre l'aspect macroscopique extérieur et la compartimentalisation de la composition submicroscopique. Au niveau de la pertinence analogique, notons que les différentes espèces chimiques présentes sont toutes représentées indifféremment par des sphères de même taille mais de couleurs différentes : leurs différentes natures (particules neutres, cations, anions) et leurs rôles respectifs ne sont pas précisés ni illustrés. Ces particules sont plongées dans un milieu, également de couleur variable, dont la nature n'est pas précisée mais qui apparaît comme continu.

Nous retrouvons l'obstacle substantialiste déjà mentionné dans l'exemple précédent. Les niveaux fonctionnel et prédictif de la représentation sont absents

dans la mesure où il est difficile de déduire du schéma la polarité de la pile. La représentation s'avère peu utile pour décrire le niveau particulaire : peu d'information est fournie si ce n'est le fait, qui devrait être assimilé par les élèves à ce stade (5^e/6^e année de l'enseignement secondaire, 11^e et 12^e grades) que la matière est constituée de particules. Quant aux interactions entre ces particules, qui sont à la base du fonctionnement de la pile et devraient constituer le nœud de cet enseignement, elles ne sont pas évoquées.

2.2.2 Le modèle atomique

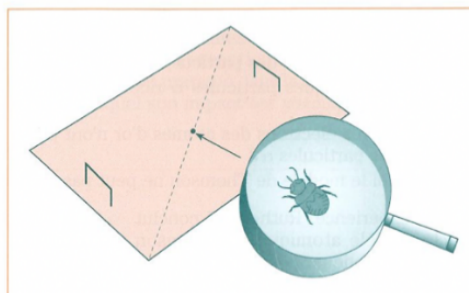
De nombreux travaux de recherche en didactique ont été consacrés à la modélisation de la structure atomique [10-22] et ont analysé entre autres les démarches des manuels [14, 22], les compétences des élèves [17], des étudiants de 1^{er} cycle universitaire [16] et des enseignants en formation [18] et leurs conceptions alternatives [18], ainsi que le changement conceptuel susceptible de s'opérer [20-21].

Bien que les concepts relatifs à la structure atomique soient enseignés successivement dans les études secondaires et supérieures, ces différents travaux montrent que les étudiants éprouvent toujours à différents stades de leurs études de grandes difficultés pour décrire la structure atomique. Il serait intéressant de se baser sur ces travaux pour analyser dans quelle mesure les faiblesses de certaines schématisations, dont nous allons discuter plusieurs exemples, et l'absence de clefs de lecture de ces représentations symboliques, que nous allons aussi souligner à plusieurs reprises, peuvent engendrer des conceptions erronées susceptibles de rendre l'apprentissage ultérieur plus difficile, en particulier dans l'enseignement supérieur.

Examinons, dans ce cadre, quelques modèles schématiques typiques.

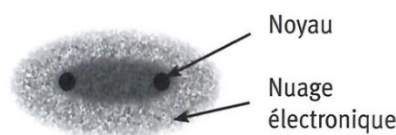
Image n°10 : P. Pirson et al. (2002), Chimie 3^e/4^e, Sciences 1^{er} et 2^e niveaux, de boeck (Bruxelles), p-36

D'autres expériences permirent de déterminer que le volume vide de l'atome a un diamètre environ 100 000 fois plus grand que celui du noyau.
 Pour te représenter cette proportion, imagine, au centre de la diagonale d'un terrain de football, une puce d'environ 1 mm. Elle figurerait le noyau, tandis que le terrain serait l'espace dans lequel évolueraient les électrons.
 Comment procéder, à présent, pour élaborer le modèle d'un atome particulier selon Rutherford ?



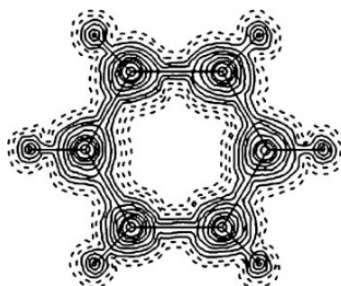
Une des caractéristiques essentielles des schémas, que nous n'avons guère abordée jusqu'à présent, est de reposer sur des analogies entre une situation réelle courante, proche des élèves, et un concept abstrait telle la représentation de l'atome. C'est l'objectif de l'image ci-dessus qui remplit essentiellement son but, relativement limité. Il ne s'agit toutefois pas ici à proprement parler d'un modèle schématique mais de l'illustration graphique d'une comparaison.

Image n°11 : I. Querton et B. Loriau-Vandenbroeck (2012), Chimie 4^e (1^{er} pér. chimie/sem enseignement libre), Van In (Louvain-la-Neuve), p-67.



Ce dessin représente le nuage électronique de la molécule de dichlore.

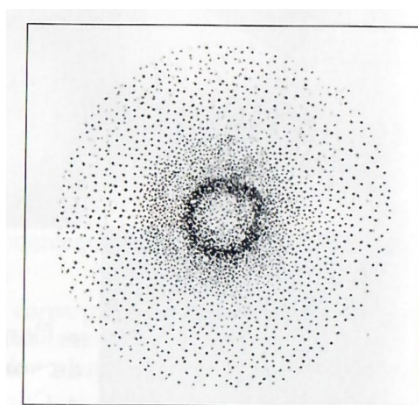
Nous rencontrons ici une image qui, même si elle est présentée dans un cadre scolaire, se rapproche d'une représentation scientifiquement établie, celle des cartes de densité électronique des molécules, telle celle représentée ci-dessous (molécule hexagonale de benzène, C₆H₆) [23] :



L'image extraite du manuel de Querton et Loriau-Vandenbroeck donne une idée acceptable de la distribution de charges au sein d'une molécule et met en évidence au moins trois aspects importants : (i) la distribution spatiale des électrons que l'on ne peut suivre individuellement ; (ii) le fait que cette distribution ait une symétrie (molécule homonucléaire) ; (iii) l'accroissement de densité électronique entre les noyaux qui pourra alors être mis en relation avec le modèle de la liaison covalente et le fameux trait de liaison qui est trop souvent source d'ambiguïtés de type substantialiste.

Notons toutefois que la frontière entre les deux types de grisé est artificiellement trop nette, ce qui est typique des modèles didactiques (« teaching models ») qui « forcent le trait ». Afin d'éviter l'obstacle substantialiste – on pourrait à tort imaginer que l'image représente une espèce de « colle » entre les noyaux – il importe de bien expliquer aux élèves, en termes adaptés à leur niveau de formation, ce que représente la distribution en question et la raison pour laquelle on la qualifie de nuage électronique (aspect analogique). Une explication du type suivant pourrait, nous semble-t-il, convenir. Il n'est pas possible, pour toute une série de raisons, de suivre individuellement les mouvements extrêmement rapides de chaque électron. Pour passer d'un côté à l'autre d'une molécule, un électron prend, en moyenne, moins qu'un millième de millionnième de millionnième de seconde (10^{-15} s). L'image montrée est donc analogue à une photographie prise avec un temps de pose assez long : on ne voit que des traces des mouvements et ces traces sont plus denses là où les électrons passent le plus de temps, là où ils sont le plus souvent.

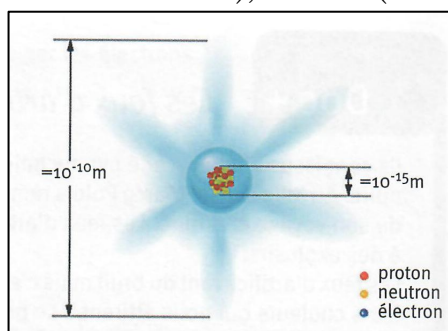
Image n°12 : J.-P. Durandeau et al. (1993), Physique Chimie 2^{de}, Hachette éducation (Paris), p-262



Cette image poursuit le même objectif que la précédente. Elle permet d'identifier l'évolution (croissance puis décroissance) de la densité de charge électronique de l'atome d'hydrogène lorsque la distance au noyau augmente. Elle doit être accompagnée du même type de commentaire explicatif que celui proposé pour l'image n°11. Le problème essentiel de cette représentation est qu'elle sera peu exploitée dans l'enseignement secondaire où l'accent est mis essentiellement sur le modèle en couches. Elle permettrait cependant peut-être de discuter avec les élèves les limites du modèle en couches. En effet, l'image de la densité électronique, ici limitée à celle de la couche K ($n = 1$) – ce point est essentiel – ne montre pas, à juste titre, de zone nette dans l'espace où l'électron serait confiné : on ne voit qu'une évolution progressive de la densité qui passe par un maximum au rayon de Bohr.

Si la densité électronique de différentes couches était représentée dans le cas d'un atome polyélectronique, on verrait que les couches se recouvrent. Ce qui distingue les couches, c'est en fait leur énergie qui, elle, varie par sauts donc de manière discontinue. La répartition spatiale des électrons ne présente pas cette discontinuité, contrairement à ce que laissent supposer d'autres modèles schématiques que nous allons aborder au paragraphe 2.2.2.3.

Image n°13 : I. Querton et B. Loriau-Vandenbroeck (2012), Chimie 4 (2 périodes chimie/semaine), Van In (Louvain-la-Neuve), p-46

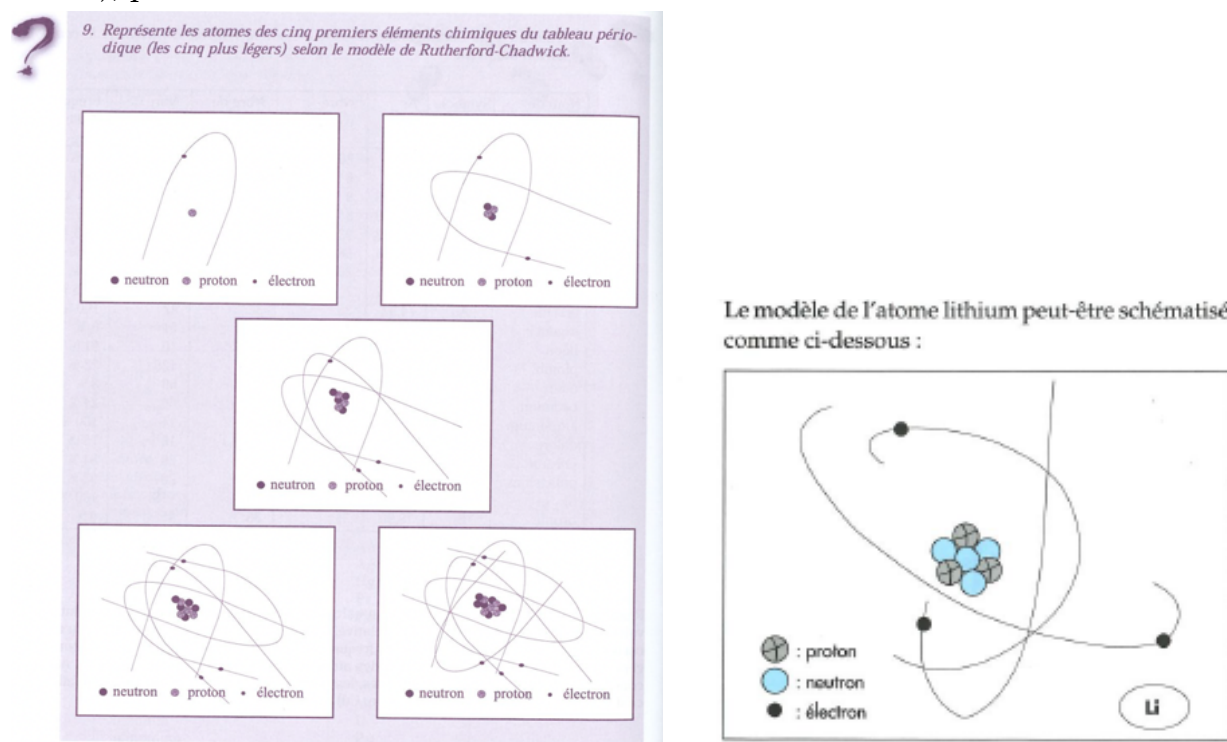


« Les électrons sont perpétuellement en mouvement dans le nuage électronique de l'atome. Il est impossible de déterminer précisément l'endroit où l'un d'entre eux se trouvera à un moment donné. On appellera orbitale atomique l'espace où la probabilité de présence de l'électron est grande. »

Avec ce modèle schématique, nous retrouvons un « teaching model ». Ce schéma nous semble cumuler de nombreux défauts. Le premier est d'être scientifiquement incorrect et de ne pas représenter une densité de charge électronique réelle. Le texte explicatif introduit inutilement la notion d'orbitale qu'il définit en outre de manière incorrecte. Les codes inhérents à cette image ne sont pas clairs, mis à part l'échelle de taille relative du noyau et de l'atome. Que représente la zone circulaire en bleu

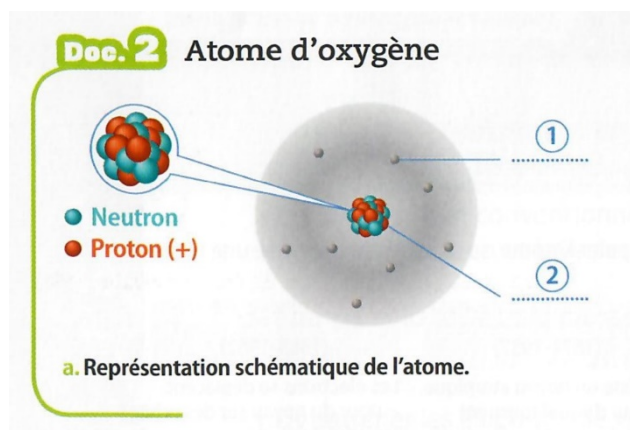
plus intense au centre ? Que représentent les jets radiaux ? En fait, l'image n'apporte rien de plus que le texte, lui-même discutable, qui l'accompagne. Cet exemple illustre le critère esthétique qui, dans ce cas, prend le pas sur le message scientifique et didactique.

Images n°14 et 15 : N. Mathys et B. Suys (2003), Sciences 3^e, de boeck (Bruxelles), p-66 et Pirson et al (2015), Chimie 3^{ème} (Sciences générales), de boeck (Louvain-la-Neuve), p-42



Beaucoup de travaux ont abordé le sujet de la structure atomique par le biais d'une analogie avec le système solaire planétaire [24-28]. Ce modèle atomique planétaire dynamique est ici illustré par une image des trajectoires des électrons dans des atomes de numéro atomique croissant. Il s'agit à nouveau d'un « teaching model ». L'apprentissage de ce modèle peut agir comme une source de conception alternative s'il est intégré par l'élève comme une représentation fidèle de l'atome [29]. Ce modèle nous semble donc présenter deux défauts majeurs : (i) il repose sur une analogie qui est considérée comme inadéquate depuis près d'un siècle ; (ii) il n'est compatible avec aucun modèle admis actuellement. Notons aussi que la taille du noyau n'est pas à la bonne échelle sans que l'attention de l'élève ne soit attirée par cette distorsion.

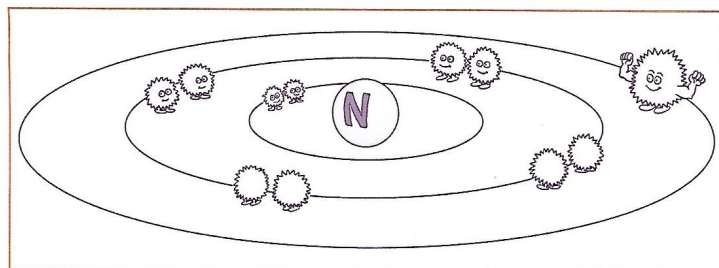
Image n°16 : K. Médina-Moretto et D. Dauriac (directeurs de publication) et al. (2019), Physique Chimie 2^{de}, Hatier (Paris), p-48 ;



Par rapport au modèle de l'image n°12, il s'agit ici d'un modèle purement didactique (« teaching model »), sans lien avec les modèles scientifiques admis. Il présente une esthétique attrayante mais est discutable au moins du point de vue de la pertinence analogique et de l'induction d'obstacles substantialistes. La taille relative du noyau par rapport à l'atome global est surestimée et contredirait, par exemple, l'information que donne une image du type de la figure n°10. Le noyau aurait pu être représenté au centre nettement plus petit, d'autant plus que l'encart en haut à gauche fournit justement un agrandissement qui explicite la structure nucléaire. Ce modèle suggère l'analogie d'un fruit à noyau, ce dernier étant entouré d'un continuum grisé dans lequel sont plongés 8 électrons. On retrouve la question du fond continu déjà évoquée plus haut en référence aux travaux de Eilks [4-5] et qui induit un obstacle substantialiste. En outre, si le fond continu est censé représenter la densité électronique, celle-ci devrait décroître progressivement à grande distance du noyau, comme dans l'image n°12, et les électrons ne devraient pas apparaître individualisés. Le fond continu semble présenter des nuances de gris difficilement interprétables et non commentées dans le texte.

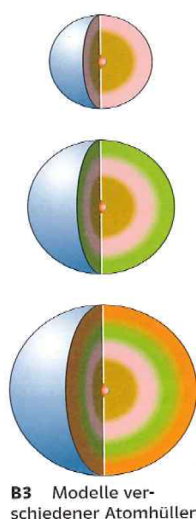
2.2.3 Le modèle en couches

Image n°17 : N. Matthys et Ph. Delsate (2006), Sciences 4^e Biologie, Chimie, Physique, de boeck Bruxelles), p-53



L'auteur présente ici les électrons par de petits personnages vivants, censés peut-être illustrer le caractère dynamique des électrons, placés sur des trajectoires circulaires, ce qui fait référence au modèle planétaire que nous évoquions dans l'image précédente. Cette analogie n'aide guère les élèves à structurer leurs idées sur le modèle en couches et est donc assez stérile. Par contre, l'aspect fonctionnel est partiellement mis en évidence puisqu'on schématise le nombre d'électrons par couches et la valeur croissante du rayon des couches : on suggère donc une information sur l'évolution du rayon moyen des couches mais celle-ci n'est pas vraiment correcte puisque le rayon moyen augmente proportionnellement au carré du nombre quantique principal ($\langle r \rangle \propto n^2$).

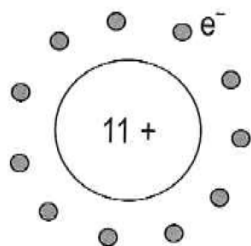
Image n°18 : E. Brückl et al. (2010), Elemente Chemie 2, Klett Verlag (Germany), p-21



Cette schématisation, également un « teaching model », poursuit le même but que l'image précédente. On notera toutefois (i) l'absence d'électrons individualisés, (ii) la

mise en évidence de zones de l'espace plutôt que d'orbites, en vue de mieux coller au concept de couche (« Atomhülle »), qui reste toutefois flou. On remarquera, en relation avec notre commentaire sur l'image n°12, que l'évolution radiale de la densité électronique ne reflète pas les discontinuités que suggère la présente image. La relation fonctionnelle concernant le rayon croissant des couches apparaît mais, comme dans l'image n°17, elle ne respecte pas la loi d'échelle $\langle r \rangle \propto n^2$. Un tel schéma présente le défaut de faire apparaître l'atome comme un objet dense, ce qui rappelle le modèle de Thomson et contredit l'expérience de Rutherford qui fait pourtant partie du programme. Il importe donc ici de sensibiliser les élèves aux limites d'une telle représentation dont la dimension symbolique est importante, afin qu'ils puissent surmonter l'obstacle substantialiste inhérent à toute représentation de ce type, et dont le caractère esthétique assez séduisant peut contribuer à forger des images mentales résistantes à une révision ou inhibition ultérieure.

Image n°19 : Ph.Arnould et al (1999), Chimie 2^e (fiches de l'élève), CAF (Frameries), p-30



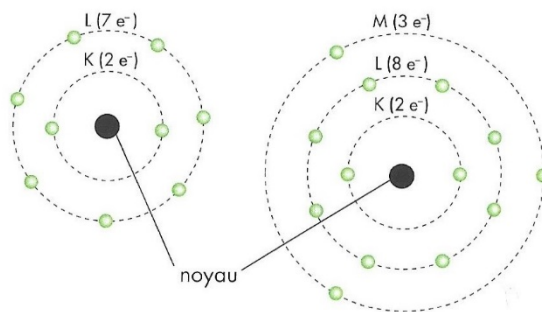
Cette image n'a sans doute d'autre ambition que de montrer le caractère sphérique de l'atome, d'illustrer sa composition (noyau et électrons) et d'insister sur sa neutralité électrique globale. Par rapport à un texte, sa valeur ajoutée est faible. Il n'illustre aucun modèle particulier, en tout cas pas le modèle en couche et n'apporte aucune information fonctionnelle. Il peut introduire une certaine confusion et constituer un obstacle à l'apprentissage du modèle de Rutherford en raison de la taille exagérée du noyau.

Image n°20 : P.Pirson et al (2015), Chimie 3^{ème} (Sciences générales), de boeck (Louvain-la-Neuve), p-45

Ainsi ,

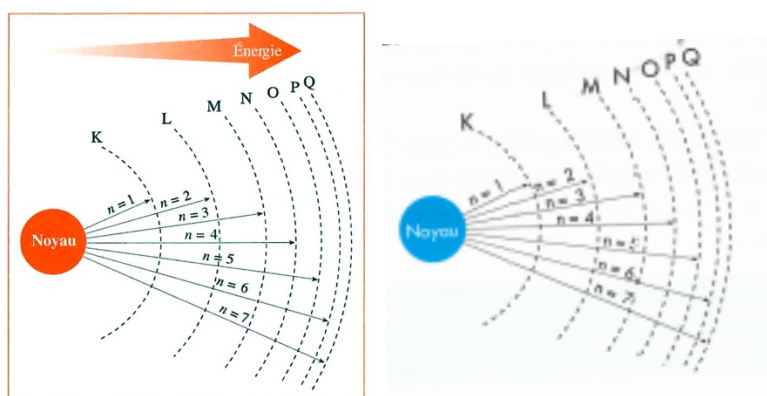
pour l'atome F
possédant
un total de 9 e⁻,
on dessinera :

pour l'atome Al
possédant
un total de 13 e⁻,
on dessinera :



Avec cette image, nous sommes de nouveau au cœur du modèle électronique en couches et d'un « teaching model ». Ce schéma est largement présent dans tous les manuels scolaires. Il se base sur l'analogie planétaire adaptée pour inclure l'idée de couches stables. Cette schématisation présente à la fois des aspects fonctionnels (nombre d'électrons par couche, taille croissante des couches mais sans respecter la loi d'échelle $\langle r \rangle \propto n^2$) et prédictifs (concernant l'évolution des rayons atomiques, électronégativité etc.) et pourra donc être didactiquement utile à condition de bien mettre en avant son rôle fonctionnel et d'éviter l'obstacle substantialiste : ce schéma décrit des relations caractéristiques de l'atome plus qu'il ne représente l'atome lui-même. Cet aspect sera encore amplifié dans les exemples qui suivent.

Images n°21 et 22 : P. Pirson et al (2002), Chimie 3^e/4^e, Sciences 1^{er} et 2^e niveaux, de boeck (Bruxelles), p-214 et P. Pirson et al (2015), Chimie 3^{ème} Sciences Générales, de boeck (Louvain-la-Neuve), p.44.



Ces deux versions du même modèle schématique illustrent la difficulté de bien représenter l'aspect fonctionnel. Il s'agit ici de représenter de manière semi-quantitative l'évolution du comportement des couches en fonction du nombre quantique principal, n . Le message manque toutefois de clarté. Que représente-t-on ? Les différentes orbites de rayon croissant ? L'énergie associée à ces orbites (ou couches) ? Quelle est la signification de la flèche orange « Énergie », flèche qui a disparu dans les éditions suivantes ? Signifie-t-elle qu'on représente l'énergie en fonction de n ? La lecture immédiate de ce schéma essentiellement spatial semble pourtant suggérer que les couches se rapprochent spatialement quand n augmente, ce qui est faux puisque le rayon moyen associé à une couche est proportionnel à n^2 : $\langle r \rangle \propto n^2$. Le texte accompagnant l'image précise d'ailleurs : « L'écart entre les différentes couches diminue au fur et à mesure qu'on s'éloigne du noyau.

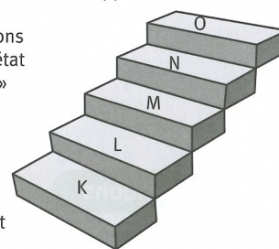
Ainsi, on peut voir qu'il est plus grand entre les couches K et L qu'entre les couches M et N et ainsi de suite. » Il ne dit toutefois pas de quel écart il s'agit : spatial ou énergétique ? L'intention des auteurs est sans doute que l'on comprenne que l'énergie des couches converge quand n augmente, ce qui est vrai puisque E_n est proportionnelle à $-n^{-2}$: $E_n \propto -n^{-2}$. L'origine du problème de cette représentation fonctionnelle nous paraît double : (i) l'image cherche à représenter dans un même schéma deux informations, l'une spatiale et l'autre, énergétique ; (ii) cette représentation graphique de fonctions n'est pas une représentation standard au même titre qu'un graphique en axes cartésiens. Le code reste implicite : sans clef d'interprétation, le lecteur risque de se fourvoyer.

Image n°23 : I. Querton et B. Loriau-Vandenbroeck (2012), Chimie 4^e (1^{er} pér. chimie/sem officiel), Van In (Louvain-la-Neuve), p-43

Avant d'être mis dans la flamme, les ions ou atomes se trouvent dans un état stable appelé « état fondamental ».

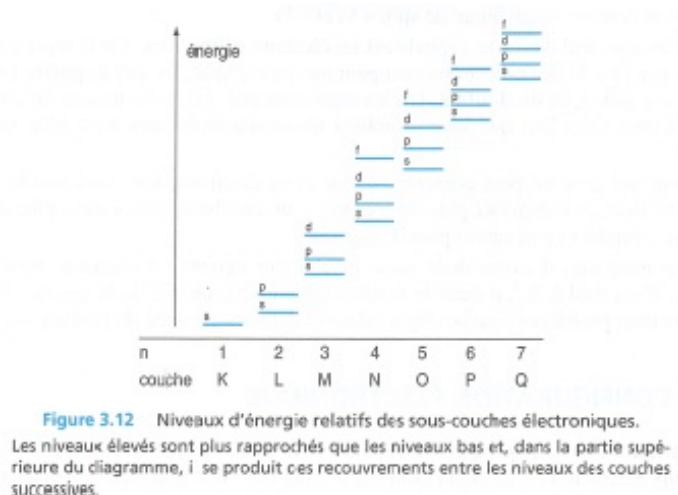
Par exemple, lorsque les ions Na^+ et Cl^- sont placés dans la flamme, les ions ou atomes reçoivent de l'énergie thermique. Les électrons passent d'un état d'énergie fondamentale à un état de plus haute énergie; ils sont « excités » ou dopés.

Dès que l'on arrête de chauffer, les électrons retournent à l'état fondamental en émettant de la lumière. L'énergie restituée est différente d'un ion à l'autre : Na^+ , Li^+ , Ca^{2+} ... puisque nos observations montrent que la couleur de la lumière émise diffère d'un composé à l'autre. Les électrons ne peuvent donc pas avoir n'importe quelle énergie; ils sont sur des « couches électroniques ». Ils ne peuvent pas avoir une énergie intermédiaire à celle des couches. Comme lorsque l'on descend un escalier, on ne sait pas descendre d'une demi-marche !



Il s'agit ici d'un modèle didactique (« teaching model ») de nature analogique. Pour aider à aborder la nature quantifiée du monde submicroscopique des atomes, l'auteur fait appel à une double analogie : l'énergie des électrons est comparée à l'énergie potentielle de la pesanteur ; une évolution discontinue est représentée par un escalier en opposition à un plan incliné (non représenté). Le texte d'accompagnement apporte un cadre d'interprétation satisfaisant, en particulier l'idée que le système ne peut être stable entre deux marches, donc entre deux niveaux (ou couches). Notons toutefois qu'il aurait mieux valu, pour représenter fidèlement la fonction $E=f(n)$, décrire l'escalier atomique comme celui d'un architecte un peu étrange qui aurait construit des marches de hauteur décroissante ($E_n \propto -n^{-2}$).

Image n°24 : F. Rouquérol et al. (2020). Les cours de Paul Arnaud Chimie générale, 8^{ème} Edition, Dunod, p.72



Signalons qu'il s'agit ici d'une figure extraite du seul traité de niveau 1^{re} année de l'enseignement supérieur, alors que les autres ouvrages s'adressent à l'enseignement secondaire. Par rapport au modèle schématique des images n°21-22, il s'agit d'une représentation classique en axes cartésiens (x,y). Le défaut relevé dans l'image n°23 concernant les sauts énergétiques se retrouve aussi, mais sous une forme différente, dans cette représentation plus sophistiquée incluant les sous-couches (orbitales). Les niveaux commencent par s'espacer (K-L, L-M, M-N, N-O) pour se rapprocher ensuite (O-P, P-Q). D'autre part, l'énergie des niveaux n'est pas

cohérente avec la règle de Klechkovskii pour l'ordre énergétique des sous-couches : par exemple, l'énergie de l'orbitale 3d apparaît inférieure à celle de 4s.

2.3 Conclusions de cette analyse

Nous avons mené une analyse qualitative critique de modèles schématiques sélectionnés dans différents manuels scolaires en nous focalisant sur la structure corpusculaire de la matière, la structure atomique envisagée de manière générale puis, plus spécifiquement, la structure électronique des atomes décrite par le modèle en couches. Nous avons basé notre analyse sur six indicateurs définis au préalable : pertinence analogique, absence d'obstacle substantialiste, aspect fonctionnel, capacité prédictive, liens avec les modèles établis et valeur esthétique.

Le tableau 2 résume nos évaluations des modèles étudiés sur la base de ces critères.

De manière générale, il est rare qu'un schéma permette l'expression de chaque critère. Toutefois, l'ensemble des images analysées nous a permis de les balayer tous et de proposer les quelques conclusions et pistes de réflexion suivantes.

- La majorité des modèles schématiques analysés correspondent à la catégorie que Justi et Gilbert désignent comme « teaching models » et sont donc essentiellement conçus dans une optique didactique [8]. Les liens avec des modèles scientifiques établis sont souvent ténus et parfois en contradiction avec ceux-ci (trajectoires électroniques, par exemple). Les seuls modèles qui présentent une cohérence plus nette avec les modèles reconnus sont ceux décrivant la densité électronique des atomes.
- Des ambiguïtés sont susceptibles de créer des obstacles de type substantialiste : les particules, quelles qu'elles soient, sont souvent représentées comme des sphères ; parfois la forme moléculaire est décrite ; parfois aussi un simple symbole (un triangle, par exemple) est utilisé ; le solvant apparaît dans certains cas comme un continuum coloré ou grisé ; les interactions électrostatiques dans un cristal ionique sont symbolisées par des tiges ; les couches électroniques sont représentées comme un continuum.

Modèle n°	Pertinence analogique	Absence d' obstacle substantialise	Aspect fonctionnel	Capacité prédictive	Cohérence avec les modèles établis	Valeur esthétique
1	+	–	np	np	≈	≈
2	+	–	np	≈	≈	≈
3	–	–	–	–	–	≈
4	–	–	np	np	–	–
5	≈	–	–	≈	–	≈
6	≈	–	–	–	–	≈
7	+	+	≈	≈	+	+
8	–	–	–	–	–	+
9	–	–	–	–	–	+
10	+	np	np	np	≈	≈
11	np	+	np	≈	+	≈
12	np	+	≈	≈	+	≈
13	np	–	–	–	–	+
14	–	np	np	–	–	≈
15	–	np	np	–	–	≈
16	–	–	np	–	–	+
17	–	–	≈	≈	–	≈
18	≈	–	≈	≈	–	+
19	np	np	np	np	np	–
20	–	np	≈	≈	–	≈
21	–	np	–	–	–	≈
22	–	np	–	–	–	≈
23	≈	np	≈	≈	np	≈
24	np	np	–	–	–	≈

Tableau 2 : Résumé des évaluations de modèles étudiés

Légende : np = critère non pertinent ; + : critère bien rencontré ; – critère mal rencontré ; ≈ critère rencontré de manière approximative

- La pertinence d'une analogie doit être évaluée en fonction du niveau de connaissances des élèves, de sa qualité scientifique et de son adéquation à des modèles reconnus. On constate que certaines simplifications mal cadrées au

niveau analogique ou fonctionnel sont de nature à créer des conceptions alternatives qu'il faudra rectifier par la suite : masses volumiques respectives des solides et des liquides trop différentes, agitation moléculaire absente de certaines phases à l'équilibre, tailles respectives incorrectes des ions d'un cristal, évolution erronée du rayon ou de l'énergie des couches électroniques, par exemple. Il est à craindre que l'impact marqué des schémas sur la mémoire visuelle et l'attrait esthétique indéniable de bon nombre d'illustrations actuelles, s'ils sont *a priori* favorables à la construction des savoirs, rendent aussi, en contrepartie, les préconceptions véhiculées par ces schémas plus difficile à inhiber par la suite.

- La mise en évidence de relations et d'interactions, en d'autres mots, le rôle fonctionnel de l'image, reste le parent pauvre dans les schématisations qui visent souvent en premier lieu à décrire les substances à l'échelle atomique ou moléculaire. Il en découle que l'aspect prédictif de ces modèles schématiques est souvent limité.
- Il est nécessaire d'encadrer toute schématisation par une clef de lecture spécifiant clairement son cadre et donc ses limites. S'agit-il d'une description ciblant plutôt le niveau analogique ou fonctionnel ? Quel niveau de précision poursuivons-nous dans la description (représentation sphérique des molécules ou description de la géométrie moléculaire, par exemple) ? Comment faut-il lire l'image ? L'image n'est pas un substitut au texte, elle l'accompagne, elle apporte une dimension complémentaire qui requiert toutefois un décodage bien argumenté.
- Une image peut pécher par action ou par omission. Elle peut induire en erreur tant par ce qu'elle dit mal (pensons aux différents schémas de la structure en couche, par exemple l'image n°18 qui donne à voir un atome « plein » ou les images n°14 et 15 qui identifient des trajectoires atomiques) que par ce qu'elle ne dit pas (que les molécules d'un liquide sont aussi animées de mouvements aléatoires, par exemple).

- Une image frappe l'imagination, plus sans doute que mille mots. Est-ce pour cela qu'elle vaut plus ? Elle s'enracine sans doute mieux dans la mémoire, ce qui fait sa force mais aussi son danger quand elle engendre des conceptions erronées.
- En lien direct avec ce qui précède, la dimension esthétique d'une image n'est pas à négliger. Trop austère, elle ne parle pas à l'imagination. Une surenchère dans l'esthétique risque de diluer ou de déformer le propos scientifique.
- Les modèles que nous avons analysés couvrent une période temporelle assez large (1993-2020). Si nous observons une évolution incontestable de la qualité esthétique des images, nous n'avons pas décelé de tendance nette de changement pour les cinq autres critères que nous avons appliqués à nos évaluations.

L'analyse que nous avons menée reste bien sûr en partie subjective parce qu'elle est *a priori* et ne s'appuie pas sur des données empiriques relatives à l'impact de telle ou telle schématisation sur l'éveil de l'intérêt des élèves et sur la qualité de leur apprentissage en termes de maîtrise des conceptions scientifiquement admises. Les pistes que nous venons d'identifier ont servi de base à une enquête dans le cycle supérieur de l'enseignement secondaire en vue d'identifier les réactions des élèves face à différents types de représentations. Une autre dimension de la suite de ce travail est de relier la capacité de élèves à analyser une représentation et celle de concevoir de manière autonome une modélisation schématique.

La suite de ce chapitre 2 présente dès lors les résultats d'une recherche qui a été menée auprès d'élèves de 4^e, 5^e et 6^e années (grades 10 à 12) de l'enseignement secondaire général francophone et germanophone de Belgique pour un cours de chimie de 2 à 3 périodes par semaine (option sciences). À partir d'un questionnaire en trois parties (A, B et C), ils ont été invités à analyser six représentations sélectionnées dans quelques manuels scolaires (partie A), à évaluer le rôle d'un schéma (partie B) et à réaliser une modélisation schématique d'un phénomène scientifique de leur choix (parmi trois possibilités) à partir de leurs connaissances antérieures (partie C).

3 Références

- [1] White, B.Y., Collins, A. & Frederiksen, J. R. (2011). The Nature of Scientific Meta-Knowledge. In M. Khine & I. Saleh (Eds.), *Models and Modeling* (pp. 6). Models and Modeling in Science Education. Springer, Dordrecht.
- [2] Lazenby, K., Rupp, C.A., Brandriet, A., Mauger-Sonnek, K. & Becker, N.M., (2019). Undergraduate Chemistry Students' Conceptualization of Models in General Chemistry. *J. Chem. Educ.*, 96, 3, 455–468.
- [3] Johnstone, A.H. (2010). You Can't Get There from Here. *Journal of Chemical Education*, 87, 22-29.
- [4] Eilks, I., Witteck, T. & Pietzner, V. (2012). The Role and Potential Dangers of Visualization when Learning about Sub-Microscopic Explanations in Chemistry Education. *C.E.P.S. Journal*, 2, 125-145.
- [5] Eilks, I., Witteck, T. & Pietzner, V. (2010). Using Multimedia Learning Aids from the Internet for Teaching Chemistry: Not as Easy as it Seems? In S. Rodrigues (Ed.), *Multiple Literacy and Science Education: ICT in Formal and Informal Learning Environments* (pp. 49-69). IGI Global.
- [6] Gopalan, M., Rosinger, K. & Ahn, J. B. (2020). Use of Quasi-Experimental Research Designs in Education Research: Growth, Promise, and Challenges. *Rev. Res. Educ.* , 44, 218–243.
- [7] Bachelard, G. (1938). *La formation de l'esprit scientifique*. Vrin, Paris.
- [8] Justi, R. & Gilbert, J. (2002). Models and Modelling in Chemical Education. In: Gilbert, J.K., De Jong, O., Justi, R. & Treagust, D.F., Van Driel, J.H. (eds) *Chemical Education: Towards Research-based Practice. Science & Technology Education Library*, 17, Springer, Dordrecht.
- [9] Toscano, M. & Quay, J. (2021). Beyond a Pragmatic Account of the Aesthetic in Science Education. *Sci. & Educ.*, 30, 147–163.
- [10] Scott, Ewing C. (1931). Atomic models for use in teaching inorganic chemistry. *Journal of Chemical Education*, 8, 9, 1845 – 1851.
- [11] Pouleur, A. L. (1932). Atomic and molecular structure models as a visual aid in the teaching of chemistry. *Journal of Chemical Education*, 9, 2, 301.
- [12] Sanderson, R.T. (1960). Atomic models in teaching chemistry. *J. Chem. Educ.* 37, 6, 307
- [13] Xue, S, Sun, D, Zhu, L, Huang, H-W. & Topping, K (2022). Comparing the effects of modelling and analogy on high school students' content understanding and transferability: the case of atomic structure. *Journal of Baltic Science Education*, 21, 2.
- [14] Fusti, R. & Gilbert, J. (2000). History and Philosophy of Science through Models: Some Challenges in the Case of 'the Atom.' *Int. J. Sci. Educ.*, 22, 993–1009,
- [15] Fitrizza, Z. & Gazali, F. (2018). Diagnosing Students' Conception on Atomic Structure Using Open Ended Questions. In *Proceedings of the Journal of Physics: Conference Series*; Institute of Physics Publishing, 1013.
- [16] Wang, C.Y. & Barrow, L.H. (2013). Exploring Conceptual Frameworks of Models of Atomic Structures and Periodic Variations, Chemical Bonding, and Molecular Shape and Polarity: A Comparison of Undergraduate General Chemistry Students with High and Low Levels of Content Knowledge. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 14, 130–146.

- [17] Harrison, A.G. & Treagust, D.F. (1996). Secondary Students' Mental Models of Atoms and Molecules: Implications for Teaching Chemistry. *Sci. Educ.*, 80, 509–534.
- [18] Monica Prima Sari; Rahmah Evita Putri (2023). Science student teachers' understanding about atom: An investigation on prior knowledge. *AIP Conference Proceedings* 2673, 110001.
- [19] Xue, S., Sun, D., Zhu, L., Huang, H.W. & Topping, k. (2022). Comparing the effects of modelling and analogy on high school students' content understanding and transferability: the case of atomic structure. *J. Balt. Sci. Educ.* 21, 325–341.
- [20] Niaz, M., Aguilera, D., Maza, A. & Liendo, G. (2002). Arguments, Contradictions, Resistances, and Conceptual Change in Students' Understanding of Atomic Structure. *Sci. Educ.*, 86, 505–525.
- [21] Ubben, M.S. & Heusler, S. (2021). Gestalt and Functionality as Independent Dimensions of Mental Models in Science. *Res. Sci. Educ.*, 51, 1349–1363,
- [22] Niaz, M. & Coştu, B. (2009). Presentation of atomic structure in Turkish general chemistry textbooks. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 10, 233-240.
- [23] Garcia-Granda, S. & Montejo-Bernardo, J.M. (2005). X-Ray Absorption and Diffraction | X-Ray Diffraction – Single Crystal. *Encycl. Anal. Sci.* Second Ed., 397–408.
- [24] Nakiboğlu, C. & Taber, K. S (2013). The Atom as a Tiny Solar System: Turkish High School Students' Understanding of the Atom in Relation to a Common Teaching Analogy in Tsaparlis, G., *Concepts of Matter in Science Education*, New York, Springer, 2013, 19, 169–198.
- [25] Sakho, J. (2017). Atomic Model of the Solar System Putting into Evidence a Tenth Celestial Object Coupled To Pluto. *Astrophys Aerospace Technol*, 5, 1.
- [26] Taber, K. S. (1998). The sharing-out of nuclear attraction: or I can't think about Physics in Chemistry. *International Journal of Science Education*, 20 (8), 1001-1014.
- [27] Taber, K. S. (1999). Ideas about ionisation energy: an instrument to diagnose common alternative conceptions. *School Science Review*, 81 (295), 97-104.
- [28] Taber, K. S. (2001). When the analogy breaks down: modelling the atom on the solar system. *Phys. Educ.*, 36, 222.
- [29] Yuanita, L., Ibrahim, M. (2015). Supporting Students in Learning with Multiple Representation to Improve Student Mental Model on Atomic Structure. *Sci. Educ. Int.*, 26, 104–125.

4 Article scientifique publié

Conceptual change in chemistry schematic modelling: a cross-sectional study of 10th -12th grade Belgian students

4.1 Résumé

Les études axées sur la pratique qui portent sur le changement conceptuel dans l'enseignement de la chimie demeurent relativement rares. Tel que le veut l'approche constructiviste, dans laquelle les apprenants construisent leur propre structure cognitive, de nombreux résultats ont montré que l'apprentissage par la modélisation contribue positivement à l'adaptation conceptuelle. De ce point de vue, nous présentons dans cet article une étude transversale des capacités de modélisation schématique des apprenants de deuxième cycle du secondaire. Les aptitudes et compétences en modélisation schématique, allant de conceptions purement macroscopiques à une interaction adéquate entre les trois niveaux du triangle de Johnstone, ont été évaluées chez 216 élèves (de 15 à 18 ans, 4^e à 6^e année secondaire, 10^e au 12^e grade) dans des situations contextualisées sélectionnées. Les données ont été recueillies à l'aide d'un instrument en trois volets, à savoir l'analyse des informations contenues dans un schéma graphique, la perception du rôle et de la pertinence de la modélisation schématique, et la production autonome de modèles schématiques. Les données recueillies montrent que les élèves du 12^e grade ont une capacité significativement plus élevée d'analyser les informations d'un schéma comparativement à ceux des 10^e et 11^e grades. De plus, les compétences de modélisation schématique autonome suivent la même tendance. Les données tendent également à montrer que les élèves ayant de meilleures compétences en matière d'analyse de modèles de référence conçoivent de manière autonome des modèles de meilleure qualité à l'échelle inframicroscopique.

Mots-clés : changement conceptuel, modèles schématiques, triangle de Johnstone, représentations macroscopiques, représentations submicroscopiques

4.2 Abstract

Practice-oriented studies on conceptual change in chemistry education remain relatively scarce. In agreement with the constructivist approach, in which learners build their own cognitive structure, many results have shown that learning through modelling positively contributes to conceptual adaptation. From this point of view, this study presents a cross-sectional study of secondary school learners' schematic modelling abilities in the upper secondary school. The schematic modelling skills and competences of 216 students (15–18 years old, 10th–12th grade), ranging from purely macroscopic conceptions to an adequate interplay between the three levels of Johnstone's triangle, have been assessed within selected contextualized situations. The data were collected using a three-part instrument, namely the analysis of the information contained in a graphical scheme, the perception of the role and relevance of schematic modelling, and the autonomous production of schematic modelling. The collected data show that 12th grade students have a significantly higher capability of analyzing the information of a scheme compared to 10th and 11th grades. Moreover, autonomous schematic modelling skills follow the same trend. The data also provide some evidence that students with better model analysis competences design autonomously higher quality models at the submicroscopic level.

Key words: conceptual change, schematic models, Johnstone's triangle, macroscopic representations, submicroscopic representations

Conceptual change in chemistry schematic modelling: a cross-sectional study of 10th–12th-grade Belgian students

Hamad Karous , Brigitte Nihant, and Bernard Leyh 

Department of Chemistry and DIDACTIfen Research Unit, University of Liège, Allée du Six Août 11, 4000 Liège, Belgium

Corresponding author: Hamad Karous (email: ha.karous@gmail.com)

Abstract

Practice-oriented studies on conceptual change in chemistry education remain relatively scarce. In agreement with the constructivist approach, in which learners build their own cognitive structure, many results have shown that learning through modelling positively contributes to conceptual adaptation. From this point of view, this study presents a cross-sectional study of secondary school learners' schematic modelling abilities in the upper secondary school. The schematic modelling skills and competences of 216 students (15–18 years old, 10th–12th grade), ranging from purely macroscopic conceptions to an adequate interplay between the three levels of Johnstone's triangle, have been assessed within selected contextualized situations. The data were collected using a three-part instrument, namely the analysis of the information contained in a graphical scheme, the perception of the role and relevance of schematic modelling, and the autonomous production of schematic modelling. The collected data show that 12th-grade students have a significantly higher capability of analysing the information of a scheme compared to 10th and 11th grades. Moreover, autonomous schematic modelling skills follow the same trend. The data also provide some evidence that students with better model analysis competences design higher quality autonomous models at the submicroscopic level.

Key words: conceptual change, schematic models, Johnstone's triangle, macroscopic representations, submicroscopic representations

Résumé

Les études axées sur la pratique qui portent sur le changement conceptuel dans l'enseignement de la chimie demeurent relativement rares. Tel que le veut l'approche constructiviste, dans laquelle les apprenants construisent leur propre structure cognitive, de nombreux résultats ont montré que l'apprentissage par la modélisation contribue positivement à l'adaptation conceptuelle. De ce point de vue, nous présentons dans cet article une étude transversale des capacités de modélisation schématique des apprenants de deuxième cycle du secondaire. Les aptitudes et compétences en modélisation schématique, allant de conceptions purement macroscopiques à une interaction adéquate entre les trois niveaux du triangle de Johnstone, ont été évaluées chez 216 élèves (de 15 à 18 ans, de la 10^e à la 12^e année) dans des situations contextualisées sélectionnées. Les données ont été recueillies à l'aide d'un instrument en trois volets, à savoir l'analyse des informations contenues dans un schéma graphique, la perception du rôle et de la pertinence de la modélisation schématique, et la production autonome de modélisation schématique. Les données recueillies montrent que les élèves de 12^e année ont une capacité significativement plus élevée d'analyser les informations d'un schéma comparativement à ceux de 10^e et de 11^e année. De plus, les compétences de modélisation schématique autonome suivent la même tendance. Les données tendent également à montrer que les élèves ayant de meilleures compétences en matière d'analyse de modèles conçoivent de manière autonome des modèles de meilleure qualité à l'échelle inframicroscopique. [Traduit par la Rédaction]

Mots-clés : changement conceptuel, modèles schématiques, triangle de Johnstone, représentations macroscopiques, représentations submicroscopiques

Introduction

A learning process results from a sequence of steps ranging from the simplest to the most complex level, in which the learner is guided through a reasoning pathway. The conceptual change framework considers constructed mental models at a given educational stage as temporary, intermediate

issues, subject to adaptation.¹ Confronted to a particular situation, the learners mobilize representation systems, mental plans and a series of actions, questions, and meanings.^{2,3} Read detailed the construction process of a new cognitive structure or the modification of an existing structure.⁴ He developed a conceptual change model related to the four

conditions already identified by Posner et al.: (i) the learner is not satisfied with his or her existing conceptions, (ii) the new conception is understandable, (iii) the new conception looks plausible, and (iv) the new conception is expected to be fruitful for further work.⁵

Conceptual change provides a framework to describe and interpret an adaptation process during which the student is faced with several situations that require to generate and test alternative propositions.⁶ Although Posner⁵ mainly insisted on the role of the cognitive conflict to promote conceptual change, focusing on the epistemological dimension, education research since then has also identified other important aspects, in particular the ontological (the nature of the investigated concepts) and affective ones, which contribute to progressively replace alternative conceptions by scientifically recognized ones.⁷ In the end, a progressive adjustment leads to a significant conceptual change.^{6,8–9} The learners must succeed in using appropriate conceptions in different situations. This means that the state of a particular concept can change according to various conditions.

Tackling with models, and especially designing models autonomously in a given learning situation, contributes to develop students' abilities to shape their own thinking frame by supporting reasoning, creativity, and decision making.¹ Concepts are constructed and used according to several interconnected components: representation systems (natural language, graphical language, mathematics, etc.) and mental plans (properties of the concepts, relations between them, operations involving the concepts, and situation-adapted and theory-based models).¹⁰

Analysing students' modelling competences in specific situations allows identifying which obstacles the learners meet in the elaboration of their knowledge as well as how possible misconceptions may arise. This forms a basis for a more focused guidance of the students to overcome these difficulties. The didactic, epistemological, and psychological dimensions must be considered in this analysis.

As noted by Kermen and Méheut¹¹ based on previous works by Tiberghien et al.¹² and Walliser,¹³ "[t]he model mediates between the theoretical field which it interprets and the empirical field which it formalises". In the present communication, we investigate a kind of pedagogical tool very often used in teaching and learning context and which we call schematic models, because they share common features with the scientific models defined above. These are graphical drawings presented in a schematic manner, thus voluntarily simplified to eliminate any aspect considered as contingent, of phenomena (chemical in our case, e.g., the dissolution of a salt in water), provided with explanatory annotations (legend of symbols and chemical equation). These representations combine a descriptive dimension insofar as the main aspects of the experimental situation are schematized (beaker, precipitate, etc.) and an explanatory dimension, ideally at the submicroscopic level of the particles involved (atoms, molecules, ions, and electrons), insofar as the behaviour (motions and interactions) of these particles is suggested. Scale distortions—atoms are not represented at the same scale as, for example, the beaker—are inevitable and often implicit, requiring specific reading and interpretation skills on the side of the

students. The lack of such competences may impede their understanding during the learning process. The interpretation and production of such schematic models thus involve mobilizing the three levels described by Johnstone's triangle—macroscopic, submicroscopic, and symbolic.¹⁴ The students are required to also relate these different kinds of information across scales. The explanatory role of the submicroscopic level, which is focusing on unseen particles and their interactions, is instrumental.¹⁵

Working with such models involves both the interpretation of existing schematic models met in textbooks, which we will call reference schematic models, and the autonomous design of models to interpret specific scientific situations (Fig. 1). Both aspects have been assessed in this work in a cross-sectional fashion. 216 learners at three stages of the upper secondary school (15–18 years old, 10th–12th grade) were asked to answer questions on reference schematic models chosen from textbooks used in the French- and German-speaking regions of Belgium (Part A of this work). In Part B, they were invited to assess the relevance of schematic models for their learning of scientific content. In Part C, they were assigned the task of designing personal schematic models of phenomena discussed in the upper secondary school curricula. Particular attention has been devoted to the comparison between the three grades (10th to 12th).

Analysing the information of a schematic model

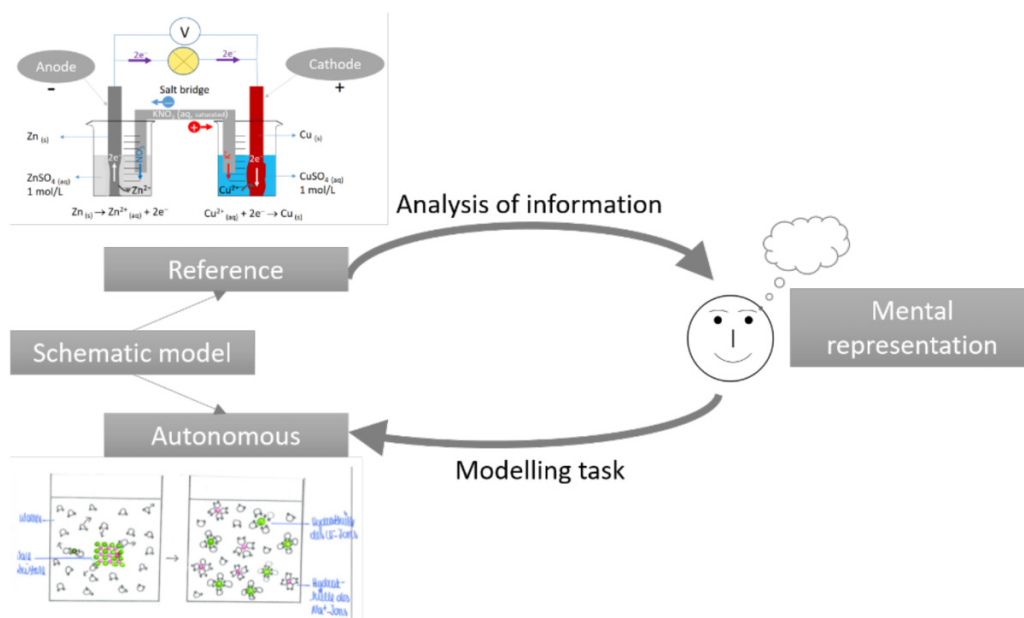
To transmit chemical knowledge, textbooks use schematic graphical representations of scientific phenomena. Therefore, representation skills become a required ability in learning chemistry.¹⁶ Schematic models in science significantly contribute to the construction of knowledge. They are designed in textbooks to optimize their representational content and may also offer some kind of synoptic conceptual map promoting cognitive integration.

Research has shown that students have difficulties interpreting and using representations of scientific concepts.^{17,18} Abd-El-Khalick et al. showed that textbooks have a large impact on students' conceptions and help them to develop conceptions about the nature of science.¹⁸

Analysing a schematic graphical representation does not only require to understand the scientific concepts but also the ability to interpret the language of its content. Translating the content of a chemical representation implies thinking about a phenomenon on three different levels.^{14,19,20} However, according to Cheng and Gilbert, students have difficulties to make links between the chemical phenomena on the macroscopic scale, the usual chemical symbolic representations, and the concepts relevant to the submicroscopic scale.²¹

Autonomous schematic modelling

The process of modelling is widespread in teaching approaches and in general human interaction with the world. When facing a new situation in everyday life, students' most common reaction is to try to find a prototype from their own conceptual field. This prototype can then be seen as a

Fig. 1. The two investigated didactic activities correlated to schematic models. [Colour online.]

first model of the considered phenomenon with, however, some limitations. Models are indeed defined by their specific content and by the way they are elaborated or structured. An interesting and fruitful distinction has been introduced by Gouvea and Passmore, who emphasize that models are both “models of” (some object and some phenomenon) and “models [designed] for” a given aim, a perspective that highlights the role of the modelling agent in defining how a model is built, which elements are included or excluded, etc.²² In the context of science teaching, it is commonly observed that students misunderstand the exact role of models and underestimate their limitations. For instance, they often believe that models represent a definite truth, ignoring their adaptability.²³ Moreover, the importance of the modelling process and of an adequate analysis of the different dimensions spanned by the model concept itself is not sufficiently addressed in the various curricula.^{24,25,26} To overcome these misconceptions, modelling approaches are developed for introducing various concepts associated with, e.g., chemical kinetics, electrochemistry, and chemical equations.^{11,21,25,27,28} This active participation in modelling processes allows developing the ability to translate mental representation in a scientific scheme and to make connections between representations and concepts. The quality of student schematic model productions is a measure of their understanding of chemical phenomena.²⁹ Cheng and Gilbert also observed that a deeper understanding of a chemical concept following a teaching sequence manifests itself in a significant progression of their modelling at the submicroscopic level.²¹

Related studies also showed that, to explain the basic concepts of scientific phenomena, students need to acquire a natural reasoning relating the submicroscopic scale to macroscopic events.^{28,30–32} These studies have consistently demonstrated that conceptual understanding of chemical changes is a concern. Sim and Daniel provided evidence for a

correlation between a high level of understanding of basic chemical concepts and representational competences.¹⁷

Research motivation and research questions

This study is part of a project that aims at improving the impact of chemistry learning through active modelling activities. This research is performed in the context of the Belgian French- and German-speaking education systems. To optimize the design of model-based learning activities, it is necessary to first explore how students react when confronted to existing representation systems and to analyse the relationship between modelling abilities and age in the upper secondary school. This contribution focuses on the following aspects for students of the 10th–12th grades:

- How do student abilities to analyse, that is, interpret and extract information from, reference schematic models compare from the 10th to the 12th grade?
- How do students progressively change from a macroscopic description of a phenomenon towards a model-based interpretation at the molecular level?
- Is there a correlation between the ability to interpret a reference schematic representation and the autonomous modelling skills?

Methods

Sample

An assessment tool has been developed for Belgian French- and German-speaking learners ($N = 216$) at three stages of the upper secondary school (15–18 years old, 10th–12th grade) (Table 1). Requests for authorization to participate in the study were sent to general education secondary schools in the Belgian province of Liège (in majority French-speaking

Table 1. Profile of participants in terms of upper secondary school grade and mother language.

Grade	Age (years)	No. of students tested		Type of education
		French speaking	German speaking	
10th	15–16	60	31	General (two or three 50 min periods of chemistry/week)
11th	16–17	46	19	General (two or three 50 min periods of chemistry/week)
12th	17–18	44	16	General (two or three 50 min periods of chemistry/week)
Total		150	66	

but also including the smaller size German-speaking region). A series of meetings were scheduled with the teachers involved to explain the research aims and the study approach. The questionnaires were originally written in French and then translated into German by a native bilingual chemistry teacher.

All participants followed an advanced chemistry course (two or three periods of 50 min/week) with similar assessment practices. After a general scientific education course in grades 7 and 8, these students had started their specific chemistry education in the 9th grade for which the curriculum includes the following topics:^{33,34}

- Composition and classification of matter: elements, combinations, metals and non-metals, metallic conductivity, atoms and molecules, atomic structure (protons, neutrons, and electrons) and associated models, cations and anions, and electronegativity.
- Qualitative approach of chemical reactions: interpretation of a chemical reaction at the particle level, chemical equation, inorganic chemical functions, oxidation numbers, Arrhenius model, ionic dissociation of a salt, and electrolysis.

These new science curricula have been introduced in 2014 (French-speaking community) and 2015 (German-speaking community). The development of modelling abilities is particularly emphasized both in the general recommendations and in the detailed descriptions of the specific topics to be taught.

We have not attempted to systematically compare the results for the two populations (French- and German-speaking). However, to check the validity of the instrument, we performed Kruskal–Wallis tests for all items of the instrument to detect possible differential item functioning between French- and German-speaking participants. For the majority of items, the null hypothesis was retained.³⁵ As a matter of fact, because the regional education system in Belgium evolved from a previously unique system, the differences between the French- and German-speaking teaching environments are not significant and may be assumed not to affect the data analysis and conclusions.

The instruments

A questionnaire was established to assess both the previously described skills (analysing a schematic model and designing such a model) and how relevant the students

perceive schematic models for their learning process. A cross-sectional assessment of these skills and perceptions was performed from the 10th to the 12th grade. This also allowed us to evaluate the conceptual changes of the students and to identify the obstacles met in the appropriation of the various concepts. Due to organisation constraints, the test time was limited to one lecture period of 50 min: this time limit forced us to focus on a limited number of questions in Part A and on one modelling task in Part C.

Part A: capability to analyse the information of a schematic model

This part of the questionnaire consisted of six multiple choice questions (MCQs): each one was associated with an image (Supplementary 1.A). These different schematic representations of scientific concepts have been selected from textbooks used in Belgian secondary schools. The schematic representations and the questions were selected based on the following criteria: (i) the illustrated concepts had already been taught previously (see the summary of the curricula in the previous subsection); (ii) the schemes refer to central concepts in chemistry; (iii) the distractors test whether students are able to infer a correct information that is effectively contained in the schematic model; in other words, they must be able to focus on the specific information content of the schematic model; and (iv) the distractors focus on the translation of the sometimes implicit symbolic language of the schematic models into conceptual explanatory information and on the awareness of the intrinsic simplified representational character of such a model.³⁶

In a validation phase, the questionnaire has been submitted to university and secondary school colleague teachers to estimate the time required to perform the test and to optimize the level of difficulty of each question. The students' responses were encoded as one point per correct answer. Cronbach's alpha coefficient has been computed to assess the internal coherence of the six items (see the result section).

Part B: student perceptions with respect to schematic models: Likert scale

Part B (see Supplementary 1.B) was designed with three items using a Likert scale ("1" = strongly disagree, "2" = disagree, "3" = agree, and "4" = strongly agree).³⁷ It aims at identifying the strengths and weaknesses of schematic modelling as perceived by the learners in their learning process. As

discussed, e.g., by Liu et al.³⁸ and by Treagust et al.,⁷ students' affective attitudes play a determinant role when learning scientific concepts: one question focused therefore on the perceived power of iconic language and another one on the aesthetic dimension. A third item, more at the metacognitive level and referring, among others, to the work of Fredlund et al.,³⁶ addressed the question whether the students are aware of the need to help deciphering the scheme language by a textual explanation.

Part C: autonomous modelling task

As mentioned by Treagust et al.,⁷ students have seldom the opportunity to engage into autonomous schematic modelling tasks despite the proven benefits for a deeper conceptual understanding.³⁹ From the vantage point of the present study, confronting learners with open modelling tasks and analysing their productions are expected to allow us to identify their spontaneous reasoning, in particular the way they connect the three aspects of Johnstone's triangle.

For the purpose of assessing the schematic modelling skills through the last 3 years of the secondary school, learners were invited to draw, based on their knowledge acquired in the previously described curriculum (see also below), a graphical schematic model describing ("model of")²² and explaining ("model for")²² a scientific phenomenon within three preselected choices that were: water vaporization, dissolution of NaCl in water, or electric current flow through a metal (see Supplementary 1.C).

The following competences have been mainly targeted: representing molecules, displaying explanatory elements, and establishing the link between the particle and the macroscopic level. Three criteria led to the choice of the selected phenomena. First, all three ones had already been taught either in the 9th grade (NaCl ionic dissociation in water and current flow in a metal conductor) or even in the 7th–8th grades (vaporization of water) with further deepening in the next years (see the section describing the sample and the curricula). A second selection criterion is that for the three phenomena, both a macroscopic description (sketch of an idealized experiment) and a rudimentary or more advanced representation at the particle level are possible and may be spontaneously chosen by the students, even though it is clear that only the particle level integrates the explanatory dimension. The third criterion is the modelling of a phenomenon rather than an object. This includes at least partly an explanatory dimension that requires that the students generate a model for explaining rather than a model of a situation.²²

The aim of the work was here to unravel the spontaneous way students deal with models at different stages of their secondary school education. This is the very reason why no specific instruction on the expected level of description and explanation (macroscopic vs submicroscopic) has been provided to best promote spontaneous modelling by the students.

By letting the students choose freely the phenomenon they had to model, we intended to have them focus on the situation that they feel to master best. The primary aim was not to test their knowledge per se but to identify the way they

tackle a modelling task where they feel at ease (or believe so) with the scientific content, even though we are aware of unavoidable biases linked to the variable knowledge level of the students (based on both personal qualifications and quality of previous teaching). It is also clear that the degree of complexity of the three different phenomena is not exactly the same, involving, e.g., more types of particles in the case of the ionic dissociation of NaCl or the current flow in a metal compared to the vaporization of water. A core content was present in the three situations, however: the need to address, in an ideal modelling, the spatial organization of the particles, and their motions and interactions. The possible influence of the complexity differences will be dealt with in the result and discussion sections.

Data collection

In all three schools, data collection was completed during the first semester of the 2018–2019 school year under the supervision of the chemistry teacher responsible for the tested group and one of the co-authors of this work, who informed the students on the goals and the framework of the study.

Data analysis

The student answers to the questionnaire were processed and analysed using the MS Excel and SPSS (version 23) software. Independent sample mean comparison tests and multiple comparisons tests were used to check the significance of differences between groups of students according to their different grades in the upper secondary school, to identify the possible differences across the secondary school curriculum. The statistical methods that were used are mentioned in Table 2. A significance (alpha) level of 0.05 was used for all statistical tests.

Results

Part A: capability to analyse the information of a schematic model

The reliability of Part A of the test can be considered as acceptable based on the computed Cronbach's alpha value of 0.72. The results of the different items could then be aggregated to provide scores between 0 and 6 (one point per correct answer). The difficulty indices of the items spanned a broad range between 0.10 and 0.83 and the indices of discrimination ranged from 0.33 to 1. The Kolmogorov–Smirnov test indicated that the data of Part A are not normally distributed. A non-parametric test was thus used, the Kruskal–Wallis test, to analyse the scores.

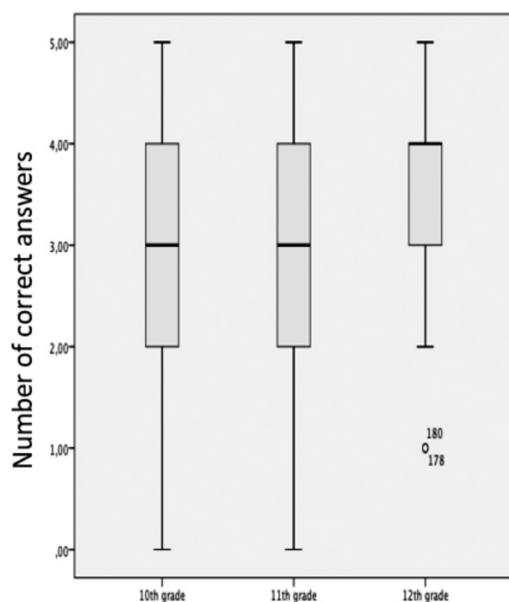
The box plots of Fig. 2 provide information on the average scores and on the score dispersions for the learners over the three successive grades (10th, 11th, and 12th).

Figure 2 shows that 12th-grade students achieved the best scores in Part A. The 10th- and 11th-grade students presented similar median scores. The variability of the score of the 12th-grade students was smaller as indicated by the interquartile range.

The Kruskal–Wallis test was performed and indicated significant differences of capability to analyse the information

Table 2. Statistical methods applied in this work.

Statistical method	Purpose
Descriptive statistics	To calculate averages and standard deviations
Kolmogorov–Smirnov test	To check the normality of the data
Dunn–Kruskal–Wallis multiple comparisons	To compare the difference between groups corresponding to different grades of the upper secondary school
Correlation coefficient	To identify correlations between the groups for the different parts of the questionnaire. To find correlation between students' scores on schematic model analysis and in autonomous modelling tasks
Graphics and box plots	To visualize and indicate trends

Fig. 2. Box plots for the schematic model analysis scores according to the student grades of the upper secondary level. The bold lines indicate the median score for each population. The rectangles represent the interquartile ranges.

of a schematic model between learners of the three groups corresponding to the three different grades (χ^2 (2, $N = 216$) = 17.134, $p < 0.001$).

Dunn's post hoc test for multiple comparisons was subsequently performed to determine which pairs of samples provided significant differences. The test results (Table 3) revealed significant differences between two pairs: 10th versus 12th scores and 11th versus 12th level, with $p < 0.05$.

Finally, for the purpose of comparison with the data of Part C, the 216 students have been categorized, following Ferk et al.,⁴⁰ into three levels according to their scores in Part A: Poor (score $< \text{average } (M) - \text{one standard deviation } (\sigma)$; $n = 20$ students), Average ($M - \sigma \leq x \leq M + \sigma$; $n = 179$ students), and Superior (score $> M + \sigma$; $n = 17$ students). As mentioned before, the data of this Part A are not normally distributed. We believe, however, that the procedure introduced by Ferk,⁴⁰ who gave no information on the normality of the data, is robust enough and will be useful to compare the scores in parts A and C, in particular the correlation between the analysis abilities and the qualitative categorization of the autonomous modelling as macroscopic or submicroscopic.

Part B: student perception with respect to schematic models: Likert scale

Figure 3 summarizes the answers of students about how they perceive the role of schematic models in their learning process. The answers of the students to these three items have not been aggregated, contrary to Part A, because they refer to three different aspects of model reception, for which the rational versus emotional dimensions are not equally weighted.

Figure 3 (item 1) shows that the majority of tested students of all grades consider that the contents of an image must be supplemented by other information (other models, explanations, etc.) to reach a better understanding of reality. The Kruskal–Wallis test did not show any significant difference between the different grades (χ^2 (2, $N = 216$) = 5.095, $p = 0.078$).

Student answers to item 2 (Fig. 3) suggest that a majority of them feel more attracted by graphics than by verbal language. Again, no statistically significant differences between the three groups of students were found for this item (χ^2 (2, $N = 216$) = 2.009, $p = 0.366$). The inter-quartile interval of 10th-grade students is broader than the inter-quartile interval of 11th- and 12th-grade students.

The answers to item 3 (Fig. 3) do not show any clear-cut tendency on the role of aesthetics in a scheme. According to the median, 10th- and 11th-grade students seem to be more sensitive to aesthetical qualities of an image than 12th-grade students. However, the differences among the three groups of students are not statistically significant (χ^2 (2, $N = 216$) = 2.561, $p = 0.278$).

Part C: autonomous modelling task

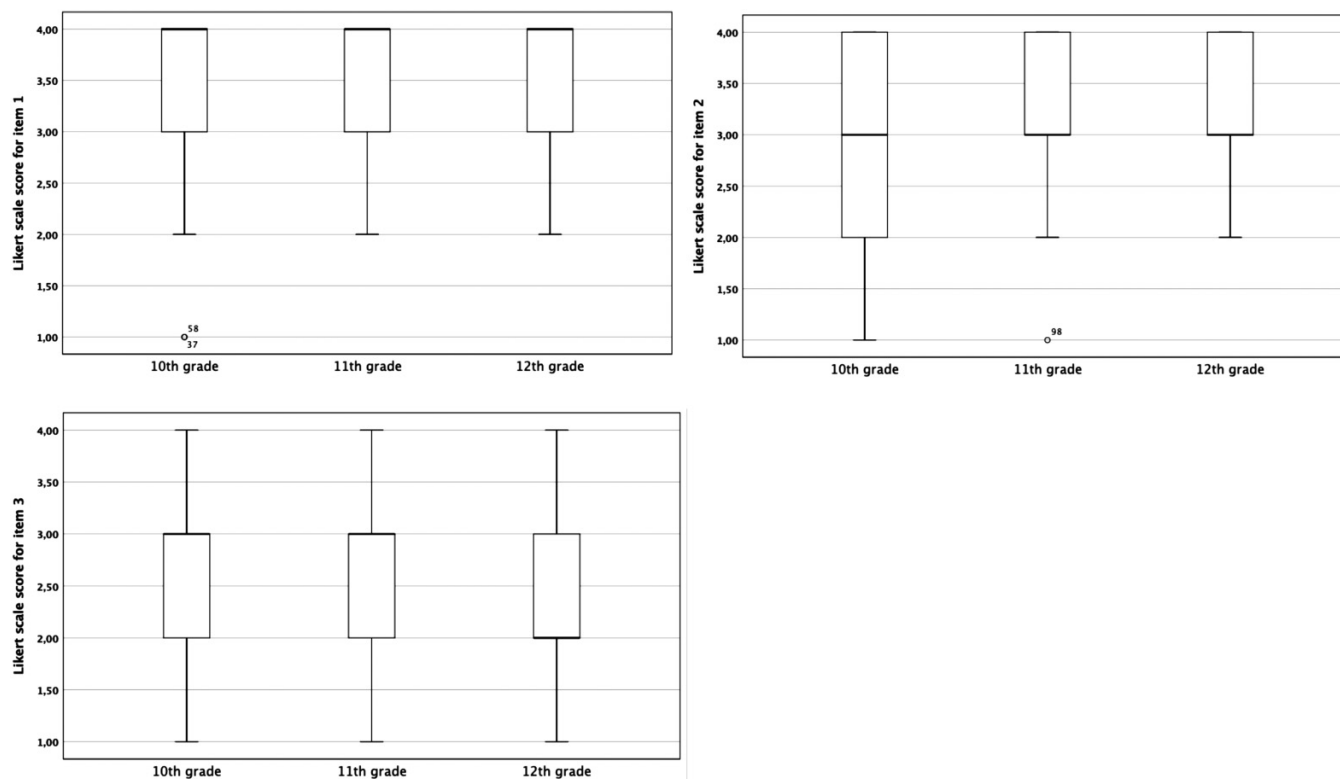
In Part C, students are confronted with an autonomous schematic modelling task. We expect this part of our study to allow us to answer two of our research questions: (i) Are higher grades students more confident with the submicroscopic view of chemical phenomena than lower grade ones? (ii) Are the autonomous modelling competences correlated to the level of ability to interpret an existing reference model?

The percentage of students having chosen each phenomenon is reported in Table 4.

This table shows that 40%–45% of the students chose the water vaporization phenomenon, whatever the grade. The reason for this choice has not been investigated. A hypothesis would be that, as mentioned before, this process seems less complex because it involves only one type of particles and

Table 3. Dunn–Kruskal–Wallis multiple comparison tests for the capability to analyse the information of a graphical schematic model.

Levels of Part A (pairs of different stages)	Mean difference	Standard error	Chi-square (χ^2)	<i>p</i> value
10th versus 11th	0.1582	0.1288	0.467	0.494
10th versus 12th	0.6379	0.1319	12.188	$p < 0.001$
11th versus 12th	0.7961	0.1420	14.384	$p < 0.001$

Fig. 3. Box plot of the answers on items 1 (top left), 2 (top right), and 3 (bottom left) of Part B according to the student grades in the upper secondary level. “4” corresponds to “strongly agree”, “3” to “agree”, “2” to “disagree”, and “1” to “strongly disagree”.**Table 4.** The percentage of students according to the chosen topic.

Grade	Water vaporization	Dissolution of NaCl in water	Electric current flow through a metal
10th	44	32	24
11th	41	31	28
12th	43	36	21

that students might be more familiar with it since it is taught already in the 7th and 8th grades.

To infer a maximum of information from the collected data, the following three levels of analysis were implemented:

- In a first step, each student schematic production was assigned a category according to the balance between the macroscopic and submicroscopic aspects represented in the drawing. Three categories were defined: macroscopic, elementary submicroscopic, and advanced submicroscopic, as described in Table 5. It must be emphasized here that this analysis assessed only the submicroscopic–microscopic balance and not the scientific accuracy, which is the focus of the next step.

- In a second approach, the student schematic models were quantitatively assessed for the accuracy and precision of their scientific information content, according to six criteria listed in the Supplementary material (Supplementary 2).
- The third level of analysis looks for a possible correlation in the ability levels for schematic level interpretation, defined in Part A, and the scores reached in the quantitative assessment of the autonomous schematic modelling skills.

Type of model representation

Depending on the pedagogical goals aimed at, and on the emphasis put on the macroscopic and submicroscopic levels of Johnstone’s triangle, schematic models often appear to

Table 5. Comparison of three types of schematic model representations.

Macroscopic model	Submicroscopic model: elementary level	Submicroscopic model: advanced level
Schematic idealized representation of the operating mode of an experimental device. Example: an electric circuit	Idealized representation of the spatial distribution of particles without details on the structure of these particles, drawn as spheres or circles. Example: the three states of matter (solid, liquid, and gas)	In addition to the elementary level, symbolic representation of the internal structure of particles (molecular geometry) and of possible interactions and motions (depending on the considered situation)

belong to one of the three categories defined in **Table 5**. Based on research on the modelling capacities of students,^{17,41} we posit that this categorization represents a key to reading the students' productions.

The schematic models drawn by the tested students are recognized to be very diverse and sometimes intermediate between two categories, so that choices had to be made. It is nevertheless observed that in most cases the categorization process was rather obvious and that the collected data shed light on the students' spontaneous modelling approach across upper secondary school. For this part of analysis, the three co-authors therefore assessed collectively the students' models and easily built a consensus view. To illustrate this categorization procedure, **Fig. 4** shows examples of students' representations for the three phenomena. Consider, e.g., the dissolution of NaCl in water. Figure A focuses on a sketch of the experimental apparatus (also introducing a non-necessary heating source). Figure B introduces clearly submicroscopic particles, distinguishing between cations and anions and suggesting the transition from the solid state (left) to the dissociated solution state (right). Interactions with the solvent (solvation) are, however, omitted in this elementary submicroscopic approach. This makes the difference with **Fig. C** that clearly introduces the role of the solvent in the ionic dissociation process and can be considered as reaching the advanced submicroscopic stage.

The distribution of student schematic models according to the three categories of **Table 5** is displayed in **Fig. 5** for the three selected situations.

Despite some fluctuations, **Fig. 5** shows a clear trend towards a more advanced submicroscopic representation as the level of instruction increases. For example, for the salt dissolution phenomenon, the percentage of students drawing an advanced submicroscopic model increases from 0% (10th grade) to 28% (11th grade) and then to 58% (12th grade).

Similar tendencies are observed for the other topics. It must be noticed, however, that students were least successful to represent the particle level for the electric current flow process, whatever their age. For example, only 31% of the 12th-grade students proposed an advanced submicroscopic model for this process, compared to 58% for the salt dissolution process. This might be linked to the already mentioned complexity of this task that required to consider the motion of conduction electrons in the field of ionic cores. No significant differences were, however, observed when comparing water vaporization and NaCl dissociation, although the latter process involves ions and solvent molecules.

To look for a possible link with the student abilities to infer information from a reference schematic model, **Fig. 6** displays the percentage of each model category for the students recognized as having poor, average, or superior model interpretation skills (see Results: Part A).

Figure 6 suggests a correlation between the model interpretation skills and the capability of designing autonomously an advanced submicroscopic model. The percentage of such models increases as the interpretation skills improve.

Quantitative assessment of the content of the student schematic models

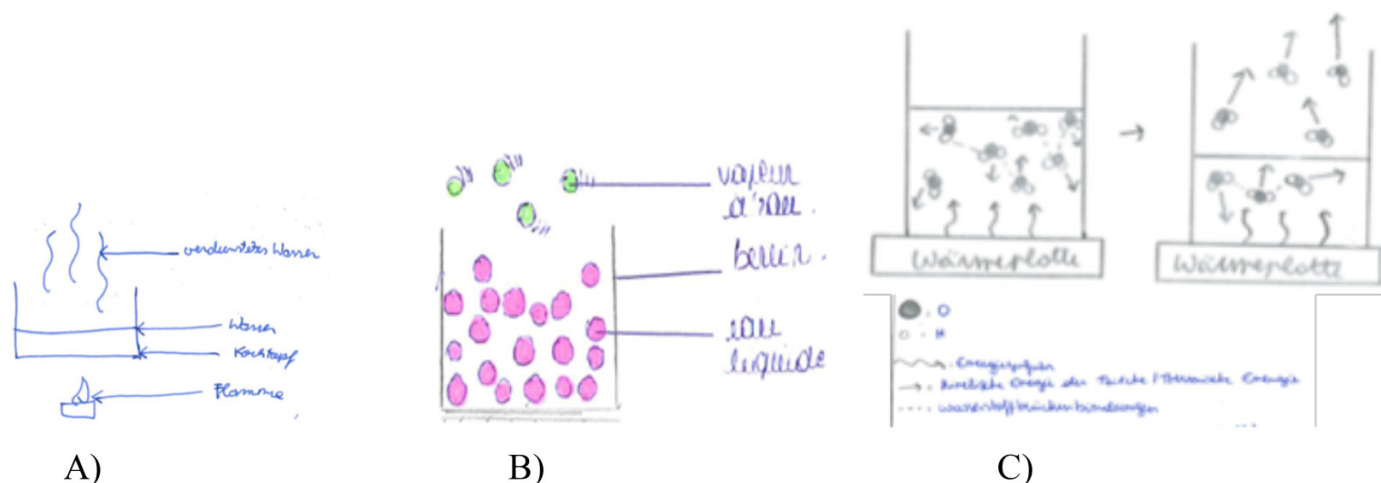
The learner productions have been quantitatively analysed using a list of six criteria that had to be met in an adequate representation (see Supplementary 2). These criteria have been specifically designed in the frame of this study to span three levels of increasing modelling competences: level 1 (criteria 1 and 2), level 2 (criteria 3 and 4), and level 3 (criteria 5 and 6). Adapted criteria had to be selected for the three phenomena to be modelled, considering their specificities, as already discussed before. Each fulfilled criterion was counted for one point, leading to a score in the 0–6 range. When ambiguities existed whether a criterion was fulfilled or not, half points could be assigned.

This assessment was more difficult than assigning one of the categories discussed in the previous subsection (**Table 5** and **Figs. 5** and **6**). To limit the influence of subjective judgments on the criteria fulfilment, all student productions were assessed independently by the three co-authors. Cohen's κ parameter was computed to check the level of agreement.⁴² All κ values lie between 0.7 and 0.9. The average κ values for modelling the vaporization of water, dissolution of NaCl in water, and electric current flow through a metal are, respectively, 0.80, 0.83, and 0.90. These κ values indicate a high agreement between the three appraisers for the assessment of the three phenomena.⁴³

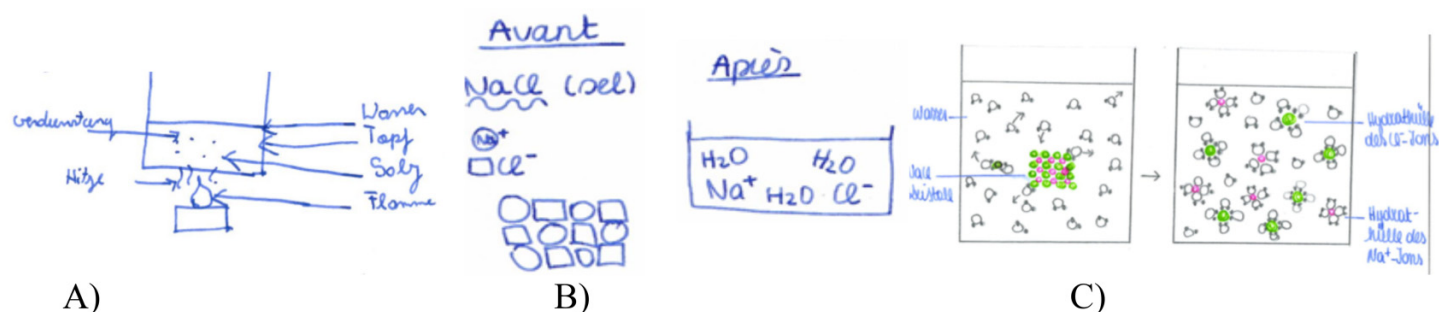
To illustrate the assessment based on the criteria of Supplementary 2, let's consider again the dissolution of NaCl in water (**Fig. 4**). The model in Part A barely meets criterion 1, although it mentions the salt (and suggests possibly macroscopic tiny NaCl crystals). Criterion 2 is fulfilled. The four other criteria are not met. This model reaches then a score of 0.5. Model B fulfils criteria 1, 2, and 3 but not 4, 5, and 6 and reaches then a score of 3. Model C reaches a score of 6, all criteria being fulfilled.

First, a classification of students' schematic models as a function of the number of met criteria has been

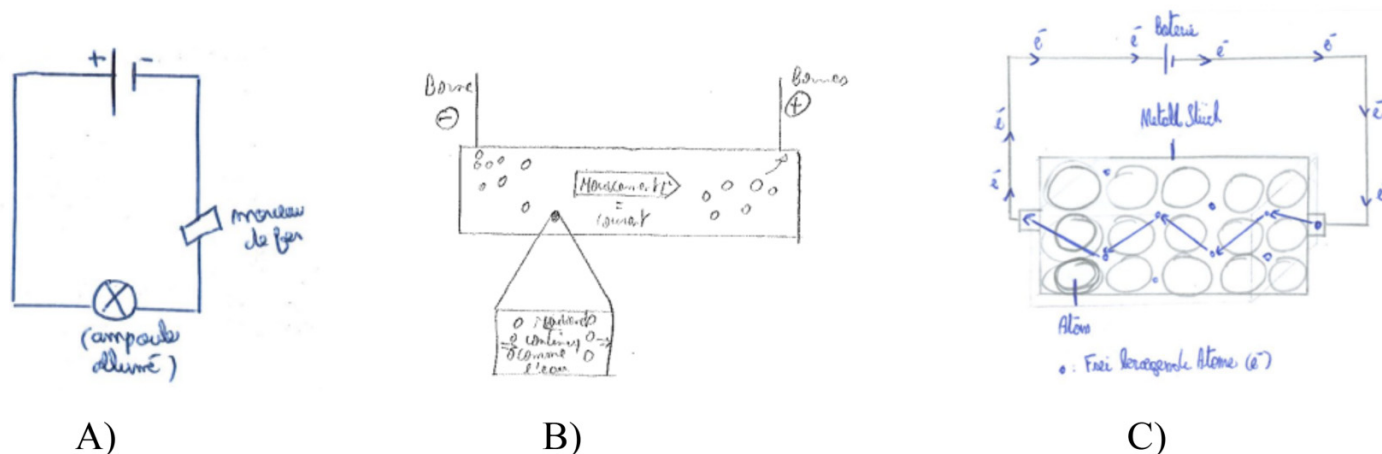
Fig. 4. Examples of students' representations of the three selected phenomena: (A) macroscopic model, (B) submicroscopic model: elementary level, and (C) submicroscopic model: advanced level. [Colour online.]



Vaporization of water



Dissolution of NaCl in water



Electric current flow through a metal

performed. A representation was globally considered as "advanced" if it met 5 or 6 criteria, as "intermediate" for 3 or 4 met criteria, and as "basic" when only 1 or 2 criteria were reached. In most cases, students reaching higher

level criteria also reached the lower level ones but some exceptions were unavoidable. The results of this assessment are shown in charts A in Fig. 7 for the three modelled situations, where the percentage of students in each

Fig. 5. Distribution of student schematic models over the three categories depending on their grade in the upper secondary school. [Colour online.]

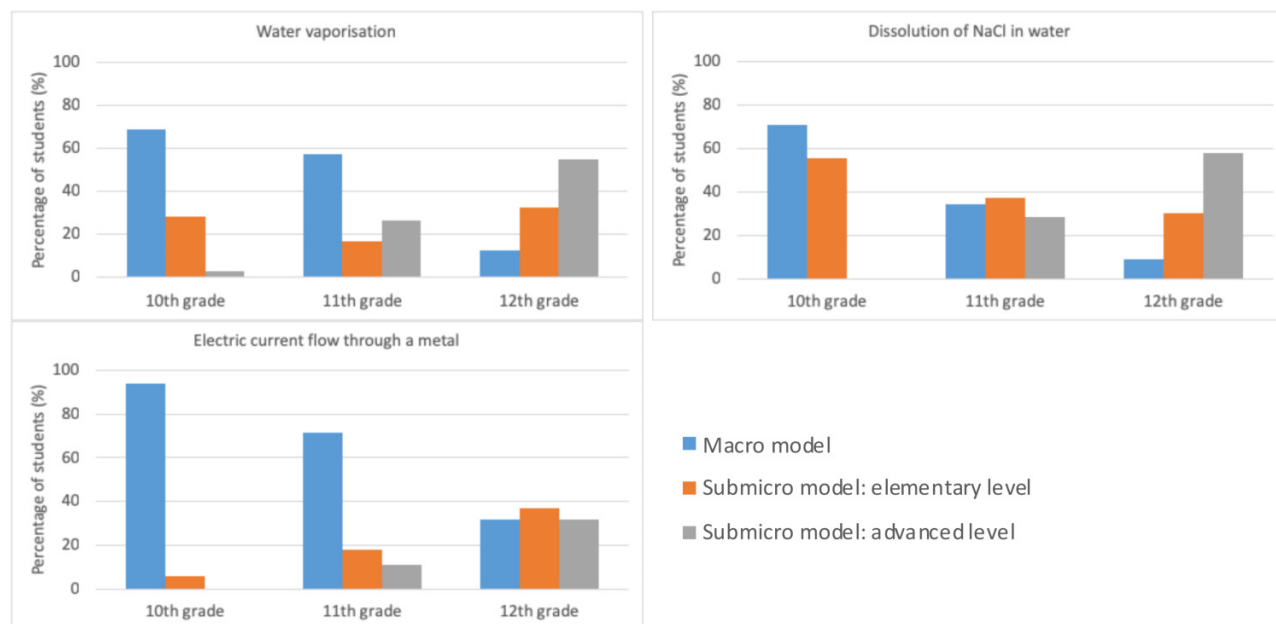
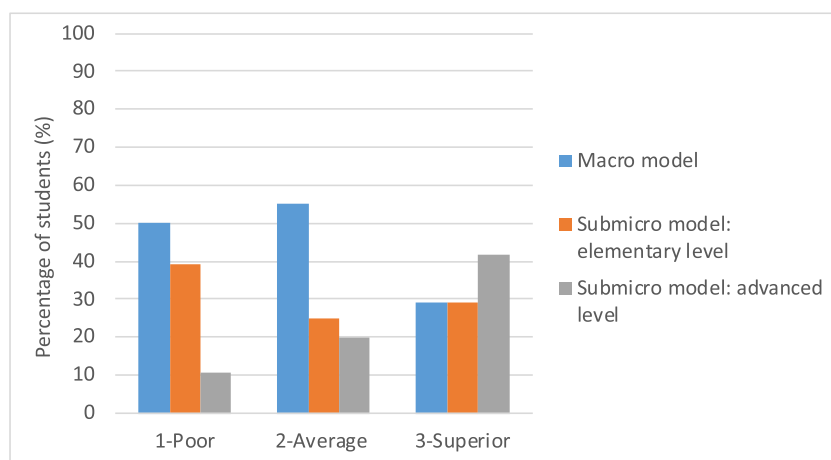


Fig. 6. Distribution over the categories of autonomous schematic models as a function of the capability level of inferring information from a reference model. [Colour online.]



of the three groups (basic, intermediate, and advanced) is displayed.

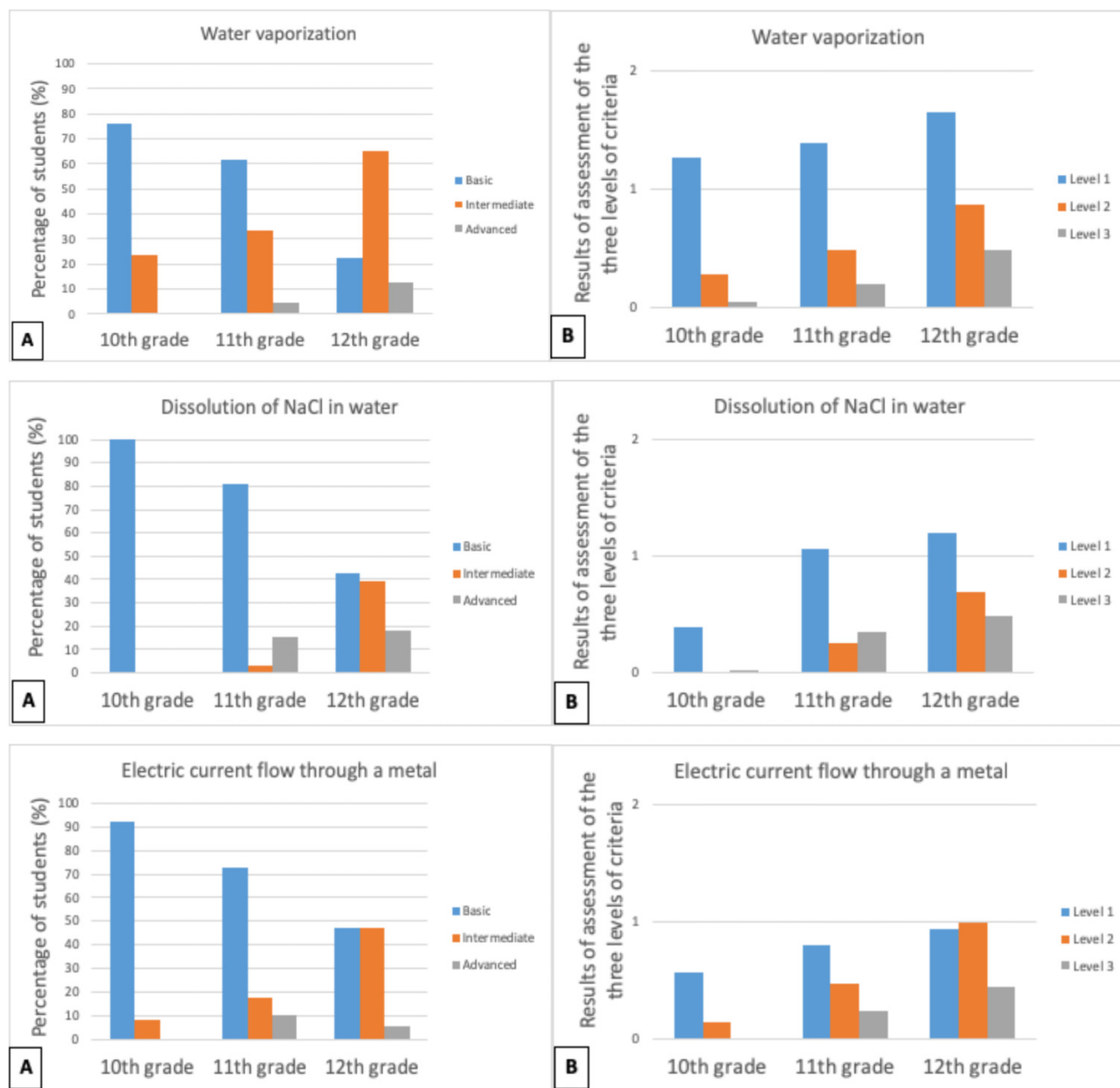
To check the consistency of the data, they have been represented in a different but complementary way in charts B of Fig. 7. In these charts, the average result reached for each of the three criterion levels (see Supplementary 2) is plotted: this corresponds to a value between 0 and 2 because there are two criteria per level.

The data reported in charts A of Fig. 7 highlight a positive trend from the 10th to 12th grade. For example, for the water vaporization, the percentage of students at only basic level dropped from 76% (10th grade) to 62% (11th grade) and then to 22% (12th grade). These results are confirmed in Fig. 7B,

which also confirms the relevance of the hierarchy of chosen criteria.

Similar conclusions emerge for the dissolution of NaCl, but the students' scores are worse than for the vaporization of water. For example, still 42% of the 12th-grade students remain at basic level. This might be due to the fact that this phenomenon is in fact a more complex process involving cleavage of ionic bonds and ion hydration. For the modelling of the third phenomenon, electric current flowing through a metal, 10th- and 11th-grade students were not very successful in building models, reaching mainly a basic level (92% of the 10th-grade students and 72% of the 11th-grade students). 12th-grade students had less difficulties in designing models

Fig. 7. Assessment of students' autonomous schematic modelling tasks for the three phenomena according to different grades. (A) Assessment according to the number of criteria met in each representation, and (B) average number of criteria fulfilled (0, 1, or 2) for each level: level 1 (criteria 1 and 2), level 2 (criteria 3 and 4), and level 3 (criteria 5 and 6). [Colour online.]



of this phenomenon (42% basic level, 40% intermediate, and 18% advanced level).

An important point has to be made when comparing charts A (representing percentages) and B (representing scores). Consider, e.g., the dissolution of NaCl in water. In chart A, a decrease of the percentage of basic models from the 10th to the 12th grade appears in parallel with a percentage increase of the intermediate and advanced models. In chart B, the scores of all three levels increase, which is consistent with the data of chart A. Whereas on average 10th-grade students do not even reach completely level 1 (score < 0.5), 12th-grade students reach better scores (even if non-ideal) for all three levels. In all three B charts, a positive trend is observed for the

three levels of criteria, which confirms a tendency towards an intermediate or even advanced modelling ability.

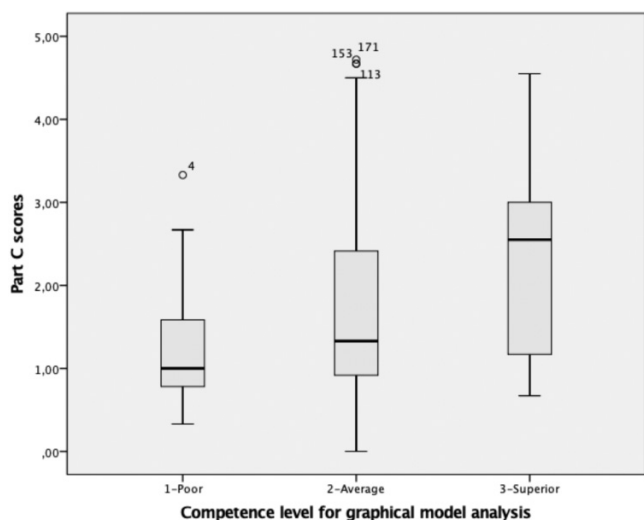
The differences between the different grades are statistically significant as shown by the Dunn-Kruskal-Wallis multiple comparisons of the scores in Part C (Table 6).

Comparison between student competence levels in inferring information from a reference schematic model and autonomous modelling competences

The aim here is to investigate whether the competences to analyse a reference schematic model have some

Table 6. Dunn–Kruskal–Wallis multiple comparisons of modelling task of the three modelled phenomena.

Levels of Part C (pairs of different grades)	Modelled phenomenon	Mean difference	Standard error	Chi-square (χ^2)	Level of significance (p)
10th versus 11th grade	Water vaporization	0.47	0.13	4.640	0.03
	Dissolution of NaCl in water	1.23	0.19	28.184	< 0.001
	Electric current flow through a metal	0.79	0.20	7.928	0.005
10th versus 11th grade	Water vaporization	1.39	0.14	11.162	< 0.001
	Dissolution of NaCl in water	1.95	0.18	48.867	< 0.001
	Electric current flow through a metal	1.64	0.23	22.197	< 0.001
11th versus 12th grade	Water vaporization	0.92	0.15	33.567	0.001
	Dissolution of NaCl in water	0.72	0.20	8.137	0.004
	Electric current flow through a metal	0.85	0.24	4.702	0.030

Fig. 8. Box plot of competences to design autonomously a schematic model as a function of the competence level reached in interpreting a reference model.

predictive value towards the ability to design autonomously such a model for a given phenomenon. Pearson's and Spearman's correlation coefficients have been calculated for tasks A and C (both scores in the 0–6 range). A small but statistically significant correlation was found: $r = 0.222$, $p < 0.01$; $r_s = 0.209$, $p < 0.01$). To gain additional insight, the scores for task C have been analysed for each degree of competences (poor, average, and superior) identified for task A. The corresponding box plot (Fig. 8) suggests that the scores obtained for the drawings in Part C correlate indeed with the competence levels defined in Part A. The low (0.2) value of the Pearson's and Spearman's coefficients might be due to the large contribution of the average students, which represent the majority (83%) of the sample and for which the scattering of the data is large.

The Kruskal–Wallis test (χ^2 (2, $N = 216$) = 6.609, $p = 0.037$) showed a significant difference among students of the three different levels. However, as shown by Dunn's post hoc multiple comparisons (Table 7), significant differences arise only between the “poor” and “superior” groups, as might also have been expected from Fig. 8.

Discussion

In this section, we discuss globally the results of the three parts (A, B, and C) in relation with the three research questions. For the ease of the discussion, we recall here these questions:

- How does the student ability to analyse reference schematic models compare from the 10th to the 12th grade?
- How do students progressively switch from a macroscopic description of a phenomenon towards its interpretation at the molecular level?
- Is there a correlation between the ability to analyse a reference schematic model and autonomous modelling skills?

We also examine the relationship between conceptual change and scientific modelling according to the students' different grades in the upper secondary school.

Figure 2 shows that 12th-grade students reached the highest score on the six MCQs of Part A that assessed their capability to infer information from a scheme, compared to both 10th- and 11th-grade students. The median of these last two groups is similar. Dunn–Kruskal–Wallis multiple comparisons revealed a significant difference between 12th-grade students and the two other grades (Table 3). A tentative explanation is that within the Belgian French- and German-speaking chemistry curricula, the relationships between the macroscopic and submicroscopic worlds as well as the associated symbolic language (Johnstone's triangle) are mostly taught during the 10th and 11th grades, while more application-oriented topics (acid–base equilibrium and redox

Table 7. Comparison of students with different scheme analysis competence levels confronted to autonomous model design.

Levels of Part C (pairs of educational level)	Mean difference	Standard error	Chi-square (χ^2)	Level of significance
Superior versus Poor	0.987	0.234	6.521	0011
Superior versus Average	0.839	0.193	3.480	0.062
Average versus Poor	0.148	0.157	2.509	0.113

reactions) are taken up in detail in the 12th grade. It might then be assumed that during their 10th and 11th grade years, the students get progressively more and more familiar with reasoning at the three Johnstone's levels so that they can reach what we called an "advanced" level only after completing grade 11th.

These results support other studies reported in the literature, showing that a majority of learners need to revisit a specific situation several times during their chemistry education to develop progressively their cognitive abilities to interpret chemical representations of this situation.^{17,18}

Figure 3 summarizes the results collected on the perception that students have about schematic models. Kruskal-Wallis tests did not detect any particular trend through the upper secondary school curriculum, so that students' global perceptions appear to remain stable. Students have a positive perception of models and they appreciate the compact information they provide but are aware of the need of additional verbal-type information to complement the graphical schemes to make an optimal use of it. They are rather neutral as far as aesthetical aspects are concerned.

Let us focus now on the competencies for autonomous model design, illustrated by a few examples in Fig. 4. Such student graphical representations of a chemical process cannot be considered as consistent with a recognized scientific view if they remain restricted to a simple rearrangement of particles, which can be referred to as a "basic" particle model, and if they do not include information on interactions between particles and dynamical aspects that are central for an understanding of the considered phenomenon.⁴⁴ Johnstone showed that students need time to become able to create a link between the three levels of thinking in chemistry (macroscopic, submicroscopic, and symbolic), and to make connections between schematic representations and the taught information.^{14,19,20} The data displayed in Figs. 5 and 6 are consistent with these considerations. Lower grade students are more prone to spontaneously propose a macroscopic descriptive model, similar to the idealized operating mode of an experiment, whereas a tendency to switch to a submicroscopic symbolic representation, even up to an advanced level (including interactions and (or) particle motion), is observed for upper grade students (Fig. 5). Figure 5 shows that, respectively, 70%–90% of the 10th-grade students, 30%–70% of the 11th-grade students, and 10%–30% of the 12th-grade students limited their models to the macroscopic level. Interestingly, the tendency to favour a submicroscopic representation in a modelling task seems to correlate positively with the ability, assessed in Part A, to infer relevant

information from existing submicroscopic graphical representations (Fig. 6).

Models at the submicroscopic, particle level have a better unifying power because they are not limited to a specific macroscopic situation but encompass a variety of contexts. Because they make decontextualization possible, they also enable a more thorough understanding of a class of chemical phenomena. This is, however, barely recognized by young learners. According to Greca and Moriea,⁴⁵ and Fredlund et al.,³⁶ the relationship that is established between reality and a physical model is complex, and the textbook images that illustrate physical concepts are not spontaneously understood because the correspondence between their contents and the macroscopic reality is not straightforward. Ferik et al. found a significant correlation between spatial visualization abilities of students and their educational level from elementary (aged 13–14 years) to secondary (aged 17–18 years) school, and then to university (aged 21–25 years).⁴⁰ They observed that the youngest students have difficulties to understand the unifying nature of a model. Grosslight et al. found that "these students have a poor understanding of models; they probably believe that models are incomplete copies of real objects, which is the lowest level of modelling".⁴⁶ Hurst has claimed that "this oversimplified presentation misleads chemistry students and may actually cause learning impediments".⁴⁷

The quantitative analysis based on the six assessment criteria of Supplementary 2 and summarized in Fig. 7 reveals a significant positive trend through the three grades of the upper secondary school. A correlation is observed between the scores obtained in the autonomous modelling task and in the reference model analysis task but statistically significant differences appear only between the two extreme categories ("poor" and "superior"). We note, however, that the dispersion for the "superior" category is larger.

A finer analysis of the data requires to confront them to the objectives of the official chemistry curricula for French- and German-speaking schools in Belgium, as described in the Methods section. Most concepts involved in the proposed situations to be modelled are taught in the 7th to 9th grades, in the chemistry but also in the physics course (followed in parallel by the tested students). These concepts and competences are revisited at a deeper level in the next years.

A first observation concerns the symbolic level of a schematic modelling. A majority of students omitted to annotate the scheme and to mention the meanings of the symbols used: the percentage of those learners who did represent annotations of the symbols increases, however, from 7% (10th grade) to 22% (11th grade), and then to 40% (12th grade). The

second important observation concerns concepts that contribute to the transition between basic to advanced submicroscopic modelling (Table 5), that is, intermolecular interactions and thermal motion. Interactions between particles are not considered by the students of the 10th grade and only 3% of the 11th-grade students and 9% of the 12th-grade students mentioned them explicitly. The results for 10th-grade students are probably not surprising based on the school curricula but the very low improvement in the next 2 years is deceiving as far as molecular interactions (hydrogen bonds in particular) are taught in the 11th grade. Particle thermal motion, even though it is taught in the physics course in the 10th grade and revisited in the chemistry course, was also strongly ignored by students: only 2%, 10%, and 29% of them mentioned it in the 10th, 11th, and 12th grades, respectively. These results are, however, better than those for the intermolecular interactions. The concept of ion, which the learners are confronted very early to, already in grade 9, is also very poorly implemented in the students' drawings: 0% (10th grade), 10% (11th grade), and 31% (12th grade) introduced them in an appropriate way in their schematic model productions. Globally, except for the intermolecular interactions where the results remain very unsatisfactory, the performances can be considered to increase steadily with a more significant jump between the 11th and 12th grades. These detailed results are consistent with the overall data shown in Fig. 7, where the advanced level is seen to be poorly achieved even by 12th-grade students. As some researchers already noticed, these concepts present strong conceptual difficulties that contribute to hamper their active understanding and mobilization by students.^{45,48,49}

Conclusions and perspectives

The present work investigated the interaction between upper secondary school students and schematic models along four directions: (i) their ability to analyse a reference graphical scheme met in a textbook, that is, to extract the relevant scientific information; (ii) their psychologic-emotional reception of schematic models in a scientific context; (iii) their competences for the autonomous design of a schematic model for a scientific phenomenon which they had already been confronted to in their science education; and (iv) the possible correlation between the ability to interpret a reference graphical scheme and to design such a scheme.

The sample consisted of 216 students of 10th, 11th, and 12th grades, from Belgian French- and German-speaking schools with similar science curricula. Because the data were not normally distributed (according to the Kolmogorov–Smirnov test), the Kruskal–Wallis test was used to identify significant differences between groups, with additional post hoc Dunn's tests when needed.

A positive trend in the investigated competences, both for interpreting a reference schematic model and for autonomously designing an original one, is in most cases observed through the three grades but the most significant improvements appear at the transition between the 11th and 12th grades. A tentative explanation based on the structure of the relevant chemistry curricula has been put forward. The

comparison of results of parts A and C also indicates that the autonomous model design competence level is related to the level of capability to analyse the information of a scheme. The perception of the learners with respect to schematic models is globally positive and remains stable along the three grades. Let us mention that our study is complementary to the concept cartoons that have been developed by Keogh and Naylor.⁵⁰ It is a simple alternative to develop learners' thinking by drawing.

Our approach allows assessing the conceptual change of the students and identifying the obstacle met in the appropriation of the concepts.^{21,25,28,29} The majority of the 10th- and 11th-grade students proposed a modelling production at macroscopic level. However, the 12th-grade students showed better abilities to reason at the submicroscopic level. The proportion of students taking into account intermolecular interactions and particle thermal motion in their models remains deceiving even though some progression takes place. Although they are part of the official curriculum, these concepts appear to remain too abstract for the students who do not mobilize them to explain a specific chemical phenomenon.

Limitations and perspectives of this study

A first limitation is that the study performed is cross-sectional rather than longitudinal. It would be interesting to follow during a 3-year period a given test group from the 10th grade to the 12th grade along with appropriate modelling training activities and to compare the results with a control group.

A second limitation is that we did not complete the study by using more qualitative tools. It has not been possible to interview students after they had realized the three parts of the questionnaire, to describe more precisely their opinions on the schematized concepts and their model choices to explain the selected scientific phenomena.

This study did not specifically follow the goal of analysing student preconceptions even though some weaknesses we identified could be interpreted as such (e.g., the neglect of intermolecular interactions). We believe, however, that it is possible to design specific modelling tasks for well-chosen phenomena to identify student preconceptions.

We are aware of the fact that this study only examined 216 students with unequal distribution among the three groups of students of different grades. A complementary study could be envisaged with a larger number of students. The correlation between the quality of different schematic models designed by each student could also be investigated.

This research focused on the analysis of individual student productions and neglected the social dimension of a teaching sequence where designed models can be the basis for interactions between peers. This paper reports on tools and methods that could be applied to assess how learners' conceptions and modelling skills evolve either during a learning sequence within a given year or over consecutive years. Model design can be integrated in a teaching sequence where the particle model plays a central explanatory role (e.g., chemical kinetics) and contributes to a thorough understanding.

Peer reviewing of the designed individual models, or social interactions within peer groups to develop a common institutionalized model, under the guidance of the teacher may be suggested.⁵¹ This approach can also integrate visualization tools along with active learning strategies using, e.g., interactive websites to support schematic drawing.^{52–54} The use of activities on an interactive website can improve students' understanding of chemical phenomena by visualizing the links between the macroscopic and submicroscopic levels.

Acknowledgements

The research presented in this paper was the result of a collaboration between several schools, teachers, and Belgian students. We acknowledge the help of Mrs Kathy Mawet and Véronique Lonnay for the critical review of the questionnaire. We are grateful to Mrs Betty Williams, Naima Saidi, and Sylvie Larock for the opportunity to collaborate in their secondary school classes.

Article information

History dates

Received: 12 June 2021

Accepted: 29 March 2022

Version of record online: 27 July 2022

Copyright

© 2022 The Author(s). Permission for reuse (free in most cases) can be obtained from [copyright.com](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Author information

Author ORCIDs

Hamad Karous <https://orcid.org/0000-0003-4060-9673>

Bernard Leyh <https://orcid.org/0000-0001-8447-5836>

Supplementary material

Supplementary data are available with the article at <https://doi.org/10.1139/cjc-2021-0162>.

References

- Carey, S. J. *Appl. Dev. Psychol.* **2000**, *21*, 13. doi:10.1016/S0193-3973(99)00046-5.
- Vergnaud, G. *Revue française de pédagogie*. **1991**, *10*, 133.
- Vergnaud, G. *Int. J. Educ. Dev.* **2013**, *36*, 131.
- Read, J. R. *Children's Misconceptions and Conceptual Change in Science Education*, **2004**, Retrieved 11 September 2021 from <https://asell.org/wp-content/uploads/2018/05/Childrens-Misconceptions-and-Conceptual-Change-in-Science-Education-1.pdf>.
- Posner, G. J.; Strike, K. A.; Hewson, P. W.; Gertzog, W. A. *Sci. Educ.* **1982**, *66*, 211. doi:10.1002/sce.3730660207.
- Amin, T. G.; Levrini, O. In *Converging Perspectives on Conceptual Change. Mapping an Emerging Paradigm in the Learning Sciences*; Amin, Levrini, Eds.; Routledge: London and New York, **2018**.
- Treagust, D. F.; Won, M.; McLure, F. In *Converging Perspectives on Conceptual Change. Mapping an Emerging Paradigm in the Learning Sciences*; Amin, Levrini, Eds.; Routledge: London and New York, **2018**; pp 121–128.
- Pluta, W.; Chinn, C.; Duncan, R. J. *Res. Sci. Teach.* **2011**, *48*, 486. doi:10.1002/tea.20415.
- Chen, J.; Wang, M.; Grotzer, T. A. *J. Res. Sci. Teach.* **2018**, *55*, 1239. doi:10.1002/tea.21450.
- Lehrer, R.; Schauble, L. In *Converging Perspectives on Conceptual Change. Mapping an Emerging Paradigm in the Learning Sciences*; Amin, Levrini, Eds.; Routledge: London and New York, **2018**; pp 163–169.
- Kermen, I.; Méheut, M. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2009**, *10*, 24. doi:10.1039/B901457H.
- Tiberghien, A.; Psillos, D.; Koumaras, P. *Instr. Sci.* **1995**, *22*, 423.
- Walliser, B. *Systèmes et modèles*; Seuil: Paris, **1977**.
- Johnstone, A. H. J. *Comput. Assist. Learn.* **1991**, *7*, 75. doi:10.1111/j.1365-2729.1991.tb00230.x.
- Kapon, S. In *Converging Perspectives on Conceptual Change. Mapping an Emerging Paradigm in the Learning Sciences*; Amin, Levrini, Eds.; Routledge: London and New York, **2018**; pp 198–205.
- Treagust, D.; Chittleborough, G.; Mamiala, T. *Int. J. Sci. Educ.* **2002**, *24*, 357. doi:10.1080/09500690110066485.
- Sim, J.-H.; Daniel, E.-G.-S. *Cogent Educ.* **2014**, *1*, 991180. doi:10.1080/2331186X.2014.991180.
- Abd-El-Khalick, F.; Myers, J.-Y.; Summers, R.; Brunner, J.; Waight, N.; Wahbeh, N.; Zeineddin, A.-A.; Belarmino, J. *J. Res. Sci. Teach.* **2017**, *54*, 82. doi:10.1002/tea.21339.
- Johnstone, A. H. J. *Chem. Educ.* **1997**, *74*, 262. doi:10.1021/ed074p262.
- Johnstone, A. H. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2006**, *7*, 49. doi:10.1039/B5RP90021B.
- Cheng, M. M.; Gilbert, J. K. *Int. J. Sci. Educ.* **2017**, *39*, 1173. doi:10.1080/09500693.2017.1319989.
- Gouvea, J.; Passmore, C. *Sci. Educ.* **2017**, *26*, 49. doi:10.1007/s11191-017-9884-4.
- Lopes, J. B.; Costa, N. *Int. J. Sci. Educ.* **2007**, *29*, 811. doi:10.1080/09500690600855385.
- Gilbert, J. K. *Int. J. Sci. Math. Educ.* **2004**, *2*, 115.
- Prins, G. T.; Bulte, A. M. W.; Van Driel, J. H.; Pilot, A. *Int. J. Sci. Educ.* **2008**, *30*, 1867. doi:10.1080/09500690701581823.
- Valk, T.; Driel, J. H.; Vos, W. *Res. Sci. Educ.* **2007**, *37*, 469. doi:10.1007/s11165-006-9036-3.
- Ghirardi, M.; Marchetti, F.; Pettinari, C.; Regis, A.; Roletto, E. *J. Chem. Educ.* **2014**, *91*, 59. doi:10.1021/ed3002336.
- Maia, P. F.; Justi, R. *Int. J. Sci. Educ.* **2009**, *31*, 603. doi:10.1080/09500690802538045.
- Chang, H. Y.; Quintana, C.; Krajcik, J. *J. Sci. Educ. Technol.* **2014**, *23*(3), 355. doi:10.1007/s10956-013-9468-2.
- Vosniadou, S. *Learn. Instr.* **1994**, *4*, 45. doi:10.1016/0959-4752(94)90018-3.
- Coll, R. K.; Taylor, N. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2002**, *3*, 175. doi:10.1039/B2RP90014A.
- Copper, C. L.; Koubek, E. J. *Chem. Educ.* **1999**, *76*, 1714. doi:10.1021/ed076p1714.
- Communauté Française Wallonie-Bruxelles. *Compétences et Savoir Requis en Sciences GéNéRales*, **2014**, http://www.gallilex.cfwb.be/document/pdf/40140_001.pdf.
- Ministerium der Deutschsprachigen Gemeinschaft. *Rahmenplan Naturwissenschaften*, **2015**, https://ostbelgienbildung.be/PortalData/21/Resourcen/downloads/schule_ausbildung/schulische_ausbildung/rahmenplaene_neu/Rahmenplan_NAWI.pdf.
- Arjoon, J. A.; Xu, X.; Lewis, J. E. *J. Chem. Educ.* **2013**, *90*, 536. doi:10.1021/ed3002013.
- Fredlund, T.; Linder, C.; Airey, J.; Linder, A. *Phys. Rev. ST Phys. Educ. Res.* **2014**, *10*, 020129. doi:10.1103/PhysRevSTPER.10.020129.
- William, M. K. T. *Research Methods Knowledge Base*, **2006**, [Online document]. URL: <http://www.socialresearchmethods.net/kb/scalgen.php>.
- Liu, C.-J.; Hou, I.-L.; Chiu, H.-L.; Treagust, D. F. *Res. Sci. Educ.* **2014**, *44*, 133. doi:10.1007/s11165-013-9373-y.
- Waldtrip, B.; Prain, V.; Carolan, J. *Res. Sci. Educ.* **2010**, *40*, 65. doi:10.1007/s11165-009-9157-6.
- Ferk, V.; Vrtacnik, M.; Blejec, A.; Gril, A. *Int. J. Sci. Educ.* **2003**, *25*, 1227. doi:10.1080/0950069022000038231.
- Chittleborough, G.; Treagust, D. F. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2007**, *8*, 274. doi:10.1039/B6RP90035F.

- (42) Cohen, J. *Educ. Psychol. Meas.* **1960**, 20, 1960. doi:[10.1177/001316446002000104](https://doi.org/10.1177/001316446002000104).
- (43) Landis, J. R.; Koch, G. G. *Biometrics*, **1977**, 33, 159. doi:[10.2307/2529310](https://doi.org/10.2307/2529310). PMID: 843571.
- (44) Johnson, P. *Int. J. Sci. Educ.* **1998**, 20, 393. doi:[10.1080/0950069980200402](https://doi.org/10.1080/0950069980200402).
- (45) Greca, I. M.; Moreira, M. A. *Sci. Educ.* **2002**, 86, 106. doi:[10.1002/sce.10013](https://doi.org/10.1002/sce.10013).
- (46) Grosslight, L.; Unger, C.; Jay, E.; Smith, C. L. *J. Res. Sci. Teach.* **1991**, 28, 799. doi:[10.1002/tea.3660280907](https://doi.org/10.1002/tea.3660280907).
- (47) Hurst, O. J. *Chem. Educ.* **2002**, 79, 763. doi:[10.1021/ed079p763](https://doi.org/10.1021/ed079p763).
- (48) Wu, H. K.; Shah, P. *Sci. Educ.* **2004**, 88, 465. doi:[10.1002/sce.10126](https://doi.org/10.1002/sce.10126).
- (49) Özman, H. J. *Sci. Educ. Technol.* **2004**, 13, 147. doi:[10.1023/B:JOST.0000031255.92943.6d](https://doi.org/10.1023/B:JOST.0000031255.92943.6d).
- (50) Keogh, B.; Naylor, S. *Int. J. Sci. Educ.* **1999**, 21, 431. doi:[10.1080/095006999290642](https://doi.org/10.1080/095006999290642).
- (51) Zembylas, M. *Stud. Sci. Educ.* **2005**, 41, 91.
- (52) Ardac, D.; Akaygun, S. J. *Res. Sci. Teach.* **2004**, 41, 317. doi:[10.1002/tea.20005](https://doi.org/10.1002/tea.20005).
- (53) Zhang, Z. H.; Linn, M. C. J. *Res. Sci. Teach.* **2011**, 48, 1177. doi:[10.1002/tea.20443](https://doi.org/10.1002/tea.20443).
- (54) Hensiek, S.; De Korver, B. K.; Harwood, C. J.; Fish, J.; O'Shea, K.; Towns, M. J. *Chem. Educ.* **2016**, 93, 1847. doi:[10.1021/acs.jchemed.6b00234](https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.6b00234).

Chapitre 3 : Ingénieries didactiques sur la cinétique chimique

Sommaire

1 Objectifs.....	108
2 Questions de recherche	110
3 Description de la séquence constituant l'ingénierie didactique	111
4 Références.....	121
5 Article scientifique 1	123
5.1 Résumé	123
5.2 Résumé graphique	123
6 Article scientifique 2	124
6.1 Résumé	124
6.2 Résumé graphique	124

1 Objectifs

Parmi les différents chapitres abordés dans un cours de chimie de l'enseignement secondaire, la cinétique chimique se prête particulièrement bien au développement de compétences de modélisation impliquant les trois niveaux du triangle de Johnstone [1] et même du tétraèdre de Kermen et Méheut [2]. L'objectif de l'ingénierie didactique que nous décrivons et évaluons dans ce chapitre peut s'énoncer comme suit : Modéliser une réaction chimique élémentaire comme le résultat d'une collision efficace entre deux molécules de réactifs (aspect moléculaire) afin d'expliquer les résultats expérimentaux macroscopiques relatifs à *l'influence de la concentration, de la température et de la présence d'un catalyseur*.

Dans cette approche, nous souhaitons mettre en évidence les atouts didactiques suivants qui sont étroitement liés au thème étudié.

- La réalisation par les élèves d'expériences peu coûteuses et rapides permettent d'identifier les principaux paramètres influençant les vitesses de réaction. Il s'agit d'un des critères mentionnés par Prins et al. [3].

- L'élaboration de modèles schématiques tels que définis et discutés au chapitre 2 est mise en avant. La compréhension du rôle des facteurs cinétiques fait appel à une modélisation au niveau moléculaire.
- Les différents niveaux du tétraèdre didactique de la chimie selon Kermen et Méheut [2] sont ainsi abordés.
 - Niveau empirique : observation précise des phénomènes au cours des expériences et leur transcription écrite.
 - Niveau macroscopique : traduction des observations expérimentales en termes de vitesse de diffusion des gaz et de vitesse de réaction.
 - Niveau symbolique : symbolisme chimique usuel pour les composés mis en jeu, équation de réaction, représentation des molécules par des modèles en polystyrène.
 - Niveau submicroscopique : diffusion moléculaire, théorie des collisions efficaces, représentation des réactifs, des produits et de l'état de transition (complexe activé) par des modèles « faits maison » avec des sphères en polystyrène et des cure-dents en bois.

Il est donc possible de faire jouer aux modèles moléculaires, donc à une représentation spatiale et iconique, un rôle didactique majeur, sachant que ce niveau de modélisation est le plus aisé à atteindre et doit être favorisé en début de phase de modélisation [4-5]. La fonction explicative des modèles peut-être particulièrement bien mise en évidence. Un aspect généralement passé sous silence dans les manuels scolaires est la raison pour laquelle l'état de transition possède une énergie supérieure à celle des réactifs et des produits [6-13].

L'argument selon lequel des liaisons existantes doivent se rompre et que de nouvelles liaisons se forment n'est à lui seul pas déterminant. La réalisation par les élèves de modèles en polystyrène de l'état de transition doit permettre à ceux-ci de se rendre compte des contraintes qu'une telle structure implique, contraintes qui ont un coût énergétique. Via une approche basée sur des modélisations, l'équilibre entre le rôle de guidance du professeur et les activités autonomes des élèves peut être optimisé [4]. Si le professeur guide en partie les élèves en leur proposant un matériel simple et peu coûteux pour réaliser des modèles des

molécules, il leur laisse en contrepartie toute liberté d'analyser le problème : les élèves doivent au préalable déterminer la géométrie des réactifs et des produits et ensuite imaginer par quel état intermédiaire on passe des uns aux autres.

Le niveau de difficulté est adapté aux compétences déjà acquises par les élèves [14-18]. Lorsqu'ils abordent la cinétique dans l'enseignement de la Communauté Française de Belgique [19], les apprenants viennent de terminer l'Unité d'Acquis d'Apprentissage (UAA) consacrée à la liaison chimique (UAA 5). Les questions de géométries moléculaires leur sont donc devenues familières et ils ont l'occasion de les réactiver dans un nouveau contexte qui leur permettra d'atteindre un stade plus avancé dans l'étude de la réaction chimique. La première partie de l'UAA 6 est consacrée à la thermochimie. Les élèves sont donc au clair avec les questions de niveaux d'énergie. Ils ont par conséquent en main les prérequis nécessaires pour une approche autonome de l'évolution des structures moléculaires et de l'énergie le long du chemin réactionnel.

En pratique, nous favorisons une familiarisation préalable des élèves avec les notions de mouvements moléculaires, de collisions, de diffusion et d'énergie thermique, en l'absence de processus réactionnel proprement dit. Il s'agit d'enrichir l'écologie conceptuelle des élèves afin de réduire l'obstacle épistémologique qu'ils rencontreront pour ensuite modéliser des mécanismes réactionnels au niveau moléculaire [20-22].

2 Questions de recherche

Nous avons identifié quatre questions de recherche qui seront abordées dans les deux propositions d'articles scientifiques qui constituent l'essentiel de ce chapitre.

1. Nous voulons d'abord développer des capacités de modélisation à l'aide de modèles moléculaires et de modèles schématiques. Nous posons les questions suivantes.
 - Dans quelle mesure la conception de modèles schématiques au niveau submicroscopique permet-elle aux élèves de fournir de bonnes explications pour les facteurs influençant la vitesse d'une réaction chimique ?

- L'analyse de l'évolution d'une réaction chimique élémentaire par l'utilisation de modèles moléculaires libres (géométries non prédéfinies) permet-elle aux élèves de développer une compréhension satisfaisante de la théorie des collisions efficaces et de la formation d'un complexe activé en impliquant des aspects géométriques et énergétiques ?
2. La mise en place d'activités sur un site Web interactif permet-elle d'améliorer la compréhension qu'ont les élèves de la cinétique chimique en visualisant les liens entre les niveaux macroscopique et submicroscopique ?
 3. Les aspects quantitatifs ont également été introduits dans notre séquence. Quelle est la capacité des élèves à interpréter les données empiriques (sous la forme de graphiques et de tableaux) et à établir des relations mathématiques à partir des données expérimentales récoltées ?
 4. Dans quelle mesure la compréhension par les élèves des concepts chimiques de base étudiés antérieurement influence-t-elle leur progression dans l'apprentissage de la cinétique chimique ? Cette dernière question est abordée à toutes les étapes de la séquence.

3 Description de la séquence constituant l'ingénierie didactique

Nous décrivons ci-dessous l'ensemble des activités qui ont été mises au point pour favoriser une telle approche. Notons que certaines expériences proposées sont tout à fait classiques (réactions entre Mg et HCl, par exemple). Notre apport consiste ici dans l'analyse des modélisations schématiques réalisées par les élèves. Par contre, la modélisation d'une réaction S_N2 par des modèles en polystyrène est, à notre connaissance originale, de même que l'observation et l'évaluation de l'activité des élèves lors de cette tâche.

• Contextualisation

- a. Réalisation par le professeur : diffusion d'un gaz odorant dans une pièce
- b. Réalisation d'expériences de diffusion par les élèves eux-mêmes :

- i. en milieu gazeux, dans un tube, avec du NH_3 et du HCl introduits aux deux extrémités
- ii. en milieu aqueux, dans un autre tube, à deux températures différentes, à partir de la réaction entre Fe^{3+} et SCN^-
- c. Analyse des préconceptions des élèves sur les expériences réalisées : comment les interprètent-ils ? Les élèves sont invités à proposer une modélisation (papier-crayon), au niveau moléculaire, des phénomènes de diffusion observés.
- d. Discussion des résultats
- e. Examen de vidéos (YouTube) et de simulations simples sur ordinateur [23-24].
- f. Les élèves sont alors invités à modéliser (papier-crayon) à nouveau les expériences de diffusion qu'ils ont réalisées. Ils corrigent ou adaptent leur travail du point c (travail à domicile).
- g. Conclusion à atteindre : ***la température est une mesure de l'énergie cinétique moyenne des molécules***. Ils constatent donc qu'un concept qu'ils ont déjà rencontré en thermochimie doit être à nouveau mobilisé dans les expériences de diffusion. Cela concourt à un renforcement de la maîtrise conceptuelle.
- h. Contextualisation de la cinétique chimique : lecture de textes ou recherches sur internet, éventuellement à domicile, afin de répondre à diverses questions dont voici quelques exemples. Ces travaux sont à réaliser individuellement ou en groupe dans le but de faire identifier les différents facteurs susceptibles d'influencer la vitesse de réaction.
 - Pourquoi certains monuments antiques en marbre ou en calcaire ont-ils vu leur dégradation s'accélérer au cours des dernières années ?
 - Pourquoi la taille du trou de la couche d'ozone au-dessus du continent Antarctique s'est-elle mise à augmenter au cours des années 1980 ?
 - Pourquoi peut-on conserver un morceau de viande crue plus longtemps que la même quantité de viande crue hachée ?
 - Quelle est l'utilité d'un pot catalytique ?
 - Quel est le rôle d'une enzyme ?
 - Quel est l'intérêt d'utiliser une cocotte-minute en cuisine ?

- **Laboratoire**

Il est essentiel de faire comprendre aux élèves que, pour analyser scientifiquement un phénomène, il faut bien contrôler les paramètres et donc réaliser des expériences qui permettront de faire varier, idéalement, un paramètre à la fois.

- Mg en ruban + $\text{HCl}_{(\text{aq})}$ ($C \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$) avec $C = 0,5 ; 1,0 \text{ et } 3,0 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ à température ambiante
- Mg en poudre + $\text{HCl}_{(\text{aq})}$ ($C \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$) avec $C = 0,5 ; 1,0 \text{ et } 3,0 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ à température ambiante
- Mg en ruban + $\text{HCl}_{(\text{aq})}$ ($1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$) avec $\theta(\text{HCl}_{(\text{aq})}) = 25^\circ\text{C} \text{ et } 60^\circ\text{C}$
- Décomposition de l'eau oxygénée en présence d'une plaque de platine, d'une solution de nitrate de fer (III) ou d'une tête de spatule de levure.

Sur la base de leurs observations, les élèves sont invités à proposer des explications sur les effets de concentration et de température en complétant (papier – crayon) des schémas prédéfinis par des modélisations au niveau submicroscopique.

- **Modélisation de l'influence des facteurs cinétiques**

La mise en commun en classe des modèles et propositions d'explications a pour but de faire émerger l'interprétation reposant sur la théorie des collisions. La figure 7 représente un exemple de modélisation-type auquel on peut s'attendre de la part d'un élève pour l'influence de la concentration. Ce modèle ne représente cependant pas explicitement les molécules en mouvement. Une discussion sur la nécessité d'inclure ces mouvements et sur la manière la plus adéquate de les représenter peut alors s'installer. On peut aussi suggérer de représenter les molécules d'eau non alignées pour évoquer l'absence d'ordre à longue portée dans un liquide. Il s'agit ici encore d'insister sur le fait qu'un modèle ne représente que partiellement la réalité empirique, en se focalisant sur ce qu'on a cru bon de mettre en relief.

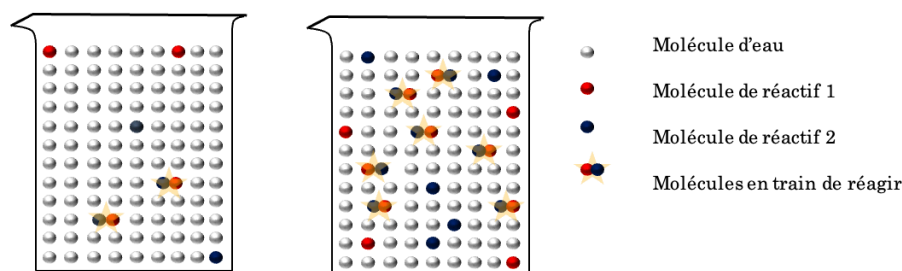
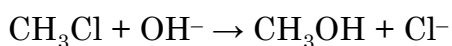


Figure 7 : Un exemple d'une modélisation submicroscopique

- **Modélisation des processus collisionnels**

- a. Sur la base des modélisations proposées et de leur négociation entre pairs sous la guidance du professeur, les élèves sont amenés à rendre compte du rapport entre les différents facteurs cinétiques et les caractéristiques des collisions. Par exemple, les collisions sont plus énergétiques si la température est plus élevée.
- b. Le rapport entre la vitesse de réaction et l'énergie cinétique des particules entrant en collision reste alors à expliquer.
- c. Pour aider les élèves à répondre à cette dernière question, une activité de modélisation avec des modèles moléculaires est proposée par petits groupes. La réaction suivante est soumise à leur réflexion :



- i. les raisons du choix de cette réaction sont les suivantes :
 1. elle possède un mécanisme simple en une étape ($\text{S}_{\text{N}}2$) ;
 2. elle correspond à une situation réelle ;
 3. ce mécanisme est très général ;
 4. les élèves ont acquis les ressources relatives aux géométries moléculaires dans l'UAA 5 ;
 5. l'état de transition est aisé à imaginer (tâche située dans la zone proximale de développement) [17-18].
- ii. Les élèves disposent de boules de polystyrène de couleurs différentes et de cure-dents. Avec ce matériel simple, ils doivent d'abord construire les modèles pour les réactifs et les

produits en choisissant la bonne géométrie (en se basant sur l'UAA 5, cf. supra). Ensuite, ils doivent imaginer une situation intermédiaire résultant de la transition progressive des réactifs aux produits. Les élèves sont informés du fait que briser complètement une liaison avant d'en reformer une autre coûte généralement plus d'énergie que de réaliser la rupture et la formation en parallèle. Nous n'avons pas fourni aux élèves des modèles moléculaires commerciaux pour les raisons suivantes : ceux-ci ne sont pas prévus pour réaliser des états de transition avec des angles et des longueurs de liaison un peu particuliers et d'autre part les élèves doivent construire les réactifs et les produits en respectant la géométrie prévue par le modèle VSEPR expliqué dans le cadre de l'UAA5. Les différentes structures proposées pour l'état de transition sont discutées en groupe d'abord, au sein de la classe ensuite, pour favoriser l'émergence d'un modèle accepté par la communauté, celle-ci incluant le professeur. La structure suivante doit émerger de cette phase d'institutionnalisation (Figure 8).

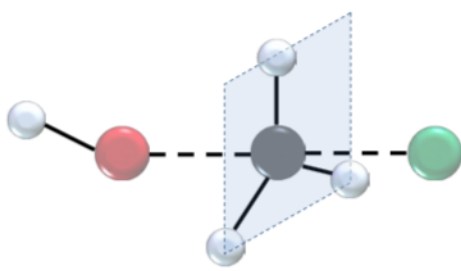


Figure 8 : Structure géométrique de l'état de transition

Cette représentation permet de conclure qu'***une collision efficace requiert une orientation adéquate des réactifs.***

- iii. Le débat avec les élèves peut alors se poursuivre en posant la question suivante : cette structure intermédiaire, que l'on va appeler état de transition ou complexe activé, est-elle plus

stable, moins stable, ou de stabilité similaire par rapport aux réactifs et produits ? Les élèves doivent faire appel à leurs connaissances acquises dans le cadre de l'UAA5 qui leur a montré qu'autour d'un atome de carbone, on a, dans les molécules stables, quatre liaisons et des angles entre les liaisons C–H, par exemple, d'environ 109°, 120° ou 180° selon le nombre stérique. La structure de la figure 8 est donc censée être moins stable et correspondre à une énergie supérieure à celle des molécules de réactifs et de produits, qui, elles, correspondent à des géométries tétraédriques.

- iv. Mettant en commun leur conclusion (point iii) quant à la stabilité de l'état de transition et leurs connaissances des diagrammes d'énergie (ou d'enthalpie) vus dans la première partie de l'UAA 6, on confie enfin aux élèves la tâche de représenter l'évolution de l'énergie du système au cours de la réaction (Figure 9).

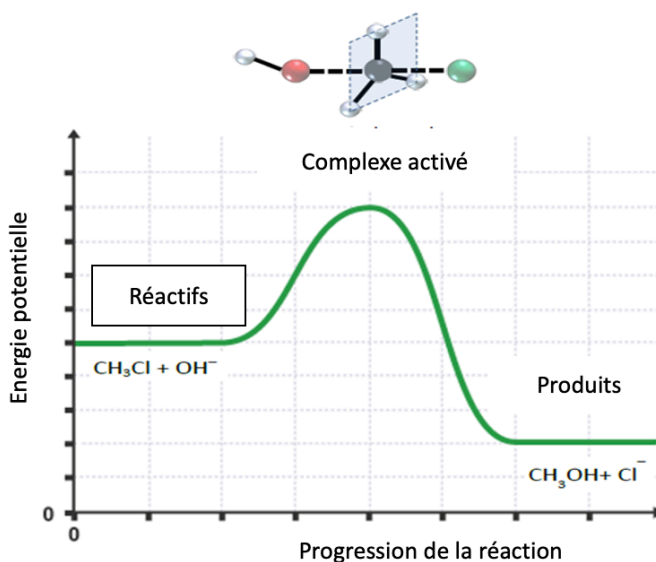


Figure 9 : Diagramme énergétique de l'évolution de la réaction de substitution nucléophile

Sur la base de ce graphique et d'une analogie avec l'ascension d'une côte par un cycliste, par exemple, l'élève doit arriver à conclure que, au cours de la réaction, de l'énergie cinétique des réactifs est convertie en énergie potentielle afin de pouvoir franchir la "barrière d'activation". Les expériences et la modélisation préparatoire sont alors réactivées : augmenter la température revient à augmenter l'énergie cinétique des molécules et donc à leur fournir l'énergie suffisante pour le passage de la barrière d'activation. A plus haute température, une plus grande proportion de molécules de réactifs disposent d'une énergie cinétique dépassant l'énergie d'activation et la réaction chimique est accélérée. *Une collision efficace est donc aussi une collision **suffisamment énergétique pour permettre le franchissement de la barrière d'activation.***

- d. Le dernier point abordé correspond à l'effet d'un catalyseur observé au laboratoire pour la réaction de décomposition de l'eau oxygénée et son explication par l'abaissement de l'énergie d'activation.

En conclusion, nous pouvons dire que la séquence proposée doit permettre de :

- développer des capacités de modélisation faisant appel tant aux modèles moléculaires et aux modèles schématiques qu'aux concepts abstraits de collisions entre particules et d'énergie cinétique et potentielle ;
- illustrer les fonctions descriptive, nomologique et, dans une moindre mesure, prédictive des modèles; des exercices complémentaires permettraient de développer cette dernière fonction ;
- mettre en évidence le fait qu'un modèle simplifie la réalité empirique, qui est le résultat des investigations des élèves eux-mêmes, tout en reproduisant les caractères essentiels qu'il rationalise ;
- faire émerger un modèle en mettant en jeu la créativité des élèves et leur aptitude à négocier ce modèle avec leurs pairs et leur enseignant ;
- de manière plus spécifique au thème concerné, de montrer que les facteurs influençant la vitesse d'une réaction chimique peuvent être expliqués sur la

base d'une représentation moléculaire dans laquelle les aspects géométriques – orientation d'approche des réactifs – et énergétiques – hauteur de la barrière d'activation – jouent un rôle central ; les élèves découvrent ainsi que la science n'est pas seulement l'accumulation de faits mais aussi – et surtout – la construction de schémas de pensées qui leur donnent un sens.

- **Application dans des classes pilotes**

La structure de l'ingénierie didactique est résumée dans la figure 10 ci-dessous. La séquence correspondante a été planifiée pour 7 périodes des cours. Les périodes ont été structurées pour introduire la séquence par des activités expérimentales. Ensuite, un laboratoire a été proposé pour étudier l'influence de divers facteurs cinétiques. Les différentes étapes de modélisation schématique ont été explorées afin d'expliquer l'impact de ces divers facteurs. À un stade plus avancé, des activités complémentaires de modélisation ont été entreprises en utilisant des modèles moléculaires.

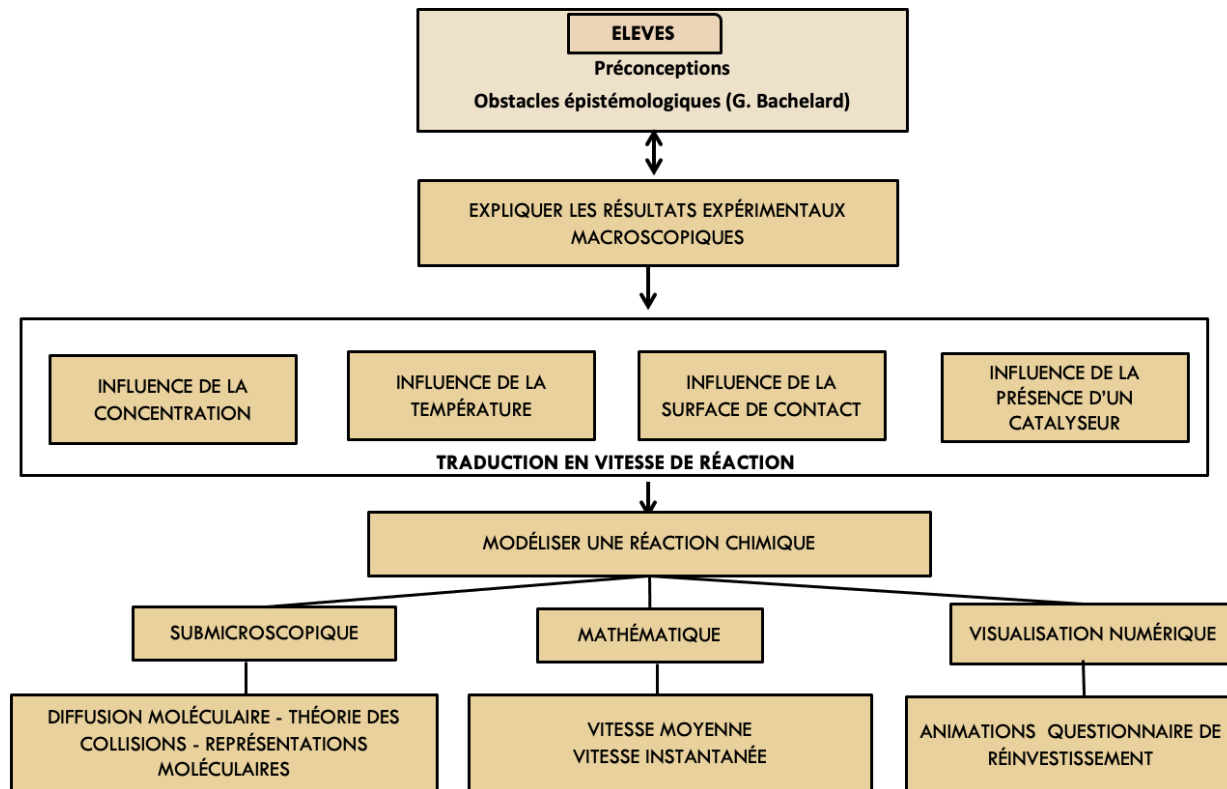


Figure 10 : Schéma d'organisation de l'ingénierie didactique proposée

Nous avons commencé par une étude préliminaire dans le but d'identifier des conceptions des élèves sur la notion de modèle et leurs difficultés éventuelles à intégrer ce concept. Dans ce questionnaire, les élèves ont d'abord décrit des exemples de modèles déjà rencontrés dans leur parcours, avant de répondre à des questions à choix multiples sur la nature et le rôle des modèles. Cette étude nous permet d'évaluer la progression des élèves à travers l'ingénierie didactique proposée.

Une série d'observations a été réalisée pendant les séances d'enseignement (dès la mise en situation) et des productions des élèves en classe ou hors classe ont été rassemblées. Ces éléments seront essentiels pour l'analyse *a posteriori* de l'ingénierie didactique développée ici. Tout au long de la séquence didactique, les élèves devaient produire des modélisations accompagnées d'explications pour les phénomènes observés. L'objectif est de déterminer en quoi les choix effectués par les élèves, en intégrant également leurs connaissances antérieures, leur ont permis d'améliorer leur compréhension de la cinétique chimique et de donner du sens à leur apprentissage. Afin de pouvoir réaliser leurs modèles de façon concrète, nous avons fourni aux élèves des annexes à compléter, des boules en polystyrène de différentes tailles colorées selon les conventions habituelles (noir pour le carbone, blanc pour l'hydrogène, rouge et vert respectivement pour l'oxygène et le chlore), des bâtons et des supports avec des visualisations numériques. Un suivi a été mis en place via une plateforme en ligne comprenant des illustrations vidéos et un ensemble de questionnaires. Ces questionnaires avaient pour but d'examiner les effets de cette nouvelle approche qui met l'accent sur les représentations moléculaires et l'apprentissage par la modélisation. Enfin, des questionnaires ont été soumis aux élèves en format papier et en format électronique afin d'évaluer leurs conceptions finales.

- **Participants**

La séquence a été testée dans trois écoles, au sein desquelles quatre professeurs avaient accepté de la réaliser avec leur classe (9 classes, 260 élèves). Dans certaines classes, la séquence a donc été donnée par l'enseignant et dans

d'autres par moi-même. L'enquête s'est déroulée sur deux ans (2016-2017 et 2017-2018).

- **Méthodologie d'analyse**

L'analyse des données s'est faite selon la figure 11 qui sera détaillée dans les propositions d'articles de recherche.

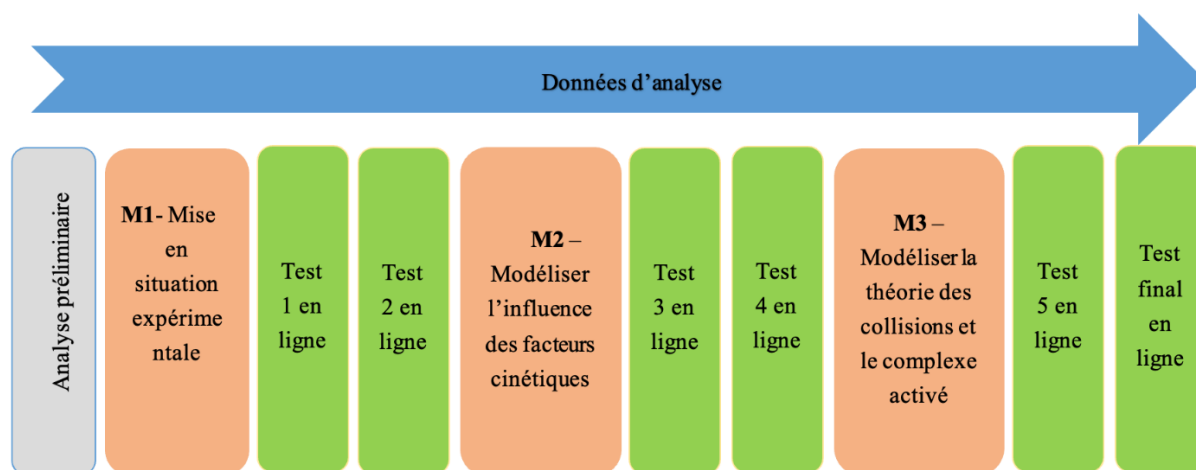


Figure 11 : Ordre chronologique de récolte de données

Les deux études présentées ci-après s'appuient sur un dispositif commun, mais développent des focales complémentaires. La première analyse les modélisations schématiques produites par les élèves pour rendre compte des facteurs influençant la vitesse de réaction, en mettant en relation les niveaux macroscopique et submicroscopique. La seconde prolonge cette réflexion en approfondissant la théorie des collisions et la construction du modèle du complexe activé, à travers des activités de modélisation moléculaire et de négociation collective.

Cette organisation permet d'examiner successivement l'évolution des représentations des élèves face aux facteurs cinétiques, puis la structuration plus fine du raisonnement énergétique et géométrique impliqué dans les collisions efficaces.

4 Références

- [1] Johnstone, A.H. (2010). You Can't Get There from Here. *Journal of Chemical Education*, 87, 22-29.
- [2] Kermen, I. & Méheut, M. (2009). Different models used to interpret chemical changes: analysis of a curriculum and its impact on French students' reasoning. *Chemistry Education Research and Practice*, 10, 24-34.
- [3] Prins, G.T., Bulte, A.M.W., Van Driel, J.H. & Pilot, A. (2008). Students' Involvement in Authentic Modelling Practices as Contexts in Chemistry Education. *International Journal of Science Education*, 30, 1867-1890.
- [4] Gobert, J.D. & Buckley, B.C. (2000). Introduction to model-based teaching and learning in science education. *International Journal of Science Education*, 22, 937-977.
- [5] Harrison, A.G. & Treagust, D.F. (2000). A typology of school science models. *International Journal of Science Education*, 22, 1011-1026.
- [6] Pirson, P., Bribosia, A., Snauwaert, P., Tadino, A., & Van Elsuwé, R. (2022). *Chimie 5e: - Manuel - Sciences générales*. 1re édition, publié par VAN IN, Mont-saint-Guibert – Wommelgem.
- [7] Pirson, P., Bribosia, A., Snauwaert, P., Tadino, A., & Van Elsuwé, R. (2017). *Chimie 5e: sciences générales*. 3e édition, De Boeck, Bruxelles.
- [8] Pirson, P., Bribosia, A., Martin, C., Snauwaert, P., Tadino, A., & Van Elsuwé, R. (2012). *Chimie 5e/6e: sciences de base*. 2e édition, De Boeck, Bruxelles.
- [9] Pirson, P., Bribosia, A., Martin, C., Snauwaert, P., Tadino, A., & Van Elsuwé, R. (2011). *Chimie 5e: sciences générales*. 2e édition, De Boeck, Bruxelles.
- [10] Pirson, P., Bribosia, A., Martin, C., & Tadino, A. (2002). *Chimie 5e: sciences générales*. De Boeck, Bruxelles.
- [11] Dulaurans, T., Durupthy, A. (2016). *Physique Chimie Ts Enseignement spécifique*. Hachette Education, Paris.
- [12] Antczak, S., Lagnaud, P., Mounier, F., Zahra, C., Berthelard, R., Bruno, F., & Chatard, A. (2020). *Physique Chimie Tle S*. Hatier, Paris.
- [13] Clavel-Monin, F., & Miguet, J. (2002). *MICROMEGA: Physique-Chimie; Terminale S; CD-ROM de l'établissement; Obligatoire et Spécialité*. Hatier, Paris.
- [14] Adadan, E., & Savasci, F. (2012). An analysis of 16–17-year-old students' understanding of solution chemistry concepts using a two-tier diagnostic instrument. *International Journal of Science Education*, 34, 513–544.
- [15] Lawrie, G.A., Schultz, M., & Wright, A.H. (2019). Insights and Teacher Perceptions Regarding Students' Conceptions as They Enter Tertiary Chemistry Studies: a Comparative Study. *International Journal of Science and Mathematics Education*, 17, 43–65.
- [16] Taber, K.S. (2016). Learning generic skills through chemistry education. *Chemistry Education Research and Practice*, 17(2), 225–228.
- [17] Finster, D.C. (1989). Developmental instruction: Part 1. Perry's model of intellectual development. *Journal of Chemical Education*, 68, 659-661.

- [18] Finster, D.C. (1991). Developmental instruction: Part II. Application of the Perry model to general chemistry. *Journal of Chemical Education*, 70, 752-756.
- [19] Arrêté du Gouvernement de la Communauté française déterminant les compétences terminales et savoirs requis à l'issue de la section de transition des humanités générales et technologiques en mathématiques, en sciences de base et en sciences générales et déterminant les compétences terminales et savoirs communs à l'issue de la section de qualification des humanités techniques et professionnelles en éducation scientifique, en français, en sciences économiques et sociales ainsi qu'en sciences humaines http://www.gallilex.cfwb.be/document/pdf/40140_001.pdf (consulté le 26 août 2014).
- [20] Marchak, D., Shvarts-Serebro, I., & Blonder, R. (2021). Crafting Molecular Geometries: Implications of Neuro-Pedagogy for Teaching Chemical Content. *Journal of Chemical Education*, 98(4), 1321–1327.
- [21] Chiu, M.-H., Liaw, H.L., Yu, Y.-R., & Chou, C.-C. (2019). Facial micro-expression states as an indicator for conceptual change in students' understanding of air pressure and boiling points. *British Journal of Educational Technology*, 50, 469–480.
- [22] Markant, D.B., Ruggeri, A., Gureckis, T.M., & Xu, F. (2016). Enhanced Memory as a Common Effect of Active Learning. *Mind, Brain, and Education*, 10, 142–152.
- [23] FuseSchool, & Unisciel. (2014). Diffusion des gaz [Vidéo]. Unisciel. <https://www.youtube.com/watch?v=1Pcvi6uVoOs> (consulté en 15 janvier 2024).
- [24] PhET & Université de Colorado Boulder. (n.d.). Diffusion d'un gaz [Vidéo]. https://phet.colorado.edu/sims/html/diffusion/latest/diffusion_all.html?locale=fr (consulté en 15 janvier 2024).

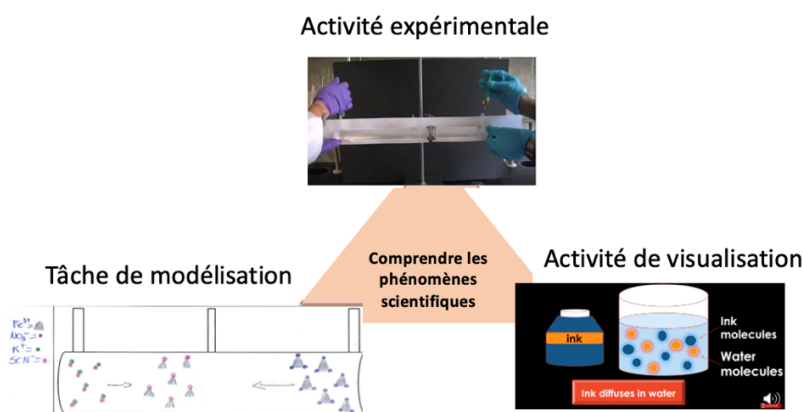
5 Article scientifique 1

Learning Chemical Kinetics at Secondary School Level by Developing Autonomous Modeling Skills. Part I. Influence of Kinetic Parameters

5.1 Résumé

La cinétique chimique joue un rôle central dans la description et la compréhension de l'évolution des réactions chimiques. Ce sujet est également important pour introduire l'étude de l'équilibre chimique, qui occupe une place importante dans les programmes de l'enseignement secondaire. Une série d'études a révélé l'existence de nombreuses conceptions alternatives de la cinétique chimique chez les élèves de l'enseignement secondaire et les étudiants de première année d'université. La plupart des études démontrent également que les approches pédagogiques de la cinétique chimique restent souvent limitées à la description qualitative macroscopique et n'identifient pas les liens pertinents nécessaires entre les échelles macroscopique et submicroscopique. Par conséquent, de faibles niveaux de compréhension conceptuelle et de nombreuses idées fausses peuvent être identifiés parmi les étudiants de différents niveaux. Basée sur l'approche constructiviste dans laquelle les apprenants construisent leur propre structure cognitive, une méthode d'enseignement incluant les aspects qualitatifs et quantitatifs de la cinétique chimique pour les élèves de l'enseignement secondaire (16-17 ans, 11^e grade) est proposée. Cette méthode intègre une introduction expérimentale suivie d'une phase centrée sur la modélisation schématique qui vise à sensibiliser les élèves à la visualisation au niveau submicroscopique. Enfin, une approche quantitative ainsi que des outils numériques ont également été introduits. Cette méthodologie favorise la capacité des étudiants à utiliser des modèles submicroscopiques pour visualiser la théorie des collisions efficaces et la théorie de l'état de transition, et les aide ainsi à acquérir une compréhension conceptuelle plus approfondie de la cinétique chimique.

5.2 Résumé graphique



Mots clés : Cinétique chimique, Conceptions alternatives, modélisation schématique, niveaux submicroscopique et macroscopique, outils interactifs

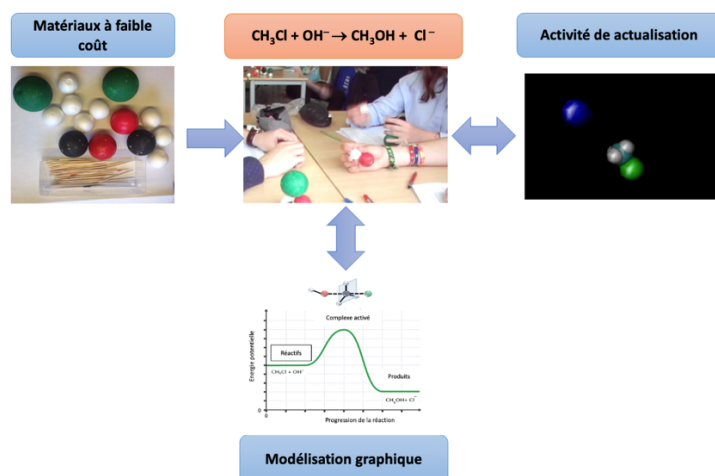
6 Article scientifique 2

Learning Chemical Kinetics at Secondary School Level by Developing Autonomous Modeling Skills. Part II. Activated complex and reaction coordinate diagrams

6.1 Résumé

Le complexe activé est un modèle central en cinétique chimique, une partie de la chimie générale qui est souvent qualifiée de difficile par de nombreux étudiants de différents niveaux. L'enseignement du modèle du complexe activé dès l'école secondaire vise à aider les élèves à rationaliser au niveau moléculaire l'influence des facteurs cinétiques macroscopiques. Des difficultés de compréhension du concept ont toutefois été identifiées. Cet article décrit et évalue une approche alternative pour enseigner le modèle du complexe activé par le biais de processus de modélisation simplifiés autonomes avec du matériel peu coûteux couplé à des activités interactives. Cette approche a été testée auprès d'élèves belges de l'enseignement secondaire. Cette étude permet également d'identifier les caractéristiques du raisonnement des élèves et d'évaluer leur changement conceptuel progressif. Les résultats de la recherche montrent que la tâche de modélisation a été bénéfique pour les élèves et a contribué de manière significative à leur processus d'apprentissage.

6.2 Résumé graphique



Mots clés: Cinétique chimique, Complexe activé, Modélisation autonome, Activités interactives, Évaluation

Learning Chemical Kinetics at Secondary School Level by Developing Autonomous Modeling Skills. Part I. Influence of Kinetic Parameters

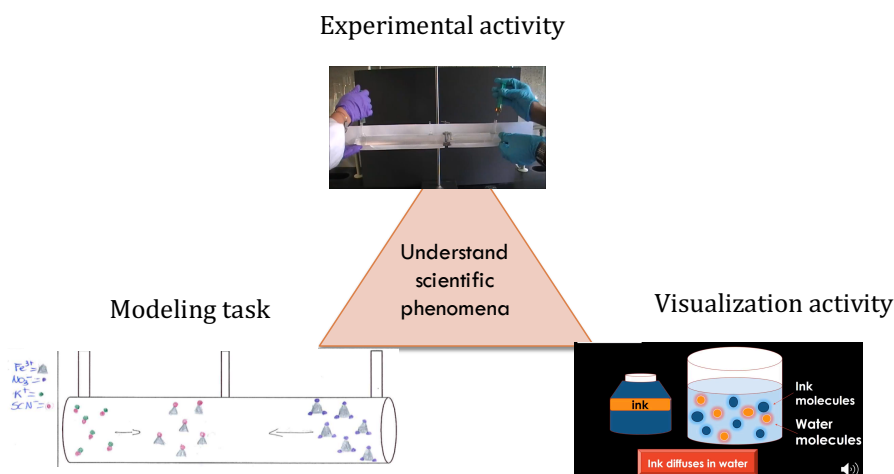
Hamad Karous^{a*}, Brigitte Nihant^{a**} and Bernard Leyh^{a***}

^a Department of Chemistry, University of Liège and DIDACTIfen Research Unit, Allée du Six Août 11, 4000 Liège, Belgium

ABSTRACT

Chemical kinetics plays a central role in describing and understanding the evolution of chemical reactions. This subject is important also to introduce the study of the chemical equilibrium, which occupies an important part in the secondary school curricula. A series of studies have revealed numerous alternative conceptions about chemical kinetics among high school and first-year university students. Most studies also demonstrate that the teaching approaches in chemical kinetics often remain limited to the qualitative macroscopic description and do not identify the necessary relevant links between the macroscopic and the submicroscopic scales. Consequently, low levels of conceptual understanding and many misconceptions can be identified among students at different levels. Based on the constructivist approach in which the learners build their own cognitive structure, a new teaching method including qualitative and quantitative aspects of chemical kinetics for secondary school students (16-17 years old, 11th grade) is proposed. This method integrates an experimental introduction followed by a phase centered on schematic modeling which aims at sensitizing students to visualization at the submicroscopic level. Eventually, a quantitative approach as well as digital tools were also introduced. This methodology fosters the students' ability to use submicroscopic models in the frame of the theory of effective collisions and the transition state theory and thus helps them acquire a deeper conceptual understanding of chemical kinetics.

GRAPHICAL ABSTRACT



KEYWORDS

Chemical kinetics, Schematic modeling, Macroscopic and submicroscopic levels, Interactive tools

INTRODUCTION

When Justi¹ wrote her 2002 review “Teaching and learning chemical kinetics”, she noticed that the literature dealing with the teaching and learning of chemical kinetics in secondary schools was relatively scarce despite its central relevance in chemical education: “It is therefore surprising that this theme has not more frequently been the focus of science education research”. The situation has progressed since then but the available literature remains limited. In their 2016 review, for example, Bain and Towns² list 18 papers devoted to chemical kinetics at secondary school level. It can also be noticed that many of the studies on the subject performed in secondary schools have been carried out in Turkey.² To stimulate conceptual change and deepen the understanding in chemical kinetics, different methods have been used like cooperative learning³, structured inquiry-based modules⁴, case-based learning⁵⁻⁶, and computer-aided animations.⁷

The prevailing didactic approaches in this area are often limited to the empirical qualitative aspect. The students mainly observe the influence of the concentration of reactants, of the temperature and of a catalyst on the reaction rate. Alternative conceptions originating from textbook representations can also lead to important learning difficulties for the students.⁸ By analyzing the chemical kinetics part of a series of chemistry textbooks of the French speaking part of Belgium and of France, one might conclude that they do not go beyond the empirical field and do not refer to model-based arguments which could rationalize the observations.⁹⁻¹⁴ The simplified collision model presented in some textbooks does not allow to explain all scientific observations and it can also lead to the development of some alternative conceptions, for example concerning the effect of the temperature, where students imagine that “the

particles will ‘bounce back’ without reacting, when they move very fast and collide with each other”.¹

Justi¹ showed that chemical kinetics is one of the many abstract concepts in chemistry, which remain difficult to understand for students. Clement¹⁵ explained that this lack of understanding could persist among senior students at the university level. In the same vein, Cakmakci and Aydogdu¹⁶ have investigated university first-year students’ ideas in chemical kinetics and have showed that evidence-informed instruction could significantly improve their understanding. The learning of chemical kinetics requires a conceptual comprehension of the corpuscular nature of matter and the dynamical aspects of chemical reactions. De Vos and Verdonk¹⁷ concluded that, although teaching corpuscular models as explanatory tools to understand the macroscopic behavior of substances is usually experienced by young students, many of them seem unable to go beyond the stage of rote learning with regard to these models. Cachapuz & Maskill¹⁸ observed that students do not perceive correctly the goal of the collision theory despite its essential role in explaining the influence of the experimental factors in chemical kinetics. Bain and Towns² have concluded that chemical kinetics is an ideal field for enabling students to understand concepts through models and modeling. On the other hand, using experimental kinetics data can shed light on students’ understanding of models and modeling competences.² Chittleborough and Treagust¹⁹ concluded that good modeling skills and understanding of models at the submicroscopic level positively influence the understanding of chemical concepts. These aspects have not yet been studied in depth for chemical kinetics. To minimize the epistemological obstacles related to the abstraction level of the molecular collision theory, our study focuses on the proposal of schematic modeling activities, in which students were invited to manipulate molecular models and schematic representations in various situations (Figure 1). This approach respects the criteria defined by Prins et al.²⁰ for authentic modeling practices: interest and motivation of the students, development of autonomy, modeling procedure adjusted to the learners’ procedural knowledge, task complexity within the zone of proximal development, and feasibility of the practical activities. A thorough observation process was also followed to assess their degree of understanding at the end of this learning approach.

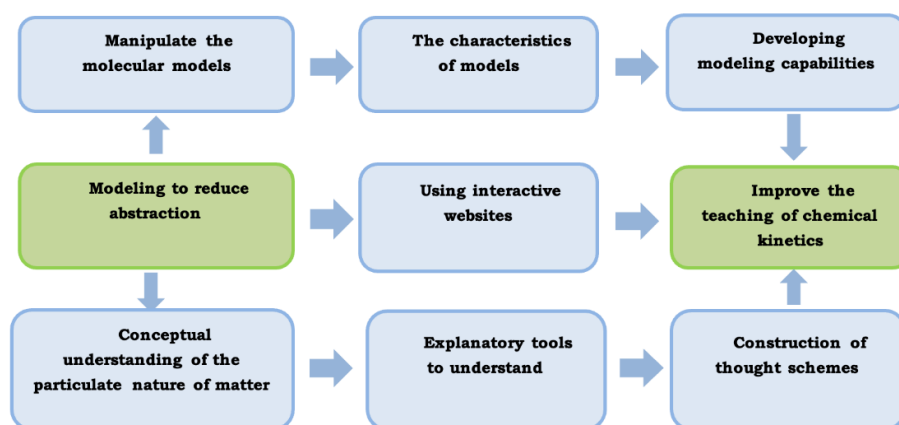


Figure 1. Modeling process in various situations

As a consequence of this process the students were engaged in the personal assessment²¹ of the efficiency of the collision model. This should eventually lead to their elaboration of the transition state model approach.¹⁸

RESEARCH QUESTIONS

Within this general framework, the goals of the sequence in chemical kinetics that we proposed to the students (16-17 years) and the associated research questions will now be defined. Firstly, the aim is to develop capabilities to design schematic²² models related to collision processes and potential energy variations during a reaction. We investigate to what extent the students can then reach a better understanding of how the factors influencing the rate of a chemical reaction can be explained on the basis of a molecular representation involving geometric and energetic aspects (**question 1**). We wish that students realize that science is not simply the accumulation of facts, but rather the construction of thought schemes that convert these bare facts into scientific knowledge. In order to familiarize learners with appropriate teaching models, they will then be confronted with analogy and computer models, using an approach which aims at stimulating their creativity and developing their ability to negotiate proposed models with their peers and their teacher.²³⁻²⁴ In this frame, it is also a question of assessing how the use of activities on an interactive website can improve students' understanding of chemical kinetics by visualizing the links between the macroscopic and submicroscopic levels (**question 2**).^{7,25-27}

Although the emphasis is on the qualitative interpretation, the quantitative aspects (mainly, the mathematical definition of the reaction rate and its measure) also play a determining role in our sequence. We aim to assess the student's ability to interpret data (graphical representations and tables with experimental data) and to establish mathematical relationships between the relevant parameters (**question 3**). A thorough understanding of chemical kinetics requires the study of all three levels of representation: macroscopic,

symbolic and submicroscopic. This includes also the mathematical approach and its interpretation.³

A fourth question that has been addressed at all stages of this sequence is how students' understanding of basic chemical concepts influences their progression in learning chemical kinetics (**question 4**).²⁸⁻²⁹

METHODS

Context and Participants

The teaching sequence has been developed in collaboration with Belgian French- and German-speaking teachers in three upper secondary schools (n = 217 16-17 years old students, 11th grade) during the academic years 2016–2017 and 2017–2018. The first two schools are from the French speaking region (n = 170) and the third one is from the German speaking region (n = 47).

All participants follow an advanced chemistry course with a very similar chemistry curriculum (2 or 3 periods of 50 minutes chemistry/week) and the same assessment instruments. The teaching methods in the French- and German-speaking regions of Belgium originate from a previously common system and remain very similar. We assumed that language would not significantly affect students' modeling abilities. All teaching documents were initially written in French and translated into German by an experienced bilingual chemistry teacher for the German-speaking learners. The data collected and used in this study include various instruments described in the next subsection.

Research Tools

This teaching sequence is organized over seven 50-minute lessons. Several types of research instruments were developed to run the investigation. Two weeks before the start of the activity, a preliminary analysis has been performed to identify the initial conceptions of the students on the use of a model and on the need of a modeling approach to rationalize the empirical reality of a chemical phenomenon. This analysis consisted in asking the students to answer the question "What is a model for you?" and give an example based on their remembrance of models they had previously encountered in their chemistry classrooms, followed by six Multiple Choice Questions (MCQ) (Supplementary material S1).

To visualize the concept of particle motion and the need for particles to collide in order that reaction can occur, three introductory experiments were carried out. Students were asked to present their explanations at the submicroscopic level with paper-and-pencil schematic modelings.³¹ They were asked to draw a diagram that integrates a representation of molecules or ions (circles, squares, etc.) and their specific motions. In this way the concepts of diffusion, molecular motions and collisions, and thermal energy could be assessed (Supplementary material S2).

Students were then provided with experimental data on the evolution of the concentration of a reactant and a product for a given reaction as a function of time. Based on these data, they were asked to interpret them in order to propose a mathematical relationship defining the rate of the chemical reaction (Supplementary material S3).

The rest of the sequence consists of experiments carried out by the students, followed by their autonomous interpretation in annotated schematic models at the submicroscopic level (Supplementary material S4).⁷ After each step of the sequence, the students were invited to connect through a QR code to an MCQ questionnaire available on an interactive website. Each of the four proposed tests started with an animation about which specific MCQ questions were then asked to assess students' knowledge and understanding related to the kinetics concepts and modeling processes acquired in their respective classrooms (Supplementary material S5). Regarding the reliability, Cronbach's alpha value for the consistency evaluation of the consensus building construct was 0.94, indicating credible internal consistency.

Our main research instrument consists in analyzing the different submicroscopic representations produced by the students after the experimentation tasks to explain the influence of the kinetic factors.

These reports alongside with notes from observations in the classrooms formed the data corpus used to assess the evolution of the conceptual understanding of the students about chemical kinetics.

At the end of the didactic sequence, a final online Likert-scale questionnaire was presented to the students to collect their opinions about the impact of technology on chemistry and on modeling learning. In addition, students' opinions on these two parts were investigated through two open questions which will also be examined (Supplementary material S6).

An alternative approach to teach the activated complex in chemical kinetics will be the subject of the accompanying article (part II of this two-paper series).

Data Analysis

Students' conceptions about the nature of models have been first analyzed. All students' answers regarding the open question "What is a model?" have been encoded. A first interpretation of responses to classify students' idea about models consisted in identifying "categories of meaning", based on the typology of school models defined by Harrison and Treagust.³⁰

To assess students' productions of submicroscopic schematic models about diffusion phenomena and the impact of kinetic factors (see previous subsection on research tools), several criteria have been developed and applied to each modeling situation. These criteria are presented in Table 1.

Table 1. Assessment criteria for students' modeling productions (i) for diffusion phenomena in the gas phase and in the liquid phase, and (ii) for the impact of kinetic factors

Scientific phenomena	Assessment criteria	Category of productions
Diffusion in gas phase	- Each type of molecule is represented by a specific icon - Difference in diffusion velocity as a function of particle size - Appropriate position of product formation - Remote and well separated icons to suggest a gas phase process	- Acceptable if 4 criteria fulfilled - Partially acceptable if 3 criteria fulfilled - Unacceptable if ≤ 2 criteria fulfilled
Diffusion in liquid phase	- Each type of ion is represented by a specific icon - Difference in diffusion velocity as a function of particle size - Appropriate position of product formation - Respect of quantity ratios (number of icons) for two parallel experiments - Symbolic indication of the temperature difference (arrows to symbolize the molecular velocity, e.g.)	- Acceptable if 4 to 5 criteria fulfilled - Partially acceptable if 3 criteria fulfilled - Unacceptable if ≤ 2 criteria fulfilled
Influence of kinetic factors	- Specific icon for atoms, ions or molecules - Correct dissociation in aqueous solution (eg. HCl to H⁺ and Cl⁻ ions) - Consistency for the quantities of matter when comparing different reaction conditions - Symbolization of the effect of the kinetic factor on the reaction medium related to collisions between particles - Evolution of collision characteristics (frequency or energy) upon the selected reaction condition changes	- Acceptable if 4 to 5 criteria fulfilled - Partially acceptable if 3 criteria fulfilled - Unacceptable if ≤ 2 criteria fulfilled

Our analytical work was focused on identifying students' abilities to use schematic models to explain their experimental observations. Our interest was to assess the following skills developed by students during the didactic sequence: representing molecules or ions in spatial perspective, displaying explanatory elements and establishing the link between the submicroscopic and the macroscopic level.

The final assessment on the interactive platform was intended to inform us about students' perceptions about this approach of kinetic learning, and hence to clarify how

teaching should be conducted to facilitate students' progression in understanding chemical kinetics.

RESULTS

The research results, summarized in the following subsections, show the main trends that emerged from the three proposed measuring instruments.

Preliminary analysis of students' conceptions on models (Supplementary material S1)

Students' understanding of the nature of a model that was assessed through the first open question "What are the words that come to mind when we talk about a model?" is illustrated in Figure 2. A substantial percentage of students (28 %) answer by giving an example and the first model they think of is the 'atomic model', which corresponds to the Rutherford-Chadwick-Bohr model of the atomic internal structure. This high percentage is not surprising, because the atomic model is explicitly addressed already early in the Belgian school curriculum (9th grade).³² A second category of students gave a more general and conceptual answer, indicating that a model is a simplified diagram of a representation (19 % of answers). Other answers belonging, sometimes more loosely to this category are: a representation (7%), an illustration (12%), an approach to reasoning (1%) or an explanation tool (9%). Globally this second category amounts to 48% of the students. Surprisingly, 3D-models were proposed by only 2% of the students. This might be due to the fact that they had not yet been confronted with organic chemistry, taught in the 12th grade where molecular models are traditionally introduced.³²

The last fifth of the students either did not justify their choice (5%) or proposed other categories which are either scientifically irrelevant (top-model, 8 %) or cannot be considered as models (an experiment, 4%, or a demonstration, 4%). Grosslight et al.³³ have identified two 'levels' of students' understanding of the 'nature of model' in school; "...Students in Level 1 thought of models as either toys or as copies of reality. Students in Level 2 thought of models as having been created for a purpose, with the emphasis on some components having been altered, but with the template of reality still predominating...". Our second category can be related to Grosslight's level 2, even if all answers are not well articulated. We find little evidence of level 1 answers.

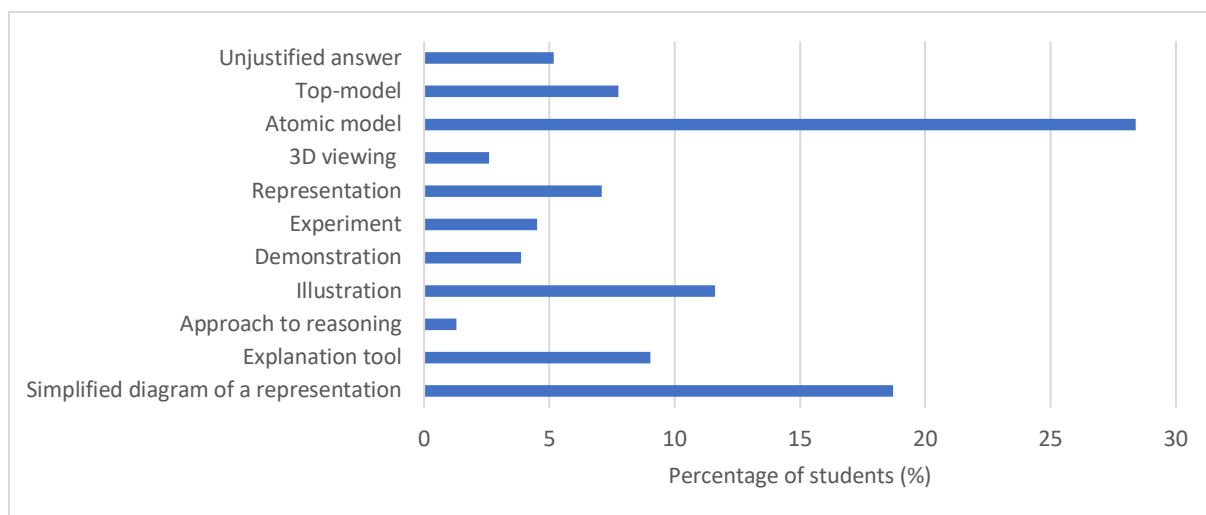


Figure 2. Categories of students' ideas about model

In a second part, we examined, using an open question, the ability of students to give an example of a model among those they have met during their course. The majority of students (60 %) cited the atomic model as an example, which is not surprising given the results discussed above, while other models have been rarely mentioned such as material representations (an object like a model of a biological cell, molecular models) or abstract representations (chemical equation, VSEPR etc.). (Figure 3). This result confirms our earlier assertion that, even if the students have been confronted to different models, they did not recognize them as such. Only the structure of the atom is referred to by most teachers and in the textbooks used in Belgium clearly as the “atomic model”. The focus on models is much less significant, if not absent, in the teaching of other topics.

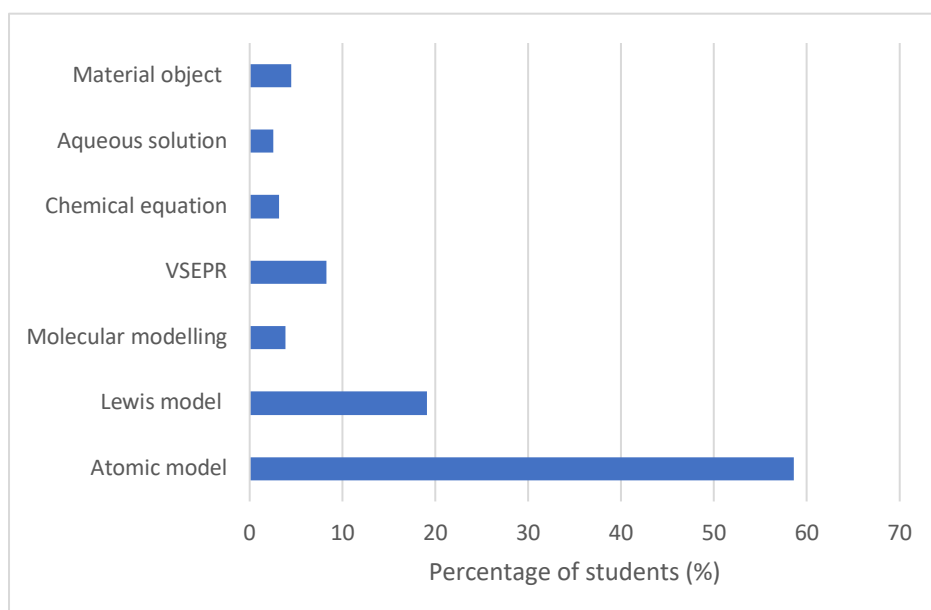


Figure 3: Examples of model suggested by students

In the third part of the preliminary analysis, the questionnaire results reflect diverse perspectives among the students. The majority (72%) believe that multiple explanations can coexist concerning an experimental observation. A majority (57%) thinks that the decision to accept a new model depends primarily on factual information. A large majority of students (88%) considers mathematical models as essential for predicting chemical phenomena. Regarding the modeling of a given chemical phenomenon, the majority (84%) believes it involves constructing an explanatory model. They do not emphasize the macroscopic/submicroscopic connection, nor the possibility of computer visualizations. A very large majority (93%) sees a model as a tool to understand or explain a phenomenon. Other aspects like supporting creativity are much less considered. Confronted to an exercise involving schematic models linking the macroscopic and submicroscopic levels, only 41% were able to select the correct model. These results underscore the complexity of understanding concepts related to scientific models among students.

Experimental simulation activities

Mastering the particle model of matter³⁴ and considering particle movements and collisions are essential to understand chemical kinetics phenomena. The first two activities therefore aim at making students more confident with molecular motions and their schematic modeling. The learners can then build on these preliminary steps to progress further with the next activities centered on the parameters impacting the chemical reaction rates. The central goal is to guide the students to mastering the three levels of representation, that is, macroscopic, symbolic and submicroscopic.³⁵⁻³⁹

Activity 1. Diffusion in the gas phase (Supplementary material S2)

This activity consists in inserting simultaneously on both sides of a long glass tube, cotton buds previously soaked in a concentrated solution of, respectively, HCl and NH₃. A universal pH paper strip was attached to the inside of the glass tube along its entire length to visualize the gas diffusion. As the HCl and NH₃ gases come into contact, a white solid of ammonium chloride appears at a precise location in the tube. The Brønsted-Lowry acid-base reaction is thus demonstrated. The different diffusion rate for each molecule is evidenced by the travelled path visualized by the coloring of the pH indicator paper. Students were asked first to observe and describe the macroscopic phenomena, to explain how the product ammonium chloride can be formed and to write the equation of the reaction. They were asked to model in a guide sheet the phenomenon that leads to this reaction product at the submicroscopic scale and their proposals have been assessed (Figure 4) based on the criteria of table 1.

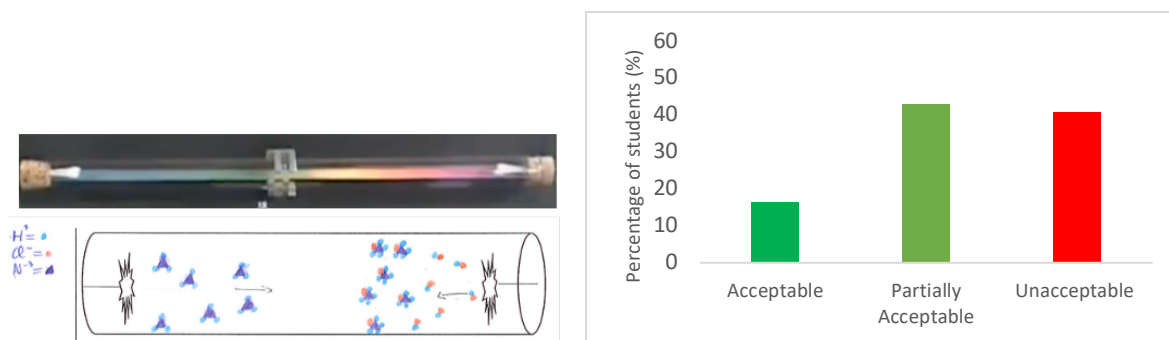


Figure 4. Example and assessment of student representations of the diffusion process in the gas phase

These results indicate that only a minority of the students (16 %) proposed an acceptable schematic modeling (Figure 4). The detailed analysis of students' representations shows that most of them did not meet criterion 2: “Difference in diffusion rates as a function of particle size”. The students had difficulty indicating the relationship between the size and mass of two different molecules (HCl and NH_3) and their respective velocity, a property which translates into a different path length at the macroscopic level. The problem lays therefore back on the proper understanding of the particle model of matter.³⁴ During the discussion with the peers and the institutionalization phase, the teacher clarified the different notions that have been highlighted by this experience. This intended to convince the students that a scientifically acceptable schematic modeling must integrate many pieces of information which are all related to the observed macroscopic phenomena which the model aims to rationalize.

Activity 2. Diffusion in the liquid phase (Supplementary material S2)

This experiment consists in injecting simultaneously 1 mL of KSCN (aq, 1 M) on one side and 1 mL of $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$ (aq, 1 M) on the other side of a 250 mL glass tube specifically built for this experiment and filled with a solution of nitric acid⁴⁰ (aq, 0.1 M) first at room temperature. A noticeable color change occurs after approximately 28 seconds at a distinct position along the tube. This change is assigned to the formation of the dark red complex ion $\text{Fe}(\text{SCN})^{2+}(\text{aq})$. Upon conducting the same experiment at a higher temperature (60°C), the diffusion rate increases, resulting in a more rapid alteration in color observed after only 16 seconds. In this activity, students were also asked to perform the same task as in activity 1, that is, describe the macroscopic observations and explain how the product is formed, write the equation for the reaction and draw a schematic model of the phenomenon (at room temperature and at 60°C) at the submicroscopic level.

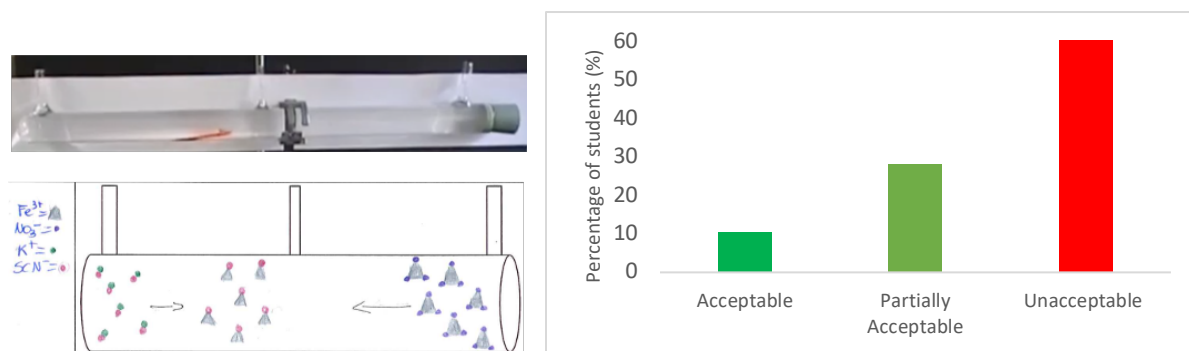


Figure 5. Example and assessment of student representations of the diffusion process in the liquid phase

Similarly to the previous activity, only 10 % of the students proposed an acceptable schematic modeling (Figure 5). They showed already difficulties to represent each type of ion by a specific symbol. Also, in this case, most students took into consideration neither the quantities (same concentration at both temperatures and same concentrations of both reactants) nor the dissociation of ionic compounds in an aqueous solution. During the discussion among peers and with the teacher following this second activity, the teacher drew the attention to the quantitative aspects, the dissociation of the compounds, the thermal agitation, leading to a negotiated institutionalized model of particle diffusion in the liquid phase.

This introductory experimental activity on concepts related to molecular motions was followed by an interactive online test assigned as homework on a voluntary basis (Supplementary material S5). The results demonstrate that the majority of students participated at a rate of 80%, with an average score of 72% and a standard deviation of 18%. The answers are distributed as shown in Figure 6.

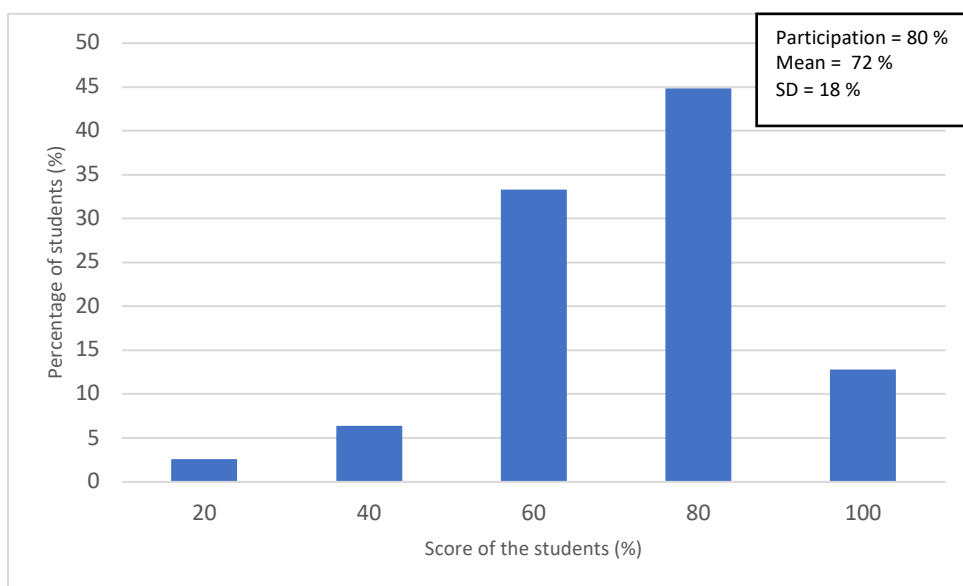


Figure 6. Distribution of scores for online test 1.

Activity 3. Introducing the concept of chemical reaction rate by analyzing data (Supplementary material S3)

The students then realized an activity which aimed at discovering, based on an example, the definition of the rate of a chemical reaction. This approach led them to analyze a table of experimental data related to the reaction between magnesium and hydrochloric acid at 20°C and providing them with measurements of the evolution of the quantities of H₂ and HCl over time. They were asked to graphically represent the data and to develop the formulas for the average and instantaneous reaction rates, providing a systematic introduction to the dynamics of the reaction.⁴

This activity of developing a mathematical model was followed by an interactive online test as homework and on a voluntary basis (Supplementary material S5). The results demonstrate that the majority of students participated at a rate of 85% with an average score of 61% and a standard deviation of 20%. The responses are distributed as shown in Figure 7.

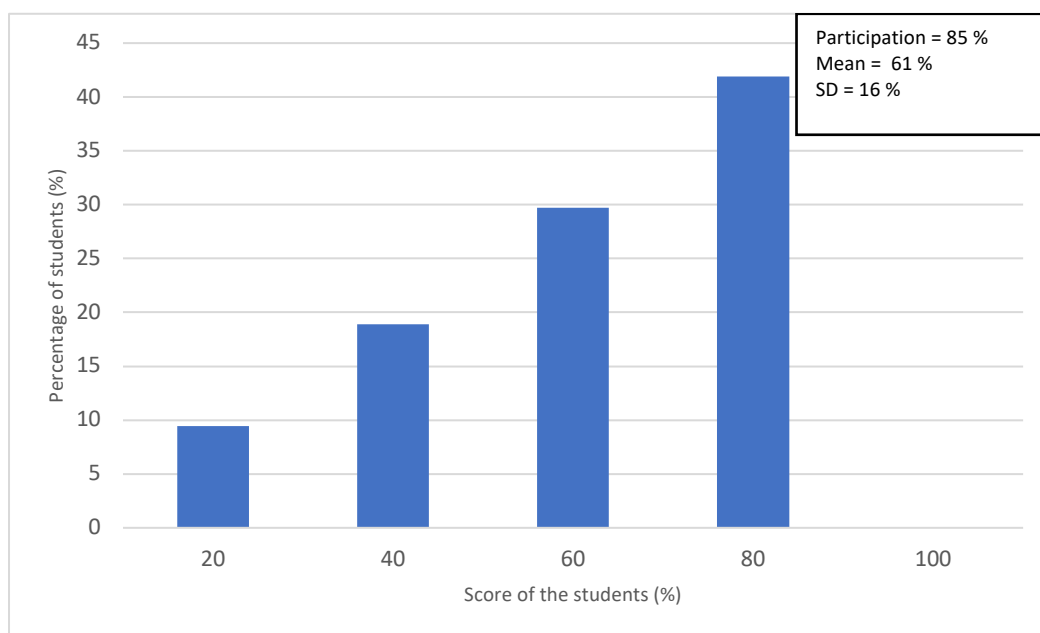


Figure 7. Distribution of scores for online test 2.

Modeling the influence of kinetic factors on the chemical reaction rate (Supplementary material S4)

For the activities described below, the cooperative learning method, based on constructivism, was applied, with students working in groups of 2 or 3 people. Referring to Johnson and Johnson⁴¹, Kirik and Boz³ argue that: “When students work in cooperative groups, they more frequently use higher levels of reasoning and critical thinking skills to create new ideas and solutions compared to when they work in competitive and individualistic

situations". After each activity a common discussion among peers, guided by the teacher, allowed to negotiate an ideal model considered as the institutionalized accepted version.

Activity 3. Influence of concentration (Supplementary material S4)

A precise length of clean magnesium ribbon is added respectively to a specific volume of three solutions of different concentrations of HCl (0.5 mol/L, 1 mol/L and 3 mol/L). After a certain time, the learners observe visually the complete disappearance of solid magnesium. The students were asked to measure reaction time, to write the equation for the reaction and to draw a schematic model of the interaction between the magnesium ribbon and the HCl solution, at the submicroscopic scale for the three different concentrations of the HCl-solution.

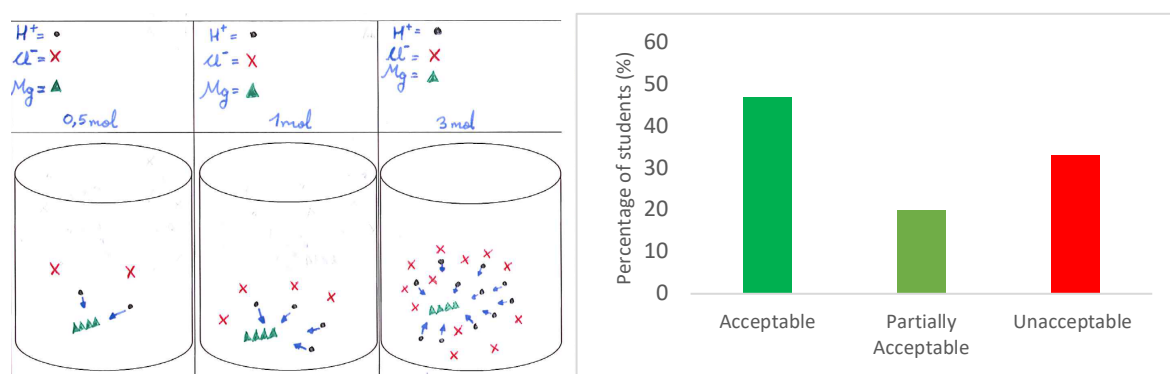


Figure 8. Example and assessment of student representations of the influence of concentration

Based on the criteria defined in Table 1, the results displayed in Table 8 are obtained. They show that the students reached now 47 % of acceptable and 20 % of partially acceptable scores. A significant progress is observed compared to activities 1 and 2, showing both a conceptual and methodological evolution. For example, the majority of students represented correctly the ionic dissociation in an aqueous solution despite many of them having had difficulties representing the dynamic aspects linked to particle motions. During the discussion, the teacher again fostered the argumentation skills of the students in order to scaffold their thinking process and increase their ability to build a consistent scientific model. This modeling activity on the influence of concentration on the rate of a chemical reaction was followed by an interactive online test as homework and on a voluntary basis (Supplementary material S5). The results demonstrate that the majority of students participated at a rate of 82% with an average score of 63% (standard deviation = 17%). The responses are distributed as shown in Figure 9.

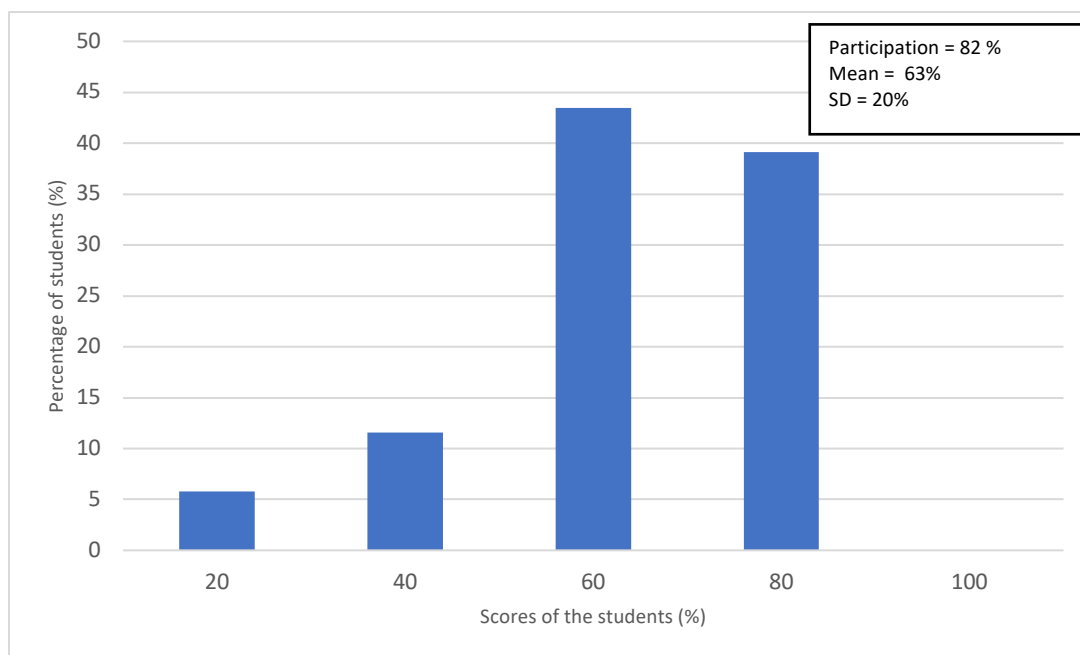


Figure 9. Distribution of scores for online test 3.

Activity 4. Influence of contact surface (Supplementary material S4)

The same mass of magnesium powder compared with the mass of the magnesium ribbon was added in three solutions of HCl of different concentration (0.5 mol/L, 1 mol/L) and 3 mol/L). This activity consists in comparing the measured times for the three experiments with those with the magnesium ribbon (activity 3). The students were asked to model their observations using a submicroscopic schematic representation. To make it easier, they had to choose the same concentration in activities 3 and 4 and model, using the particle scale, the interactions between the magnesium (ribbon and powder) and the HCl solution with the same concentration.

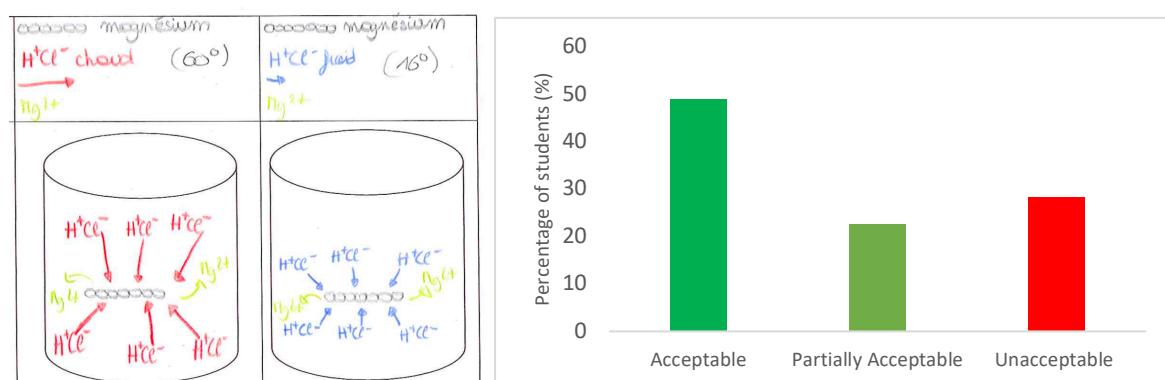


Figure 10. Example and assessment of student representation of the influence of contact surface

The results are very similar to those of activity 3. 49 % of students correctly represented the phenomenon of the influence of the contact surface (Figure 10). Again, some students

continued to show difficulties in the representation of the dynamic aspect, a weakness again addressed by the teacher during the common discussion session.

Activity 5. Influence of temperature (Supplementary material S4)

Two equal masses of clean magnesium ribbon were added in two beakers filled with the same volume of a HCl (1mol/L) solution, one at room temperature and one at 60 °C. The students were asked to perform the same tasks as during the previous activities, namely, to measure the time required for complete reaction of magnesium and to model the interactions between the magnesium ribbon and the HCl solution at the two different temperatures.

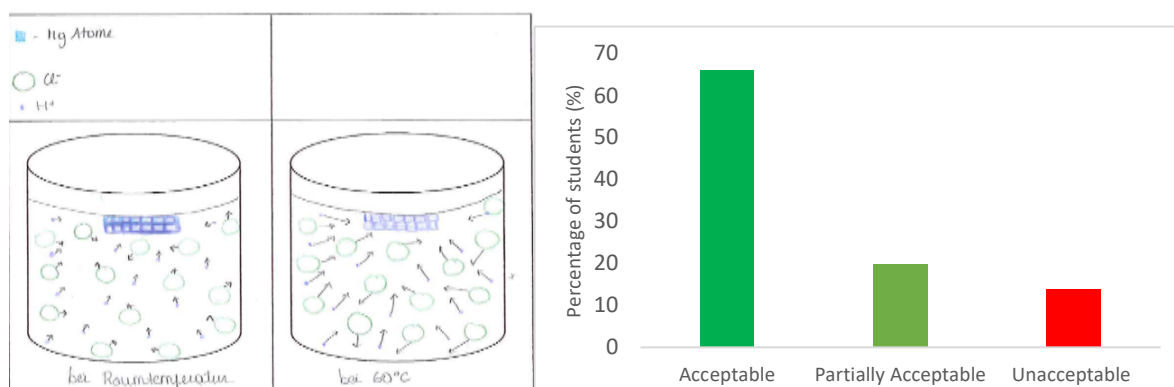


Figure 11. Example and assessment of student representation of the influence of temperature

Similarly to the two previous activities, acceptable models (66%) outweigh those that are partially acceptable and unacceptable (Figure 11). This result indicates that the majority of representations now include at least 4 of the 5 criteria described previously in table 1 including the dynamic aspect.

This also substantiates the progressive evolution of the conceptual understanding reached thanks to the common discussion sessions concluding each activity.

Similarly, this modeling activity on the influence of temperature on the rate of a chemical reaction was followed by an interactive online test as homework and on a voluntary basis. The results show that the majority of students participated at a rate of 78% with a success rate of 77%. The responses are distributed as shown in Figure 12.

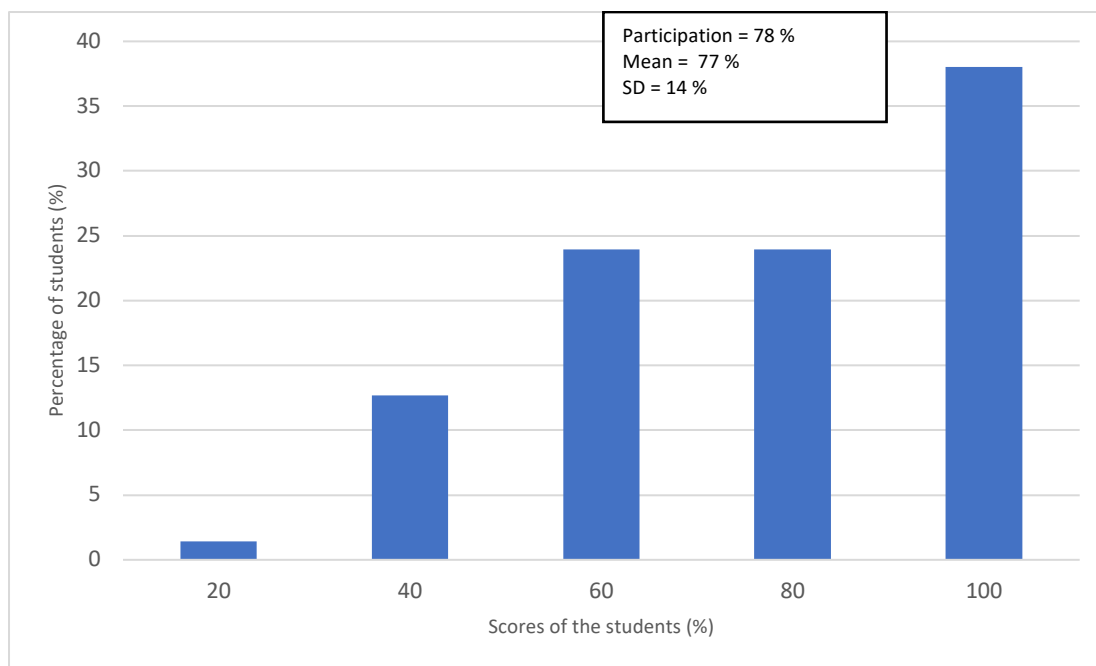


Figure 12. Distribution of scores for online test 4.

By employing this learning approach of building and reconstructing students' mental structures, we aim to enhance their understanding.⁴² It appears that this collaborative method, set within an active learning and inquiry-based environment, effectively develops modeling competences regarding the impact of concentration, temperature, and matter division on reaction rates, leading to a more thorough comprehension.^{3,5,22, 43-45}

Activity 6. Influence of the presence of a catalyst (Supplementary material S4)

Activity 6 is intended to show the decomposition of hydrogen peroxide in the presence of three types of catalysts (Platinum, Iron (III) Nitrate solution and Yeast). The students again carried out the experiment in groups of 2 or 3 people and also evidenced the nature of the released gas, that is, oxygen. They were then asked to write up their observations and propose in a prepared sheet a submicroscopic model of the influence of the platinum plate on the decomposition of hydrogen peroxide.

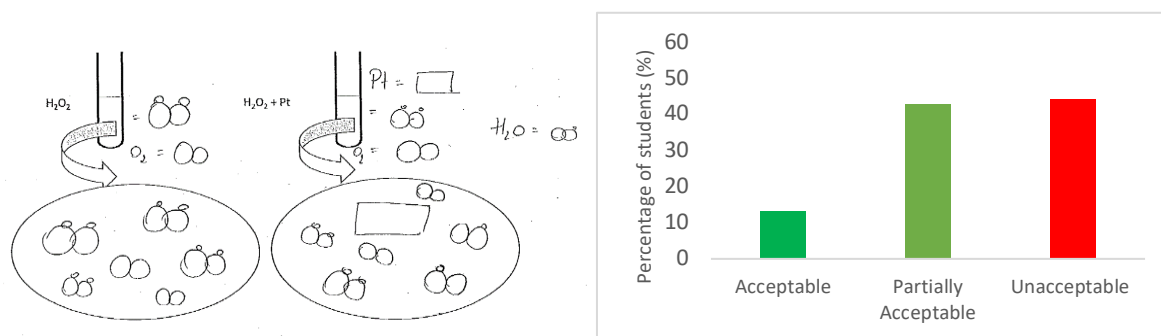


Figure 13. Example and assessment of student representations of the influence of the presence of a catalyst

This time only 13 % of students proposed acceptable and 43 % of them proposed partially acceptable schematic modeling (Figure 13). These results are weaker than for the other kinetic factors. A small percentage of representations displayed the reaction taking place on the catalyst surface. As revealed by many studies^{39,45}, most students know that a catalyst is a substance which increases the rate of a chemical reaction and is regenerated at the end of this reaction, but they seldom realize how it might work, even at an elementary level, for example upon adsorption on a surface. Even a very simplified schematic modeling of the decomposition of hydrogen peroxide on a platinum surface may already provide students with important insight on how heterogeneous catalysis works. The post-activity brainstorming sessions offered the students an adapted environment that encouraged them to ask questions and mobilize their knowledge in search of answers toward a deeper understanding of the catalysis mechanism.

Final online questionnaire (Supplementary material S6)

First part: Impact of Technology on Chemistry Learning

Overall, a significant number of students expressed agreement with various statements regarding the role of technology in chemistry learning (Figure 14). A majority of them (79%) emphasized that animations on the interactive website assisted them in interpreting experimental results. Similarly, a majority (71%) acknowledged that the tools used in online activities enriched their study of chemical kinetics. However, 52% do not deem animations essential for understanding, suggesting that students perceive these activities as supportive aids rather than indispensable tools. Furthermore, half of them feel that online activities do not enhance their interest in the chemistry course, while only 20% prefer learning online. This preference might be influenced by social considerations and interactions with teachers.^{19,46-48}

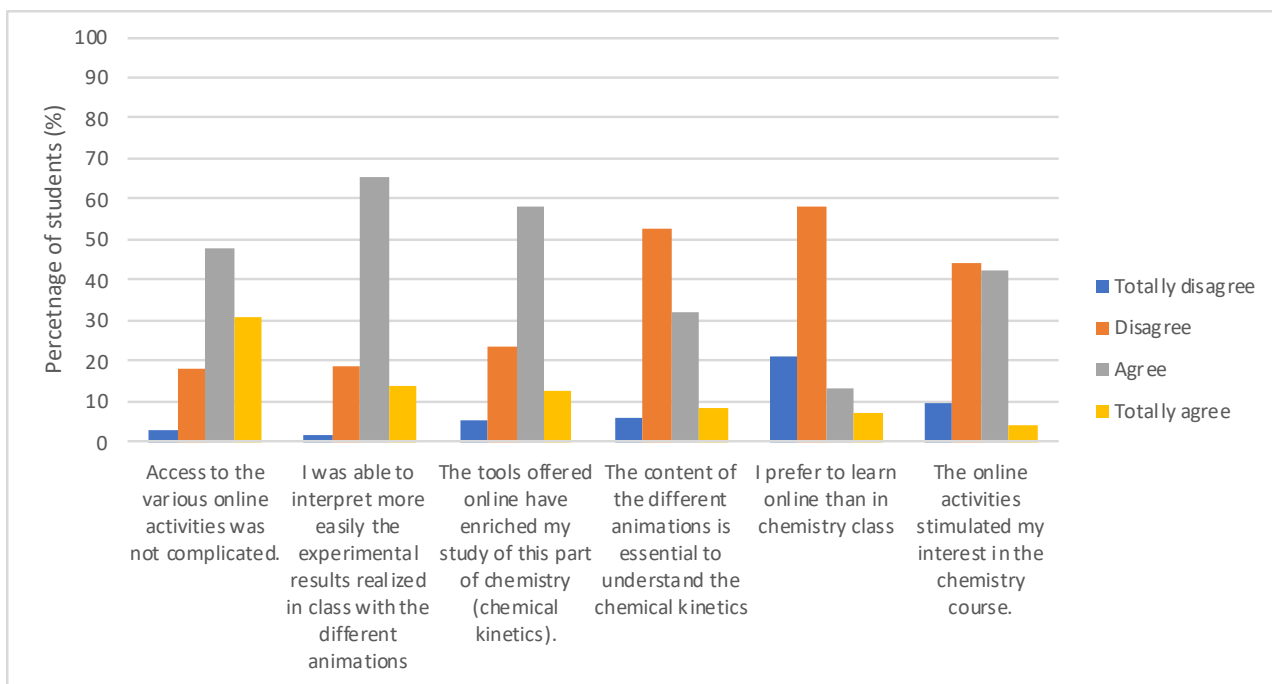


Figure 14. Student answers relating to impact of Technology on Chemistry Learning.

Relevant comments from the open-question section of the final online questionnaire are presented below. “It allows time flexibility”, “It helps to understand”, “It helps to synthesize the course”, “It uses a visual language”, “It keeps me awake”.

Second part: Learning Through Modeling

The results of the evaluation of the modeling learning approach are presented in Figure 15, showing that students developed a positive awareness of the role of the modeling process in learning. The majority of students (86%) confirmed that modeling in chemistry involves moving back and forth between the macroscopic and submicroscopic particle worlds.

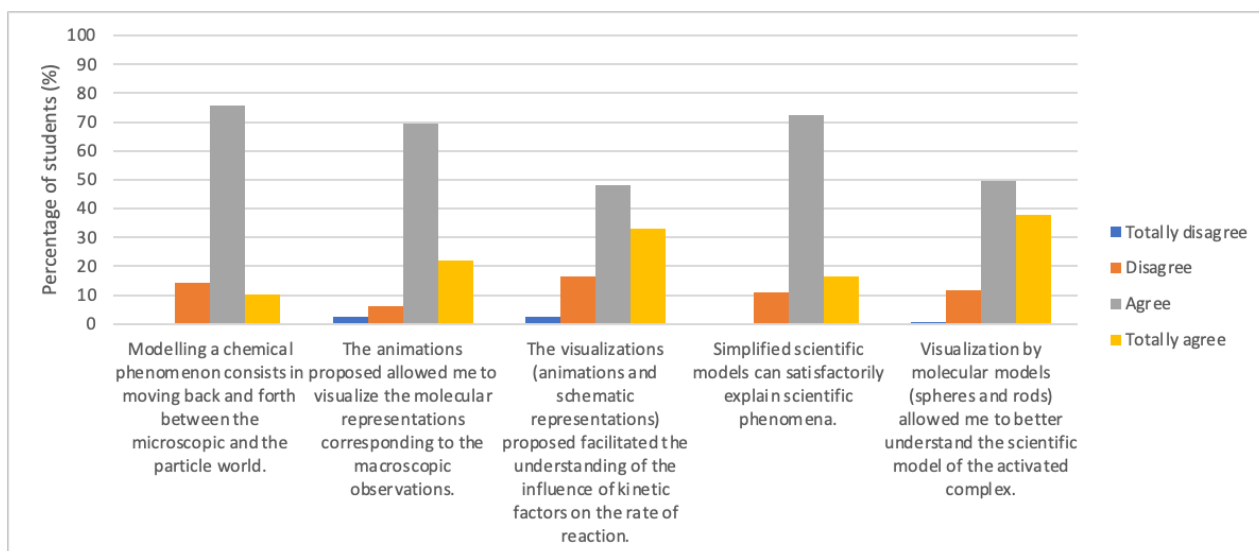


Figure 15. Student responses relating to Learning Through Modeling.

Furthermore, in response to the open-ended question in the online questionnaire, students shared their perspectives on learning through modeling. Their comments highlight benefits such as "enhanced mental model representation," "improved visualization and understanding of kinetics," "better connection between experiments and concepts," and the feeling of "seeing what you learn" and "enjoying learning chemistry". These responses align with the overall positive impact of technology and modeling on chemistry learning, reinforcing the findings presented in Figure 14. Although the majority (90%) acknowledged the utility of animations for visualizing submicroscopic representations corresponding to macroscopic observations, it is noteworthy that in Part A, 52% of students consider animations not indispensable for understanding. This suggests that while animations are considered helpful, they are not perceived as essential by all students.⁴⁹⁻⁵⁰

HAZARDS

Concentrated hydrochloric acid poses a significant risk, causing severe burns to the respiratory tract, eyes, and skin. It is highly corrosive to the eyes. Similarly, concentrated ammonia leads to burning sensations in the nose, throat, and respiratory tract.

Nitric acid, being a corrosive compound, can cause irritation to the eyes, throat, and lungs when in vapor form. Potassium thiocyanate is harmful through inhalation, skin contact, and ingestion, and contact with acids can release highly toxic gases. Iron (III) nitrate induces severe irritation to the eyes, skin, and respiratory tract, potentially resulting in burns.

Hydrogen peroxide, known for its strong oxidizing properties, has the potential to be corrosive to the eyes, skin, and respiratory system. Caution is advised in handling these substances due to their harmful effects on various parts of the body.

DISCUSSION

The research findings suggest that engaging students in modeling activities significantly enhances their conceptual understanding of chemical kinetics. The initial pre-test indicated a limited knowledge base among students regarding the nature of models, with many of them associating models with ideal schemes, often citing examples like the atomic models of Rutherford and Bohr. This is unsurprising given the limited emphasis on modeling activities in most Belgian chemistry classes, despite the 2014 science curriculum highlighting the central role of models.³²

The study aimed to assess the effectiveness of a constructivist teaching sequence in improving students' understanding of chemical kinetics, focusing on four key research questions. Research Question 1, centered on conceptual development, utilized hands-on activities and online tests to measure progress in constructing schematic models related to collision processes. Collaborative learning and guided discussions played a crucial role in overcoming persistent challenges.

Diffusion experiments and exploration of kinetic factors revealed promising advancements in students' ability to construct schematic models related to collision processes. Despite ongoing challenges, particularly in dynamic aspects, collaborative learning and scaffolded discussions were instrumental in facilitating conceptual evolution. But for the influence of a catalyst, a steady increase of the proportion of acceptable schematic models was observed, reaching 66% for the impact of temperature. The online test on diffusion phenomena led to an average score of $72 \pm 18\%$, and those of the effects of the concentration and the temperature, to scores of $63 \pm 17\%$ and $77 \pm 22\%$, respectively, with participation rates of about 80%.

Research Question 2 delved into the integration of an interactive website and macro-submicroscopic links. The website effectively complemented hands-on activities, enhancing connectivity between macroscopic observations and submicroscopic representations, as evidenced by high online test participation rates (72% to 79%) and good scores (mean scores between 61 and 77%).

Activities related to Research Question 3 focused on interpreting data and establishing mathematical relationships. Positive outcomes, reflected in a participation rate of 85% and a mean score of 61% (as shown in Figure 7), demonstrated that the sequence has the potential to guide students toward an understanding of quantitative aspects of chemical kinetics.

Research Question 4, probing the impact of fundamental chemical concepts, revealed a plethora of perspectives in students' conceptual models. To tackle question number 4, specific instances were meticulously scrutinized from the models spanning Activity 1 to Activity 6. These perspectives encompass vital principles such as ionic dissociation, alongside stoichiometric considerations, encapsulating the proportional relationship between the amounts of dissolved ions. We noted that the criterion "Difference in diffusion velocity as a function of particle size" in Activity 1 was only met by 42% of the students, while the criterion "Respect of quantity ratios (number of ions) for two parallel experiments" in Activity 2 was

achieved by 40% of them. Students are faced with difficulties related to respecting particle size, ionic states and proportionality, which are essential to the development of scientifically accurate models.

In line with these analyses, we investigated criteria such as "Correct dissociation in aqueous solution (e.g., HCl to H^+ and Cl^- ions)" and "Consistency for the quantities of matter when comparing different reaction conditions" in activities 3 through 6. Students made progress in meeting quantitative aspects in various modeling tasks, with criteria finally met at a minimum average of 60%.

In summary, this constructivist teaching sequence effectively helped students develop schematic modeling skills and fostered their understanding of chemical kinetics. Collaborative learning, hands-on activities, and interactive online tests collectively contributed to students' conceptual evolution. Despite persistent challenges, particularly in the schematic translation of dynamic and quantitative aspects, the positive outcomes support the continued exploration of teaching methods integrating qualitative and quantitative aspects of chemical kinetics.

CONCLUSION

The adoption of a student-centered and cooperative learning methodology, coupled with targeted modeling activities, serves as a transformative tool guiding students from their initial reasoning and modeling abilities in chemical kinetics towards a defined educational model established through didactic transposition.^{3,5,7,15} This pedagogical approach emphasizes molecular-level analyses of experimental results, where students sketch relevant particle-level (molecules and ions) schematic models on provided sheets and engage in argumentation activities with their peers and the teacher. This is complemented by simulation activities using interactive websites associated with multiple-choice questionnaires. The positive outcomes witnessed in this study, corroborated by feedback from various sources, underscore the significance of model-based learning in reshaping student skills, particularly in the realm of chemical kinetics. We suggest that this approach holds substantial implications for refining methods of assessing student proficiency in the intricate domain of chemical kinetics, contributing to the ongoing dialogue on innovative and effective teaching methodologies.⁵²⁻⁵⁶

ASSOCIATED CONTENT

Supporting Information

Preliminary analysis, supporting materials for five modelling activities, and interactive test questions.

AUTHOR INFORMATION

Corresponding Author

*E-mail: [*h.karous@uliege.be](mailto:h.karous@uliege.be); [***Brigitte.Nihant@uliege.be](mailto:Brigitte.Nihant@uliege.be); [***Bernard.Leyh@uliege.be](mailto:Bernard.Leyh@uliege.be)

ACKNOWLEDGMENTS

The authors extend their gratitude to all the teachers and students for their invaluable support in implementing the alternative approach within the framework of the learning sequence on chemical kinetics.

REFERENCES

1. Justi, R. Teaching and Learning Chemical Kinetics. In Gilbert, J.K., De Jong, O., Justi, R., Treagust, D.F., Van Driel, J.H. (Eds.), *Chemical Education: Towards Research-based Practice* (pp. 123-136). *Science & Technology Education Library*, 17. Springer, Dordrecht, 2002.
2. Bain, K., & Towns, M. H. A review on the teaching and learning of chemical kinetics. *Chemistry Education Research and Practice*. **2016**, 17, 246-262.
3. Kirik, Ö.T., & Boz, Y. Cooperative learning instruction for conceptual change in the concepts of chemical kinetics. *Chemistry Education Research and Practice*. **2012**, 13, 221-236.
4. Murni, H. P., Azahr, M., Ellizar, E., Nizar, U.K., & Gutspatni, G. Three levels of chemical representation-integrated and structured inquiry-based reaction rate module: Its effect on students' mental models. *Journal of Turkish Science Education*. **2022**, 19(3), 758-772.
5. Chairam, S., Somsook, E., & Coll, R.K. Enhancing Thai students' learning of chemical kinetics. *Research in Science & Technological Education*. **2009**, 27(1), 95-115.
6. Yalçinkaya, E., Taştan-Kırık, Ö., Boz, Ö., & Yıldiran, D. Is case-based learning an effective teaching strategy to challenge students' alternative conceptions regarding chemical kinetics? *Research in Science & Technological Education*. **2012**, 30(2), 151-172.
7. Calik, M., Kolomuç, A., & Karagölge, Z. The effect of conceptual change pedagogy on students' conception of reaction rate. *Journal of Science Education and Technology*. **2010**, 19, 422-433.
8. Gegios, T., Salta, K., & Koinis, S. Investigating high-school chemical kinetics: the Greek chemistry textbook and students' difficulties. *Chemistry Education Research and Practice*. **2017**, 18, 151.
9. Pirson, P., Bribosia, A., Snauwaert, P., Tadino, A., & Van Elsuwé, R. *Chimie 5e: sciences générales*. 3e édition, De Boeck, Bruxelles, 2017.
10. Pirson, P., Bribosia, A., Martin, C., Tadino, A., Snauwaert, P. & Van Elsuwé, R. *Chimie 5^e/6^e : sciences de base*. 2e édition, De Boeck, Bruxelles, 2012.
11. Pirson, P., Bribosia, A., Martin, C., Snauwaert, P., Tadino, A., & Van Elsuwé, R. *Chimie 5e: sciences générales*. 2e édition, De Boeck, Bruxelles, 2011.
12. Pirson, P., Bribosia, A., Martin, C., & Tadino, A. *Chimie 5e: sciences générales*. De Boeck, Bruxelles, 2002.

13. Dulaurans, T., & Durupthy, A. Physique Chimie Ts Enseignement spécifique. Hachette Education, Paris, 2016.
14. Clavel-Monin, F., & Miguët, J. MICROMEGA: Physique-Chimie; Terminale S; CD-ROM de l'établissement; Obligatoire et Spécialité. Hatier, Paris, 2002.
15. Clement, J. Model-based learning as a key research area for science education. *International Journal of Science Education*. **2000**, 22, 1041-1053.
16. Cakmakci, G., & Aydogdu, C. Designing and evaluating an evidence-informed instruction in chemical kinetics. *Chemistry Education Research and Practice*. **2011**, 12, 15-28.
17. De Vos, W., & Verdonk, A.H. A new road to reactions, Part 4: The substance and its molecules. *Journal of Chemical Education*. **1987a**, 64, 692-694.
18. Cachapuz, A.F.C., & Maskill, R. Detecting changes with learning in the organization of knowledge: Use of word association tests to follow the learning of collision theory. *International Journal of Science Education*. **1987**, 9, 491-504.
19. Chittleborough, G., & Treagust, D.F. The modelling ability of non-major chemistry students and their understanding of the submicroscopic level. *Chemistry Education Research and Practice*. **2007**, 8(3), 274-292.
20. Prins, G.T., Bulte, A.M.W., Van Driel, J.H., & Pilot, A. Selection of authentic modelling practices as contexts for chemistry education. *International Journal of Science Education*. **2008**, 30(14), 1867-1890.
21. Pluta, W. J., Chinn, C. A., & Duncan, R. G. Learners' epistemic criteria for good scientific models. *Journal of Research in Science Teaching*. **2011**, 48(5), 486-511.
22. Ghirardi, M., Marchetti, F., Pettinari, C., Regis, A., & Roletto, E. A. Teaching Sequence for Learning the Concept of Chemical Equilibrium in Secondary School Education. *Journal of Chemical Education*. **2014**, 91, 59-65.
23. Libman, D., & Huang, L. Chemistry on the Go: Review of Chemistry Apps on Smartphones. *Journal of Chemical Education*. **2013**, 90, 320-325.
24. Niess, M. Preparing teachers to teach science and mathematics with technology: Developing a technology pedagogical content knowledge. *Teaching and Teacher Education*. **2005**, 21(5), 509-523.
25. Zhang, Z. H., & Linn, M. C. Can generating representations enhance learning with dynamic visualizations? *Journal of Research in Science Teaching*. **2011**, 48(10), 1177-1198.
26. Domingues, L., Rocha, I., Dourado, F., Alves, M., & Ferreira, E. C. Virtual laboratories in (bio)chemical engineering education. *Education for Chemical Engineers*. **2010**, 5(2), e22-e27.
27. McClean, S., McCartan, K. G., Meskin, S., Gorges, B., & Hagan, W. P. Reflections on "YouTestTube.com": An Online Video-Sharing Platform to Engage Students with Chemistry Laboratory Classes. *Journal of Chemical Education*. **2016**, 93(11), 1863-1870.
28. Hadenfeldt, J. C., Neumann, K., Bernholt, S., Liu, X., & Parchmann, I. Students' Progression in Understanding the Matter Concept. *Journal of Research in Science Teaching*. **2016**, 53(5), 683-708.

29. Psillos, D., & Méheut, M. Teaching-learning sequences: aims and tools for science education research. *International Journal of Science Education*. **2004**, 26(5), 515–535.
30. Harrison, A. G., & Treagust, D. F. A Typology of School Science Models. *International Journal of Science Education*. **2000**, 22, 1011–1026.
31. Karous, H., Nihant, B., & Leyh, B. Conceptual change in chemistry schematic modelling: a cross-sectional study of 10th–12th-grade Belgian students. *Canadian Journal of Chemistry*. **2022**, 100(8), 633–648.
32. Communauté Française Wallonie–Bruxelles. Compétences et Savoir Requis en Sciences Générales. http://www.gallilex.cfwb.be/document/pdf/40140_001.pdf (accessed April 15, 2024).
33. Grosslight, L., Unger, C., Jay, E., & Smith, C. L. Understanding models and their use in science: Conceptions of middle and high school students and experts. *Journal of Research in Science Teaching*. **1991**, 28, 799–822.
34. Cheng, M. W. Students' visualization of chemical reactions-insight into the particle model and the atomic model. *Chemistry Education Research and Practice*. **2018**, 19, 227–239.
35. Dhindsa, H. S., & Treagust, D. F. Prospective pedagogy for teaching chemical bonding for smart and sustainable learning. *Chemistry Education Research and Practice*. **2014**, 15(4), 435–446.
36. Johnstone, A. H. Teaching of chemistry: logical or psychological? *Chemistry Education Research and Practice*. **2000**, 7(2), 49–63.
37. Stojanovska, M. I., Petrusevski, V. M., & Soptrajanov, B. T. Study of the use of the three levels of thinking and representation contributions. *Section of Natural, Mathematical and Biotechnical Sciences*. **2017**, 35(1), 37–46.
38. Talanquer, V. Macro, submicro and symbolic: the many faces of the chemistry “triplet”. *International Journal of Science Education*. **2011**, 33(2), 179–195.
39. Jusniar, J., Effendy, E., Budiasih, E., & Sutrisno, S. Misconceptions in rate of reaction and their impact on misconceptions in chemical equilibrium. *European Journal of Science Education Research*. **2020**, 9(4), 1405–1423.
40. De Berg, K., Maeder, M., & Clifford, S. A new approach to the equilibrium study of iron(III) thiocyanates which accounts for the kinetic instability of the complexes particularly observable under high thiocyanate concentrations. *Inorganica Chimica Acta*. **2016**, 445, 155–159.
41. Johnson, D. W., & Johnson, R. T. Learning together and alone: Cooperative, competitive, and individualistic learning (5th ed.). Boston, MA: Allyn and Bacon, 1999.
42. Cooper, M. M. Cooperative Learning: An Approach for Large Enrollment Courses. *Journal of Chemical Education*. **1995**, 72, 162–164.
43. Van Driel, J. H. Students' corpuscular conceptions in the context of chemical equilibrium and chemical kinetics. *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*. **2002**, 3(2), 201–213.

44. Nahum, T. L., Mamlok-Naaman, R., & Hofstein, A. Developing a New Teaching Approach for the Chemical Bonding Concept Aligned with Current Scientific and Pedagogical Knowledge. *Science Education*. **2007**, 579-603.
45. Copper, C. L., & Koubek, E. An experiment to demonstrate how a catalyst affects the rate of a reaction. *Journal of Chemical Education*. **1999**, 76, 12.
46. Hensiek, S., DeKorver, B. K., Harwood, C. J., Fish, J., O'Shea, K., & Towns, M. Improving and Assessing Student Hands-On Laboratory Skills through Digital Badging. *Journal of Chemical Education*. **2016**, 93(11), 1847–1854.
47. Gabel, D. Improving Teaching and Learning through Chemistry Education Research: A Look to the Future. *Journal of Chemical Education*. **1999**, 76(4), 548-554.
48. Frailich, M., Kesner, M., & Hofstein, A. Enhancing Students' Understanding of the Concept of Chemical Bonding by Using Activities Provided on an Interactive Website. *Journal of Research in Science Teaching*. **2009**, 46(3), 289–310.
49. Yanarates, E. The Effect of Animated Teaching on Science Teacher Candidates' Chemistry Achievements and Learning Persistence. *Educational Policy Analysis and Strategic Research*. **2022**, 17(1).
50. O'Day, D. H. The value of animations in biology teaching: a study of long-term memory retention. *CBE—Life Sciences Education*. **2007**, 6(3), 217-223.
51. Maia, P. F., & Justi, R. Learning of Chemical Equilibrium through Modelling-based Teaching. *International Journal of Science Education*. **2009**, 31(5), 603–630.
52. Hammer, D., & Elby, A. Tapping Epistemological Resources for Learning Physics. *Journal of the Learning Sciences*. **2003**, 12, 53–90.
53. Treagust, D. F., Chittleborough, G., & Mamiala, T. L. Students' Understanding of the Role of Scientific Models in Learning Science. *International Journal of Science Education*. **2002**, 24, 357–368.
54. Machado, J., & Braga, M. Secondary Students' Modelling Conceptualisation in Situations Related to Particle Dynamics: A Clinical Perspective. *International Journal of Science Education*. **2018**, 40, 1606–1628.
55. Rodriguez, J. M. G., Stricker, A. R., & Becker, N. M. Students' Interpretation and Use of Graphical Representations: Insights Afforded by Modeling the Varied Population Schema as a Coordination Class. *Chemistry Education Research and Practice*. **2020**, 21, 536–560.
56. Bongers, A., Beauvoir, B., Streja, N., Northoff, G., & Flynn, A. B. Building Mental Models of a Reaction Mechanism: The Influence of Static and Animated Representations, Prior Knowledge, and Spatial Ability. *Chemistry Education Research and Practice*. **2020**, 21, 496–512.

Learning Chemical Kinetics at Secondary School Level by Developing Autonomous Modeling Skills. Part II. Activated complex and reaction coordinate diagrams

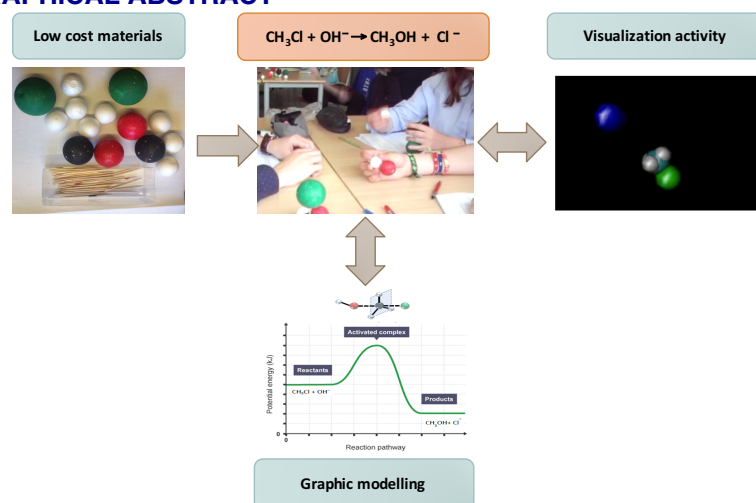
Hamad Karous^{a*}, Brigitte Nihanta^{a**} and Bernard Leyh^{a***}

^a Department of Chemistry, University of Liège and DIDACTIfen Research Unit, Allée du six Août 11, 4000 Liège, Belgium.

ABSTRACT

The activated complex is a central model in chemical kinetics, a part of general chemistry which is often qualified as difficult by many students at different levels. Teaching the activated complex model already in secondary school (high school) aims at helping students to rationalize at the molecular level the influence of the macroscopic kinetic factors. Difficulties in understanding the concept have, however, been identified. This paper describes and assesses an alternative approach to teach the activated complex model and reaction coordinate diagrams through autonomous simplified modeling processes with low-cost material coupled to interactive activities. It has been tested with Belgian secondary school students. This study also allows to identify characteristics of the reasoning of students and to assess their progressive conceptual change. The research results show that the modeling task was beneficial for students and provided a significant contribution in their learning process.

GRAPHICAL ABSTRACT



KEYWORDS

Chemical kinetics, Activated complex, Reaction coordinate diagram, Autonomous modeling, Interactive activities, Assessment

CONTEXT OF THE PROPOSED ALTERNATIVE APPROACH

In many countries, including French-speaking Belgium where the present study was performed, the teaching of chemical kinetics is focused on a qualitative experimental investigation of the influence of macroscopic parameters like temperature or reactant concentration on the rate of a given chemical reaction. Ye et al.¹ demonstrated that understanding concepts and problem-solving at the border between mathematics and natural sciences poses significant challenges also for university students. Despite teachers' concerns about students' mathematical skills, research indicates that persistent obstacles exist beyond technical mathematical manipulations at all levels of education, from secondary school to advanced university studies.²⁻³

Justi & Ruas⁴ observed that the majority of students of a selected sample ($n = 42$) in a Brazilian school did not express any ideas concerning the dynamic nature of particles. They used a static view of substance to explain how the reactant concentration, temperature and catalysts influenced the rate of chemical reactions. Kousathana and Tsaparlis⁵ mentioned that students have difficulty distinguishing between the rate of reaction and the yield of reaction. They also refer to Le Chatelier's principle to explain the influence of temperature on the rate.⁵ Even though collision processes are of paramount importance to understand chemical kinetics, students tend to misunderstand them, most probably because they do not clearly recognize the relationship between the collisional events at the molecular level and the macroscopic, visible outcome of the reaction with its specific kinetic properties.⁶

To understand the influence of kinetic factors on the reaction rate, such as concentration, contact surface and temperature, reaction mechanisms at the molecular level must be considered.⁷ Moreover, students need to master several essential prerequisites: molecular motion, diffusion, collision, kinetic energy of the particles, etc.⁸

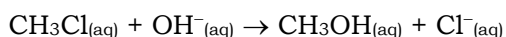
Van Driel⁹ showed that students (aged 16-17 years, 10th grade) rely on a simple model of colliding particles to explain, at submicroscopic level, the observable influences of the external parameters. In his study, he found that the reasoning in terms of moving and colliding particles is a limited method because it can lead to misinterpretation of the influence of temperature. A better understanding would require to introduce the activated complex model, also called transition state model, involving the progressive breaking of old bonds and formation of new ones, a model which this author did not consider tractable for 10th grade students. However, the notion of activation energy can also be misunderstood. Yalçinkaya et al.¹⁰ mention that some students equate activation energy with the kinetic energy of reactants. Furthermore, Taştan¹¹ showed that some students had difficulties in understanding activation energy and listed many misconceptions on this concept, for example, on the

influence of a catalyst or about the relationship between activation energy and exothermicity. Pölloth et al.¹² detailed in their review that students struggle to establish a connection between bond formation and energy release, emphasizing the need for early education focused on molecular-level explanations.

The evolution of the potential energy along the reaction coordinate, also denoted as reaction coordinate diagram (RCD), gives access to the concepts of activated complex and activation energy and is a pivotal conceptual tool to account for reaction rates and, therefore, to understand chemical kinetics. Parobek et al.¹³ conducted research to understand how students interpret the different points on RCD. They suggest to use a state-based RCD in which the x-axis is removed to avoid assigning it to time, as they observed some students did. The curves have also to be replaced by discrete lines corresponding to the reactants, transition state and products.

Gegios et al.¹⁴ performed a combined analysis of (i) the approach adopted by a Greek chemistry textbook about chemical kinetics, including activated complex and RCD, and (ii) the difficulties encountered by the students. In the context of our research, let us notice that these authors emphasize how difficult it is for the students to appreciate “the wealth of information provided in the potential energy diagram of a reaction”.

Our aim is to help secondary school students realize the pivotal role played by the activated complex theory for a better understanding of collision processes in chemical kinetics. In this paper, we shall use the terms “transition state” and “activated complex” interchangeably, the precise definition of the transition state, involving phase space considerations, exceeding the scope of secondary school teaching. To introduce the activated complex model, we called on the students’ ability to represent molecules spatially and model them in the specific case of the following exothermic S_N2 reaction:



The task that was assigned to the students was: Propose a molecular model of the evolution of a bimolecular reaction. What does happen at the molecular level when the reactants interact upon collision and progressively rearrange into products?

Groups of 3 or 4 11th grade students first had to build models of the reactants and products. They were provided with polystyrene balls of different sizes and colors following the usual conventions for hydrogen (white), carbon (black), oxygen (red) and chlorine (green), and toothpicks. They then had to explain under which conditions of orientation the collision between the reactants was effective and they had to propose an intermediate structure that might correspond to the transition on the way from reactants to products. Due to the unconventional structure of the transition state, usual commercial molecular models were not desirable. An additional advantage of using home-made models with no pre-orientations of the bonds was to check the retention of the VSEPR theory, taught in a previous sequence,

by the students and their ability to make the relevant connections between chapters, that is, chemical bond theory and chemical kinetics.

This approach makes it possible to develop, analyze and assess the following students' competences and skills, in which the social interactions play a decisive role:¹⁵

- identifying the students' reasoning leading to the choice of a molecular representation respecting geometric and energetic aspects;
- assessing their progressive conceptual change;
- observing how the students perceive scientific models, in particular how they make decisions concerning the relevant aspects that need to be integrated in a model;
- observing and analyzing the role of the teacher in coaching the learning process during a complex task.

In the socio-constructivist approach, students are encouraged to play an active role in their own learning: interacting with peers, they have to exchange explanations, make decisions and present their conclusions to the class group.

We have drawn on several previous research works in order to favor the use of an educational sequence that integrates molecular representations with macroscopic and symbolic representations when teaching the concepts of chemistry. It has been shown that multimedia-related learning using animated models online can contribute to the understanding of scientific phenomena.¹⁶⁻¹⁸ So, we have also included an online questionnaire based on animation at the submicroscopic level to support the understanding of the model of the activated complex. For example, Fang and Guo's¹⁹ interactive Computer Simulation and Animation (CSA) module enhanced student understanding of particle kinetics in engineering dynamics, showing significant learning gains compared to traditional teaching methods.

Own²⁰, for example, claims that "... the network and multimedia are useful tools for developing the learning environment with a constructivist learning approach. Well-designed, web-based instruction will become a crucial part of implementing constructivist style instruction."

METHODS

Context and Participants

A sample of 108 students from two Belgian secondary schools was selected. It consists of two groups. The first group of students is from the French-speaking region ($n = 94$) and the other one is from the German-speaking region ($n = 14$). Because the regional education system in Belgium originates from an initially common system, we assumed that language would not significantly affect the analysis of students modeling data. All documents were initially written in French and translated into German by an experienced bilingual chemistry teacher.

The involved students are between 16 and 17 years old (11th grade). They all attended an advanced chemistry course, namely two or three hours of chemistry per week with similar

methods. Two hours have been dedicated to test the approach presented in this paper, in the frame of a learning sequence in chemical kinetics. These two hours are the concluding part of our didactic sequence on chemical kinetics (see part I of this series). It has been tested in the same classes.²¹

Research Tools

In the present study, the collected data come from the use of various instruments which are included in the supplementary information (Supplementary material S1). They have been translated into English by us for the purpose of this publication.

Firstly, as mentioned before, groups of 3-4 learners were given the task of proposing and constructing molecular models for the reactants, products and the transition state for an exothermic S_N2 reaction using polystyrene balls and toothpicks. The students in each group had to exchange information and justify the proposed geometry. Then, a document with 6 different proposals for the reaction coordinate diagram was provided to the students. From their own construction of the molecular model of the activated complex and the analysis of its particular geometry, the students had to deduce that this structure, which does not respect the usual valence rules, is necessarily less stable than both the reactants and the products and therefore corresponds to a maximum in the reaction coordinate diagram. On the other hand, as they had been given the information about the exothermicity of the reaction, they could choose the correct proposal. Each representation required analysis and evaluation, fostering an active learning environment that empowered students to independently construct the correct reaction coordinate diagram. Finally, after the class activity, an animated visualization accompanied with multiple-choice questions (MCQs) using an interactive website was introduced. This animation made it possible to visualize both ineffective collisions and effective collisions when the reagents collide with the correct orientation (Supplementary material S1). The student answers to these MCQs allowed us to assess their comprehension level.

Data Analysis

Video sequences were recorded during the modeling activity. The interactions within the groups and with the teacher were analyzed using a diagrammatic approach (see Figure 1) inspired from Maia and Justi.²² We were interested to identify the student's attitude during the modeling task, to establish a categorization and to observe its influence on the achievement of the task in different teams. Given that the number of cameras was limited, only 11 teams were filmed (G1 to G11). The following scheme allowed to compare the different groups.

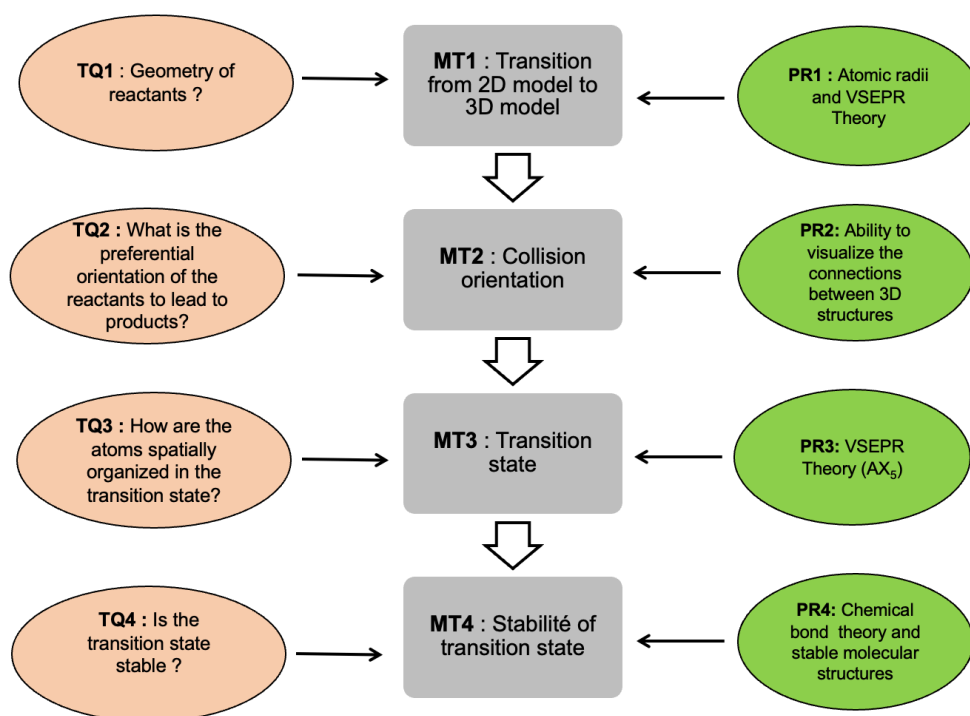


Figure 1. Diagram of Learning Process (Legend; **TQ**: Teacher Question; **MT**: Modeling Task; **PR**: Prerequisites)

In addition to the analysis of the video sequences, the efficiency of the proposed methodology was assessed based on the student performances at the tasks mentioned in the research tools section: (i) success rate at the questionnaire featuring six distinct reaction coordinate diagrams; (ii) categorization of the written justifications at the same questionnaire; (iii) online self-assessment through MCQs following a dynamic visualization of the studied S_N2 reaction. All mentioned tools are available in the supporting information.

RESULTS

Using simple materials and their prior knowledge of the VSEPR model, students were first encouraged to construct reactants and products with correct geometries. They are then asked to formulate reasonable hypotheses about the appropriate geometry of the activated complex. By proposing a correct spatial organization of atoms in the activated complex, representing a non-classical carbon valence and geometry, the students are led to perceive the origin of the higher energy of the transition state and therefore of the appearance of an activation barrier. Throughout the activity, the students were supported by the teacher and drew on their prior knowledge of chemical bonds, geometries, and the link between bond formation and energy. All groups succeeded in creating a realistic model of the transition state (see Figure 2). Despite some difficulties encountered with the geometry of methanol, particularly with regard to the CÔH angle in the alcohol function, students persevered.

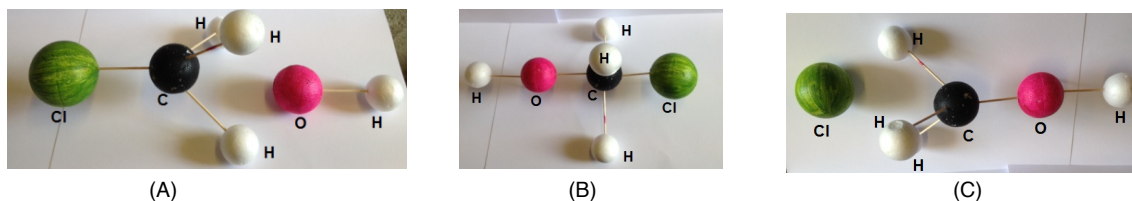


Figure 2. Examples of students' construction of the space configuration of the reactants, activated complex and products of the reaction: $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{OH}^- \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + \text{Cl}^-$: (A) the structure of the reactants, (B) the structure of activated complex, (C) the structure of the products

The Diagram of Learning Process shows the number of steps where the students asked for teacher help and the number of steps where they used efficiently their prerequisites to progress in the activity (see Table 1). Globally, a first correlation can be established between the autonomous use of background knowledge, the extent of teacher coaching and the global time devoted to the task (MT1 to MT4) (Figure 3). The important parameter is the ratio between the number of autonomous steps referring to background knowledge and the number of steps requiring coaching interventions (Figure 4).

Table 1. Number of autonomous and coached steps for each group

Group	Number of autonomous steps based on background knowledge	Number of steps requiring teacher coaching
G1	2	2
G2	0	4
G3	0	4
G4	1	3
G5	1	3
G6	0	4
G7	3	1
G8	3	1
G9	2	2
G10	2	2
G11	2	2

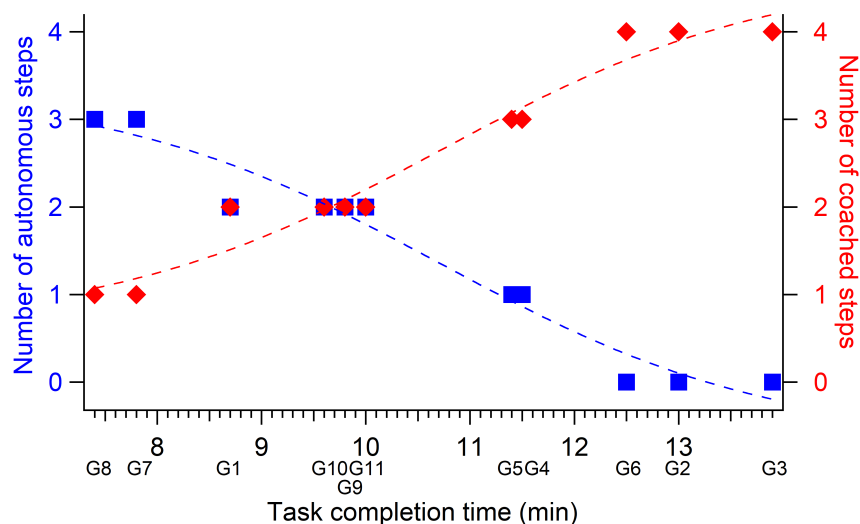


Figure 3. Time invested during the modeling activity in each group in correlation with the number of autonomous (based on background knowledge) and coached steps. The dotted lines are only a guide for the eye, to highlight the general trend.

The students independently completed an average of 1.5 steps (standard deviation = 1.1) and therefore required the teacher's help for 2.5 steps. Among the 4 steps, 45% of the groups had more difficulty with modeling task 4 (MT4), which addressed the stability of the transition state (Table 2). This step took up to 40% more time than the others for some groups. It should also be noted that no group realized all four tasks independently. This proves the importance of prerequisites and teacher support in a complex task.

Table 2. The modeling task (MT) that caused most difficulties

Group	G1	G2	G3	G4	G5	G6	G7	G8	G9	G10	G11
Step	MT2	MT4	MT1	MT4	MT2	MT4	MT4	MT4	MT3	MT3	MT2

Based on the analysis of the videotapes, we also carried out a qualitative analysis of the skills and attitudes demonstrated by the students and their influence on mastery of the modelling tasks and, consequently, on conceptual progress (Table 3).

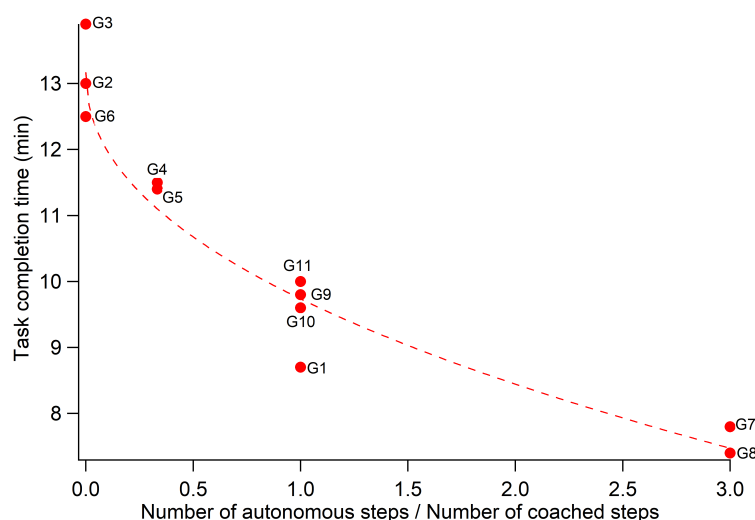


Figure 4. Time invested by each group as a function of the ratio of the number of autonomous and coached steps. The dashed line is a guide for the eye.

Table 3. Assessment of five categories in the eleven groups during the modeling activity (Legend; S: Strong; M: Moderate; W: Weak)

Category	G1	G2	G3	G4	G5	G6	G7	G8	G10	G11
Seriousness during the task	M	S	S	M	S	S	S	S	S S	S
Dialogue within the team	S	W	W	S	S	M	S	S	S S	M
Is one particular student leading the group?	No	No	No	No	No	No	No	No	No	No
Logical reasoning	S	W	W	M	M	W	S	S	M M	M
Coaching by the teacher	W	S	S	S	M	S	W	W	M M	S
Time required/min	8.7	13.0	13.9	11.5	11.4	12.5	7.8	7.4	9.6	10.8

We first observe that the students took on average the task seriously. Large dispersions show up as far as the dialogue within the team, the level of logical reasoning and teacher support are concerned. In none of the groups did a particular student take on the role of leader. The three most efficient groups (G8, G7 and G1) displayed a good combination of team working and cognitive competences (logical reasoning). As expected, the least productive groups (G2 and G3) combined collaborative and cognitive weaknesses. G6 needed almost as much time as G2 and G3 to complete the task, despite moderately good teamwork. For this group, the absence of logical reasoning could only be slowly compensated by the strong teacher support. The five remaining groups, with intermediate task completion times, show that moderate competencies at the cognitive level can be partly mitigated by either a strong dialogue within the group (G4, G5, G9, G10) and/or a good use of teacher support (G4, G11).

The questionnaire addressing the energy diagram along the reaction coordinate was designed to assess how the students could (i) refer to their knowledge acquired in the previous

unit on thermochemistry, knowing that the investigated reaction is exothermic, and (ii) interpret correctly in energy terms the chemical structure of the activated complex they built in the group activity. They had to recognize two key points which were met only in one of the six reaction coordinate diagrams provided: (i) the energy of the products is lower than that of the reactants; (ii) the energy of the activated complex is greater than that of both the reactants and the products. Figure 5 shows the distribution of students' answers. Four categories, with their respective student percentages, show up based on the two above-mentioned criteria: (i) completely correct choice (1 possible choice) (83%); (ii) only the thermochemistry criteria is met (2 possible choices) (2%); (iii) only the criteria about the transition state energy is met (11%) (1 possible choice); (iv) none of the two criteria is met (2 possible choices) (4%).

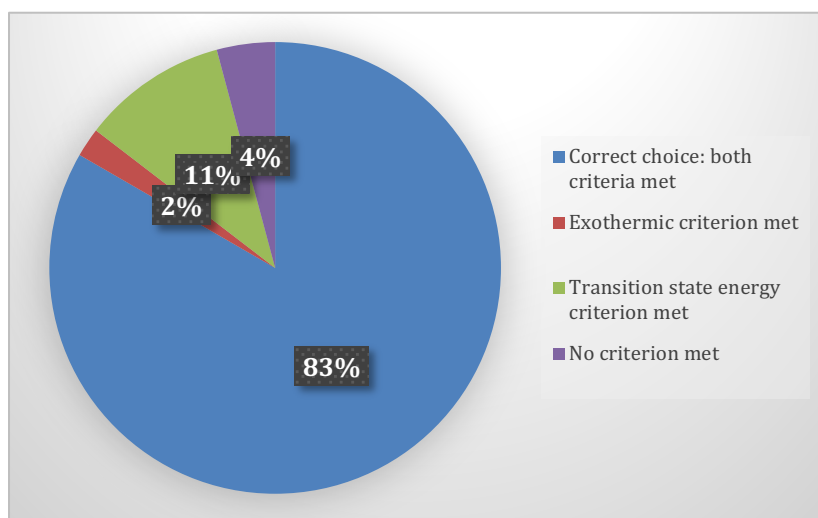


Figure 5. Student choice distribution for the questionnaire with 6 different reaction coordinate diagrams

Out of the 83% of students who chose the correct diagram, 59% justified their choice by arguing on both criteria (exothermicity and energy of the transition state) (Figure 6). 32% argued on only one criterion and 9% did not justify their choice. These results are promising because they show a positive conceptual impact of the activity based on the construction of a molecular model of the activated complex.

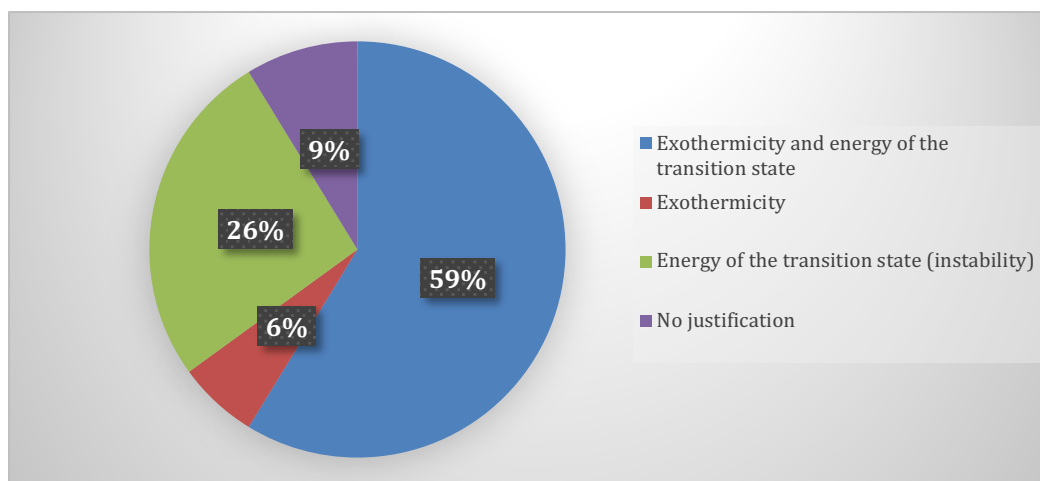


Figure 6. Classification of students' justifications for their reaction coordinate diagram choices

Figure 7 focuses on a more detailed analysis of the arguments used by these 59% of the students when justifying the relative energy of the transition state compared to the reactants and products. Arguments focused either on structural aspects (tight geometry of the activated complex) or on energetic aspects (instability of this species, which must dissociate into fragment), or on a combination of both.

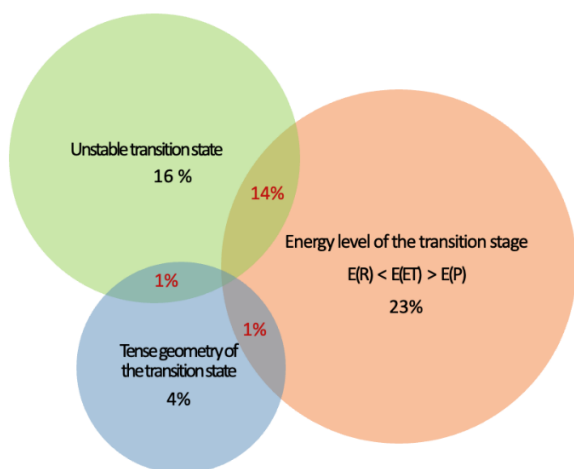


Figure 7. The distribution of the arguments used by the students to justify the higher energy of the activated complex (Legend; **R**: Reactants, **TS**: Transition State, **P**: Products)

The classroom activity was followed by an interactive online activity in which the students were asked to visualize an animation on effective collisions and answer to 5 MCQS (Supplementary material). The five questions were about the role of the collisions in the process of reaction, the effective collisions between the reactants to form the products, the formation of the activated complex and the progression of the reaction. The results of the online test are summarized in Table 4. The mean score for this test is 70 % with a standard deviation of 12%.

Table 4. Results of the online test: mean, standard deviation (SD), minimum maximum of answer scores, scores for each question (Q1 to Q5).

	Mean	SD	Min	Max	Q1	Q2	Q3	Q4
Scores (%)	70	12	58	86	60	74	86	69

Students were also asked to express their views on the impact of the modeling activity in understanding the activated complex theory, utilizing a Likert scale (Figure 8).

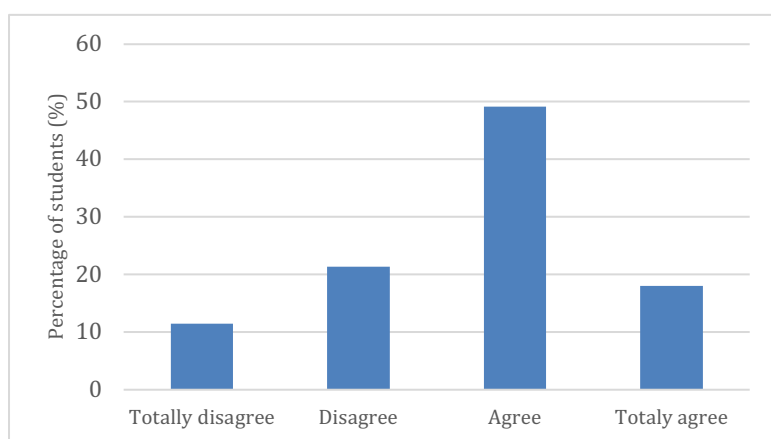


Figure 8. Student answers on the importance of the modeling activity to understand the activated complex theory.

Most students (67%, Figure 8) agreed that the molecular modeling of the activated complex facilitated their visualization of this transitory species and improved their understanding of its characteristics. Students were comfortable with the online activity, and the computer animations proved useful in bridging the gap between the macroscopic and sub-microscopic levels.²³⁻²⁵

DISCUSSION

Encouraging results have been obtained on the enhancement of students' understanding of the abstract concept of the activated complex and its relationship to the efficient collision requirement by engaging the learners in a process of building, refining, and comparing molecular models of the reactants, the activated complex, and the resulting products of an elementary S_N2 reaction. Fostering collaborative efforts with peers, and proposing an online testing activity at the individual level are also essential dimensions of this approach. led to encouraging results We must, however, note that, for both ethical and practical reasons linked to school requirements, no comparison with a control group was possible. The analysis of the written justifications required in the questionnaire brought about interesting nuances about the level of understanding reached by the learners.

This study corroborates the findings of numerous researches,²⁶⁻²⁷ underscoring the positive impact of modeling activities on the overall quality of understanding. We demonstrate that incorporating modeling activities is highly beneficial, as it forces students to actively participate, articulate their arguments, and progress toward scientifically rigorous discussions within small groups. The thoughtful design of the activity and the classroom environment collectively contributed to improving students' conceptual understanding.

Employing basic materials to construct 3D models at the submicroscopic level helps students to bridge the gap between the macroscopic observations and dynamic molecular aspects. Grasping the connections between kinetic data and the reaction mechanism is crucial. Additionally, computer simulations play a significant role in enhancing students' comprehension of the dynamic facets of chemical reactions. Understanding these aspects is pivotal for a profound comprehension of chemical kinetics.²⁸⁻²⁹ Other researchers³⁰⁻³² have recommended supplementary teaching strategies for students' learning, involving the representation of chemical reactions at the submicroscopic scale guided by the observation of animations.

By explicitly introducing the transition state model and reaction coordinate diagrams, we opened the possibility to explain why more energetic collisions, which correspond to higher temperature conditions, lead to an increase of the reaction rate. This gave the students the opportunity to question the alternative conception identified by Van Driel⁹ about too fast reactants bouncing back after collision, without reacting.

Our observations also highlight the importance of the social component, in line with previous researches. Krystyniak & Heikkinen³³ found that interactions among students in small group discussions significantly improved the understanding of observations in laboratory activities and the underlying mechanisms of phenomena. Moreover, Coll et al.³⁴ indicate by their research that “group work and peer discussion can be vital components of successful teaching to enhance students’ cognitive and metacognitive thinking skills”.

Examination of the results and analysis of the video tapes on the basis of the learning process diagram reveals a significant impact of background knowledge, although this is partially offset by teacher support (See Tables 1-3 and Figures 3-4). Two-thirds of the students needed the teacher's help, while one-third used their background knowledge efficiently to progress in the activity. Our results concerning the role of the modeling activity in the process of conceptual change within the framework of collision theory and activated complex theory are in line with existing literature.¹⁵

Noteworthy differences emerge between the groups based on students' attitudes during the activity, with several relevant factors influencing students' conceptual change identified (see Table 3). A subtle interplay takes place between two types of elements: cognitive elements, such as basic knowledge, logical reasoning and the teacher's intellectual support, and emotional factors encompassing dialogue, leadership and the teacher's moral support, favoring motivation leading to a serious attitude towards the proposed task. Saouma et al.³⁵

emphasized the crucial role of teachers in supporting students' progress: "...that teachers use figures of speech to clarify concepts and facilitate students' understanding, help students relate what they learn to real life experiences, overcome misconceptions, learn new concepts and relate these to prior knowledge, retrieve information from memory, and relate them to familiar physics or mathematical concepts..."

Based on their construction of a molecular model of the transition state, a large majority (83%) of students were able to select the correct reaction coordinate diagram, providing the correct energy order of reactants, transition state and products (Figure 5). However, their justifications were less well articulated. 59% of them addressed the two energy criteria (exothermicity and higher energy of the transition state) (Figure 6), arguing on the basis of the tense geometry and/or the unstable structure of the transition state (Figure 7). This shows that there is still progress to be made in enabling students to acquire argumentative skills and translate them into well-constructed sentences using precise vocabulary.

The efficiency of our approach can also be estimated based on the results of the online test (Table 4) which led to an average score of 70 ± 12 %. In addition, the Likert-scale question shows that nearly 70% of all students recognized that the modelling activity, leading them from a hands-on activity to concept building, had a positive impact on their understanding.

CONCLUSIONS

The autonomous modelling approach presented in this article is the final part of a teaching sequence devoted to kinetics, the general structure of which is explained in the first part of this series. The pedagogical experiment carried out with 108 Belgian secondary school students (11th grade) in a science-oriented section revealed several positive and promising aspects. This approach encourages collaborative work, motivation and the development of argumentation skills. Around half of the groups of students were able to define a convincing structure for the transition state within a reasonable time and essentially independently. For the other half, however, the teacher's support role should be recognized. This teaching method enabled students to gain a better understanding of two essential aspects of chemical kinetics: geometry (an appropriate orientation of the colliding reactants is necessary) and energy (the energy stored in the reaction coordinate must be larger than the activation energy). This leads to a correct understanding of the temperature-dependence of the rate constant. A large majority of students were able to correctly classify the reactants, transition state and products on an energy scale and obtained respectable scores for the final online test. Weaknesses were observed, however, although not unexpected, in the precise and rigorous formulation of justifications. Students are often on the right track but fail to articulate their arguments properly.

In conclusion, while the autonomous modeling approach demonstrates substantial promise in enhancing student understanding of chemical kinetics, particularly in geometric

and energetic contexts, ongoing support and guidance are essential to foster students' ability to articulate and justify their scientific reasoning effectively. These findings underscore the need for continuous evolution and refinement of pedagogical methodologies to best support conceptual change in chemistry.

ASSOCIATED CONTENT

Supporting Information

Questionnaire on the energy evolution from reactants to products, and interactive test questions.

AUTHOR INFORMATION

Corresponding Author

*E-mail: *h.karous@uliege.be; ** Brigitte.Nihant@uliege.be; ***Bernard.Leyh@uliege.be

ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to express their gratitude to the participating teachers, as well as to the students, for their invaluable support in implementing this didactic sequence.

REFERENCES

1. Ye, S., Elmgren, M., Jacobsson, M. and Ho. F.M. How much is just maths? Investigating problem-solving in chemical kinetics at the interface of chemistry and mathematics through the development of an extended mathematical modeling cycle. *Chemistry Education Research and Practice*, 2024, 25, 242-265.
2. Boujaoude, S., Salloum, S., & Abd-El-Khalick, F. Relationships between selective cognitive variables and students' ability to solve chemistry problems. *International Journal of Science Education*. 2004, 26, 63-84
3. Akben, N. Effects of the Problem-Posing Approach on Students' Problem Solving Skills and Metacognitive Awareness in Science Education. *Research in Science Education*. 2020, 50, 1143-1165.
4. Justi, R.S., & Ruas, R.M. Aprendizagem de química: reproduçao de pedaços isolados de conhecimento? [Learning of chemistry: reproduction of isolated pieces of knowledge?] *Química Nova na Escola*. 1997, 5, 23-26.
5. Kousathana, M. and Tsaparlis G., Student's errors in solving chemical equilibrium problems. *Chemistry Education: Research and Praxis in Europe* 2002, 1, 5-17.
6. De Vos, W., & Verdonk, A.H. A new road to reactions, Part 4: The substance and its molecules. *Journal of Chemical Education*. **1987a**, 64, 692-694.
7. Sözbilir M., Pınarbaşı, T. and Canpolat, N. Prospective Chemistry Teachers' Conceptions of Chemical Thermodynamics and Kinetics. *Eurasia Journal of Mathematics, Science & Technology Education*, **2010**, 6(2), 111-120.

8. Justi, R. Teaching and Learning Chemical Kinetics. In Gilbert, J.K., De Jong, O., Justi, R., Treagust, D.F., Van Driel, J.H. (Eds.), *Chemical Education: Towards Research-based Practice* (pp. 123-136). Science & Technology Education Library, 17. Springer, Dordrecht (2002).
9. Van Driel, J. Students' corpuscular conceptions in the context of chemical equilibrium and chemical kinetics. *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*. **2002**, 3 (2), 201-213.
10. Yalçinkaya, E. ,Taştan-Kırık, Ö., Boz, Y. & Yıldırım, D. Is case-based learning an effective teaching strategy to challenge students' alternative conceptions regarding chemical kinetics? *Research in Science & Technological Education*. **2012**, 30(2), 151–172.
11. Taştan, Ö. Effect of cooperative learning based on conceptual change conditions on motivation and understanding of reaction rate. Unpublished doctoral diss., Middle East Technical University (2009).
12. Pölloth, B., Diekemper, D. and Schwarzer, S. What resources do high school students activate to link energetic and structural changes in chemical reactions? – A qualitative study. **2023**, 24, 1153-1173.
13. Parobek, A.P, Chaffin, P.M and Towns, M.H. Location-thinking, value-thinking, and graphical forms: combining analytical frameworks to analyze inferences made by students when interpreting the points and trends on a reaction coordinate diagram. *Chemistry Education Research and Practice*. **2021**, 22, 697-714.
14. Gegios, T., Salta,K. and Koinis,S. Investigation of high-school chemical Kinetics : the Greek chemistry textbook and students'difficulties. *Chemistry Education Research and Practice*. **2017**, 10, 151-168.
15. Zembylas, M. Three Perspectives on Linking the Cognitive and the Emotional in Science Learning: Conceptual Change, Socio-Constructivism and Poststructuralism. *Studies in Science Education*. **2005**, 41, 91-116.
16. Hensiek, S., DeKorver, B. K., Harwood, C. J., Fish, J., O'Shea, K., & Towns, M. Improving and Assessing Student Hands-On Laboratory Skills through Digital Badging. *Journal of Chemical Education*. **2016**, 93(11), 1847–1854.
17. McClean, S., McCartan, K. G., Meskin, S., Gorges, B., & Hagan, W. P. Reflections on "YouTestTube.com": An Online Video-Sharing Platform to Engage Students with Chemistry Laboratory Classes. *Journal of Chemical Education*. **2016**, 93 (11), 1863–1870.
18. Domingues, L., Rocha, I., Dourado, F., Alves, M., & Ferreira, E. C. Virtual laboratories in (bio)chemical engineering education. *Education for Chemical Engineers*. **2010**, 5 (2), e22–e27.
19. Fang, N., & Guo, Y. Interactive computer simulation and animation for improving student learning of particle kinetics. *Journal of Computer Assisted Learning*. **2016**, 32(5), 443-455.
20. Own, Z. The application of an adaptive, web-based learning environment on oxidation-reduction reactions. *International Journal of Science and Mathematics Education*. **2006**, 4, 73–96.

21. Karous, H., Nihant, B., & Leyh, B. (Submitted). Learning Chemical Kinetics at the Secondary School Level by Developing Autonomous Modeling Skills: Part I - Influence of Kinetic Parameters. *Journal of Chemical Education* (Submitted).
22. Maia, P. F., & Justi, R. Learning of Chemical Equilibrium through Modeling-based Teaching. *International Journal of Science Education*. **2009**, 31(5), 603–630.
23. Johnstone, A. H. Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem. *Journal of Computer- Assisted Learning*. **1991**, 7, 75–83.
24. Robinson, W. Chemistry problem-solving: Symbol, macro, micro, and process aspects. *Journal of Chemical Education*. **2003**, 80, 978–982.
25. Tsaparis, G. Atomic and molecular structure in chemical education: A critical analysis from various perspectives of science education. *Journal of Chemical Education*. **1997**, 74, 922–925.
26. Gilbert, J. K. Models and Modeling: Routes to more Authentic Science Education. *International Journal of Science and Mathematics Education*. **2004**, 2(2), 115–130.
27. Cheng, M. M. & Gilbert, J. K. Modeling students' visualization of chemical reaction. *International Journal of Science Education*. **2017**, 39(9), 1173–1193.
28. Marbach-Ad, G., Rotbain, Y., & Stavy, R. Using computer animation and illustration activities to improve high school students' achievement in molecular genetics. *Journal of Research in Science Teaching*, **2008**, 45, 273–292.
29. Ardac, D., & Akaygun, S. Using static and dynamic visuals to represent chemical change at molecular level. *International Journal of Science Education*. **2005**, 27, 1269–1298.
30. Zhang, Z. H., & Linn, M. C. Can generating representations enhance learning with dynamic visualizations? *Journal of Research in Science Teaching*. **2011**, 48(10), 1177–1198.
31. Hoban, G., & Nielsen, W. Learning science through creating a 'slowmotion': A case study of preservice primary teachers. *International Journal of Science Education*. **2013**, 35 (1), 119–146.
32. Isaac, K. Collaborative critique of self-generated visual representations: An exploration of high school chemistry learning. (Unpublished M.Ed. dissertation). **2016**, The University of Hong Kong, Hong Kong.
33. Krystyniak, R.A., & Heikkinen, H.W. Analysis of verbal interactions during an extended, open-inquiry general chemistry laboratory investigation. *Journal of Research in Science Teaching*. **2007**, 44, 1160–1186.
34. Coll, R.K., France, B & Taylor, I. The role of models/and analogies in science education: implications from research. *International Journal of Science Education Publication*. **2005**, 27 (2), 183–198.
35. Saouma, D., Bahous, R., Natout, M. & Nabhani, M. Figures of speech in the physics classroom: a process of conceptual change. *Research in Science & Technological Education*. **2018**, 36(3), 375–390.

Chapitre 4 : Ingénierie didactique relative à la thermochimie

Sommaire

1 Objectifs.....	168
2 Questions de recherche	172
3 Description de la séquence constituant l'ingénierie didactique	172
4 Références.....	180
5 Article scientifique 3	183
5.1 Résumé	183
5.2 Résumé graphique.....	183

1 Objectifs

Pour le thème de la thermochimie, nous avons adopté une approche similaire à celle que nous avons développée pour l'enseignement de la cinétique chimique auprès des élèves suivant le cours de sciences générales en Fédération Wallonie-Bruxelles et en Communauté Germanophone de Belgique (Chapitre 3). Celle-ci implique d'identifier les idées préconçues des élèves par un enseignement basé sur une phase expérimentale introductive, suivie d'un processus de modélisation [1]. Nous avons réparti les élèves en petits groupes et leur avons demandé de proposer des modèles schématiques dans le but d'interpréter les phénomènes observés et les mesures réalisées. Ces modélisations schématiques leur permettent de développer leur créativité et doivent viser à expliquer les phénomènes au niveau submicroscopique [2]. Par ailleurs, la collaboration au sein du groupe développe leur capacité à communiquer entre eux, à comparer leurs propositions et à les évaluer de manière critique [3-4].

Concernant l'enseignement général de transition et pour les élèves ayant choisi l'orientation sciences générales, les attentes établies dans le programme de l'unité

d'acquis d'apprentissage concernée (UAA6) (Fédération Wallonie-Bruxelles) sont reprises dans le tableau suivant :

Programme scolaire [5]
Unité d'Acquis d'Apprentissage UAA6 : Caractériser un phénomène chimique (cinétique et thermochimie) - Chaleur - Réactions exothermiques, endothermiques - Enthalpie et ΔH - Capacité calorique et pouvoir calorifique d'une substance - Relation liée au changement de température ($Q = c m \Delta T$) - Chaleur massique d'une substance - Chaleur molaire - Facteurs influençant la vitesse d'une réaction - Catalyseur

Le référentiel de la Communauté Germanophone reprend également ces concepts dans un cadre d'enseignement similaire [6].

Plusieurs auteurs ont étudié les difficultés de compréhension des concepts fondamentaux de thermodynamique, notamment ceux liés à la température, la chaleur et la capacité calorifique, constatant que de nombreuses conceptions alternatives persistent chez les élèves dès le niveau de l'école secondaire et au-delà [7-21]. Les concepts thermodynamiques sont réputés pour leur complexité en raison de leur abstraction. Les élèves ont souvent tendance à appliquer des algorithmes sans saisir les principes fondamentaux qui les sous-tendent [22].

En lien avec le programme éducatif, nous avons également analysé les manuels utilisés en Fédération Wallonie-Bruxelles ainsi que deux manuels français [23-30], pour concevoir une ingénierie didactique sur la thermochimie respectant les prescrits curriculaires. Dans cette ingénierie didactique, nous proposons une analyse préliminaire des préconceptions des élèves de 5^{ème} année en sciences générales (11^e grade, 16-17 ans) concernant les notions de température, chaleur et capacité calorifique.

Suite à cette analyse, nous avons développé une approche expérimentale où ces élèves combinent les phases d'expérimentation et de modélisation. Les observations expérimentales sont interprétées et expliquées au niveau submicroscopique, en relation avec une activité de modélisation réalisée par les élèves, suivie d'une activité d'argumentation en groupe et d'institutionnalisation. Ces modélisations visent à renforcer la compréhension des concepts de température, chaleur et capacité calorifique.

Dans le cadre de cette étude, nous avons donc travaillé de la manière suivante :

- Identifier le maximum de préconceptions et conceptions alternatives [7-21].
- Développer une approche expérimentale destinée, entre autres, à susciter des conflits cognitifs. Les élèves sont ensuite invités à interpréter et expliquer les observations et les résultats de mesure lors d'expériences réalisées, en ayant recours à des activités de modélisation au niveau submicroscopique [31-32].
- Favoriser l'utilisation des simulations et des animations sur ordinateur [33].

Ce projet de recherche vise à approfondir la compréhension des élèves concernant plusieurs notions liées à la thermochimie [7-21], en mettant au maximum en relation les observations et mesures contextualisées et les concepts-clés qui les rationalisent. Ces outils expérimentaux et concepts-clés comprennent notamment :

- Le type de système (isolé, fermé, ouvert) et l'environnement (milieu extérieur) (C1)
- Les concepts de température, de chaleur et d'énergie thermique (C2)
- La capacité calorifique (C3)
- Les processus endothermiques et exothermiques (C4)
- Les mesures calorimétriques (C5)
- L'enthalpie (C6)

Suivant les mêmes objectifs que pour l'ingénierie didactique relative à la cinétique chimique (chapitre 3), nous avons favorisé l'insertion d'activités pratiques dans les différentes sections de la séquence. Pour chacune des

expériences proposées, nous demandons aux élèves de représenter schématiquement les observations macroscopiques, de les interpréter par une modélisation schématique au niveau submicroscopique et de traduire le phénomène en un langage symbolique, tel que l'écriture de la réaction chimique ou du changement de phase. Des visualisations numériques sont également fournies pour renforcer la compréhension des phénomènes observés [34-37].

De manière plus précise, la séquence proposée commence par un approfondissement de la compréhension de la notion d'énergie. L'ensemble des activités développées pour favoriser une approche constructiviste [38-40] est détaillé ci-dessous :

- a. Identification des différents types d'énergie en analysant des photos ou des représentations visuelles.
- b. Description et classification d'une série de systèmes de la vie quotidienne en tant que systèmes ouverts, fermés et isolés.
- c. Illustration du premier principe de la thermodynamique à travers des descriptions d'activités accompagnées de figures : les élèves doivent décrire les phénomènes observés et en déduire le principe de conservation de l'énergie.
- d. Réalisation d'expériences pour comprendre les notions de chaleur, température, énergie thermique et capacité calorifique :
 - i. Les élèves doivent expliquer les phénomènes observés et les modéliser (sur papier) au niveau moléculaire.
 - ii. Analyse des données mesurées au cours d'une expérience pour déterminer la relation mathématique reliant la quantité de chaleur Q à la masse d'eau, par exemple, et à la variation de température, introduisant ainsi la notion de capacité calorifique massique.
- e. Analyse de quelques exemples de systèmes de la vie quotidienne et classification en processus exothermiques et endothermiques, suivie de la réalisation d'une expérience où les élèves doivent formuler les observations

et les interpréter au niveau submicroscopique en utilisant le registre symbolique adéquat.

- f. Réalisation par les élèves, répartis en petits groupes, d'une mesure calorimétrique.
- g. Introduction de la notion d'enthalpie de manière simplifiée mais rigoureuse.

2 Questions de recherche

Dans le cadre de cette étude, nous avons formulé trois questions de recherche pour guider notre exploration de l'enseignement de la thermochimie. Nous souhaitons répondre à la question de recherche suivante : Une méthodologie d'enseignement basée sur la combinaison de l'expérimentation, de la modélisation schématique et mathématique, et des activités en ligne conduit-elle à un changement conceptuel significatif sur les concepts fondamentaux de la thermochimie ?

3 Description de la séquence constituant l'ingénierie didactique

• Contextualisation

La structure de cette ingénierie didactique relative à la thermochimie a été testée dans les mêmes écoles et avec les mêmes professeurs que la séquence relative à la cinétique chimique (chapitre 3).

Tout au long de la séquence, l'objectif est, après avoir identifié les conceptions alternatives des élèves à l'aide d'un prétest, de les aider à surmonter ces préconceptions et à développer une compréhension approfondie des notions clés de la thermochimie.

L'efficacité de l'ingénierie didactique par rapport aux objectifs d'apprentissage spécifiques que nous avons établis a été évaluée au moyen d'un ensemble d'outils tout au long de son application, comprenant des modélisations schématiques et des activités en ligne.

- **Combiner expérimentation et modélisation**

La séquence didactique sur la thermochimie est structurée pour offrir une progression cohérente. Tout au long de cette séquence, six aspects principaux, combinant l'approche expérimentale macroscopique et la modélisation submicroscopique, sont développés et approfondies, comme décrit dans la figure 12. Des interconnexions entre ces concepts ont été établies, par exemple entre le concept 5 et les concepts 2 et 3, ainsi qu'entre le concept 6 et le concept 5, facilitant ainsi une compréhension globale du sujet.

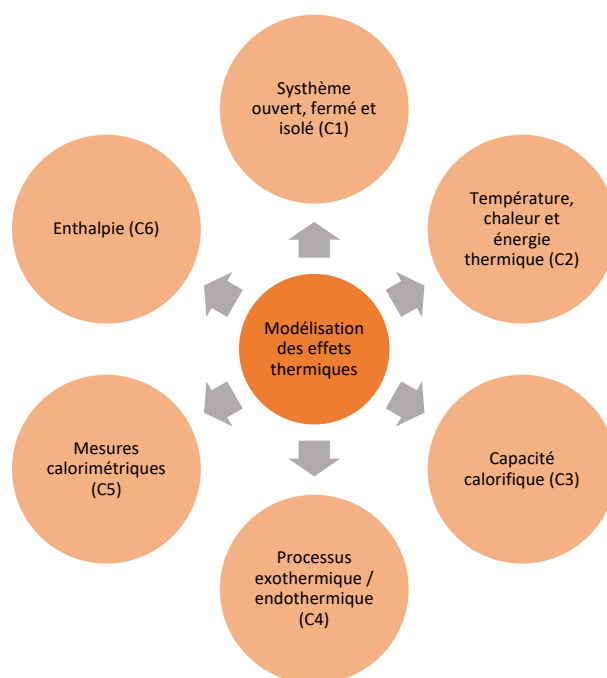


Figure 12 : La modélisation des effets thermiques : des expériences aux concepts

Deux expériences sont proposées en vue de générer un conflit cognitif susceptible de faire percevoir la différence entre les concepts, différents mais liés, de chaleur et de température : (i) l'apport de chaleur à un mélange eau-glace ne provoque pas d'augmentation de température tant que l'équilibre de phase est présent ; (ii) l'apport de la même quantité de chaleur à deux liquides différents mène à des augmentations de température différentes. Cette dernière expérience permet d'introduire le concept de capacité calorifique qui représente le lien entre les deux concepts.

1) Modélisation du type de système (isolé, fermé, ouvert) et de l'environnement (milieu extérieur) (C1)

Les élèves ont modélisé des systèmes pour distinguer les trois types de système, à travers une activité impliquant l'analyse d'images et de systèmes.

2) Les concepts de température, de chaleur et d'énergie thermique (C2)

a. Modélisation de l'effet d'un apport de chaleur à une masse donnée de glaçons

La mise en commun des propositions d'explication pour interpréter la courbe correspondant à la variation de température tout au long du processus de fusion de la glace contenue dans un bécher chauffé de façon constante vise à faire émerger l'explication du phénomène par l'agitation thermique. Les élèves doivent modéliser sur papier ce qui se passe au niveau moléculaire. La figure 13 représente le type de résultat attendu pour illustrer cet effet et expliquer le lien entre les notions de température et de chaleur. Tout comme dans les modélisations proposées dans la partie relative à la cinétique chimique, il est important de revenir à ce stade sur les différents rôles d'un modèle et son rapport à la réalité.

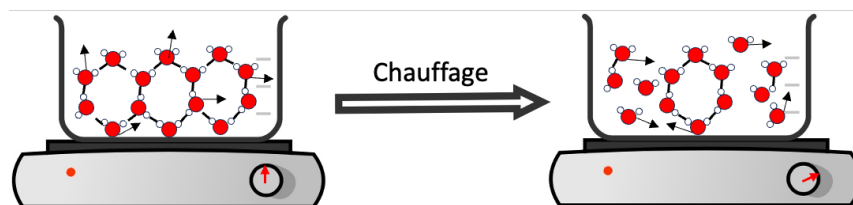
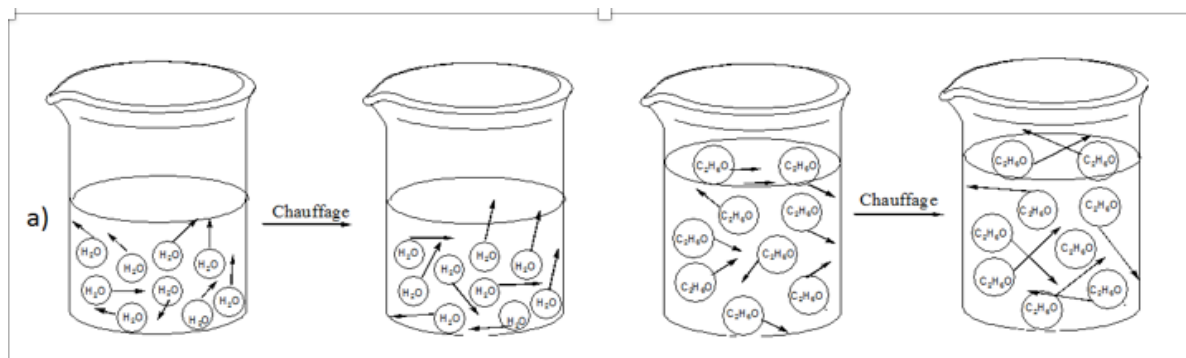


Figure 13 : Un exemple illustrant le lien entre les notions de température et chaleur

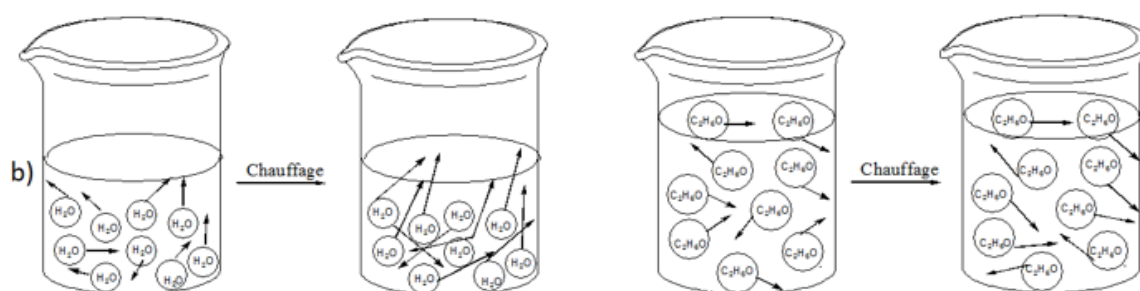
b. Modélisation de l'effet de l'apport d'une même quantité de chaleur à une mole d'eau et une mole d'éthanol

Dans cette expérience réalisée avec les élèves, on mesure les variations de température consécutives à l'apport d'une quantité de chaleur donnée à une mole d'eau et une mole d'éthanol. Notre objectif est de faire comprendre la notion de capacité calorifique à travers la théorie cinétique, en représentant l'agitation thermique des molécules. La figure 14 présente les différentes modélisations

proposées aux élèves et entre lesquelles ils doivent opérer un choix à justifier, afin de rendre compte des variations de température observées suite à l'apport de la même quantité de chaleur à une mole d'eau d'une part, et une mole d'éthanol d'autre part. La longueur des flèches représente l'énergie cinétique des molécules, et la direction des flèches correspond à la direction du mouvement.



Oui/Non. Pourquoi?



Oui/Non. Pourquoi?

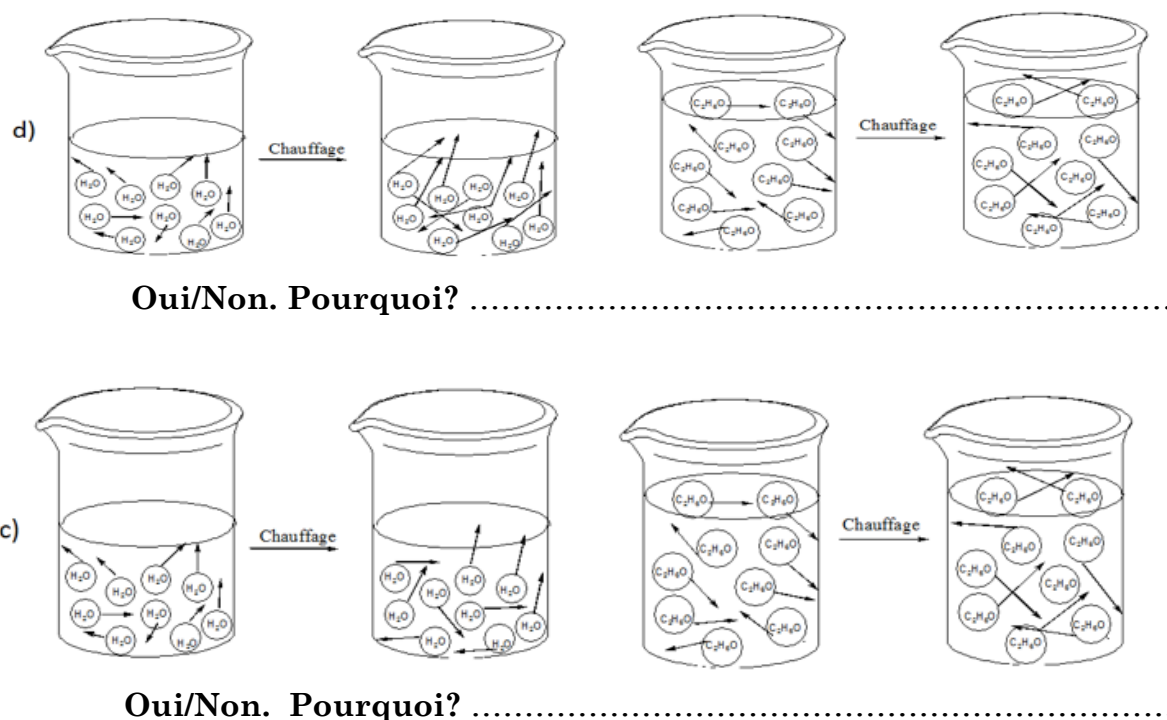


Figure 14 : Modélisation pour illustrer la relation entre la température et l'énergie thermique

3) Modélisation mathématique : introduction de la capacité calorifique (C3)

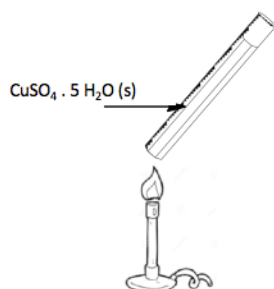
À partir d'un tableau de données expérimentales fournies (variation de température $\Delta\theta$ en fonction de la quantité de chaleur fournie), les élèves ont dû représenter graphiquement ces données et développer mathématiquement la relation linéaire liant la température et la chaleur, introduisant ainsi le concept de capacité calorifique, associée à la pente de la droite obtenue.

4) Modélisation des échanges de chaleur : processus endothermiques et exothermiques (C4)

En utilisant des illustrations schématiques comme point de départ, les élèves ont été amenés à identifier les processus d'échange d'énergie. Cette activité a été suivie de deux démonstrations expérimentales (Figure 15) : la première consistait à chauffer un échantillon de $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, tandis que la seconde impliquait l'ajout

d'une quantité d'eau à du CuSO_4 déshydraté, suivi de la mesure de la variation de température.

a) Expérience a



b) Expérience b

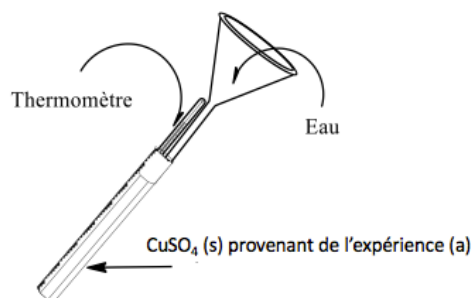


Figure 15 : Expériences sur les transferts de chaleur lors des transformations physico-chimiques

5) Approche expérimentale quantitative : le calorimètre (C5)

Le but de cette étape est d'amener les élèves à répondre à la question : Comment déterminer de manière précise la quantité de chaleur dégagée ou absorbée lors d'un processus chimique ? Après avoir réalisé un montage à partir de matériel disponible, les élèves ont mené une série de mesures pour déterminer la quantité de chaleur échangée lors de la dissolution de différents sels.

6) Modélisation théorique : le concept d'enthalpie (C6)

Le but de cette activité de modélisation mathématique est de permettre aux élèves de revisiter les expériences réalisées et de comprendre les transferts de chaleur entre le système et l'environnement. Nous avons observé que certaines transformations absorbent de la chaleur tandis que d'autres en dégagent. Ceci est dû au fait que l'énergie interne des réactifs n'est pas la même que celle des produits. Pour des processus réalisés à pression constante, la grandeur la plus adéquate pour décrire les échanges de chaleur est toutefois l'enthalpie. Cette activité vise à introduire une transposition didactique du concept d'enthalpie et à calculer la variation d'enthalpie lors de différentes expériences.

- **Application dans des classes pilotes**

La structure de l'ingénierie didactique est résumée dans la figure 16 ci-dessous. La séquence correspondante a été planifiée sur 5 périodes de cours. Nous avons

commencé par une étude préliminaire dans le but d'identifier les conceptions des élèves concernant les six concepts-clés (de C1 à C6) de thermochimie.

Cette étude nous permet d'évaluer la progression des élèves à travers l'ingénierie didactique proposée. Tout au long de la séquence didactique, plusieurs activités expérimentales ont été mises en place, lors desquelles les élèves étaient invités à réaliser des modélisations mathématiques et schématiques accompagnées d'explications pour les phénomènes observés. L'objectif était de déterminer dans quelle mesure les choix effectués par les élèves, en intégrant également leurs connaissances antérieures, leur ont permis d'améliorer leur compréhension de la thermochimie et de donner du sens à leur apprentissage.

Un suivi a été mis en place via une plateforme en ligne comprenant des questionnaires. Ces questionnaires visaient à examiner les effets de cette nouvelle approche mettant l'accent sur la modélisation.

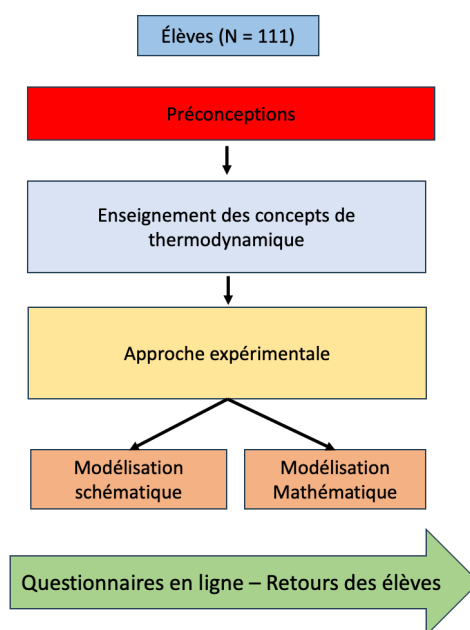


Figure 16 : Schéma d'organisation de l'ingénierie didactique proposée

- **Participants**

Pendant cinq cours (d'une durée de 50 minutes chacun), deux enseignants d'une même école francophone et une enseignante d'une école germanophone ont accepté de tester cette séquence de thermochimie. Quatre classes, composées d'un total de

111 élèves (94 francophones et 17 germanophones), âgés de 15 à 17 ans, ont participé à l'étude. L'enquête s'est déroulée durant l'année 2017-2018.

- **Méthodologie d'analyse**

L'analyse des données s'est faite selon la figure 17 qui sera détaillée dans la proposition d'article de recherche.

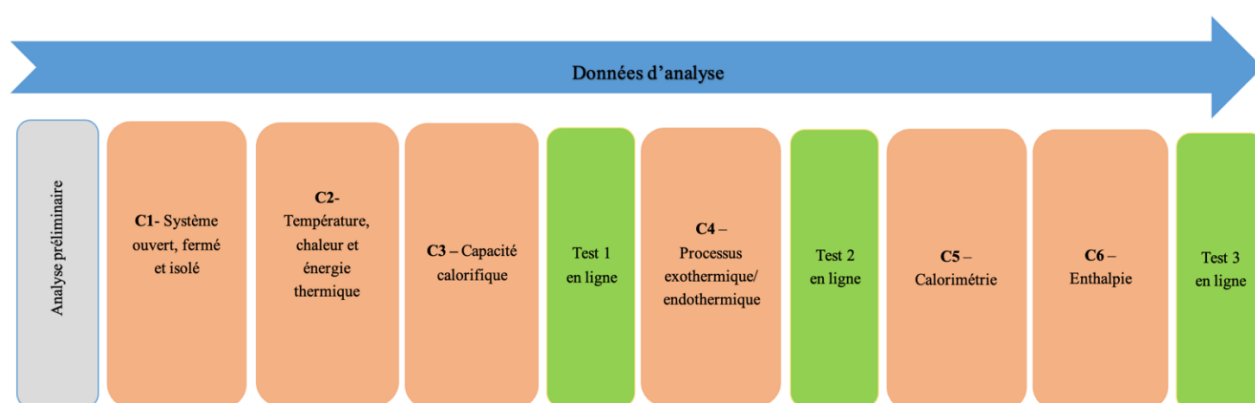


Figure 17 : Ordre chronologique de récolte de données

Ce chapitre s'inscrit dans la continuité de l'ingénierie didactique relative à la cinétique chimique présentée au chapitre 3. Il adopte une démarche similaire fondée sur l'identification des préconceptions des élèves, l'articulation entre phases expérimentales et activités de modélisation, ainsi que l'intégration d'outils interactifs.

Toutefois, en se centrant sur la thermochimie, il explore un champ conceptuel marqué par un degré d'abstraction différent, notamment autour des notions de chaleur, de température, de capacité calorifique et d'enthalpie. Cette seconde mise en œuvre permet ainsi d'examiner la portée du cadre théorique et méthodologique développé précédemment dans un contexte où les difficultés conceptuelles et les obstacles épistémologiques prennent une forme spécifique.

La complémentarité entre les chapitres 3 et 4 ne réside donc pas uniquement dans la diversité des contenus abordés, mais dans la possibilité d'analyser la transférabilité et les ajustements nécessaires d'une approche fondée sur la modélisation schématique dans deux domaines majeurs du programme UAA6.

4 Références

- [1] Diawati, C. Students' Conceptions and Problem-Solving Ability on Topic Chemical Thermodynamics. AIP Conference Proceedings. 2016, 1708 (1), 040002.
- [2] Blanco-Anaya, P.; Justi, R.; Díaz de Bustamante, J. (2017). Challenges and Opportunities in Analysing Students Modelling. International Journal of Science Education, 39, 377–402.
- [3] Kirik, Ö.T., & Boz, Y. Cooperative learning instruction for conceptual change in the concepts of chemical kinetics. Chemistry Education Research and Practice. 2012, 13, 221-236.
- [4] Cooper, M. M. Cooperative Learning: An Approach for Large Enrollment Courses. Journal of Chemical Education. 1995, 72, 162–164.
- [5] Arrêté du Gouvernement de la Communauté française déterminant les compétences terminales et savoirs requis à l'issue de la section de transition des humanités générales et technologiques en mathématiques, en sciences de base et en sciences générales et déterminant les compétences terminales et savoirs communs à l'issue de la section de qualification des humanités techniques et professionnelles en éducation scientifique, en français, en sciences économiques et sociales ainsi qu'en sciences humaines http://www.gallilex.cfwb.be/document/pdf/40140_001.pdf (consulté le 26 août 2014).
- [6] Ministerium der Deutschsprachigen Gemeinschaft, Rahmenplan für die zweite und dritte Stufe des allgemeinbildenden und technischen Übergangsunterrichts in der Regelsekundarschule.
<https://ostbelgienbildung.be/DownloadCount.aspx?raid=122707&docid=53319&rn=a4d43605d-9ba2-411c-adec-57514356e0a1> (consulté le 19 avril 2024).
- [7] Sozbilir, M., A Review of Selected Literature on Students' Misconceptions of Heat and Temperature. Journal of Education, 20, 25-41 (Bogaziç University, 2003).
- [8] M. I. Cotignola, C. Bordogna, G. Punte, O. M. Cappannini, (2002). Difficulties in learning thermodynamic concepts: are they linked to the historical development of this field? Science & Education, 11, 279-291.
- [9] Jasin, P.G & Oberem, G.E (2002). Understanding of Elementary Concepts in Heat and Temperature among College Students and K-12 Teachers. Journal of Chemical Education, 79, 7, 889.
- [10] Bain, K. & Towns, M. H. (2018). Investigation of Undergraduate and Graduate Chemistry Students' Understanding of Thermodynamic Driving Forces in Chemical Reactions and Dissolution. Journal of Chemical Education, 95 (4) , 512-520.
- [11] Herrington, D.G. (2011) . The Heat Is On: An Inquiry-Based Investigation for Specific Heat. Journal of Chemical Education, 88 (11) , 1558-1561.
- [12] Saricayir, H., Ay, S., Comek, A., Cansiz, G. & Uce, M. (2016). Determining Students' Conceptual Understanding Level of Thermodynamics. Journal of Education and Training Studies, 4(6), 69-79.
- [13] Kibirige, I. (2021). Exploring the Prevalence of Misconceptions Regarding Heat and Temperature among Grade Nine Natural Science Learners. Unnes Science Education Journal, 10 (3), 115-123.

- [14] Meltzer, D. E. (2004). Investigation of students' reasoning regarding heat, work, and the first law of thermodynamics in an introductory calculus-based general physics course. *American Journal of Physics*, 72 (11) 1432-1446.
- [15] Ozmen, H. (2004). Some student misconceptions in chemistry. *Journal of Science Education and Technology*, 13, 147–159.
- [16] Maia, P. F., & Justi, R. (2009). Learning of Chemical Equilibrium through Modelling-based Teaching. *International Journal of Science Education*, 31(5), 603–630.
- [17] Sözbilir M., Pınarbaşı, T. and Canpolat, N. (2010). Prospective Chemistry Teachers' Conceptions of Chemical Thermodynamics and Kinetics. *Eurasia Journal of Mathematics, Science & Technology Education*, 6(2), 111-120.
- [18] Paik, S.H., Cho, B.K., and Go, Y.M. (2007). Korean 4- to 11-year-old student conceptions of heat and temperature. *Journal of Research in Science Teaching*, 44 (2) , 284-302.
- [19] Fenditasari, K., & Istiyono, E. (2020). Identification of misconceptions on heat and temperature among physics education students using four-tier diagnostic test. In *Journal of Physics: Conference Series* 1470(1), 012055.
- [20] Özmen, H.; Ayas, A. (2003). Students' difficulties in understanding of the conservation of matter in open and closed-system chemical reactions. *Chemistry Education Research and Practice*. 4 (3), 279-290.
- [21] Sokrat, H., Tamani, S., Moutaabbid, M., Radid, M. (2014). Difficulties of Students from the Faculty of Science with Regard to Understanding the Concepts of Chemical Thermodynamics. *Procedia - Social and Behavioral Sciences*, 116, 368-372.
- [22] Nakhleh, Mary B (1993). Are Our Students Conceptual Thinkers or Algorithmic Problem Solvers? Identifying Conceptual Students in General Chemistry. *Journal of Chemical Education*, 70(1), 52.
- [23] Pirson, P., Bribosia, A., Snauwaert, P., Tadino, A., & Van Elsuwé, R. (2022). *Chimie 5^e – Manuel - Sciences générales. 1^{re} édition*, De Boeck publié par VAN IN, Mont-saint-Guibert – Wommelgem.
- [24] Pirson, P., Bribosia, A., Snauwaert, P., Tadino, A., & Van Elsuwé, R. (2017). *Chimie 5^e: Sciences générales. 3^e édition*, De Boeck, Bruxelles.
- [25] Pirson, P., Bribosia, A., Martin, C., Tadino, A. Snauwaert, P. & Van Elsuwé, R. (2012). *Chimie 5e/6e : sciences de base. 2^e édition*, De Boeck, Bruxelles.
- [26] Pirson, P., Bribosia, A., Martin, C., Snauwaert, P., Tadino, A., & Van Elsuwé, R. (2012). *Chimie 5e : sciences générales. 2^e édition*, De Boeck, Bruxelles.
- [27] Dulaurans, T., & Durupthy, A. (2016). *Physique Chimie Ts Enseignement spécifique*. Hachette Education, Paris.
- [28] Antczak, S. & Le maréchal, J.-F. (2012). *MICROMEGA : physique-chimie ; terminale S ; cd-rom pour la classe*. Hatier, Paris.
- [29] Pirson, P., Bribosia, A., Martin, C., & Tadino, A. (2002). *Chimie 5e: sciences générales*. De Boeck, Bruxelles.
- [30] Clavel-Monin, F., & Miguet, J. (2002). *MICROMEGA: Physique-Chimie; Terminale S; CD-ROM de l'établissement; Obligatoire et Spécialité*. Hatier, Paris.
- [31] Guspatni, G (2021). Student-Generated PowerPoint Animations: A Study of Student Teachers' Conceptions of Molecular Motions through Their Expressed Models. *Chemistry Education Research and Practice*, 22, 312–327.

- [32] Wu, M.Y.M.; Yezierski, E.J. (2022). Pedagogical Chemistry Sensemaking: A Novel Conceptual Framework to Facilitate Pedagogical Sensemaking in Model-Based Lesson Planning. *Chemistry Education Research and Practice*, 23, 287–299.
- [33] Kelly, R.; Akaygun, S. (2019). Visualizations and Representations in Chemistry Education. *Chemistry Education Research and Practice*, 20, 657–658.
- [34] Stevens, R., Soller, A., Cooper, M. & Sprang, M. (2004). Modeling the development of scientific competence in chemistry. *International Conference Cognition and Exploratory Learning in Digital Age (CELDA 2004)*, 273-280.
- [35] Sharifov, G., & MacIsaac, D. (2021). Effectiveness of a simulated thermodynamics lab in a grade eight lyceum class. *Jurnal Pendidikan Fisika Indonesia*, 17(2).
- [36] Lin, M., San, L., & Ding, Y. (2020). Construction of a robotic virtual laboratory system based on Unity3D. In *Proceedings of the 3rd International Symposium on Application of Materials Science and Energy Materials (SAMSE 2019)*, Shanghai.
- [37] Chen, S. (2010). The view of scientific inquiry conveyed by simulation-based virtual laboratories. *Computers and Education*, 55(3), 1123–1130.
- [38] Meli, K., Koliopoulos, D. & Lavidas, K. A. (2022). Model-Based Constructivist Approach for Bridging Qualitative and Quantitative Aspects in Teaching and Learning the First Law of Thermodynamics. *Sci & Educ* 31, 451–485.
- [39] Partanen, L. (2018). Student oriented approaches in the teaching of thermodynamics at universities – developing an effective course structure. *Chemistry Education Research and Practice*, 19, 885.
- [40] Gencer, S. (2023). Development and Use of Flowchart for Preservice Chemistry Teachers' Problem Solving on the First Law of Thermodynamics. *Journal of Chemical Education*, 100, 3393–3401.

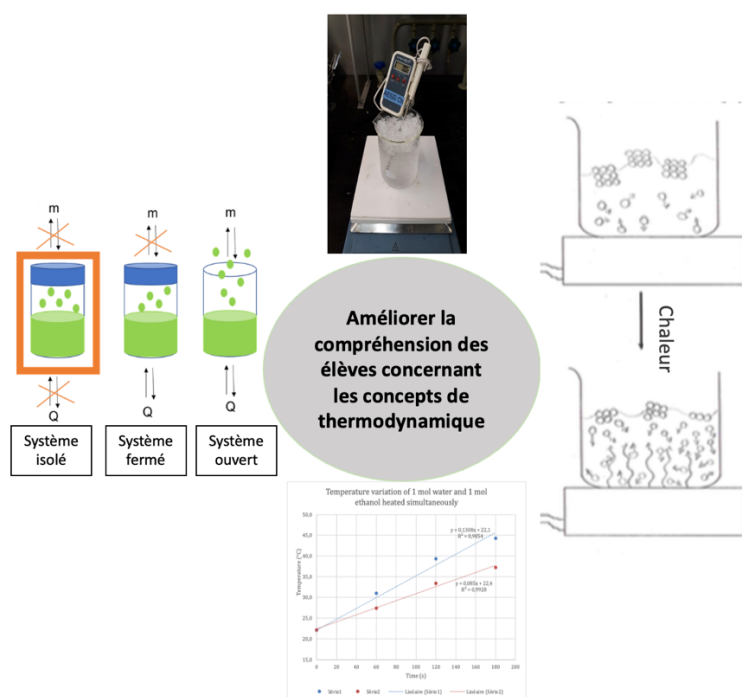
5 Article scientifique 3

Combining experimentation and modeling for learning thermochemistry at high school level

5.1 Résumé

Cet article présente la mise en place et l'évaluation d'une approche alternative qui vise à enseigner la thermochimie aux élèves de l'enseignement secondaire en Belgique au niveau sciences générales à travers des processus de modélisation simplifiés. La séquence didactique a été proposée à quatre groupes de classe (élèves de 16 à 17 ans) et vise à déterminer si le processus de modélisation améliore la compréhension des élèves de certains concepts de thermodynamique, et si oui, dans quelle mesure. L'analyse des résultats a révélé que les processus de modélisation étaient réalisés consciencieusement par les élèves et avaient une contribution significative dans leur compréhension de certains concepts de thermodynamique, telle la distinction entre la température, l'énergie thermique et la chaleur, par exemple. Nous avons constaté que les élèves ont également participé spontanément aux activités en ligne qui ont été développées et proposées pour soutenir leur processus d'apprentissage et qu'ils les ont appréciées.

5.2 Résumé graphique



Combining experimentation and modeling for learning thermochemistry at high school level

Hamad Karous^{a*}, Brigitte Nihant^{a**}, José-Carlos Arrebola^{b***} and Bernard Leyh^{a****}

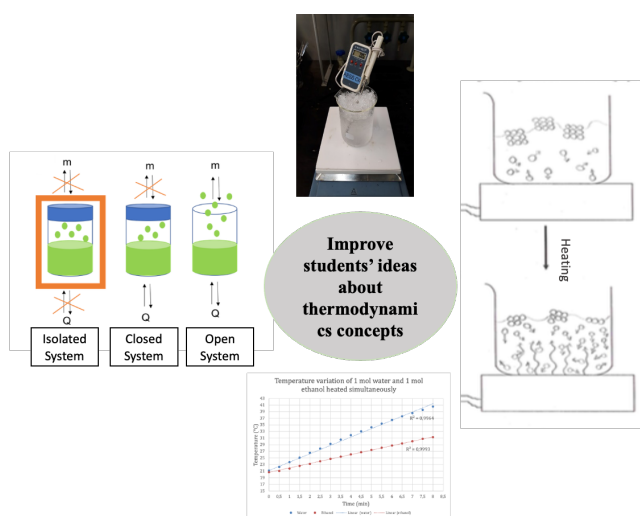
^a *Department of Chemistry, University of Liège and DIDACTIfen Research Unit, Allée du Six Août 11, 4000 Liège, Belgium*

^b *Departamento de Didáctica de las Ciencias Sociales y Experimentales, Universidad de Córdoba, San Alberto Magno s/n, 14071 Córdoba, Spain*

ABSTRACT

The concepts of temperature, specific heat and enthalpy of reaction are challenging for secondary school students. In this article, we present an approach based on experimentation and modeling of observed phenomena. The investigation was conducted in five class groups (students aged 16-17) of Belgian secondary schools and aimed to determine if the combination of experimentation and modeling improves students' understanding of thermodynamic concepts, and to what extent. We focus our assessment on the production and negotiation of schematic and mathematical models. Our study revealed that the modeling process was beneficial for students and significantly contributed to their learning of thermodynamic concepts. We found that students appreciated and participated spontaneously in the online activities developed to support their learning process. This positive response underscores the value of integrating modeling activities into the curriculum to enhance the comprehension of complex scientific concepts.

GRAPHICAL ABSTRACT



KEYWORDS

Thermochemistry, Temperature, Heat, Heat capacity, Conceptual change, Secondary school, Schematic models

INTRODUCTION

Numerous studies have been conducted worldwide at both secondary school and university levels to analyze preconceptions and difficulties in understanding fundamental thermodynamic concepts, particularly temperature, heat, and heat capacity.¹⁻⁷ Secondary school students in the French and German-speaking communities of Belgium face similar challenges, compounded by the limited time allocated in the curriculum for teaching basic thermochemical concepts such as heat, temperature, heat capacity, and enthalpy.

One potential solution to this problem is to introduce an approach that is easy to implement and fits within the existing curriculum schedule. This approach is based on modeling processes designed to support students' reasoning, enabling them to interpret macroscopic phenomena observed in various experiments or to explain the results of measurements previously recorded by the authors.^{4,8-12}

In chemistry, students can use models to visualize submicroscopic entities through various representations, including dynamic diagrams, symbols, and schematics. Several research studies have demonstrated that students who receive explanations of key concepts based on modeling processes develop a better understanding than those taught using traditional methods.¹³⁻¹⁵

For this reason, it is essential to involve students more in modeling activities to help them acquire a deeper understanding of abstract scientific phenomena. Additionally, it is crucial that teachers receive training in this approach to facilitate its effective implementation.¹⁶⁻²⁰

Several studies have identified students' ideas and alternative conceptions about thermochemical concepts.²¹⁻²⁷ These studies have highlighted the following difficulties among secondary school students as well as higher education students:

- (i) Only a very small proportion of students were able to make predictions and demonstrate a good understanding of the conservation of mass in chemical events within open or closed systems.
- (ii) Classifying reactions as exothermic or endothermic is more challenging than it appears. Some students also believe that the rate of the dissolution process depends on whether the process is exothermic or endothermic. They argue that in an exothermic dissolution process, the dissolving rate decreases with increasing temperature, and vice versa.
- (iii) Temperature and heat are introduced as early as the elementary level, but their definitions and relationships remain unclear even for high school students. Herrington²⁸ suggested that numerous everyday experiences can lead students to develop incorrect ideas about these concepts. Students are generally taught to use

the equation $Q = m \cdot c \cdot \Delta\theta$ to determine the quantity of heat transferred between two objects. They need to understand the concept of specific heat, c , to accurately calculate variations in thermal energy, Q . For example, Herrington²⁸ proposed an experiment to assess students' understanding of heat capacity by observing how different metals of equal mass, when heated, affect the temperature of a defined amount of water. Students often confuse "heat" and "temperature", using the terms interchangeably.⁵ Jasoen and Oberem² also emphasized that despite the importance of understanding these basic concepts, many students still hold misconceptions. Sözbilir³ reviews students' misconceptions about heat and temperature, discussing their origins and educational implications.

To determine heat capacity, various materials were used to construct calorimeters, including Thermos brand snack jars, polypropylene Tri-Pour beakers, glass beakers, and paper cups instead of Styrofoam.²⁹⁻³⁰ In our teaching sequence, we have adopted an experimental approach³¹, encouraging students to work autonomously and emphasizing the importance of allowing them to construct their own knowledge. The teacher intervenes at key moments to provide guidance and support.

We suggested that, based on their macroscopic observations and measurements, such as comparing the increase in temperature of one mole of water and one mole of ethanol receiving the same amount of heat, students either represent the phenomenon schematically using symbolic language or analyze and select from proposed models the one that best explains the observations. To introduce the concept of heat capacity, we had students interpret the graphs they constructed from a table of measurement results provided to them. Additionally, students constructed "low-cost" calorimeters using Styrofoam soup bowls, glass beakers, and thermochips to measure, for example, the heat of dissolution of selected ionic compounds. Here, we present the results from this learning sequence aimed at introducing key thermodynamics concepts such as open and closed chemical systems, heat and temperature, heat capacity and specific heat, exothermic and endothermic processes, enthalpy, and ΔH .

RESEARCH QUESTION

We wish to answer the following research question. Does a teaching methodology based on combining experimentation, schematic and mathematical modeling, and online activities lead to a significant conceptual change on fundamental thermochemistry concepts?

METHODS

DESCRIPTION OF THE TEACHING STRATEGY

According to the diagram displayed in Figure 1, we have proposed a strategy based on modeling for the learning of thermodynamic concepts. Drawing on the students' preconceptions identified through a pre-test, we developed a comprehensive strategy

incorporating several experiments to introduce various concepts. This strategy includes different modeling tasks (both schematic and mathematical) and three online activities, each focusing on key concepts.

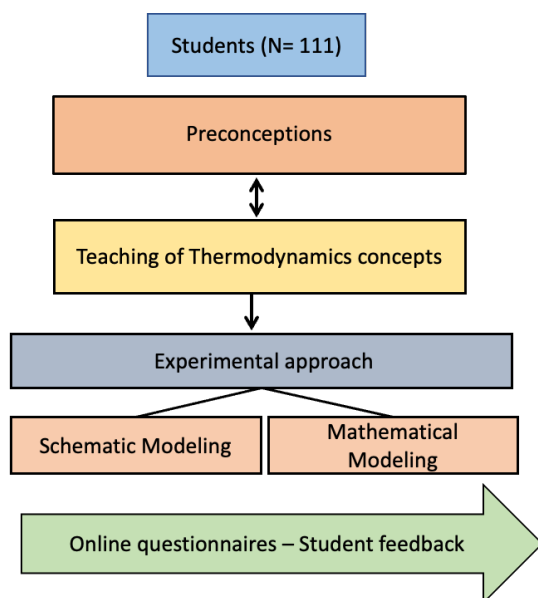


Figure 1. Teaching strategy of the didactic sequence

PARTICIPANTS

A sample of 111 students from five Belgian secondary schools was selected, consisting of two groups: 94 students from the French-speaking part and 17 students from the German-speaking part of Belgium. Given that the regional education system in Belgium stems from a unified system, we assumed that language would not significantly impact the analysis of students' modeling data. The teaching curricula are similar.³²⁻³³ All teaching material was originally written in French and translated into German by an experienced bilingual chemistry teacher.

The students aged 16 to 17 (11th grade), all attended an advanced chemistry course, with two or three hours of chemistry per week using similar methods. Five hours were dedicated to implementing this alternative approach, and three teachers agreed to collaborate with us.

DATA COLLECTION

To answer the research questions, various types of data were collected using several tools. They are all available in the Supporting Information.

- Pre-test and post-test (Supplementary material S1)

The purpose of the pre-test was to identify the level of knowledge and the preconceptions of 11th-grade students regarding thermodynamic concepts before starting the new sequence. The test consisted of multiple-choice questions covering the following topics: open and closed

system, the differences between temperature, heat, and thermal energy, heat capacity, endothermic and exothermic processes, and the modeling of thermal effects. Because enthalpy is a new concept, no associated preconception was expected. Enthalpy was therefore not addressed in either the pre-test or the post-test.

The post-test allowed us to assess the evolution of the students' understanding of these thermodynamic concepts taught during the sequence, and their possible conceptual change.

- **Heat and temperature: cognitive conflicts, schematic modelling and a first look at heat capacity (Supplementary material S2 and S3)**

To enhance the understanding of abstract thermodynamic concepts, our approach favors the integration of the macroscopic and submicroscopic levels. Students were asked to schematically model experimental observations using worksheets provided in the Supplementary Material (S2, S3). The experiments were designed to induce cognitive conflicts about the temperature and heat concepts. In a first experiment on ice melting, heat is provided without temperature increase. In a second experiment, the same amount of heat is transferred to the same amount of matter of two different liquids, leading to different temperature increases. After the experimental demonstrations, a guided discussion was conducted to engage students in reflective processes based on scientific arguments. This allowed them to propose suitable schematic models at the molecular level to explain observed thermochemical phenomena and measurement results. The second experiment leads to a first contact with the heat capacity concept, a link between heat and temperature.

This activity was included in both the pre-test and post-test to evaluate the students' capacity for submicroscopic modeling, ensuring a thorough assessment of their understanding.

- **Deepening the heat capacity concept: a mathematical link between heat and temperature (Supplementary material S4)**

To introduce the concept of heat capacity, students were required to plot the temperature variation data for two different samples of water (100 g and 200 g) as a function of the heat (Q) supplied, which had previously been measured by the teacher. This activity, assigned as homework, was designed to enable students to develop the ability to build and interpret a graph displaying experimental data. To support their learning, three online questions related to this graph were provided. These questions guided students in finding the mathematical model that describes the proportionality between heat (Q), temperature variation (ΔT), and mass of water (m), that is, $Q = m \cdot c \cdot \Delta T$, and helped introduce the concept of the heat capacity of water (c).

- Online activities (Supplementary material S5)

To help students review and reinforce their learning in the classroom, we introduced interactive activities featuring multiple-choice questions. The answers to these online tests not only provided insights into the students' engagement with the activities throughout the sequence but also indicated their level of understanding of the material.

DATA ANALYSIS

Various activities and instruments were introduced and carried out by students both in the classroom and at home to enhance their understanding of thermochemistry concepts (C1 to C6). Throughout the sequence, the fundamental concepts were introduced in the order shown in the following diagram, and the analysis of the students' data was conducted in the same sequence.

A non-parametric Kruskal-Wallis analysis was conducted to determine if post-test scores were statistically significantly different from pre-test scores for the different thermochemistry concepts (Table 2). A significance level of 0.05 was adopted.

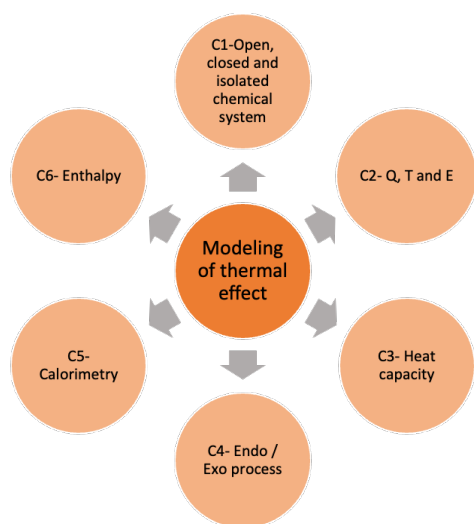


Figure 2. Modeling thermal effects: from experiments to concepts

RESULTS

Table 1 gives a general overview of the conceptual evolution between the pre-test and the post-test for concepts C1 to C4.

Table 1. Mean scores and statistical analysis of thermochemistry concepts (pre-and post-test). The corresponding question of the pre-test and post-test is mentioned for each item.

Thermochemistry concepts		Survey	Mean scores (%)	p
C1	Isolated, open and closed systems (Q2)	Pre-test	38	0.017
		Post-test	86	
C2	Temperature evolution upon heating (Q5a)	Pre-test	71	0.270
		Post-test	78	
C2	Temperature vs thermal energy (Q5b)	Pre-test	28	<0.001
		Post-test	56	
C3	Heat capacity (Q1)	Pre-test	44	<0.001
		Post-test	82	
C4	Endothermic process (Q3a)	Pre-test	48	<0.001
		Post-test	79	
C4	Exothermic process (Q3b)	Pre-test	70	0.007
		Post-test	80	
C1	Insulation and heat transfer (Q4)	Pre-test	83	0.609
		Post-test	91	

^a Significant at $p < 0.05$.

Table 1 shows that post-test scores were statistically significantly higher than pre-test scores for all thermodynamic concepts except for part of C2 (temperature evolution upon heat transfer) and part of C1 (insulation and heat transfer), for which the scores at the pre-test were already high. These results are encouraging and indicate that the proposed approach effectively improved the level of understanding of the addressed concepts.

In the following sub-sections, we present in detail the key activities performed during the teaching sequence which followed the pre-test, to improve and assess the understanding of each concept.

CONCEPT 1: ISOLATED, OPEN AND CLOSED CHEMICAL SYSTEMS

In the first lesson, students were asked to examine examples of everyday life systems and categorize them as open, closed, or isolated (e.g., a beaker with cold or hot water, a thermometer, a 9V cell connected or not). Among the different questions proposed in Online Test 1, one specifically targeted the analysis of schematic models of matter and heat exchanges (Figure 3) and led to a success score of 90%.

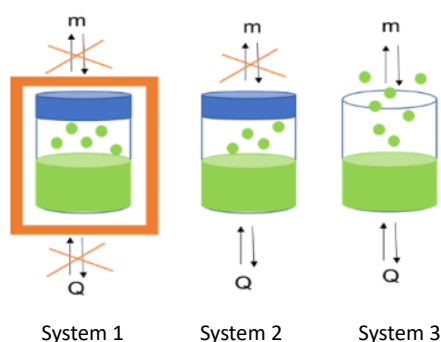


Figure 3. Online activity modeling about system, open and closed system

CONCEPT 2: TEMPERATURE, HEAT AND THERMAL ENERGY

The two experiments illustrated in Figure 4 were carried out with the students to differentiate the following concepts: temperature, heat and thermal energy.

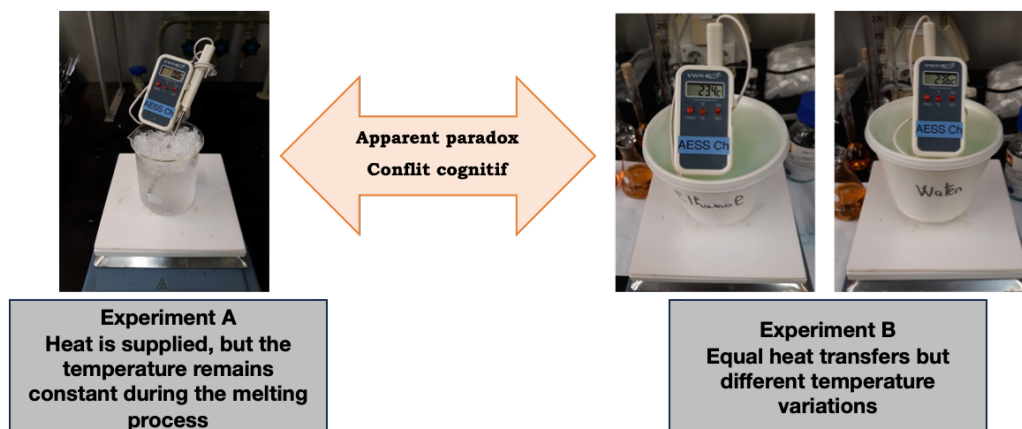


Figure 4. Two experiments to differentiate the concept temperature, heat and thermal energy.

In experiment A, we added heat, yet the temperature remained constant during the ice melting process. Conversely, in experiment B, we applied the same amount of heat to both substances (1 mol water and 1 mol ethanol) for 8 minutes. This led to different temperature increases, as depicted in Figure 5.

The two experiments lead to apparent paradoxes that induce a cognitive conflict³⁴: heat and temperature are different but connected concepts.

The students were asked after the experiment A to translate autonomously their observations into a schematic drawing at the sub-microscopic level (Figure 6). For the second experiment, the students had to choose the correct model from four proposed options and justify their choice.

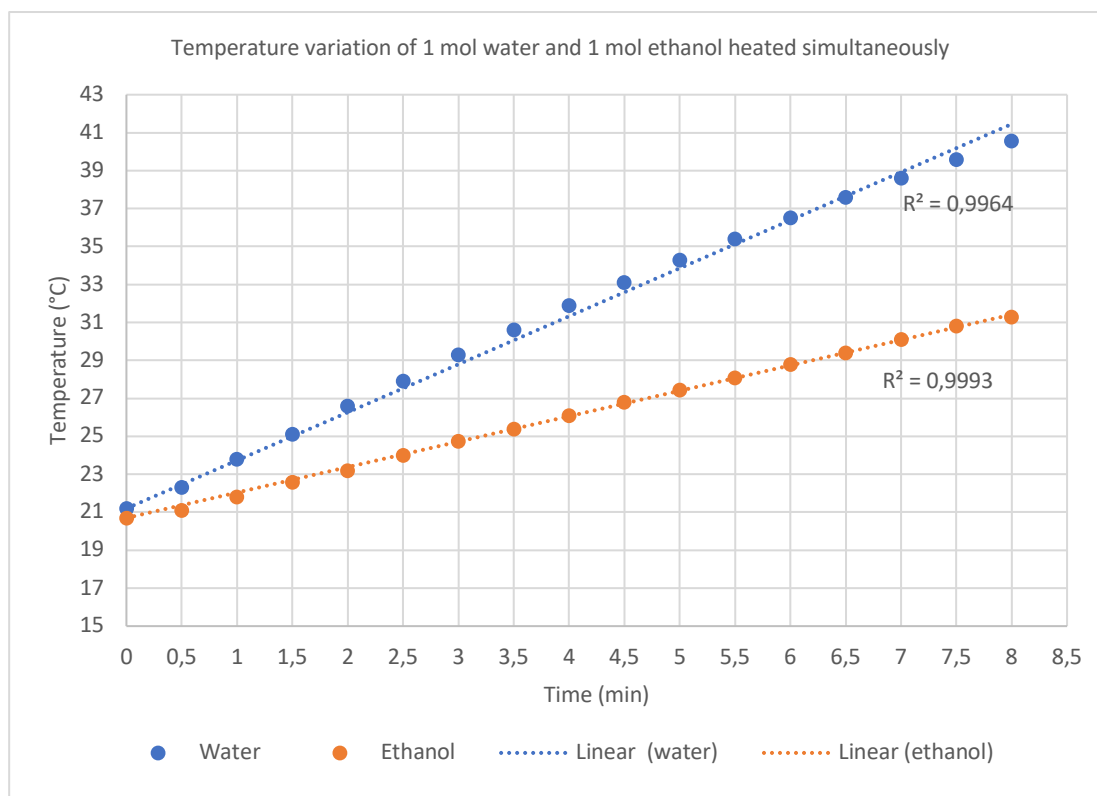


Figure 5. Temperature Changes in Water and Ethanol Upon Heating for 8 minutes

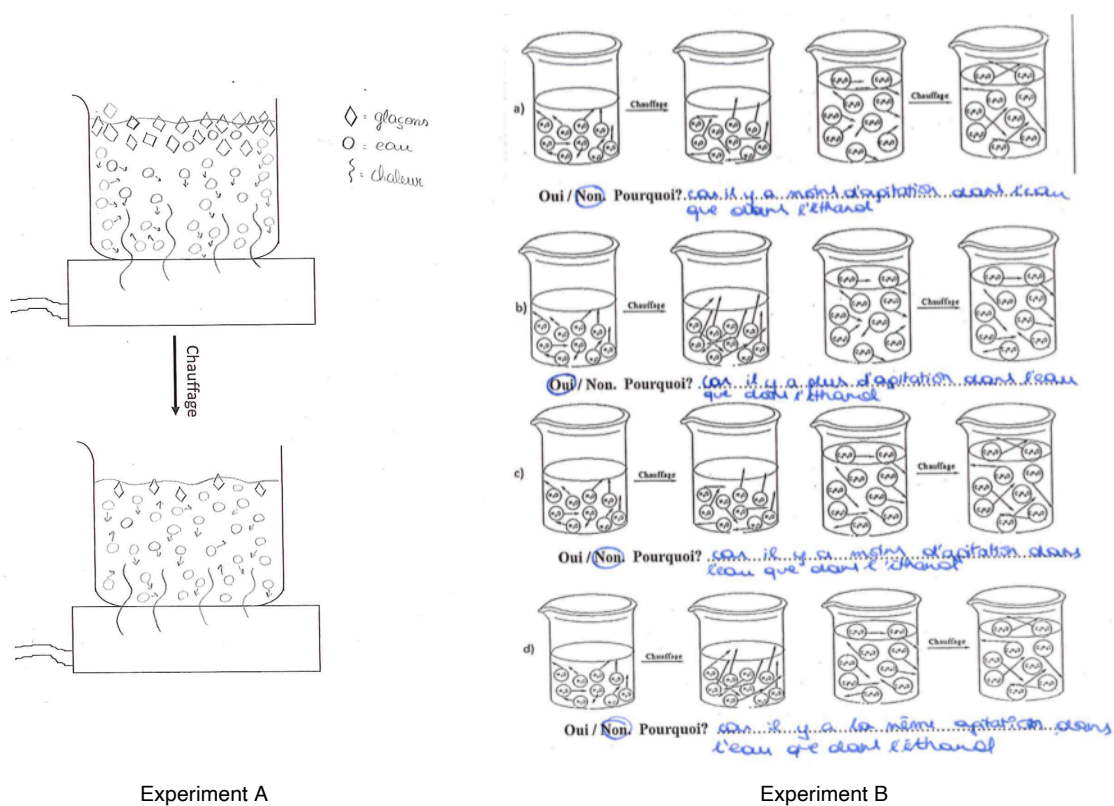


Figure 6. Examples of students' schematic mobilizations of the experiments A and B

To assess students' modeling productions for Experiment A (Figure 6A), the following criteria were selected.

- (i) Different States of Aggregation for Water:
 - Icons representing molecules randomly distributed in the liquid phase
 - Icons regularly organized in the solid phase
- (ii) Temperature increase: use of appropriate symbols (arrows, e.g.) to suggest thermal motion
- (iii) Symbolization of the heat transfer from the heat source (hot plate)

63% of students correctly represented the co-existence of two aggregation states but only 32% of them correctly represented the link between temperature as a macroscopic parameter and thermal motion as a molecular phenomenon. 58% of students introduced a relevant symbol to represent the heat exchange with the external heat source.

Experiment B is intended to show that the intensive parameter “temperature” and the extensive quantity “heat” are connected through a central physical quantity called “heat capacity”, which will be presented in Concept 3 below. Here, we chose to guide students through the modeling activity by asking them to select the correct schematic model out of four options and to justify their choice (Figure 6B). The four proposals differ in the length of the arrows depicting the thermal motion. Students were informed that each arrow indicates the direction of motion of a given molecule and its length is proportional to the kinetic energy of that same molecule. 71% of the students chose the correct proposal (model b) but only 35% correctly justified their choices. Even if they were guided, the students had difficulty relating the increase in temperature to the molecular motion, particularly the average kinetic energy. After this activity, the students were invited to reflect further on these concepts, first in class, through argumentation and exchange among peers and with the teacher, and then by answering Online Test 2 where a series of questions are devoted to the temperature-heat topic.

CONCEPT 3: HEAT CAPACITY

The previous activity has already shown a linear relationship between temperature and heating time (Figure 6), which is itself proportional to the delivered amount of heat. The question is now: what is the physical meaning of the slope of these straight lines for water and ethanol? What does it depend on? The activity, which involved analyzing the graph of the temperature variation as a function of the heat supplied for two different masses of water (100 g and 200 g) (Figure 7), enabled the students to deduce the mathematical relationship between the specific heat capacity, c , the quantity of heat transferred, Q , the mass m of the water, and the temperature variation ΔT . To help them analyze the graphical information, three online multiple-choice questions were submitted to the students. Their answers to these three questions are presented in Tables 2 to 4.

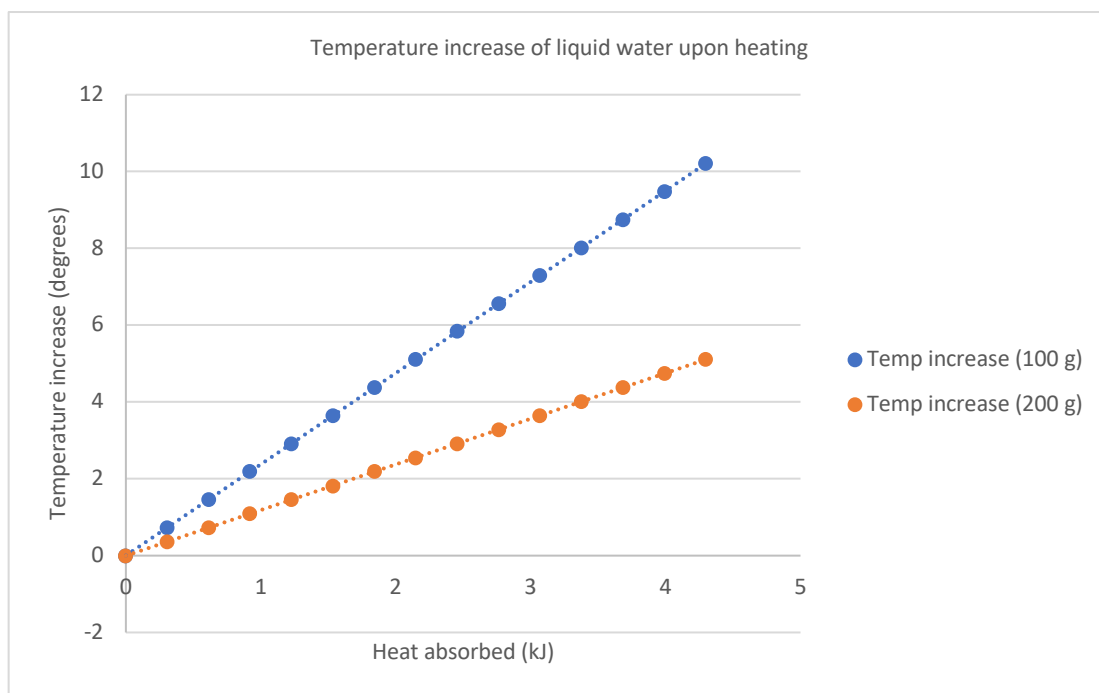


Figure 7. Temperature increase as a function of the absorbed heat for two water samples

Table 2. Results for the question*: The graphs of ΔT as a function of Q show that

Questions	Distribution of answers (%)
a. the amount of heat absorbed is the same for both masses for a given temperature rise.	4
b. if the mass of water is increased, the amount of heat required to reach a given temperature is reduced.	8
c. the temperature reached by the sample is independent of the amount of heat absorbed.	6
d. if the mass of water is increased, the amount of heat required to reach a given temperature is increased.	82

*Correct answer in bold characters.

Table 3. Results for the question*: The graphs of ΔT as a function of Q show that:

Questions	Distribution of answers (%)
a. the amount of heat absorbed for an identical temperature increase is smaller in the larger sample.	25
b. the larger the slope, the larger the amount of heat absorbed for a given temperature rise.	40
c. the slope is inversely proportional to the mass of the heated sample.	34
d. for a given amount of heat absorbed, the temperature reached by the two samples is the same.	1

*Correct answer in bold characters.

Table 4. Results for the question*: The units of the slopes of the two plotted lines are:

Questions	Distribution of answers (%)
a. degree per kilojoule: ° C / kJ	89
b. joule per degree: J / ° C	10
c. degree per square joule: ° C / (J ^ 2)	1
d. joule per degree square: J / (° C ^ 2)	0

*Correct response in bold characters.

Visual examination of the graphs of Figure 7 allowed students to identify the proportionality between ΔT and Q . Questions 1 and 2 (Tables 2 and 3) draw their attention, first qualitatively then quantitatively, to the fact that the amount of heat (Q) absorbed for a given temperature rise is proportional to the mass (m) of water. Thus, Q is proportional to both ΔT and m .

Based on these answers and on a guided discussion with the teacher, the students could then infer equation (1) which includes a new physical quantity, the specific heat capacity, denoted as c .

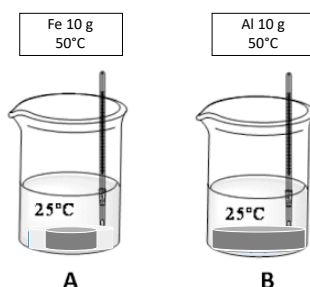
$$Q = c \cdot m \cdot \Delta T \quad (1)$$

Because the graphs in Figure 7 display ΔT as a function of Q , the slope of these graphs is equal to $(c \cdot m)^{-1}$. From the unit of the slope (Table 4), the students are then invited to infer the unit of c , that is, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{degree}^{-1}$, also denoted as $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$ or $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, if the students are already familiar with the Kelvin unit.

To assess students' understanding and application of the concept of heat capacity, an online question (Box 1) was proposed. It addressed the temperature change of two water samples initially at 25°C in which an aluminum or an iron bar at 50°C are introduced. Students had to predict the amount of heat exchanged between the piece of metal and the water based on the specific heat capacities of the two different metals, and to deduce which water sample reached the highest final temperature.

Box 1. Example of a question about the specific heat capacity for two metals

Two metal bars, respectively of aluminum and iron (same mass of 10 g and at an initial temperature of 50 °C), were deposited in the same amount of water at 25 °C. The specific heat of iron is $450 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$ and that of aluminum is $910 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$. Choose the right statement*:



- a. The temperature of the water will increase and reach the same final value in both beakers.
- b. The temperature of the water will increase and will reach a higher final value in the beaker A.
- c. **The temperature of the water will increase and will reach a higher final value in the beaker B.**
- d. We do not have enough information to predict in which beaker the temperature will be the highest.

*Correct answer in bold characters

56% of the students indicated that the temperature of the water in beaker B with the 10 g aluminum is higher than the temperature in beaker A with the 10 g iron. An argumentation session guided by the teacher was organized afterwards to correct the misconceptions hold by the remaining 44% of the students.

CONCEPT 4: ENDOTHERMIC AND EXOTHERMIC PROCESS

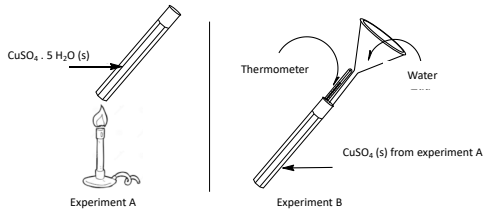
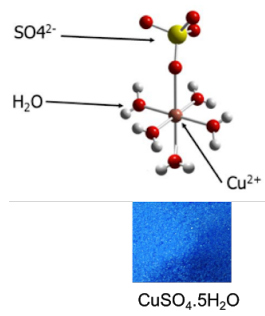
Examples from everyday life (self-heating soups and instant cold packs, e.g.) were first discussed to introduce endothermic and exothermic processes.

Second, an experimental demonstration conducted in class further illustrated both endothermic and exothermic processes in a reversible situation. In the first part of the experiment, a given amount of copper(II) sulfate pentahydrate was heated. In the second part, some of the obtained anhydrous copper(II) sulfate was brought into contact, after some delay for cooling, with a small amount of water, and the temperature variation was measured. Students recorded their observations, interpreted the results, and wrote down the chemical equations corresponding to the reactions.

Following this activity, students were asked to complete an online multiple-choice questionnaire again (Online Test 2, Supplementary Material S5).

We will, for example, present the results of two sub-questions (illustrated in Box 2, A and B), which aim to highlight the two levels of representation used during the classroom experiment: the macroscopic level, referring to observable phenomena, and the submicroscopic level, which serves to explain them. From the submicroscopic model, students can infer that a certain amount of energy is required to break the bonds between the copper ion (Cu^{2+}) and water molecules. This type of reasoning, involving back-and-forth movement between the macroscopic and submicroscopic levels, will be particularly useful in the following chapters—for instance, to introduce the concept of chemical equilibrium through the exothermic reaction: $\text{Fe}^{3+}(\text{aq}) + \text{SCN}^{-}(\text{aq}) \rightleftharpoons \text{FeSCN}^{2+}(\text{aq})$.

Box 2. Examples of two interactive questions related to the endothermic (A) and exothermic (B) process. The correct answers are in bold characters.

A) With the two experiments below, we have shown that:  a. the energy contained in a system is constant. b. if a reaction is endothermic, the reverse reaction is exothermic. c. an exothermic reaction is complete. d. an exothermic reaction is faster than an endothermic reaction.	B) The diagram below shows the submicroscopic structure of copper(II) sulphate pentahydrate. What is the correct proposition?  a. Dehydration of $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ requires energy to break the bonds between the copper ion (Cu^{2+}) and the water molecules. b. Dehydration of hydrated $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ requires energy to break the bonds between the copper ion (Cu^{2+}) and the sulfate ion. c. Dehydration of hydrated $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ requires energy to form the bonds between the copper ion (Cu^{2+}) and the water molecules. d. Dehydration of hydrated $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ requires energy to increase the energy of the bonds between the copper ion (Cu^{2+}) and the water molecules.
--	--

The results show that 82% of the students participated, with an average score of 94% (standard deviation = 6%) on Question A and 74% (standard deviation = 11%) on Question B, as illustrated in Figure 8.

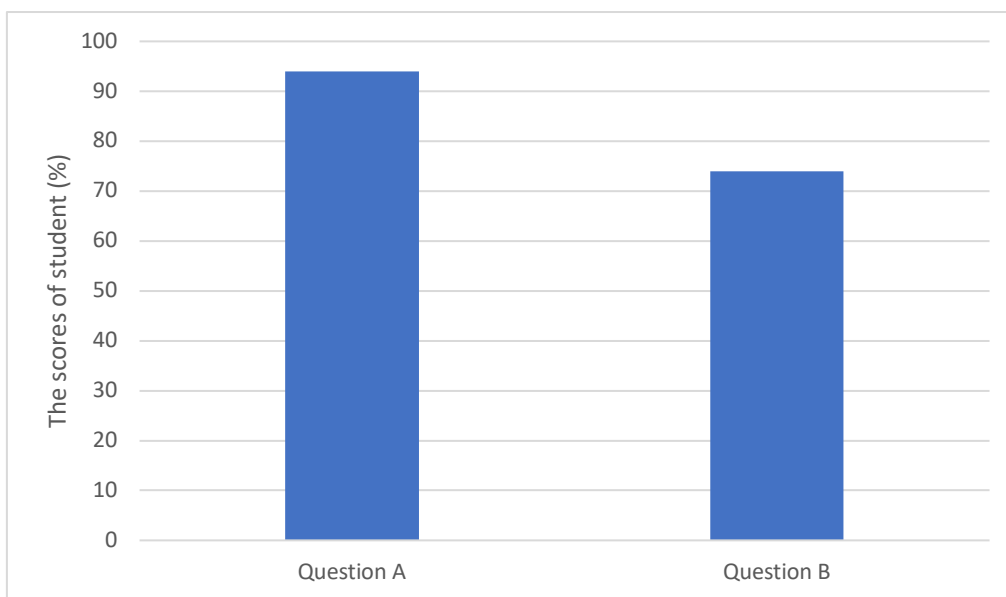


Figure 8. Scores of Students for Questions A and B in Box 2

CONCEPT 5: FROM QUALITATIVE TO QUANTITATIVE CHEMISTRY: CALORIMETRY

This part of the sequence targets multiple goals: (i) to introduce a quantitative approach following the previous qualitative analyses; (ii) to deepen the understanding of the heat-temperature relationship by explicitly applying the formula $Q = c \cdot m \cdot \Delta T$, where c , the specific heat capacity of water, is taken as $4.18 \text{ J/g}^\circ\text{C}$; (iii) to provide additional examples of endothermic and exothermic processes.

In this activity, students built calorimeters using Styrofoam bowls with lids pierced for thermometer insertion. This device enabled them to measure temperature variations associated with the dissolution of various ionic compounds in water (see Figure 9).

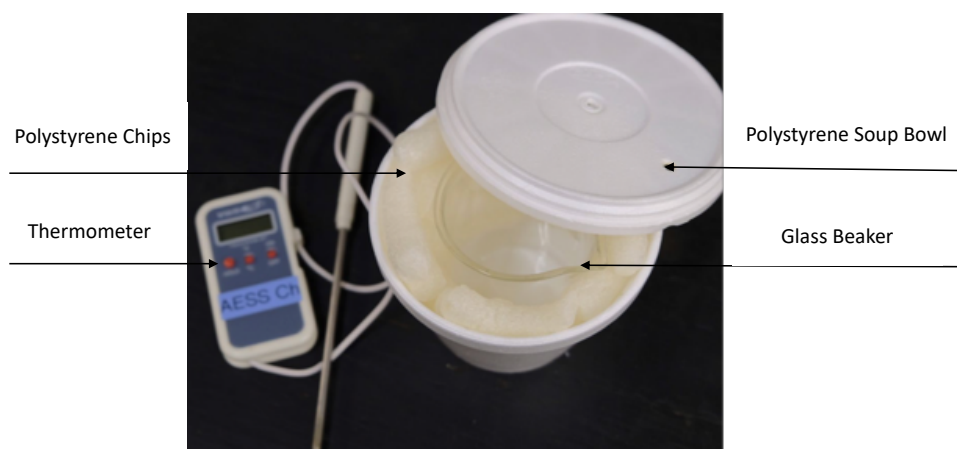


Figure 9. Calorimeter constructed from a styrofoam soup bowl a glass beaker and styrofoam chips

The students were asked to determine the amount of heat exchanged when dissolving 5 g of the following salts in 100 g of water: KNO_3 , NH_4NO_3 , CaCl_2 (anhydrous), and $\text{CaCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Working in pairs, students conducted the experiments during laboratory hours and had sufficient time to complete the table and analyze the data obtained. A sample of student results is shown in Table 5.

Table 5. Experimental results for the dissolution of different salts in water

Salt	Mass (g)	$\theta_{\text{i, water}} /$ $^{\circ}\text{C} *$	$\theta_{\text{f, solution}} /$ $^{\circ}\text{C} *$	$\Delta\theta = \Delta T$	$c_{\text{solution}} \cdot m_{\text{solution}} \cdot \Delta T$ (J) *
KNO_3	5,00	20,6	16,9	-3,7	--1548
NH_4NO_3	5,00	20,6	217,2	-3,4	-1423
CaCl_2 (anhydrous)	5,01	20,6	328,2	+ 7,6	3181
$\text{CaCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	5,04	20,5	19,5	-1,0	- -418,5

* The symbol θ is used when temperatures are given in $^{\circ}\text{C}$. The symbol T is used for absolute temperatures in K . Of course, $\Delta\theta = \Delta T$.

CONCEPT 6: INTERNAL ENERGY AND ENTHALPY

We now come to a part of the sequence where the conceptual machinery becomes even more abstract, which poses didactic difficulties, especially considering the limited time allowed by the high school chemistry curriculum.

In the experiments presented so far, the students observed that energy is exchanged as heat between the system and the environment. Why do some transformations absorb energy, while others release it? The students are led to conclude that this is because the energy contained in the reactants is not the same as that contained in the products. This energy is called the internal energy, noted U : it encompasses the contributions of the molecular motions (especially the translation and the rotation of the molecules), and of the chemical bonds (contribution of the electrons).

However, the state function which chemists most of the time use is the enthalpy, denoted as H , and its variation, denoted as ΔH . As mentioned above, time considerations do not allow us to provide a detailed introduction of the enthalpy function. To remain rigorous within a limited timeframe, we have proposed the theoretical introduction reproduced in Box 3.

Box 3. Theoretical background about the enthalpy state function

Chemists generally carry out their reactions under conditions where the external pressure remains constant.

Thermodynamics shows that the heat absorbed or released under such conditions is equal to the variation of a function called enthalpy, denoted H .

Q_p = heat absorbed or released by the system at constant pressure $P = H_{final} - H_{initial} = \Delta H$

H is in fact equal to the internal energy of the system, noted U , to which we add the product PV (Pressure in the system $\cdot$ Volume of the system)

$$H = U + PV$$

Enthalpy H is therefore directly related to the energy possessed by the chemical system.

Enthalpy unit: since enthalpy is a quantity of energy, it is expressed in Joules (J).

The enthalpy of one mole of substance is called the molar enthalpy. Its unit is Joule per mole ($J \cdot mol^{-1}$). The $kJ \cdot mol^{-1}$ unit is also frequently used: $1 kJ \cdot mol^{-1} = 10^3 J \cdot mol^{-1}$

The enthalpy of the reactants is noted H_R , and the enthalpy of the products, H_P .

$\Delta H = H_P - H_R$ represents the enthalpy change during the transformation reactant $\rightarrow$ products.

Based on the results from the calorimetry experiments (C5), the students are guided to calculate the enthalpy of dissolution which is directly linked to the heat absorbed or released during the dissolution. Experience shows that this is not such an easy task for the students. Step by step guidance is required as now explained. Consider, for example, the dissolution of anhydrous calcium chloride (Table 5). The solution temperature increased ($\Delta T > 0$) upon dissolution, which means that salt dissolution is exothermic and released heat to water. In this case, the sign of $Q_{water} = c_{water} \cdot m_{water} \cdot \Delta T$ is positive. Because the heat absorbed by water is provided by the dissociating salt, the internal energy and the enthalpy of the dissolved salt are smaller than those of the initial solid salt: $H[CaCl_{2(aq)}] < H[CaCl_{2(s)}]$. The sign of ΔH for the dissolution process, $\Delta H_{dissolution} = H[CaCl_{2(aq)}] - H[CaCl_{2(s)}]$, is then negative. This can of course be generalized for this kind of calorimetry experiment: $\Delta H_{dissolution} = -Q_{water}$. $\Delta H_{dissolution}$ is called the “enthalpy of dissolution”. The molar enthalpy of dissolution, denoted ΔH_m , is obtained by dividing $\Delta H_{dissolution}$ by the amount of matter of salt (in mol). The students are then invited to fill out Table 6 by converting the data of Table 5 into molar enthalpies of dissolution.

Table 6. Experimental Results for the dissolution enthalpy of the different salts in water

Salt	Mass (g)	Amount of matter (<i>n</i>)(mol)	ΔT	$c_{\text{water}} m_{\text{water}} \Delta T$ (J)	$\Delta H_m = \frac{\Delta H_{\text{dissolution}}}{n}$ $= -\frac{Q_{\text{water}}}{n}$
KNO ₃	5,00	0.0495	-3,7	-1548	31,3
NH ₄ NO ₃	5,00	0.0625	-3,4	-1423	22,8
CaCl ₂	5,01	0.0451	+ 7,6	3181	- 70,5
CaCl ₂ ·6H ₂ O	5,04	0.0230	-1,0	-418,5	18,2

A comparison between the experimentally determined dissolution enthalpies using a low-cost calorimeter and the standard values from the literature shows relatively good agreement for KNO₃ (31.3 vs. 34.9 kJ/mol) and CaCl₂·6H₂O (18.2 vs. 16 kJ/mol). The deviations are slightly larger for NH₄NO₃ (22.8 vs. 25.7 kJ/mol) and CaCl₂ (-70.5 vs. -82 kJ/mol). These discrepancies can be attributed to two main factors: first, students did not work under standard conditions (e.g., exact temperature, pressure, and concentration); second, some salts, particularly NH₄NO₃ and CaCl₂, are highly hygroscopic and might not have been fully dehydrated at the time of the measurement, affecting the mass and thus the calculated enthalpy values.³⁵

In the following data set (Table 7), the results of the online tests (1, 2 and 3) are presented according to the different thermodynamic concepts. We calculated the mean scores for the questions addressing each assessed concept. The scores exceed 50% for all concepts, which is encouraging. Not quite unexpectedly, the lowest scores are for the concepts with the highest grade of abstractness, that is, heat capacity and enthalpy.

Table 7. Mean scores of multiple-choice online questions according to different thermochemistry concepts

Concept	Mean scores (%)
Open and closed system chemical events	90
Temperature vs Heat	69
Temperature vs Thermal energy	73
Heat capacity	56
Endothermic process	76
Exothermic process	80
Calorimeter	79
Enthalpy	67

DISCUSSION

The major characteristics of our approach are:

- (i) We engage students in hands-on experiments followed by the interpretation of experimental results using a modeling approach, to help them construct conceptual understanding and acquire deeper knowledge.
- (ii) Experiments have been chosen to induce cognitive conflicts, which are then solved by appropriate modeling and argumentation sessions among peers guided by the teacher. This was the case in the experiments illustrated in Figure 4 (A and B), where cognitive conflicts generated by observations and measurement results enabled students to undergo conceptual changes regarding the concepts of temperature and heat.³⁴
- (iii) We favor an exploration of the link between macroscopic observations and submicroscopic mechanisms.³⁶⁻³⁷ This occurred, e.g., to distinguish heat and temperature, or to interpret exothermic and endothermic processes.
- (iv) We combined qualitative analysis with quantitative measurements. We first distinguished heat and temperature by a qualitative interpretation of experimental results (section on Concept 2) and then moved to a quantitative analysis (Concept 3) based on the specific heat capacity.
- (v) Theoretical concepts, like enthalpy, are introduced within an experimental framework, to show that theory is not a stand-alone machinery but is developed to help rationalize how nature works.

We now come back to our research question: “Does a teaching methodology based on combining experimentation, schematic and mathematical modeling, and online activities lead to a significant conceptual change on fundamental thermochemistry concepts?”

A non-parametric Kruskal-Wallis test ($\alpha = 0.05$) on the pre- and post-test surveys (Table 1) showed significant improvement for all basic thermodynamic concepts except for the evolution of temperature upon heating and the link between insulation and heat transfer, which are easy, everyday life concepts, already mastered at the pre-test.

Based on a research literature survey, three major difficulties associated with thermochemistry concepts were identified (see introduction section): (i) identifying mass and energy exchanges depending on the nature of the system,²⁶⁻²⁸ (ii) recognizing and understanding exothermic and endothermic processes,²⁴⁻²⁵ and (iii) distinguishing and connecting heat and temperature.²⁻⁶ On the other hand, research^{28,38-41} has shown that active learning methods, which engage students in interpreting and modeling everyday phenomena and classroom experiences to deduce underlying concepts, can significantly improve their understanding.

The data summarized in Tables 1 (pre-test/post-test) and 7 (online tests) show that significant progress can be observed for all three of these problematic issue, providing an encouraging answer to our research question.

While these results indicate a clear improvement in students' performance between the pre- and post-tests, they should not be interpreted as direct evidence of conceptual change in a strict sense. Several factors may also have contributed to the observed gains, such as the duration of the intervention, the role of the teacher, or a familiarization effect with the tasks. These elements call for a cautious interpretation of the results, while still highlighting the potential of the proposed approach to support students' understanding of thermochemistry concepts.

Most of the students (85%) voluntarily completed the various online activities, and the results show that a majority of students provided correct answers. More abstract concepts like heat capacity or enthalpy led, however, to lower scores. The benefits of an approach of this type were also observed in different other studies.⁸⁻¹⁰

Throughout the sequence, students alternated between analyzing examples from everyday life, conducting chemical experiments, interpreting data, modeling their observations, and engaging in interactive activities.³ The aim of offering a variety of activities was to enable students to cross-reference different pieces of information and deepen their understanding. The results of the survey conducted in the last questionnaire show that this alternative approach helps students take greater ownership of their learning compared to traditional teaching methods.¹⁷

In a similar project on learning chemical kinetics, students rated this approach very positively. In this investigation, most of the students (>70%) confirmed that modeling tasks and online activities enriched their study of this part of the chemistry course. Some comments included: "It allows you to see what you are learning," "It helps to establish a better link between experiences and concepts," and "It makes me want to learn chemistry."

CONCLUSIONS AND IMPLICATIONS FOR TEACHING

Our aim was to design and test a sequence that allowed students to participate actively in learning the thermochemistry concepts. The teaching sequence described here was tested on 111 students (11th grade). Students were asked to perform different types of activities: carrying out and interpreting experimental measurements, realizing schematic and mathematical models, answering online tests. In this teaching sequence, the modeling procedures have been developed within the framework of experimental activities. These practical and modeling activities were supplemented by the conclusions reached during argumentation sessions among peers supervised by the teacher.

The initial conceptions of the students were identified in a pre-test and then challenged through a combination of experimental and conceptual activities based on cognitive conflicts, qualitative interpretations, mathematical analysis and the introduction of new theoretical concepts. The results of the post-test and the online tests are encouraging and give some indication of positive conceptual change.

ASSOCIATED CONTENT

Supporting Information

Pre- and post-test questions and Interactive test questions.

AUTHOR INFORMATION

Corresponding Author

*E-mail: [*h.karous@uliege.be](mailto:h.karous@uliege.be); ** Brigitte.Nihant@uliege.be; *** q92arhaj@uco.es; ****
Bernard.Leyh@uliege.be

ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to thank all teachers and students for supporting the implementation of the alternative approach in the frame of a learning sequence about thermochemistry.

REFERENCES

1. Aglarci Ozdemir, O. Turkish Pre-service Teachers' Understanding of Daily Life Phenomena Related to Chemistry and Compatibility with the Current Chemistry Curriculum. *Science Insights Education Frontiers*. **2023**, 16(2), 2477-2503.
2. Jasoen, P.G., & Oberem, G.E. Understanding of Elementary Concepts in Heat and Temperature among College Students and K-12 Teachers. *Journal of Chemical Education*. **2002**, 79, 889-895.
3. Sözbilir, M. A Review of Selected Literature on Students' Misconceptions of Heat and Temperature. *Bogazici University Journal of Education*. **2003**, 20, 25-41.
4. Hitt, A.M., & Townsend, J.S. The Heat is On! Using Particle Models to Change Students' Conception of Heat and Temperature. *Science Activities*. **2015**, 52(2), 45-52.
5. Saricayir, H., et al. Determining Students' Conceptual Understanding Level of Thermodynamics. *Journal of Education and Training Studies*. **2016**, 4, 69-79.
6. Saporini, et al. Profile of Conceptual Understanding and Misconceptions of Students in Heat and Temperature. *Advances in Social Science, Education and Humanities Research*. **2020**, 513, 751-756.
7. Sutarja, M.C., & Wulandari, A.Y.R. Identifying Students' Difficulty in the Basics of Thermodynamics. *Journal of Physics: Conference Series*. **2021**, 2126 012010.

8. Prins, G.T.; Bulte, A.M.W.; Van Driel, J.H.; Pilot, A. Selection of authentic modelling practices as contexts for chemistry education. *International Journal of Science Education*. **2008**, 30 (14), 1867-1890.
9. Cheng, M. M.; Gilbert, J. K. Modelling students' visualisation of chemical reaction. *International Journal of Science Education*. **2017**, 39 (9), 1173-1193.
10. Ferreira, P.F.M. Modelagem e suas Contribuições para o Ensino de Ciências: Uma análise no estudo de equilíbrio químico [Modelling and its contributions to science teaching: An analysis of the teaching of chemical equilibrium]. Unpublished Master Dissertation, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brazil, **2006**.
11. Maia, P. F.; Justi, R. Learning of Chemical Equilibrium through Modelling-based Teaching. *International Journal of Science Education*. **2009**, 31 (5), 603-630.
12. Rea-Ramirez, M.A.; Clement, J.; Núñez-Oviedo, M.C. *An instructional model derived from model construction and criticism theory*. Eds. Springer: Dordrecht, the Netherlands, **2008**, pp 23-43.
13. Ainsworth, S. DeFT: A conceptual framework for considering learning with multiple representations. *Learning and Instruction*. **2006**, 16 (3), 183-198.
14. Plass, J. L.; Milne, C.; Homer, B. D.; Schwartz, R. N.; Hayward, E. O.; Jordan, T.; Barrientos, J. Investigating the effectiveness of computer simulations for chemistry learning. *Journal of Research in Science Teaching*. **2012**, 49 (3), 394-419.
15. Van der Meij, J.; de Jong, T. Supporting students' learning with multiple representations in a dynamic simulation-based learning environment. *Learning and Instruction*. **2006**, 16 (3), 199-212.
16. Cheng, M. M. W.; Gilbert, J. K. Students' visualization of metallic bonding and the malleability of metals. *International Journal of Science Education*. 2014, 36 (8), 1373-1407.
17. Reid D. J.; Zhang, J.; Chen, Q. Supporting scientific discovery learning in a simulation environment. *Journal of Computer Assisted Learning*. **2003**, 19, 9-20.
18. Coll, R. K.; Taylor, N. Mental models in chemistry: Senior chemistry students' mental models of chemical bonding. *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*. **2002**, 3, 175-184.
19. Barker, V.; Millar, R. Students' reasoning about chemical reactions: What changes occur during a context-based, post-16 chemistry course? *International Journal of Science Education*. **1999**, 21, 645-665.
20. Haidar, A. H. Prospective chemistry teachers' conceptions of the conservation of matter and related concepts. *Journal of Research in Science Teaching*. **1997**, 34, 181-197.

21. Copper, C. L.; Koubek, E. An experiment to demonstrate how a catalyst affects the rate of a reaction. *Journal of Chemical Education*. **1999**, 76 (12), 1714–1715.
22. Ifqiren, S., Bouzit, S., Kouchou, I., & Selmaoui, S. Modelling in the Scientific Approach to Teaching Life and Earth Sciences: Views and Practices of Moroccan Teachers. *Journal of Education and e-Learning Research*, **2023**, 10 (4), 605-615.
23. Lang, V., Eckert, C., Perels, F., Kay, C. W. M., & Seibert, J. A novel modelling process in chemistry: Merging biological and mathematical perspectives to develop modelling competences. *Education Sciences*. **2021**, 11, 611.
24. Bain, K., Moon, A., Mack, M. R., & Towns, M. H. A review of research on the teaching and learning of thermodynamics at the university level. *Chemistry Education Research and Practice*. **2014**, 15 (3), 320-335.
25. Le Maréchal, J.-F., & El Bilani, R. Teaching and learning chemical thermodynamics in school. *International Journal of Thermodynamics*. **2008**, 11 (2), 91-99.
26. Özmen, H.; Ayas, A. Students' difficulties in understanding of the conservation of matter in open and closed-system chemical reactions. *Chemistry Education: Research and Practice*. **2003**, 4 (3), 279-290.
27. Canpolat, N.; Pinarbasi, T.; Bayrakceken, S.; Geban, O. The conceptual change approach to teaching chemical equilibrium. *Research in Science and Technological Education*. **2006**, 24(2), 217-235.
28. Herrington, D. The Heat Is On: An Inquiry-Based Investigation for Specific Heat. *Journal of Chemical Education*. **2011**, 88, 1558–1561.
29. Bopegedera, A. M. R. P.; Perera, K. N. R. "Greening" a Familiar General Chemistry Experiment: Coffee Cup Calorimetry to Determine the Enthalpy of Neutralization of an Acid– Base Reaction and the Specific Heat Capacity of Metals. *Journal of Chemical Education*. **2017**, 94, 494–499.
30. Ngeh, L. N.; Orbell, J. D.; Bigger, S. W. Simple Heat Flow Measurements: A Closer Look at Polystyrene Cup Calorimeters. *Journal of Chemical Education*. **1994**, 71, 793–795.
31. Thomas, P. L.; Schwenz, R. W. College Physical Chemistry Students' Conceptions of Equilibrium and Fundamental Thermodynamics. *Journal of Research in Science Teaching*. **1998**, 35, 1151–1160.
32. Arrêté du Gouvernement de la Communauté française déterminant les compétences terminales et savoirs requis à l'issue de la section de transition des humanités générales et technologiques en mathématiques, en sciences de base et en sciences générales et déterminant les compétences terminales et savoirs communs à l'issue de la section de qualification des humanités techniques et professionnelles en éducation scientifique, en français, en sciences économiques et sociales ainsi qu'en sciences humaines http://www.gallilex.cfwb.be/document/pdf/40140_001.pdf (consulté le 26 août 2014).
33. Ministerium der Deutschsprachigen Gemeinschaft, Rahmenplan für die zweite und dritte Stufe des allgemeinbildenden und technischen Übergangsunterrichts in der

<https://ostbelgienbildung.be/DownloadCount.aspx?raid=122707&docid=53319&rn=ad43605d-9ba2-411c-ade5-57514356e0a1> (consulté le 19 avril 2024).

34. Hewson, P. W.; Hewson, M. G. The role of the conceptual conflict in conceptual change and the design of science instruction. *Instructional Science*. 1984, 13, 1-13.
35. Purdue University Science Express. *Enthalpy of Solution: Reference:* https://www.purdue.edu/science/science-express/labs/labs/Enthalpy%20of%20Solution_Reference.pdf (accessed Mars 12, 2025).
36. Knoerzer, A. T.; Hill, M. E.; Davis, A. T.; Iacono, T. S.; Johnson, E. J. Comparative Analysis of Fuel Composition and Physical Properties of Biodiesel, Diesel, Kerosene, and Jet Fuel. *Journal of Chemical Education*. **2018**, 95, 1821–1826.
37. Ghirardi, M.; Marchetti, F.; Pettinari, C.; Regis, A.; Roletto, E. A. Teaching Sequence for Learning the Concept of Chemical Equilibrium in Secondary School Education. *Journal of Chemical Education*. **2014**, 91, 59–65.
38. Ghirardi, M.; Marchetti, F.; Pettinari, C.; Regis, A.; Roletto, E. A. Implementing an Equilibrium Law Teaching Sequence for Secondary School Students To Learn Chemical Equilibrium. *Journal of Chemical Education*. **2015**, 92, 1008–1015.
39. Bayline, L. J.; Tucci, M. H.; Miller, W. D.; Roderick, D. K.; Brletic, A. P. Chemistry of Candy: A Sweet Approach to Teaching Nonscience Majors. *Journal of Chemical Education*. **2018**, 95, 1307–1315.
40. Vosniadou, S. Mental models in conceptual development. In L. Mangani, N. J. Nersessian, & P. Thagard (Eds.), *Model based reasoning in scientific discovery* (353–368). New York: Kluwer, 2002.
41. Clement, J. Learning via model construction and criticism. In Glover, G., Ronning, R. & Reynolds, C. (Eds). *Handbook of creativity, assessment, theory and research*. New York, NY: Plenum, 1989.

Chapitre 5 : Échelle TRL « Transmission du Raisonnement Logique »

Sommaire

1 Objectifs.....	208
2 Questions de Recherche	209
2.1 Description de l'Étude	209
3 Article scientifique 4	211
3.1 Résumé	211

1 Objectifs

Ce chapitre se distingue des précédents par son statut et par son ambition. Il ne vise pas à présenter une étude empirique de même ampleur que celles développées aux chapitres 3 et 4, mais à explorer de manière ciblée le potentiel de l'échelle TRL (Transmission du Raisonnement Logique) comme outil pédagogique structurant. Plus précisément, l'échelle TRL est envisagée à la fois comme un outil d'évaluation pour le chercheur et l'enseignant, et comme un outil d'auto-évaluation pour les élèves engagés dans des activités de modélisation en chimie.. Le caractère plus concis de ce chapitre reflète ainsi une démarche volontairement exploratoire, centrée sur l'analyse d'un outil pédagogique spécifique, dont l'objectif est de compléter les résultats présentés précédemment en ouvrant des perspectives sur les modalités d'évaluation des processus de modélisation en chimie.

L'objectif principal de cette étude est d'examiner dans quelle mesure l'échelle éducative de Transmission du Raisonnement Logique (TRL) peut contribuer à l'évaluation de la progression des compétences de modélisation des élèves en chimie. Parallèlement, l'étude vise à analyser l'apport des outils interactifs mobilisés dans le dispositif, ainsi qu'à mieux comprendre la manière dont les élèves perçoivent l'échelle TRL et l'utilisent dans leur processus d'auto-évaluation. En articulant ces différentes dimensions, cette étude cherche à proposer une première

lecture intégrée du potentiel de l'échelle TRL comme instrument de suivi de la progression conceptuelle et réflexive des apprenants.

2 Questions de Recherche

Dans le cadre de cette étude, nous nous posons les questions suivantes :

- Dans quelle mesure l'échelle TRL peut-elle être utilisée pour identifier les changements conceptuels chez les élèves au cours d'activités de modélisation en chimie ?
- Comment les outils interactifs utilisés dans le cadre de cette étude soutiennent-ils l'apprentissage des élèves ?
- Quelle est la perception des élèves concernant l'échelle TRL et comment évaluent-ils son utilité dans le processus d'apprentissage ?

2.1 Description de l'Étude

Pour répondre à ces objectifs et questions de recherche, l'étude est menée dans deux classes de 5e année de l'enseignement secondaire belge francophone, regroupant un total de 26 élèves. Elle se déroule en plusieurs étapes :

Conception des Activités : Les chercheurs conçoivent une série d'activités de modélisation en chimie destinées à encourager l'engagement actif des élèves. Ces activités sont progressives et visent à développer les compétences de modélisation des élèves à partir de leurs observations et expériences en classe.

Collecte de Données : Les données sont collectées à partir de plusieurs sources, notamment des auto-évaluations des élèves à l'aide de l'échelle TRL, des enregistrements vidéo des interactions en classe et des activités en ligne. Les élèves remplissent l'échelle TRL à différents stades des activités de modélisation pour évaluer leur propre progression. Les vidéos des interactions en classe permettent d'observer le processus d'apprentissage et les discussions entre les élèves. Les activités en ligne fournissent des données supplémentaires sur la compréhension des concepts chimiques par les élèves.

Analyse et Interprétation : Les données collectées sont analysées pour identifier les changements conceptuels chez les élèves, les compétences développées au cours des activités de modélisation, les obstacles rencontrés et l'impact de l'utilisation de l'échelle TRL sur l'auto-évaluation des élèves. Les résultats de l'analyse sont interprétés pour évaluer l'efficacité de l'échelle TRL comme outil d'évaluation des compétences des apprenants en modélisation chimique.

En résumé, cette étude vise à combler le fossé entre la théorie du changement conceptuel et les pratiques d'évaluation en éducation chimique en proposant une approche novatrice basée sur l'utilisation de l'échelle TRL. En intégrant la technologie et les approches d'apprentissage collaboratif, l'étude cherche à fournir des informations précieuses sur la progression des compétences des apprenants dans les activités de modélisation en chimie.

3 Article scientifique 4

An educational Transmission of Reasoning Logic (TRL) scale to assess the progress of learners' competences in modelling

3.1 Résumé

Les études axées sur la pratique et sur le changement conceptuel dans l'enseignement de la chimie restent relativement rares. En accord avec l'approche constructiviste dans laquelle les apprenants construisent leur propre structure cognitive, de nombreux résultats ont démontré que l'apprentissage par modélisation contribue positivement à l'adaptation conceptuelle. De ce point de vue, ce travail analyse dans quelle mesure les capacités de modélisation des apprenants du secondaire supérieur peuvent évoluer au sein de situations contextualisées sélectionnées et de difficultés diverses depuis des capacités de raisonnement spontanées et des concepts préalables vers un modèle conceptuel adéquat. L'étude porte sur le développement d'un outil d'évaluation pour valider l'évolution des compétences de modélisation. Une des tâches principales est l'analyse des interactions sociales au sein des groupes de pairs dans une tâche de modélisation complexe. Une échelle pédagogique appelée « Transmission du Raisonnement Logique » (TRL) a été développée par analogie avec le monde industriel, pour évaluer comment les conceptions et les capacités de modélisation des apprenants peuvent évoluer au cours d'une activité d'apprentissage. À cette fin, l'activité proposée était soutenue par un site Web interactif pour l'évaluation par les élèves de leurs nouvelles connaissances et compétences. Les données ont été recueillies à partir de plusieurs sources de données, y compris l'échelle TRL, la bande vidéo et le test en ligne. L'échelle TRL semble faciliter considérablement l'auto-évaluation de la progression des élèves dans les activités proposées. De plus, il est conclu que les activités en ligne avec des questions à choix multiples intégrées peuvent fournir des opportunités pertinentes aux étudiants pour soutenir la construction de leurs connaissances et la progression de leurs compétences.

An educational Transmission of Reasoning Logic (TRL) scale to assess the progress of learners' competences in modelling activities

Hamad Karous^{a*}, Brigitte Nihant^a, Sabri Mekaoui^b and Bernard Leyh^a

^a *Department of Chemistry, University of Liège and DIDACTIfen Research Unit, Allée du Six Août 11, 4000 Liège, Belgium*

^b *Project Adviser at European Commission, Space Unit, REA, Brussels Area, Belgium*

ABSTRACT

Practice-oriented studies on conceptual change in chemistry education remain relatively scarce. In agreement with the constructivist approach in which learners build their own cognitive structure, many results have shown that learning through modelling positively contributes to conceptual adaptation. From this point of view, this work analyses to what extent upper secondary school learners' modelling abilities can progress, within selected contextualized situations of various difficulties, from spontaneous reasoning abilities and prior concepts to an adequate conceptual model. The study focuses on the development of an assessment tool in order to validate the evolution of the modelling competences. Analyzing social interactions within peer groups in a complex modelling task is also one of its main task. An educational scale referred to as "Transmission of Reasoning Logic" (TRL) has been developed by analogy to the industrial world, to assess how learners' conceptions and modelling skills can evolve during a learning activity. To this aim, the proposed activity was supported by an interactive website for student assessment of their new knowledge and competences. Data were collected from multiple data sources, including TRL scale, videotape and online test. The TRL scale appears to facilitate the self-assessment of student progression in the proposed activities. Additionally, it is concluded that online activities with integrated multiple-choice questions may provide relevant opportunities for students to support the construction of their knowledge and the progress of their skills.

KEYWORDS

Transmission of Reasoning Logic, Conceptual Change, Self-assessment, Modelling, Technology integration, Socio-constructivism, Learning.

1. INTRODUCTION

1.1 Modelling in chemical education

Mastering basic integrating concepts is essential to further develop scientific knowledge. However, it has repeatedly been found that students often have difficulties in getting acquainted with these fundamental concepts. These difficulties, mostly due to initial preconceptions, tend to persist over time up to the higher education level [1-4].

In chemistry teaching, whether at secondary school or undergraduate level, it is well known that students face serious difficulties varying from: (i) linking abstract concepts to concrete situations [5-6], (ii) using basic mathematical language to quantify concepts, (iii) understanding and linking the different macroscopic, symbolic and particle levels of a phenomenon [7-8], (iv) manipulating concepts through appropriate modelling and schematization [9-10].

In line with these difficulties, Schwarz et al. [11] observed that students misunderstand the exact role of models and underestimate their limitations. Indeed, various detailed studies [3,4,12-26] focused on the role of modelling in a teaching framework and highlighted the following central statements: (i) a scientific model inherently and deliberately simplifies complex phenomena, (ii) it may describe a reality which is not directly accessible, (iii) it provides the scientists with an explanatory framework for the observations and measurements, (iv) it is negotiated and eventually accepted within a given research community, (v) it leads to predictions which can be experimentally tested, and (vi) to proposals for new experiments, possibly requiring (vii) its further development with an extension of its validity domain.

The modelling process and its various dimensions are often insufficiently emphasized in school curricula. This omission hinders students' ability to fully understand scientific concepts and the utility of models in explaining complex phenomena. Therefore, it is crucial to integrate modern pedagogical approaches with foundational principles in curricula. Such integration ensures that students are better equipped to understand and apply scientific models effectively.

To address misconceptions about models, educators should introduce modelling strategies that familiarize students with essential scientific concepts, such as chemical equations, reaction kinetics, and electrochemistry [27-30].

Jayanti [31] argues that developing higher-order thinking skills in chemistry education requires the explicit integration of modeling frameworks. The study highlights that modeling is not merely a tool for conceptual understanding but also a means of assessing and enhancing students' critical thinking through well-designed evaluations.

In chemistry, modelling is particularly shaped by Johnstone's triangle [32], which illustrates the interplay between macroscopic observations, symbolic representations, and submicroscopic interpretations. Understanding a chemical phenomenon requires students to navigate between the macroscopic experimental world and the particulate level, connected through symbolic languages such as chemical and mathematical equations.

When students are asked to develop models for a given class of scientific phenomena, such as those proposed by Lazenby et al. [33], they need to master the different functions of a model detailed above and apply their know-how. Conducting and interpreting experiments is essential because this is the process of transforming observation into model-based scientific knowledge. If appropriately applied and clearly described in the classroom, modelling activities will ultimately help students to:

- become aware of the diversity of models in sciences;
- adjust their ideas and revise possible misconceptions through experimental evidence, leading to conceptual change;
- build their knowledge on the basis of their proposed constructed models;
- communicate with their peers using an adequate scientific language.

1.2 Conceptual change in chemical education

Conceptual change refers to the transformation of learners' initial misconceptions into scientifically accurate concepts. Strike and Posner define it as "*the alteration of conceptions that are in some way central and organizing in thought and learning*" [34]. This process occurs when students encounter new evidence that conflicts with their prior knowledge, requiring cognitive restructuring. Linn & Eylon integrate conceptual change into the Knowledge Integration (KI) framework, emphasizing how students progressively build a coherent understanding of scientific concepts over time [35]. Similarly, White & Gunstone [36] describe

conceptual change as a process in which students commit to new scientific beliefs while abandoning previous misconceptions.

The initial contribution to conceptual change research is due to Posner et al. [37], who proposed a framework explaining how learners transition from one conceptual system to another through cognitive conflict. This model has since evolved to incorporate socio-constructivist perspectives, which emphasize the role of discourse and social interactions in shaping conceptual understanding [38]. Amin & Levrini further argue that conceptual change is not simply the replacement of misconceptions but a complex, iterative process involving epistemological shifts and learning progressions [39]. More recently, research has highlighted the role of metaphors and analogies in guiding students toward conceptual change, particularly in chemistry [40].

In chemistry education, conceptual change is particularly relevant due to the abstract nature of concepts such as atomic structure, chemical equilibrium, and reaction kinetics. Many studies have demonstrated that students struggle with persistent misconceptions, requiring targeted interventions to facilitate conceptual restructuring [41-42]. The "Model of Modelling" introduced by Maia & Justi provides a framework for assessing how students construct and refine scientific models through inquiry-based learning [41]. Recently, Espinosa et al. [43] explored pre-service chemistry teachers' conceptual understanding using three-tier diagnostic inventories, which help identify and address misconceptions at multiple cognitive levels.

A common challenge in high school chemistry is to understand the dissolution of a solute in a solvent [44-46]. Many students mistakenly believe that dissolution is either a purely physical process, where the solute "disappears," or a chemical transformation that changes the identity of the solute. Studies have shown that students struggle with differentiating dissolution from diffusion and melting, often confusing these concepts due to misleading everyday language [46]. Ebenezer & Erickson [47] found that students tend to think of solubility in terms of particle size rather than molecular interactions, leading to misconceptions about why some substances dissolve more easily than others.

Experiments play a critical role in conceptual change by allowing students to compare their predictions with empirical observations, leading to cognitive conflict and subsequent revision of mental models [48]. Additionally, research highlights the importance of cognitive-emotional connections in overcoming misconceptions. Zembylas[49] and Saouma et al. [50] suggest that

metaphors, figures of speech, and emotional engagement can help students internalize and restructure their conceptual understanding.

Recent research highlights the power of technology in promoting conceptual change. Chen et al. [51] found that a Three-Dimensional Thinking Graph (3DTG) significantly enhances scientific reasoning skills by visualizing complex relationships. Ryoo & Bedell [52] demonstrated that dynamic visualizations are particularly effective for linguistically diverse students, as they reduce language barriers while reinforcing key chemical principles.

Very recently, Kartini et al. [53] explored how augmented reality can enhance students' understanding of acid-base titration, making abstract chemical reactions more accessible. These findings suggest that digital tools can mediate conceptual change by providing immersive, interactive learning experiences.

From a socio-constructivist perspective, conceptual change is not merely an individual cognitive process but is shaped by discourse and social interactions [40]. Already in 1998, Green & Gee [54] emphasize that argumentation and peer discussion are essential for solidifying scientific concepts. Bunce & Cole [55] further advocate for evidence-based reasoning as an integral component of chemistry learning.

These approaches align with the modern understanding that scientific knowledge is constructed through collaborative learning environments, where students refine their conceptual frameworks through argumentation, peer discussions, and teacher scaffolding.

1.3 Technology readiness-conceptual framework

Education is a fundamental driver of societal progress, ensuring the transmission and evolution of knowledge across generations [56-57]. Over time, pedagogy has undergone significant transformations, particularly with the advent of digital technologies. To maximize the benefits of these advancements, educators must be receptive to integrating technology into effective learning environments [58].

With the rise of the internet, social networks, and digital innovations, education now operates within a highly dynamic and interconnected landscape [59]. This transformation aligns with the broader global shift towards systemic innovation and sustainable economic development [60]. The European Union, through initiatives such as Europe 2020 and the Innovation Union program, has prioritized technological advancements in education. Similarly,

institutions like NASA and other governmental bodies have emphasized the need for standardized measures to assess technological maturity in various sectors, including education [61].

To evaluate technological maturity, NASA developed the Technology Readiness Level (TRL) framework, which consists of nine progressive stages, from basic research (TRL 1) to fully operational deployment (TRL 9). This standardized approach provides a structured method for assessing technology development before widespread implementation.

Originally designed for aerospace and industrial applications, the TRL model has since been adapted across various fields, including healthcare, construction, human resources, and education [60, 62]. The model's applicability in education technology is now widely recognized, allowing for systematic evaluation of digital learning tools before their integration into curricula and classrooms [63].

Figure 1 illustrates the TRL scale as applied to educational technology adoption, highlighting key stages from concept validation to real-world implementation.

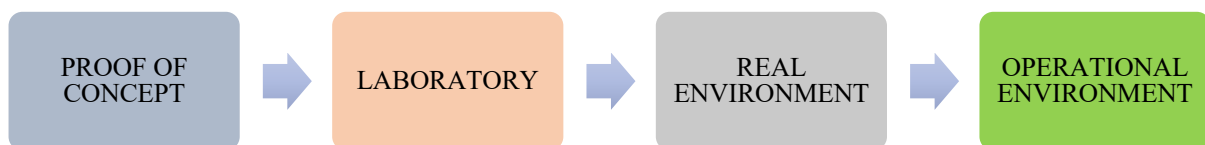


Figure 1. The Technology Readiness Levels (TRL) from concept to deployment.

In the educational context, TRL-inspired frameworks help assess whether a digital tool is ready to be used in the classroom, how advanced an e-learning platform or adaptive system is, and whether an innovation can be scaled across institutions. In addition to TRL-based approaches, other researchers have stressed the importance of structured evaluation models in education. Rossi and Mustaro [63, 64], for instance, developed the eQETIC and EXSeQETIC models, which define maturity phases for online learning tools and provide systematic guidance for schools and universities. While not directly grounded in TRL, these frameworks reinforce the same fundamental need: ensuring that educational technologies are adopted through rigorous and transparent evaluation processes, thereby making their integration more efficient and sustainable.

Although the TRL model was originally developed for technological and industrial applications, recent research suggests that its structure can also be useful for evaluating

institutional readiness and educational quality systems. For example, Artyukhov et al. [60] propose adapting the TRL logic to assess the maturity of quality assurance processes in education. Their model outlines structured stages from identifying institutional needs to full certification, showing how a TRL-inspired scale can help guide and benchmark internal improvements in educational systems.

Similarly, Cobos et al. [65] developed a TRL-based model to measure the maturity level of research projects in higher education institutions, particularly those with the potential to evolve into spinoffs—further demonstrating the flexibility of TRL frameworks within the educational domain.

While teacher readiness for technology integration is an important factor in the success of digital transformation, this issue goes beyond the scope of our study and is therefore not developed here. Instead, our research aims to adapt the TRL structure as an educational tool to monitor the development of reasoning and modelling competences in learners. We introduced the "Transmission of Reasoning Logic" (TRL) scale, designed to assess students' conceptual progression in chemistry education. This pedagogical adaptation enables us to:

- Track students' reasoning development through structured learning tasks,
- Explore the role of self-assessment and peer interaction in constructing scientific knowledge,
- and support this process using interactive and digital tools.

By reinterpreting the TRL framework in a pedagogical context, our goal is to provide a structured learning progression tool that bridges technology use and deep conceptual learning—ensuring that students not only engage with digital environments but also develop robust reasoning and problem-solving skills.

1.4 Integrating online activities into teaching chemistry in the frame of modelling practices

Understanding a chemical phenomenon requires students to think at the molecular level while connecting macroscopic behaviors to molecular and symbolic representations [66]. This multi-level reasoning is crucial in chemistry, where abstract concepts like molecular interactions, reaction mechanisms, and equilibrium demand an integrated cognitive approach. Recent research underscores the effectiveness of multimedia simulations in bridging these representational levels. Compared to traditional teaching methods, multimedia tools

dynamically illustrate chemical processes, facilitating learners' ability to construct knowledge and adapt their conceptual frameworks [67]. By engaging students in interactive visualizations and experiments, these tools promote analytical thinking and provide an opportunity for learners to connect abstract concepts to observable phenomena.

The integration of modern technology tools into chemistry education enhances student learning by supporting self-assessment and providing individualized feedback. These tools actively engage students, allowing them to apply their knowledge to practical contexts and refine their reasoning. Augmented reality (AR) applications are particularly effective in this domain. Jeon et al. [68] demonstrated the potential of AR to support conceptual understanding by visualizing ionic and covalent bonding. Their study revealed significant progress in students' ability to represent and interpret abstract chemical concepts, fostering the development of adequate mental models. Similarly, Karpudewan [69] explored AR's use in presenting sustainable green chemistry, reporting enhancements in preservice teachers' technological and pedagogical skills. These examples illustrate how AR bridges the gap between theoretical knowledge and practical application, offering students a means to construct and refine their conceptual understanding through active engagement.

Online learning environments have also shown significant promise in facilitating conceptual change, particularly through activities that encourage learners to progress from prior knowledge to more structured conceptual models. Almasri [70] highlighted the role of science simulations in enhancing student engagement, self-confidence, and satisfaction, with these factors positively correlating with academic performance. Simulations allow learners to explore chemical phenomena in a controlled virtual environment, fostering inquiry-based learning and experimentation. By manipulating variables and observing molecular interactions, students gain firsthand insight into chemical principles, which supports their transition from spontaneous reasoning to more formalized conceptual frameworks [70].

Multimedia tools are increasingly essential in chemistry education, particularly for helping students grasp abstract concepts such as chemical bonding. Their effectiveness lies in supporting visual and interactive representations that promote intuitive understanding—especially at the microscopic and structural level, which is often difficult to achieve through traditional instruction. Frailich et al. [71] developed an interactive web-based learning environment focused on chemical bonding. Their study demonstrated that such tools enhance students' conceptual understanding of bonding structures and significantly increase motivation and engagement. By allowing learners to explore atomic and molecular structures in a guided

digital context, these tools help bridge the gap between symbolic representations and conceptual meaning.

Virtual laboratories provide realistic, safe environments that support both procedural and conceptual learning. Domingues et al. [72] reported that students showed improved outcomes in experiment planning (60–90%) and data interpretation (55–80%), with 93% rating the virtual lab portal as highly useful. While not focused on modelling, such environments foster essential scientific reasoning skills involved in hypothesis testing and experimental design.

Aligned with the constructivist approach, these technology-driven interventions support learners in building their own cognitive structures through active engagement and social interaction. Peer collaboration in online platforms or virtual labs fosters socio-constructivist learning, enabling students to negotiate meaning, share perspectives, and collaboratively refine their understanding. By embedding technology tools into contextualized modelling tasks, educators can create environments that challenge students to progress from spontaneous reasoning to conceptual models validated by scientific reasoning.

2. CONCEPTUAL FRAMEWORK

2.1 Designing modelling activities to develop students' skills

Modelling approaches emphasize spontaneous reasoning and the importance of having students build their knowledge autonomously. It is therefore a question of leaving more autonomy to the pupils by proposing more open tasks and activities of higher cognitive level. Our aim is to emphasize in the classroom that chemistry is, on the one side, an experimental science which, on the other side, requires, to make sense, a modelling of the observed phenomena and processes. The development of appropriate models requires a permanent back and forth reasoning from the macroscopic to the submicroscopic (atoms, molecules, ions) world using a symbolic and mathematical language [73]. This develops the creativity of the students as well as the ability to communicate among themselves, to compare their proposals and to critically assess their own work and that of their peers.

In this respect, a teaching activity based on engaging students in modelling tasks about the polarity of chemical compounds is proposed. In this study, modelling procedures have been developed within the framework of experimental activities. The active participation of students is promoted through the following activities: realizing and observing experiments dedicated to

various concepts, modelling the associated results individually or in groups, and taking part in guided discussions supervised by the teacher [22, 41, 71, 74-75].

This multi-faceted approach ensures that students gain a comprehensive understanding of the concepts while developing critical thinking and communication skills. Additionally, by encouraging peer interactions and guided reflections, students develop a deeper understanding of the interconnectedness of various chemical phenomena.

2.2 Designing an educational Transmission of Reasoning Logic scale

The present study aims at applying the TRL concept presented in the introduction (section 1.3) to an educational environment by developing an Educational TRL scale called Transmission of Reasoning Logic. By using this expression, we keep the original TRL acronym but give it a specific educational and pedagogical content. The didactic approach focusses on the development of logical thinking through the training of modeling competences which aim at interpreting chemical phenomena and making predictions in a heuristic perspective. In the industrial frame, the TRL scale is used by funding agencies or industries to assess the maturity of a product in development, to estimate the needed efforts and risks before entering the market. For educational purposes, it is suggested here to draw an analogy between the school and the funding institution, between the teacher and the industry and finally, between the competencies acquired by the student and the product to be developed. The student is expected to adapt and to gain in maturity/knowledge, a progress which can be assessed through the TRL scale.

The proposed educational TRL scale for the validation of the acquisition of new skills is shown in Table 1. It encompasses 9 levels and starts with basic competences, like observation, and culminates with more advanced abilities, like integrating various models. Socio-constructivist aspects like exchange between peers are also included.

As a proof of concept, this investigation focusses on the development of competences and the conceptual change taking place in scientific modelling in a chemistry learning context [19].

Table 1. The educational TRL scale

Task progression		TRL scale	Level
Addition Revision	Integration to other known models	TRL9 •I recognize the connections between different models relevant to an experimental situation.	
	Scientifically recognized model	TRL8 •I can combine the developed model with other established models to deal with complex situations involving multiple phenomena.	
	Mental model under construction	TRL7 •I am able to model situations with a higher degree of complexity.	
		TRL6 •I apply my model to various situations of average complexity.	
		TRL5 •I am able to modify my model to broaden its application range.	
		TRL4 •I confront my model with those of my peers.	
		TRL3 •I can tell if my model only describes the reality, if it explains it, if it can make predictions.	
		TRL2 •I propose a first scientific model that is compatible with the available experimental observations.	
	Situated task	TRL1 •I describe precisely the characteristics of a scientific phenomenon observed at the macroscopic level.	

Building on this framework, the activities described in section 2.3 were designed to apply the educational TRL scale in the context of chemistry learning, with a focus on assessing and fostering the development of student modelling competencies and observing their possible conceptual change. During these activities, the proposed educational TRL scale was used to systematically evaluate students' progress in mastering scientific modelling skills.

Each level on the TRL scale represents a milestone in learners' cognitive development:

- **TRL 7-9** emphasize the integration of recognized models with other frameworks, enabling students to address multifaceted problems and establish connections between models and experimental situations.

- **TRL 4-6** focus on refining mental models under construction through peer confrontation, modification, and application to increasingly complex scenarios.
- **TRL 1-3** involve situated tasks where students describe phenomena, propose initial models, and evaluate their explanatory and predictive capacities.

The TRL scale was further enriched with focused online activities designed to complement these levels of learning. These web-based tools not only facilitated personalized feedback but also encouraged autonomy by allowing students to self-assess their progression at each stage.

Integrating technology into the learning process fostered a collaborative environment between teachers and students, enabling the latter to confidently advance through the TRL stages. This structured progression, coupled with targeted online interventions, is expected to improve students' scientific competencies and prepare them for complex real-world applications of chemistry.

2.3 Current study

The TRL scale was applied in an experiment-oriented lesson designed to integrate hands-on activities with modelling tasks. This lesson centered on addressing the question: **How can we explain the dissolution of a solute in a solvent?** The investigation included both ionic and molecular compounds.

The proposed activities required that the secondary school student:

- **Describe a given scientific phenomenon from a macroscopic perspective:** Students describe the observable changes in a dissolution process such as color, state, or temperature modifications.
- **Develop graphical representations at the submicroscopic level:** Students propose graphical representations of the interactions between solute and solvent particles, distinguishing ionic dissociation from molecular dissolution.
- **Apply models to complex scenarios:** Students extend their understanding to more challenging contexts, such as comparing polar and nonpolar solvents or analyzing temperature effects on dissolution.
- **Engage in group discussions to share interpretations:** Students collaborate to refine their models, offering peer feedback to enhance their conceptual clarity.
- **Self-assess their progress using the TRL scale:** Students evaluate their conceptual progression across the TRL stages, gaining insights into their learning trajectory.

These structured activities were designed to guide students from basic observation to advanced model synthesis, fostering a deeper understanding of dissolution mechanisms while promoting collaborative learning.

2.4 Research questions

The following research questions guided this study, focusing on the integration of the TRL scale and interactive tools to support student learning:

- **RQ1: Is the TRL scale an efficient tool to assess the progression of learners' competencies in modelling activities?** This question investigates the effectiveness of the TRL framework in measuring students' skill development, particularly in connecting macroscopic observations to submicroscopic representations.
- **RQ2: How do interactive tools support student learning?** This question examines the role of digital resources, such as simulations and feedback mechanisms, in enhancing conceptual understanding and engagement.
- **RQ3: How do students value the TRL scale?** This question explores students' perceptions of the TRL framework, assessing its usability, clarity, and impact on their learning experience.

3. METHODS

3.1 Participants

Two 10th grade classes from two Belgian French-speaking secondary schools participated in this study. Each class was taught by a different chemistry teacher. The average age of the students was 15.5 years (ranging from 15 to 16). Each class consisted of 13 students, for a total of 26 participants, all of whom were enrolled in an advanced chemistry course (2 periods per week) with comparable assessment practices.

The students were divided into six small groups of 4 or 5 students. Each group conducted the activities under the guidance of a tutor. The tutors included the chemistry teachers in charge of the respective classes and two of the study's authors who were actively involved in facilitating the activities.

Several preparatory meetings were held during the development phase of the study to ensure alignment between the tutors on the objectives and methodologies of the activities. This

collaborative planning process aimed to provide a consistent learning experience across the two classes and to support the effective implementation of the study's pedagogical framework.

3.2 Design and procedure

To investigate the above-mentioned research questions, four activities were planned, three in the classroom and one online activity at home. A self-assessment step using the TRL scale was included after each of the first three activities. The overall sequence is summarized in Figure 2.

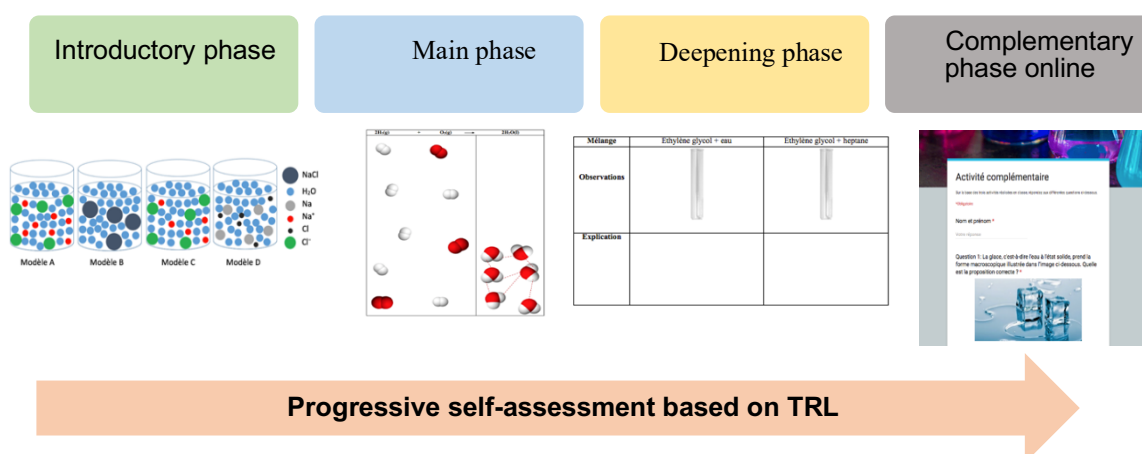


Figure 2. The different phases of the proposed learning activity

The introductory phase aimed to revisit the concept of ions and introduce students to particle-level reasoning. Students were asked to answer the following question: **What happens when a small amount of table salt (sodium chloride, NaCl) is mixed with water?** They selected a model at the particle level (atoms, molecules, and ions) that best explained the phenomenon [20,66,75]. Following this, students observed NaCl crystals in Petri dishes and proposed a three-dimensional model to represent the arrangement of cations and anions in the solid state.

In the main phase, students analyzed the water synthesis reaction occurring at room temperature and were asked to explain why dihydrogen (H₂) and dioxygen (O₂) are in the gaseous state whereas their reaction leads to liquid water (H₂O) [76]. Several concepts (molar mass, electronegativity, chemical bonding, molecular geometry with the help of molecular models) had to be mobilized to allow them to make hypotheses related to polarity and hydrogen bonding. Moreover, we asked students to summarize their hypotheses in a proposal for an

explanatory model based on intermolecular forces. Some applications on the polarity of simple molecules were proposed to strengthen their understanding.

The deepening phase first came back to the initial question – how does water dissolve table salt? –, but at a higher conceptual level, by analyzing the interaction between the water solvent and the solute, based on the model developed in the main phase. The students performed afterwards experiments to attempt to dissolve a liquid, ethylene glycol ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2$), in two different liquids, water and heptane and to compare the respective solubilities. Molecular models were at their disposal to structure their reasoning and help them find an explanation based again on the intermolecular force model built in the main phase. This activity reinforced their understanding of intermolecular forces and allowed them to apply the conceptual framework developed earlier in the sequence.

3.3 Sources of data and analysis methods

3.3.1 TRL self-assessment

The TRL scale was introduced at the beginning of the lesson and explained in detail to ensure that students fully understood its purpose and application. At three key stages—following each of the three modelling activities—students were given approximately 10 minutes to complete the TRL self-assessment form. This allowed them to reflect on their learning progression and assess their evolving competencies.

The completed TRL scales were systematically encoded and analyzed to track individual student progress across the three activities. To evaluate the evolution of student competency levels, the Friedman test was used as it is well suited for analyzing repeated measures in non-parametric data. This test allowed us to determine whether significant differences existed across the three activities.

To triangulate the findings and enhance the reliability of the assessment, the TRL self-assessment results were cross-referenced with additional data sources. These included:

- **Video recordings** of student interactions and discussions, which provided qualitative insights into their reasoning and collaborative problem-solving skills.
- **Online activities**, which served as supplementary assessments to further examine how students engaged with the learning material in a digital environment.

By applying this combination of statistical analyses and integrating self-reported assessments with observational and digital data, a comprehensive evaluation of the TRL scale's effectiveness in monitoring student progress was achieved.

3.3.2 Video data

All activities in the different groups were videotaped to capture students' actions, arguments, and interactions with peers and tutors. In both classes, each group was filmed using a fixed camera placed at the side to ensure a clear view of their collaborative work and reasoning processes. The analysis of the video transcripts focused on both macro-level and micro-level aspects of student discussions guided by the tutor.

To address the research question RQ1, video transcripts from the six groups (26 students) were analyzed. The macro-level coding aimed to identify students' reasoning steps by aligning their discourse with the Knowledge Integration (KI) framework [77] and the different levels of the TRL scale [52]. Additionally, micro-level coding was performed to transcribe individual conversational exchanges within each group (Table 2). This level of analysis facilitated an in-depth examination of students' argumentation strategies [78] and discourse structure [79]. By integrating both levels of coding, we aimed to assess the features of argumentation within group discussions and explore their impact on skill development while identifying the challenges students faced during the process [78].

Table 2. Argumentation characteristics of group discussions, according to Evagorou, & Osborne (2013), where a detailed definition of each category and sub-category can be found

Argumentation Characteristic	
Main categories	Exploratory talk / negotiating a shared understanding
	Dispute talk
	Cumulative talk
Sub-categories	Asking questions
	Questioning data
	Explaining data
	Reading data
	Discussing structure
	Using analogies

Different types of arguments were further analyzed using **the modified Toulmin's Argument Pattern (TAP)**, as structured by Erduran & Osborne (2004) [80]. The relevant argument elements are described in Table 3 with definitions borrowed from Evagorou and Osborne [79].

Table 3. Argument element of groups discussions

Argument Element	Definition (Evagorou, & Osborne, 2013) [79]
Claim	“The conclusion whose merits are to be established.”
Data	“Information provided within the learning environment that can be used to support or contradict a claim.”
Warrant	“The reason that is used to justify the connections between the data and conclusion.”
Qualifier	“Specifies the condition under which the claim is true, and are phrases that show what kind of degree of reliance is to be placed on conclusions, given the arguments available to support them.”
Rebuttal	“Specifies the conditions in which the claim is not true.”

Among the 6 video recordings, one was selected to be presented in this paper. Two of the authors (HK and BN) coded the video recording of this group independently for characterizing the argumentation developed by the students. In a second step, they confronted their analysis to find an agreement on their assessments.

The data analysis focused on: (a) How do students adapt their scientific visions throughout the learning process as identified by the TRL scale? (b) What are the skills developed during this learning process? (c) What are the obstacles encountered by students throughout this process? (d) Which argumentation level is reached in the discussion groups using Erduran et al.'s [80] framework.

This structured approach to video analysis enabled us to assess the depth of conceptual engagement, collaborative reasoning, and the overall impact of the TRL-based instructional design on students' learning experiences.

3.3.3 Post-online activity

An additional online activity was designed to assess students' understanding of key concepts explored and developed during classroom sessions. This activity aimed to reinforce conceptual connections and evaluate students' ability to transfer their knowledge to novel scientific contexts, a critical skill in chemistry education.

However, only 10 out of the 26 students who participated in the in-class activities completed the online activity, which limits the generalizability of the results presented below. The insights drawn from this post-activity should therefore be interpreted with caution and seen as exploratory rather than conclusive.

First Section: Conceptual Application and Transfer (Supplementary material S1)

The first part of the online activity consisted of eight progressively structured transfer questions. These questions required students to apply fundamental chemistry concepts—such as polarity, molecular geometry, electronegativity, and hydrogen bonding—to new but related scientific phenomena, including water crystallization and associated molecular interactions, the variation of ice density with temperature, superabsorbent polymer behavior in different environments, ...

To ensure a structured progression, the questions were designed to incrementally challenge students' reasoning abilities, following three key stages:

1. Observation of an experimental phenomenon, prompting initial conceptual engagement.
2. Development of an explanatory model, requiring students to synthesize their knowledge.
3. Application to a more complex situation, assessing their ability to generalize and extend their understanding.

These questions were explicitly mapped to the TRL educational scale (Table 4), ensuring that each level corresponds to a progressively deeper cognitive process. Due to its advanced nature, Question 8 was classified as spanning both TRL 8 and TRL 9, as it required higher-order reasoning, synthesis of multiple concepts, and application in novel contexts.

Table 4. Correspondence between online activity questions and TRL scale levels

TRL level	TRL1	TRL2	TRL3	TRL4	TRL5	TRL6	TRL7	TRL8-TRL9
Question	Q1	Q2	Q3	Q4	Q5	Q6	Q7	Q8

Second Section: Student Perception and Self-Assessment (Supplementary material S2)

The second section of the online activity focused on gathering students' perceptions of the TRL educational scale and its effectiveness in supporting their learning. This was assessed through:

- A 4-point Likert scale (1 = strongly disagree, 4 = strongly agree) measuring students' agreement on four items evaluating the usefulness of the TRL scale in structuring their learning process.
- An open-ended question inviting students to reflect on the role of the online activity in improving their understanding of class concepts.

By combining both quantitative (Likert scale responses) and qualitative (open-ended feedback) assessments, this online activity provided valuable insights into how students engage with the TRL framework. It also highlighted how interactive digital tools can reinforce scientific reasoning, bridging the gap between classroom learning and real-world applications.

4. RESULTS AND DISCUSSION

4.1 How does the TRL scale assess the progress of learners' competencies in modelling activities? (RQ1)

4.1.1 Analysis of the self-assessment results

Results of the self-assessment, based on the TRL scale, for the 26 students who participated in the three activities, show that most of them expressed the feeling of progressing from the first to the third activity. These results are summarized in Figure 3. For instance, the number of students who considered that they had reached the TRL level 8 is 0, 2 and 9 respectively for Activity 1, Activity 2 and Activity 3.

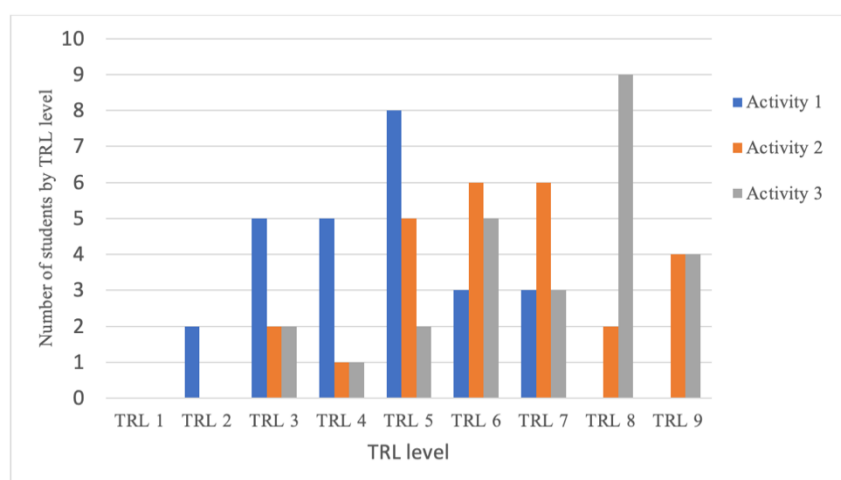


Figure 3. Number of students by TRL levels in the three activities

A comparison of students at different levels of TRL scale in the three activities is presented in Table 5.

Table 5. Mean, standard deviation, minimum, and maximum of TRL scale activity

	N°	Minimum TRL level	Maximum TRL level	Mean TRL level	Standard Deviation
Activity 1	26	2	7	4.54	1.45
Activity 2	26	3	9	6.35	1.72
Activity 3	26	3	9	6.88	1.77

The results of the Friedman Test ($\chi^2=31.68$, $p<0.001$) indicate statistically significant differences in students' perceived competency levels across the three activities.

These results reflect students' self-assessed feelings of progression through the course, as captured by the TRL scale. While encouraging, such findings must be interpreted with caution. Given the subjective nature of self-assessment and the limited scope of this exploratory study, further research involving objective measures of learning is needed to validate the scale's educational impact.

The TRL tool may serve as a meaningful prompt for student reflection and metacognitive engagement, helping learners visualize the evolution of their mental models. This is in line with research by Chen et al. [51], who examined how visual thinking tools can support inquiry-based concept integration.

However, the introduction of the TRL scale to students also revealed some potential challenges. It is plausible that students systematically overestimated their abilities, particularly for higher levels of the scale, due to their growing confidence throughout the activities. Previous studies, such as those by Vachliotis et al. [81], Méheut [82], and Rahmawati et al. [83], have shown that learners need explicit training to critically and accurately assess their competencies. Without this, their assessments might lack the rigor required to reflect true progress, particularly at advanced TRL levels.

The inconsistencies in students' self-assessments, illustrated in Figure 3, further highlight this challenge. While TRL6 and TRL7 were achieved with similar probabilities after Activity 2, TRL7 became less prevalent following Activity 3, overtaken by TRL6 and TRL8. Additionally, the dominance of TRL8 and TRL9 after Activity 3 is unexpected and suggests a need for further exploration. These patterns could be attributed to fluctuations caused by (i) the

small size of the samples leading to strong fluctuations ($N = 26$), (ii) a possible systematic overestimation by the students when they acquire more self-confidence, and (iii) the difficulty to self-assess for levels which describe the transition to higher complexity situations and which also correspond to the transition from a mental model to a scientifically recognized one.

Despite these challenges, the findings suggest the potential of the TRL scale to foster conceptual understanding and reasoning. By guiding students from descriptive modelling in Activity 1 to predictive and exploratory applications in Activity 3, the sequence encouraged the development of advanced skills. Previous studies Van Driel & Verloop [26], and Grosslight et al. [22], showed that the different functions of a model are rarely mentioned in the curricula (e.g., using models to make predictions). According to Grosslight et al. [22], “most models are ‘wrong’ or ‘limited’ in some key aspect and the pragmatic use of models that are known to possess limitations is one of the characteristics that differentiates the expert from the novice.” Lopes and Costa [19], have proven that the use of assessment instruments capable of providing information on how students learn is very important in a learning process to make it more efficient.

4.1.2 Analysis of the argumentation patterns

An initial analysis of the discussions within the different groups is summarized in Table 6. The aim of this analysis is not only to describe students’ learning processes, but also to show how their reasoning steps, conceptual difficulties, and forms of argumentation can be interpreted in relation to the different levels of the TRL scale in a real teaching context. For each TRL level, Table 6 identifies typical reasoning patterns observed in students’ discourse, the modelling skills progressively developed, and the conceptual or procedural obstacles they encountered. It therefore provides a synthetic framework for relating the analysis of students’ arguments to their progression in modelling competence. Although the table does not offer a direct or comprehensive assessment of competencies acquired, it helps visualize how students’ reasoning aligns with increasing levels of abstraction and model-based thinking. It also highlights recurring misconceptions or simplifications, which can inform instructional design.

Beyond its descriptive role, Table 6 also provides an interpretative framework for linking students’ argumentation to the different TRL levels. At lower levels, students’ discourse remains mainly descriptive, whereas at intermediate levels it increasingly involves explanations, hypotheses, and the coordination of data, claims, and warrants. At higher levels, students mobilize more elaborated forms of argumentation, combining multiple models and

applying their reasoning to more complex situations. Table 6 therefore helps interpret the argumentation patterns observed (Tables 7 to 9) in terms of progression along the TRL scale.

This connection is also useful for understanding students' difficulties. The low occurrence of qualifiers and rebuttals suggests that, although students are able to formulate claims and refer to data, they still struggle to critically examine their reasoning, which is consistent with intermediate TRL levels. Conversely, explanations that integrate multiple concepts (geometry, polarity, intermolecular interactions) can be seen as indicators of progression toward higher TRL levels.

While some teachers report implementation difficulties—such as time constraints or technological barriers [84]—this analysis suggests that, when structured appropriately, modeling activities can support students in navigating from concrete representations to more formal scientific models. However, further investigation would be required to determine the actual impact of these activities on student achievement and confidence.

Cognitive factors such as reasoning skills, visuospatial abilities, and representational competencies play a crucial role in students' success in chemistry, particularly at higher TRL levels, where integrating multiple models and applying abstract concepts to real-world scenarios are required. For instance, visuospatial abilities enable students to visualize molecular structures, while representational competencies allow them to map these structures onto macroscopic phenomena [83, 85-87].

Interactive simulations, as noted by Almasri [70], enhance engagement, self-confidence, and academic performance, enabling students to refine their reasoning skills and transition effectively between TRL levels. These technologies not only support conceptual understanding but also prepare students to tackle real-world chemical challenges with greater competence.

The TRL scale is expected to further enhance students' learning by fostering metacognitive competences [33, 42]. By encouraging learners to reflect on how they learn and assess their progression, the scale supports the development of self-regulation and critical thinking. As students advance through the levels, they become more adept at identifying their strengths and areas for improvement, laying the groundwork for continuous learning and adaptation.

Table 6. Short coding of analyzed videos to illustrate the conceptual change and obstacles faced by students

Category	Developed skills	Obstacles
Integration to other known models (TRL8 – TRL9)	Geometry as well as polarity can determine miscibility between two solvents: polar molecules dissolve polar molecules and apolar molecules dissolve apolar molecules	Simplified too much a scientific concept Students must be guided to combine several models at the same time
Scientifically recognized model (TRL6 – TRL7)	Apply the polarity concept to a more complex situation: how an electrostatically charged rod can bend a water flow	Molecular motion: Reorientation (rotation) of water molecules
Mental model under construction (TRL3 – TRL5)	Develop a model to explain and make predictions about interactions between molecules (gas and liquid phase, role of H-bridges) Exchange within group about different suggestions Apply properties or relations to explain the state of matter	Need time to recognize the relationship between charges and interactions and the state of matter
Situated task (TRL2)	Recognize the relevance of molecular geometry Make the link between geometry and polarity Use molecular models to make correlations with the data collected in the table Describe the role of H-bridges	No spontaneous recourse to molecular models to describe molecule geometry
Situated task (TRL1)	Observe and describe the situated task at the macroscopic level (water synthesis) Fill in the information about molar mass, electronegativity difference and geometry Suggest hypotheses for the difference between the states of matter of H ₂ , O ₂ and H ₂ O at room temperature and explain their reasoning	Do not identify immediately the state of matter (“g = gram”!) Problem to calculate molar masses (Example = $M(\text{H}_2\text{O}) = 36 \text{ g/mol}$! because of the stoichiometric coefficient)

The way students interact collaboratively in the frame of scientific argumentation needs further investigation. The quality of collaborative argumentation has a positive impact indeed on school performance. Recent studies have shown that the most successful students in argumentation are also more interested in giving meaning to their learning [78-79].

A second step in our data analysis focused therefore on the quality of the argumentation during the discussions within the different groups, using the methodology described in Section 3.3.2 and based on the works of Erduran et al. [80] and of Evagorou, & Osborne [79]. The results are summarized in Table 7 and Table 8. The number of argumentation elements used within a selected group during the three activities is presented in Table 7 for each student and the main characteristics of the argumentation of this same group are provided in Table 8.

Table 7. Number of elements of argument during the oral argumentation for the 4 students (denoted as S1 to S4) of one selected subgroup.

	Students			
	S1	S2	S3	S4
Claims	3	1	5	2
Data	25	1	4	4
Warrants	3	0	2	0
Qualifiers	1	1	1	1
Rebuttals	4	0	0	0
Total	36	3	12	7

Throughout the three activities, the two most active students (S1 and S3) mainly referred to facts (data) which led them to state claims and warrants. The analysis of the transcripts reveals that they often restricted themselves to short answers with limited interpretation, a situation which might be linked to their usual teaching and learning environment. Belgian secondary school learners are usually not confronted to argumentation exercises in a social context, which could explain the weak occurrence of qualifiers and rebuttals.

The analysis of student exchanges further revealed that most of the argumentation fell into exploratory talk (negotiating shared understanding with critical analysis of each other's ideas and arguments) and cumulative talk (putting together well-established pieces of knowledge brought about by the participants in a cumulative way to solve a given problem), as illustrated in Table 8.

Table 8. Number the characteristics of collaborative argumentation during the oral argumentation for the students

	Students			
	S1	S2	S3	S4
Exploratory talk and negotiating shared understanding	12	0	5	2
Dispute talk	1	0	2	0
Cumulative talk	8	0	1	2
Asking questions	1	1	2	0
Explaining data	9	2	1	2
Reading data	2	0	0	0
Discussing structure	2	0	0	1
Using analogies	1	0	1	0
Total	36	3	12	7

Students S1 and S3 engaged much more in talk and arguments than the two other students. S1 took spontaneously the leadership, dominating the discussion despite the presence of the teacher/tutor. Student S2, on the other hand, did not seem to evolve in the course of the three activities.

Table 9 below gives a representative sample of the exchanges within a group during the introductory activity, illustrating their implications through the variety of argument elements and argumentation schemes.

Table 9. Illustrative examples of the discussion that took place in a selected group during the introductory activity. T refers to the teacher.

Student – talk	Argument Element	Argumentation Characteristic
T- So why not the D model?		
S4- We need to have Na ⁺ and Cl ⁻	Data	Cumulative talk
T- So now you have to choose between A and C.		
S1- I hesitated between A and C because the only thing that changes is the number of Na ⁺ in both models.	Data, Warrant	Discussing structure
T- So we take a certain amount of NaCl and put it in water, we get how much Na ⁺ and how much Cl ⁻ ?		

S3-Can you please repeat?		Asking questions
S1- The same number	Warrant	Cumulative talk
T- So there's the same amount of Na^+ and Cl^-		
S4- So this is the C model.	Claim	Cumulative talk
T- So the answer is C because we have the same number of Na^+ and Cl^- . The amount of matter must always be conserved.		

During this introductory activity, the students are invited first to describe the macroscopic phenomenon. Afterward the nature and the role of modelling in science is discussed. We focused on the ideas they shared about the interpretations of the results and the links with the explanatory models and the unobservable reality. In this way, a modelling process can bring a new way of thinking about scientific phenomena at the sub-microscopic level [7]. To facilitate the understanding of the nature of a model and to highlight its role, during the introductory activity, two types were used: first, a simple two-dimensional drawing and, afterward, a three-dimensional model of the Na^+ and Cl^- crystal lattice.

The limited occurrence of qualifiers and rebuttals during group discussions suggests that students seldom posed clarifying questions or critically examined each other's reasoning, revealing a weakness in their argumentation skills. While no widespread misconceptions were identified, one specific error—confusing molar mass with the stoichiometric coefficient—was noted at the end of the sequence (Table 6).

Rather than addressing predefined misconceptions, the interactive learning approach adopted here aimed to support students in articulating and refining their ideas through collaborative modeling. As noted by Lopes & Costa [19], peer interaction can promote conceptual development when appropriately scaffolded, a point also emphasized by Kirschner et al. [88].

Taken together, Tables 6 to 9 suggest that the TRL framework can be used not only to categorize task complexity, but also to interpret the quality of students' argumentation and the extent to which their discourse reflects an evolving modelling competence.

4.1.3 Online test and reliability of the self-assessment of the students

As noted above in Table 4, the questions of the interactive test at the end of the learning sequence span the whole range of TRL levels. Figure 4 shows the results of the first part of the online test, based on multiple-choice questions accompanied by justifications.

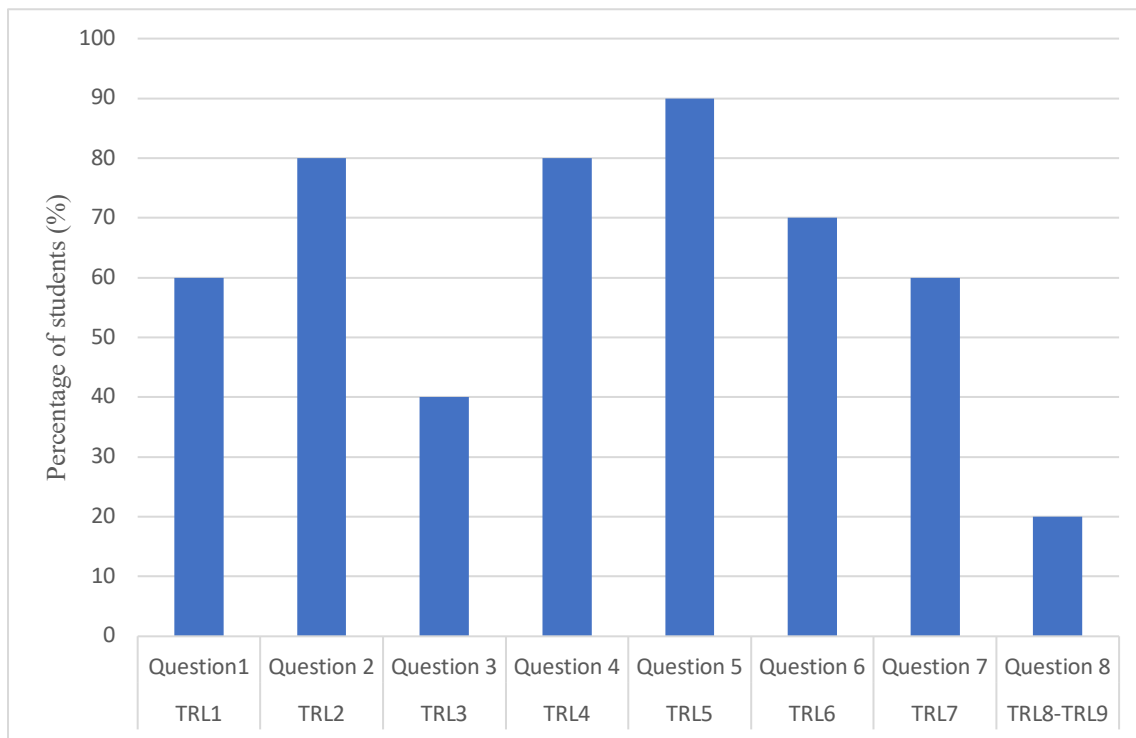


Figure 4. Scores obtained by the students for the online test

The average score for the online activity is 62% with a standard deviation of 23%. This result should be compared to the data shown in Figure 3 to check the reliability of the self-assessment of the students. However, Figures 3 and 4 cannot be directly compared because Figure 3 displays the reached TRL levels whereas Figure 4 shows the results for questions linked with the different TRL levels.

To better interpret these data, we applied a cumulative analysis based on the structure of the test. The principle is as follows: a student is considered to have reached a TRL level n only if they correctly answered all questions from $Q1$ to Qn . This approach is coherent with the intended cumulative nature of TRL levels and allows for a straightforward estimation of actual TRL achievement across the cohort.

The results of this cumulative analysis are presented in Figure 5 below.

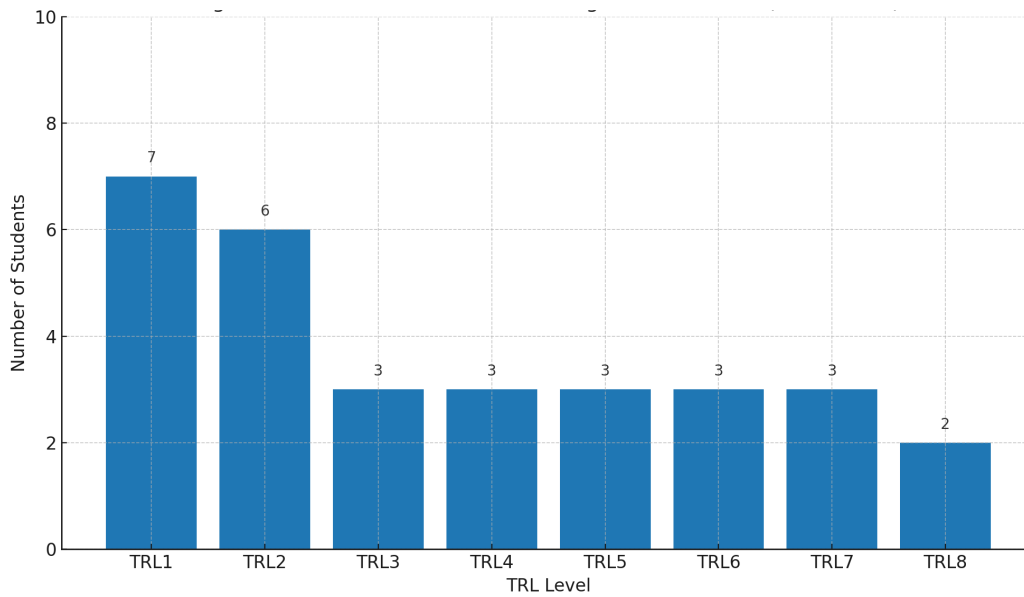


Figure 5. Number of students reaching each TRL level (cumulative analysis)

This figure shows that only two students reached TRL8 in a consistent and cumulative way. The number of students decreases as the TRL level increases, with a notable drop after TRL2. Interestingly, several students failed early questions (particularly question 3) yet succeeded on subsequent, supposedly more advanced ones. This observation suggests that the calibration of question difficulty may not strictly follow the assumed TRL progression.

Several observations can be drawn from Figures 3, 4, and the cumulative analysis presented in Figure 5. First, the limited sample size remains an important constraint. With only ten students completing the online test, each student represents 10% of the dataset. As a result, statistical fluctuations can strongly influence the interpretation of results. This low resolution is reflected in the sharp drops observed in the cumulative progression and requires caution when generalizing conclusions.

Second, the progression along the TRL scale does not appear strictly cumulative in practice. Although the test was designed with an increasing level of difficulty corresponding to TRL levels, student performance reveals deviations from this ideal structure. In several cases, students who failed early questions—typically associated with lower TRLs—managed to answer later, supposedly more advanced questions correctly. This suggests that their understanding may not develop in a linear fashion, and that TRL levels might not represent discrete thresholds of competence as originally intended.

Third, this pattern points to potential inconsistencies in how the questions were calibrated relative to the TRL framework. Yet some of those same students successfully responded to later

questions. Such discrepancies indicate that the sequence of questions may not have faithfully reflected a stepwise increase in complexity or abstraction, and that a more refined alignment is needed between item design and targeted TRL levels.

Finally, a comparison with the self-assessment results shown in Figure 3 reveals a notable mismatch. While most students estimated their TRL level to be relatively high—especially TRL8—the test-based evaluation paints a more diverse and overall lower picture. This discrepancy suggests that some students significantly overestimated their level of conceptual mastery. Those who remained at TRL2 or TRL3 according to the cumulative test data had previously perceived themselves to be well beyond that stage. Such gaps between perception and performance underscore the need to triangulate self-reports with structured assessments when evaluating learning outcomes.

4.2 How do interactive tools support student learning ? (RQ2).

In the open-ended part of the questionnaire, the students were invited to explain in a few words how the complementary online activity helped them to deepen their understanding of the concepts introduced (molecular geometry, polarity, hydrogen bond, ...).

Some representative comments are provided below.

- “The online activity helped me to pay attention to details I didn’t notice.”
- “I already knew this subject before the activity, so I can’t judge whether it helps or not.”
- “It is much easier to understand because it is much more visual that the course and the simplified diagrams are very clear about the organization of atoms and molecules in space.”
- “It helped me to improve in this area.”
- “I was able to distinguish what I didn’t understand correctly and what I understood.”
- “I discovered more things for example that the positive charges of the water molecule are attracted by a negative charge pipe.”
- “The online side-activity made me use “logic” and answer the different questions with reference to the theory of the course seen in class.”
- “Now the material is clear and understandable thanks to the activities we did in class.”

These comments highlight the benefits of interactive tools in enhancing understanding and engagement. Most students reported positive outcomes, citing the clarity and visual nature of the online activity as key factors. Notably, several students acknowledged improved ability to identify misconceptions and apply theoretical knowledge to problem-solving tasks [70, 72, 74].

However, these observations also emphasize the need for targeted strategies to address the bimodal distribution of TRL levels. To support students at lower TRL levels, guided and collaborative activities, such as group support and peer mentoring, are essential. Additionally, strengthening metacognitive skills through critical self-reflection and constructive feedback is crucial for helping students better assess their progress.

Furthermore, it is vital to incorporate specific tasks that facilitate the transition between TRL levels 4 and 5, a critical step in developing scientific competencies. These approaches provide an opportunity for all students to advance meaningfully through the TRL levels while maximizing the benefits of online activities.

4.3 How do students value the TRL scale? (RQ3)

The second part of the online activity shows that a majority of students gave a positive appreciation of their learning through the educational TRL scale (Figure 6).

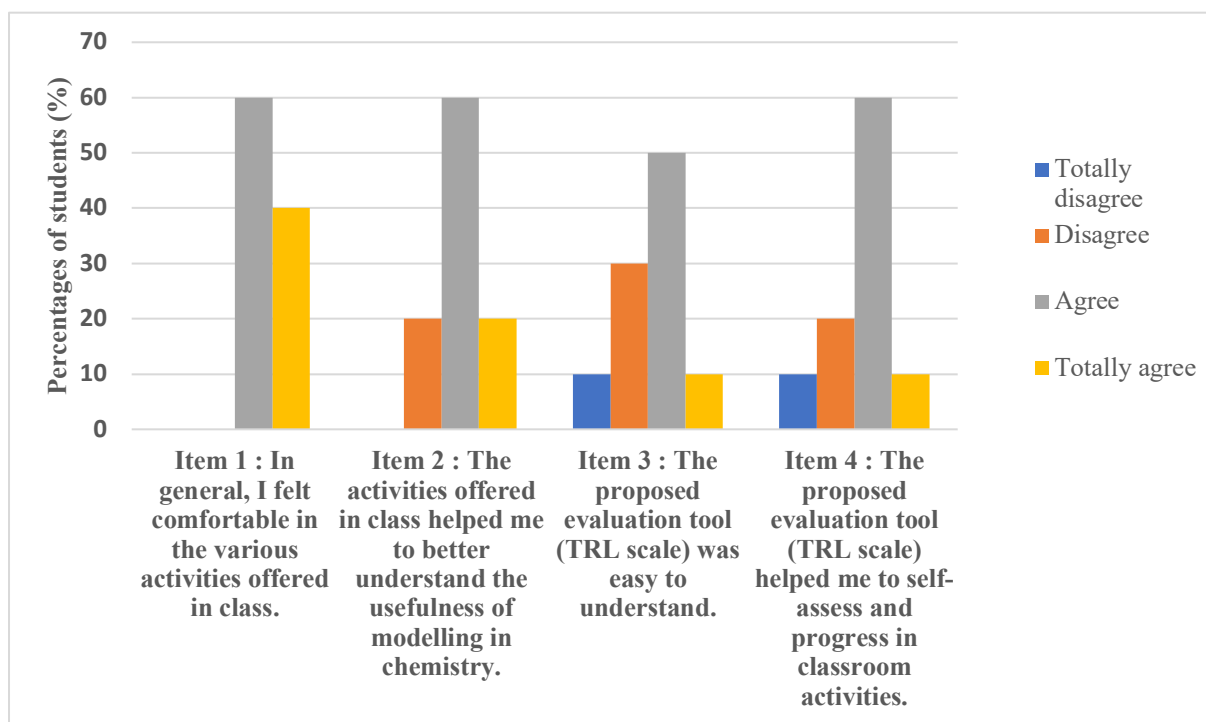


Figure 6. Student answers relating to the proposed activities and the role of the TRL scale

The data indicates that all students became really involved in the different activities proposed in class as part of this approach (item 1). A significant majority of them (80%) appreciated the modelling process and felt that they were progressing (item 2). A high proportion (70%) also agreed that using the TRL educational scale helped them to self-assess and progress in their activities (item 4). However, only 60% of students found the scale easy to

understand (item 3). This lower percentage reflects the novelty of the tool, which requires further classroom use and familiarization for better student comprehension and validation [81].

5. Conclusion

This study explored student interactions, argumentation, and conceptual progression during collaborative modelling activities supported by the newly developed Transmission of Reasoning Logic (TRL) scale. Conducted with 26 tenth-grade students from French-speaking Belgian secondary schools, the research assessed the impact of the TRL scale through three progressive modelling tasks. The TRL scale, composed of nine levels, was designed to evaluate the development of students' modelling skills.

During the introductory activity, students were first invited to describe a macroscopic phenomenon before engaging in discussions about the nature and role of modelling in science. By interpreting results and linking them with explanatory models and unobservable realities, they began to adopt new ways of reasoning about submicroscopic processes [7]. To facilitate understanding, two types of models were introduced: a simple two-dimensional drawing and a three-dimensional lattice model of Na^+ and Cl^- ions.

The methodology encouraged students to collaboratively construct submicroscopic models to interpret data, explain experimental results, and make predictions. The synthesis presented in Table 6 also provided an interpretative framework linking students' argumentation to their progression across TRL levels, allowing a more refined understanding of their modelling development. Group discussions revealed that while students engaged actively with data and explanations, their argumentation remained limited. Qualifiers and rebuttals occurred only rarely, indicating that students seldom posed clarifying questions or critically examined peers' reasoning. No widespread misconceptions were identified, but a recurring error—confusing molar mass with stoichiometric coefficients—emerged at the end of the sequence. These observations highlight weaknesses in argumentative skills but also suggest that interactive modelling supported the refinement of students' ideas, in line with findings by Lopes & Costa [19] and Kirschner et al. [88].

Self-assessment using the TRL scale was conducted at three points in the sequence, while an online test at the end provided further evaluation of conceptual mastery. The average score was 62% (SD = 23%), but detailed analysis revealed a complex pattern. A cumulative method was applied to align results with the hierarchical structure of the TRL scale: a student was considered to have reached level n only if all questions from Q_1 to Q_n were answered correctly.

This analysis showed that only two students consistently reached TRL 8, while performance declined sharply after TRL 2. Interestingly, some students failed early questions yet succeeded on more advanced ones, suggesting that the test items did not strictly reflect a stepwise increase in TRL difficulty. This inconsistency raises questions about the calibration of assessment items and the assumption of strictly cumulative progression.

A comparison between self-assessments and test-based results revealed a notable discrepancy. Many students perceived themselves to be at higher levels (particularly TRL 8), whereas the cumulative test showed several remained at TRL 2 or 3. This overestimation underscores the importance of combining self-reports with structured assessments to obtain a more reliable picture of student learning.

Despite these inconsistencies, overall progression was observed. The distribution of students across TRL levels after the final activity was bimodal: about 30% remained at lower levels (TRL 2–3), while the majority reached intermediate levels (TRL 6–7). Levels 4 and 5 appeared to function as critical transition phases, requiring not only a solid grasp of scientific models but also the ability to apply reasoning in unfamiliar contexts. Supporting students at these stages will require targeted strategies, such as guided collaboration, peer mentoring, and activities fostering critical reflection and metacognitive skills.

Feedback from students confirmed the value of the TRL-based approach. Most reported strong engagement with the activities, with 80% appreciating the modelling process and perceiving progress, and 70% indicating that the TRL scale supported self-assessment and improvement. However, only 60% found the scale easy to understand, reflecting its novelty and the need for further classroom implementation to ensure familiarity and clarity [81].

Finally, students highlighted the benefits of interactive and visual tools, which facilitated understanding and problem solving while helping them identify misconceptions [70, 72, 74]. Nonetheless, the observed gaps in argumentation and the mismatches between self-assessment and test outcomes emphasize the need for refinement of both the TRL framework and its assessment tools. Overall, the TRL scale shows promise as a pedagogical instrument to foster responsibility, peer interaction, and structured progression in modelling skills. Future research should expand its application, improve item calibration, and design bridging tasks to strengthen transitions between intermediate TRL levels, thereby maximizing its impact on chemistry education.

6. Implications

The approach presented in this study, based on modelling and self-assessment, aligns with constructivist and conceptual change theories, which are increasingly recognized as effective frameworks for promoting meaningful science learning [91].

Although investigated in a specific context, this approach could be extended to other scientific topics involving assimilation and self-assessment, particularly those engaging students with the three typical chemistry levels: macroscopic, symbolic, and submicroscopic. Such an extension may enhance students' ability to connect theoretical concepts with observable phenomena and symbolic representations, thereby enriching and deepening the learning experience.

7. Limitations

This study proposes an innovative method for assessing science learning through the educational TRL scale. Nevertheless, several limitations should be acknowledged. The small sample size characteristic of this exploratory research restricts the generalizability of the results. Expanding the study to larger and more diverse cohorts would reduce statistical variability and provide a stronger basis for conclusions.

Moreover, the methodology should be tested across a broader range of chemistry topics and other scientific disciplines such as physics and biology. Considering diverse educational contexts—including general, technical, and vocational secondary education—would further enhance the depth and applicability of the findings.

Additionally, the influence of social context on learning dynamics merits greater attention. In this regard, and building on the work of Evagorou & Osborne [79], applying Toulmin's Argumentation Pattern (TAP) during peer discussions or interviews could provide detailed insights into students' reasoning processes and their perceptions of the TRL scale. This qualitative approach would complement quantitative data, offer a more comprehensive understanding of the tool's effectiveness and guiding its refinement for broader educational use.

REFERENCES

1. Barke, H.-D., Harsch, G., Schmid, S. Essentials of Chemical Education, Heidelberg, Springer, **2001**.
2. Prins, G., T., Bulte, A.M.W., Van Driel, J., H., & Pilot, A. Selection of authentic modelling practices as contexts for chemistry education. *International Journal of Science Education*, **2008**, 30 (14), 1867-1890.
3. Coll, R.K., & Taylor, N. The role of models/and analogies in science education: implications from research. *Chemistry Education: Research and Practice in Europe*, **2005**, 3 (2), 175–184.
4. Park, E. J., & Light, G. Identifying Atomic Structure as a Threshold Concept: Student mental models and troublesomeness. *International Journal of Science Education*, **2009**, 31(2), 233–258.
5. Sirhan, G. Learning difficulties in chemistry: An overview. *Journal of Turkish Science Education*, **2007**, 4, 2-20.
6. Taber, K. S. The mismatch between assumed prior knowledge and the learners' conceptions: A typology of learning impediments. *Educational Studies*, **2002**, 27(2), 159–171.
7. Johnstone, A. H. You Can't Get There from Here. *Journal of Chemical Education*, **2010**, 87,22–29
8. Kermen, I., & Méheut, M. Different models used to interpret chemical changes: Analysis of a curriculum and its impact on French students' reasoning. *Chemistry Education: Research and Practice*, **2009**, 10, 24–34.
9. Gilbert, J. K., & Treagust, D.F. Introduction: Macro, submicro and symbolic representations and the relationship between them: Key models in chemical education. In J. K. Gilbert & D. F. Treagust (Eds.), *Multiple representations in chemical education*, London: Springer-Verlag, **2009**, pp. 1–8.
10. Cheng, M. M., & Gilbert, J. K. Modelling students' visualisation of chemical reaction. *International Journal of Science Education*, **2017**, 39 (9), 1173–1193.
11. Schwarz, C. V., Passmore, C., & Reiser, B. J. Helping Students Make Sense of the World Using Next Generation Science and Engineering Practices; *National Science Teachers' Association Press*: Arlington, **2016**.
12. Van Der Valk, T., Van Driel, J., H., & De Vos, W. Common Characteristics of Models in Present-day Scientific Practice. *Research in Science Education*, **2007**, 37(4), 469-488.
13. Treagust, D. F., Chittleborough, G. D., & Mamiala, T. L. Students' Understanding of the Descriptive and Predictive Nature of Teaching Models in Organic Chemistry. *Research in Science Education*, **2004**, 34 (1), 1-20.
14. Rouse, W. B. & Morris, N. M. On looking into the black box: Prospects and limits in the search for mental models. *Psychological Bulletin*, **1986**, 100, 349-363.
15. Modell, H. I. How to help students understand physiology? Emphasize General Models. *Advances in Physiology Education*, **2000**, 23 (1), 101-107.
16. Martinand, J. L. Introduction à la modélisation, Actes du séminaire de didactique des disciplines technologiques, **1996**, Cachan Paris.
17. De Vecchi, G. Enseigner l'expérimental en classe : pour une véritable éducation scientifique, Paris : Hachette éducation, **2006**.
18. Justi, R., & Gilbert, J. A cause of a historical science teaching: use of hybrid models. *Science Education*, **1999**, 83, 163–177.
19. Lopes, J. B., & Costa, N. Models and Modeling: Cognitive Tools for Scientific Enquiry. *International Journal of Science Education*, **2007**, 29, 811-851.
20. Coll, R.K. and Taylor, N. Alternative conceptions of chemical bonding held by upper secondary and tertiary students. *Research in Science and Technological Education*, **2001**, 19 (2), 171–191.
21. Gilbert, S.W. Model building and a definition of science. *Journal of Research in Science Teaching*, **1991**, 28, 73–79.

22. Grosslight, L., Unger, C., Jay, E., & Smith, C. Understanding models and their use in science: Conceptions of middle and high school students and experts. *Journal of Research in Science Teaching*, **1991**, 28 (9), 799-822.
23. Hodson, D. Re-thinking old ways: towards a more critical approach to practical work in school science. *Studies in Science Education*, **1993**, 22, 85–142.
24. Justi, R., & Gilbert, J. History and philosophy of science through models: some challenges in the case of the atom. *International Journal of Science Education*, **2000**, 22, 993–1009.
25. Justi, R., & Gilbert, J. Models and modelling in chemical education. *International Journal of Science Education*, **2003**, 25, 1369-138.
26. Van Driel, J. H., & Verloop, N. Teachers' knowledge of models and modelling in science. *International Journal of Science Education*, **1999**, 21 (11), 1141- 1153.
27. Brewe, E. Modeling Theory Applied: Modeling Instruction in Introductory Physics. *American Journal of Physics*, **2008**, 76, 1155–1160.
28. Schwarz, C. V., & White, B. Y. Metamodeling Knowledge: Developing Students' Understanding of Scientific Modeling. *Journal Cognition and Instruction*, **2005**, 23, 165–205.
29. Cheng, M.-F., & Lin, J.-L. Investigating the Relationship between Students' Views of Scientific Models and Their Development of Models. *International Journal of Science Education*, **2015**, 37, 2453–2475.
30. Chittleborough, G., & Treagust, D. F. The Modelling Ability of Non-Major Chemistry Students and Their Understanding of the Sub-Microscopic Level. *Chemistry Education Research and Practice*, **2007**, 8, 274–292.
31. Jayanti, E. Analysis of Needs for Developing Higher Order Thinking Skills Test Instruments in Chemistry Learning Model Course. *Orbital: Jurnal Pendidikan Kim*, **2024**, 8 2.
32. Johnstone, A. H. Why Is Science Difficult to Learn? Things Are Seldom What They Seem. *Journal of Computer Assisted Learning*, **1991**, 7,75–83.
33. Lazenby, K., Stricker, A., Brandriet, A., Rupp, C. A., Mauger-Sonnek, K., & Becker, N. M. (2019). Mapping undergraduate chemistry students' epistemic ideas about models and modeling. *Journal of Research in Science Teaching*, **2019**, 57(5), 794–824.
34. Strike, K. A., & Posner, G. J. A revisionist theory of conceptual change. In Duschl, R. A., and Hamilton, R. J. (Eds.), *Philosophy of Science, Cognitive Psychology, and Educational Theory in Practice*, State University of New York Press, Albany, NY, **1992**, pp. 147–176.
35. Linn, M. C., & Eylon, B. S. *Science learning and instruction: Taking advantage of technology to promote knowledge integration*. New York, NY: Routledge, **2011**.
36. White, R. T., & Gunstone, R. F. Metalearning and conceptual change. *International Journal of Science Education*, **1989**, 11,577-586.
37. Posner, G. J., Strike, K. A., Hewson, P. W., & Gertzog, W. A. Accommodation of a scientific conception: Towards a theory of conceptual change. *Science Education*, **1982**, 66, 211–227.
38. Vygotsky, L.S. *Mind in society: The development of higher psychological processes*. Cambridge, MA: Harvard University Press, **1978**.
39. Amin, T.G., & Levrini, O. (2017). *Converging perspectives on conceptual change: Mapping an emerging paradigm in the learning sciences*. Routledge.
40. Amin, T.G. (2020). Coordinating metaphors in science, learning and instruction. In *How metaphors guide, teach and popularize science*.
41. Maia, P. F., & Justi, R. Learning of Chemical Equilibrium through Modelling-based Teaching. *International Journal of Science Education*, **2009**, 31(5), 603–630.

42. Treagust, D. F., Chittleborough, G., & Mamiala, T. L. Students' Understanding of the Role of Scientific Models in Learning Science. *International Journal of Science Education*, **2002**, 24, 357–368.
43. Espinosa, A. A., Koperová, D., Kuhnová, M., & Křištofiaková, D. Preservice Chemistry Teachers' Conceptual Understanding and Confidence Judgment: Insights from a Three-Tier Chemistry Concept Inventory. *Journal of Chemical Education*, **2024**, 102, 1, 53–65.
44. Akgün, A. The relation between science student teachers' misconceptions about solution, dissolution, diffusion and their attitudes toward science. **2009**, *Egitim ve Bilim*.
45. Salame, I. I., & Nikolic, D. Examining Some of the Challenges Students Face in Learning About Solubility and the Dissolution Process in Chemistry. *International Journal of Environmental and Science Education*, **2021**, 16(2), e2237.
46. Harrer, B. W., Flood, V. J., & Wittmann, M. C. Productive resources in students' ideas about energy: An alternative analysis of incorrect responses to questions about ATP. *CBE—Life Sciences Education*, **2019**, 18(2).
47. Ebenezer, J.V., & Erickson, G.L. (1996). Chemistry students' conceptions of solubility: A phenomenography. *Science Education*.
48. Thorley, N., R. & Stofflett, R., T. Representation of the Conceptual Change Model in Science Teacher Education. *Science Education*, **1996**, 80 (3): 317-339.
49. Zembylas, M. Three Perspectives on Linking the Cognitive and the Emotional in Science Learning: Conceptual Change, Socio-Constructivism And Poststructuralism. *Studies in Science Education*, **2005**, 41: 91-116
50. Saouma, D., Bahous, R., Natout, M. & Nabhani, M. Figures of speech in the physics classroom: a process of conceptual change. *Research in Science & Technological Education*, **2018**, 36 (3), 375–390.
51. Chen, J., Wang, M., & Grotzer, T., A. Using a three-dimensional thinking graph to support inquiry learning. *Journal of Research in Science Teaching*, **2018**, 55:1239–1263.
52. Ryoo, K. & Bedell, K. Supporting linguistically diverse students' science learning with dynamic visualizations through discourse-rich practices. *Journal of Research in Science Teaching*, **2018**, 1–32.
53. Kartini, K.S., Yusa, I.M.M., & Adnyana, I.N.W. Impact of augmented reality on high school students' motivation and understanding of acid-base titration concepts. *Applied Science and Technology Education Journal*, **2024**, 8, 6, 7559-7569.
54. Green, J., & Gee, L. J. Discourse analysis, learning, and social practice: A methodological study. *Review of Research in Education*, **1998**, 51(23), 119-169.
55. Bunce, D. M., Cole, R., S. Tools of chemistry Education Research, Eds; ACS Symposium, **2014**.
56. Sjöström, J., & Talanquer, V. Humanizing Chemistry Education: From Simple Contextualization to Multifaceted Problemization. *Journal of Chemical Education*, **2014**, 91, 1125–1131.
57. Stuckey, M., Hofstein, A., Mamlok-Naaman, R., & Eilks, I. The Meaning of Relevance' in Science Education and Its Implications for the Science Curriculum. *Studies in Science Education*, **2013**, 49, 1–34.
58. Badri, M. A., Al Rashedi, A., Yang, G., Mohaidat, J., & Al Hammadi, A. Technology readiness of school teachers: An empirical study of measurement and segmentation. *Journal of Information Technology Education: Research*, **2014**, 13, 257–275
59. Dio, R. V., Solano, S. S., & Gonzales, I. R. B. Exploring Faculty Profiles and Technology Transfer Initiatives in Higher Education Institutions. *International Journal of Evaluation & Research in Education*, **2024**, 13, 4, 2335-2344.

60. Artyukhov, A., Volk, Iu., Krmelova, V., Krmela, J. Quality Of Education System As A Determinant Of Socio-Economic Development: Assessment Of Technological Level Of Readiness. *SocioEconomic Challenges*, **2021**, 5(4), 172-182.
61. NASA. (2023). Technology Readiness Level (TRL): <https://www.nasa.gov/directorates/somd/space-communications-navigation-program/technology-readiness-levels/> (accessed 15 January 2025).
62. Lam, S., Chiang, J., & Parasuraman, A. The effects of the dimensions of technology readiness on technology acceptance: an empirical analysis. *Journal of International Marketing*, **2008**, 22, 19-39.
63. Rossi, R., & Mustaro, P. N. EXSeQETIC: Expert System to Support the Implementation of eQETIC Model. **2022**, arXiv preprint.
64. Rossi, R., & Mustaro, P. N. eQETIC: A maturity model for online education. *Interdisciplinary Journal of E-Skills and Lifelong Learning*, **2015**, 11, 11–23.
65. Cobos, M. P., Quezada, V. F., Morloy, L. I. Z., Alvarez, P. V., & González, S. P. (2021). *A model based on the Technology Readiness Level (TRL) scale to measure the maturity level of research projects that can become spinoffs in Higher Education Institutions*. Congreso Internacional de Innovación y Tendencias en Ingeniería (CONIITI), Bogotá, Colombia, pp. 1–6.
66. Ardac, D., & Akaygun, S. Effectiveness of multimedia-based instruction that emphasizes molecular representations on students' understanding of chemical change. *Journal of Research in Science Teaching*, **2004**, 41(4), 317–337.
67. Hensiek, S., DeKorver, B. K., Harwood, C. J., Fish, J., O'Shea, K., & Towns, M. Improving and Assessing Student Hands-On Laboratory Skills through Digital Badging. *Journal of Chemical Education*, **2016**, 93(11), 1847–1854.
68. Young-Eun Jeon, J.-Y.; Ji, H.-G.; Hong, H.-G. Development and Evaluation of a Marker Arrangement-Based Mobile Augmented Reality Application for Learning Covalent and Ionic Bonding in the High School Curriculum. *Journal of Chemical Education*, **2024**, 101(3), 1130–1138.
69. Karpudewan, M. Augmented Reality as a Platform to Present Green Sustainable Chemistry to Improve Preservice Teachers' Competency on Technological Pedagogical Content Knowledge. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*, **2024**, 39, 102579.
70. Almasri, F. Simulations to Teach Science Subjects: Connections Among Students' Engagement, Self-Confidence, Satisfaction, and Learning Styles. *Education and Information Technologies*, **2022**, 27, 7161–7181.
71. Frailich, M., Kesner, M., & Hofstein, A. Enhancing Students' Understanding of the Concept of Chemical Bonding by Using Activities Provided on an Interactive Website. *Journal of Research in Science Teaching*, **2009**, 46(3), 289–310.
72. Domingues, L., Rocha, I., Dourado, F., Alves, M., & Ferreira, E. C. Virtual Laboratories in (Bio)Chemical Engineering Education. *Education for Chemical Engineers*, **2010**, 5(2), e22–e27.
73. Johnstone A., H. Chemical education research in Glasgow in perspective, *Chemistry Education Research and Practice*, **2006**, 7, 49-63.
74. Uce, M. Constructing models in teaching of chemical bonds: Ionic bond, covalent bond, double and triple bonds, hydrogen bond and molecular geometry. *Educational Research and Reviews*, **2015**, 10(4):491-500.
75. Drechsler, M. Models in chemistry education - A study of teaching and learning acids and bases in Swedish upper secondary schools. Faculty of the Technology and Science Chemistry, Sweden, **2007**.
76. Easdon, J. *A stay-at-home chemistry activity to illustrate intermolecular forces*. *Journal of Chemical Education*, **2022**, 99,24.
77. Linn, M. C., & Eylon, B.-S. (2011). *Science learning and instruction: Taking advantage of technology to promote knowledge integration*. Routledge/Taylor & Francis Group.

78. Chin, C., & Osborne, J. Students' questions and discursive interaction: Their impact on argumentation during collaborative group discussions in science. *Journal of Research in Science Teaching*, **2010**, 47 (7), 883–908.
79. Evagorou, M., & Osborne, J. Exploring young students' collaborative argumentation within a socioscientific issue. *Journal of Research in Science Teaching*, **2013**, 50 (2), 209–237.
80. Erduran, S., Osborne, J., & Simon, S. TAPping into argumentation: Developments in the application of toulmin. *Science Education*, **2004**, 88 (6), 915–933.
81. Vachliotis, T., Salta, K., Vasiliou, P., & Tzougraki, C. Exploring Novel Tools for Assessing High School Students' Meaningful Understanding of Organic Reactions. *Journal of Chemical Education*, **2011**, 88, 3.
82. Méheut, M., & Psillos, D. Teaching–learning sequences: aims and tools for science education research. *International Journal of Science Education*, **2004**, 26(5), 515–535.
83. Rahmawati, Y., Dianhar, H., & Arifin, F. *Analyzing students' spatial abilities in chemistry learning using 3D virtual representation*. *Education Sciences*, **2021**, 11(4), 185.
84. Justi, R., & van Driel, J. The development of science teachers' knowledge on models and modelling: promoting, characterizing, and understanding the process. *International Journal of Science Education*, **2005**, 27(5), 549–573.
85. Kiernan, N. A., Manches, A., & Seery, M. K. *The role of visuospatial thinking in students' predictions of molecular geometry*. *Chemistry Education Research and Practice*, **2021**, 22, 626–639.
86. Kenneally, C. D., & Bentley, B. A cognitive load approach to molecular geometries: Augmented reality technology and visuospatial abilities in chemistry. *Education Sciences*, **2024**, 14(9), 1036.
87. Sim, J.-H., Daniel, E.-G.-S. Representational competence in chemistry: A comparison between students with different levels of understanding of basic chemical concepts and chemical representations. *Cogent Education*, **2014**, 1, 991180.
88. Kirschner, P. A., Sweller, J., & Clark, R. E. Why minimal guidance during instruction does not work: An analysis of the failure of constructivist, discovery, problem-based, experiential, and inquiry-based teaching. *Educational Psychologist*, **2006**, 41(2), 75–86.
89. Minkley, N., Kärner, T., Jojart, A., & Nobbe, L. Students' mental load, stress, and performance when working with symbolic or symbolic–textual molecular representations. *Journal of Research in Science Teaching*, **2018**, 55, 1162 – 1187.
90. Milenković, D., Segedinac, M., & Hrin, T. Increasing high school students' chemistry performance and reducing cognitive load through an instructional strategy based on the interaction of multiple levels of knowledge representation. *Journal of Chemical Education*, **2014**, 91(9), 1409–1416.
91. Yalçinkaya, E., Taştan-Kırık, Ö., Boz, Y. & Yıldiran, D. Is case-based learning an effective teaching strategy to challenge students' alternative conceptions regarding chemical kinetics? *Research in Science & Technological Education*, **2012**, 30 (2), 151–172.

Conclusions et perspectives

Notre travail s'est centré sur une analyse didactique du rôle de la modélisation schématique dans l'enseignement et l'apprentissage de la chimie dans l'enseignement secondaire supérieur. Les schémas occupent en effet une place centrale dans l'enseignement de la chimie, en particulier pour visualiser les liens entre les observations expérimentales et l'interprétation au niveau submicroscopique [1-4]. Ces schémas présentent de nombreuses caractéristiques communes avec les modèles scientifiques considérés de manière générale [5-6] et l'apprentissage de la schématisation scientifique peut donc être considéré comme une contribution active à la prise de conscience par les élèves du rôle central que joue la modélisation dans la construction des savoirs scientifiques.

Dans les deux premiers chapitres (introduction générale et chapitre 1), qui contextualisent notre projet de recherche, nous présentons d'abord les lignes directrices de notre travail (introduction générale) puis, dans le chapitre 1, une réflexion sur le concept de modèle scientifique et une analyse de son implication dans l'enseignement, en abordant la contribution au changement conceptuel d'une approche basée sur la modélisation, ainsi que l'apport du multimédia. La démarche de recherche basée sur l'ingénierie didactique est également explicitée.

Le chapitre 2 examine la modélisation schématique dans l'enseignement secondaire sous deux angles.

- (i) Quelles sont les qualités et les lacunes des modèles que découvrent les élèves dans les manuels qui sont mis à leur disposition, modèles qui acquerront pour eux, par la force des choses, le statut de modèles de référence ? Nous avons pour cela introduit des critères d'analyse et focalisé notre attention sur des exemples concernant le modèle atomique et la structure électronique.
- (ii) Quel est le niveau de compétences d'élèves de l'enseignement secondaire supérieur quant à, d'une part, l'interprétation de modèles schématiques de référence et, d'autre part, la conception autonome de tels modèles ? Pour répondre à cette question, nous avons proposé des activités liées à la modélisation schématisatique à 216 élèves de 4^e, 5^e et 6^e années, issus de

l'enseignement secondaire général d'écoles belges francophones et germanophones. Nous avons évalué leur capacité à analyser un schéma graphique pour en extraire l'information scientifique pertinente, leur réception psycho-émotionnelle des modèles schématiques dans un contexte scientifique, et, enfin, leurs compétences pour la conception autonome d'un modèle schématique d'un phénomène scientifique. Nous avons cherché à établir si une corrélation apparaît entre les capacités à interpréter un schéma graphique de référence et à concevoir un tel schéma.

Concernant la première question, notre étude nous a conduit aux conclusions suivantes. L'analyse des schémas extraits de manuels scolaires, portant notamment sur les modèles atomiques (Dalton, Rutherford, Bohr) et la structure électronique, révèle une forte disparité dans la qualité des représentations proposées aux élèves. À partir d'une grille d'analyse construite autour de critères explicites –pertinence analogique, absence d'obstacles substantialistes, aspect fonctionnel, capacité prédictive, liens avec des modèles reconnus, valeur esthétique– nous avons mis en évidence à la fois des atouts et des lacunes notables.

Certains manuels présentent des schémas qui souffrent de simplifications abusives, d'un manque de rigueur symbolique, voire de confusions entre modèles successifs. Il arrive, par exemple, que des modèles historiquement distincts soient juxtaposés sans contextualisation, ce qui peut induire des conceptions erronées ou une compréhension superficielle. L'usage de codes couleur sans légende, l'absence de mise en relation avec les données expérimentales ou la présentation figée et statique des entités chimiques réduisent considérablement la portée explicative et pédagogique de ces schémas. Ces lacunes contribuent à ce que les élèves considèrent ces représentations comme des vérités définitives, sans remise en question possible, et sans percevoir leur statut de modèles scientifiques construits, provisoires et perfectibles. Ainsi, les schémas jouent souvent un rôle décoratif ou illustratif, plutôt qu'un rôle heuristique dans le raisonnement scientifique.

En ce qui concerne la seconde question, notre étude a fait l'objet d'une publication [7] dont nous résumons maintenant les conclusions. Une évolution

positive des compétences investiguées, particulièrement à la transition entre la 5^e et la 6^e année, a pu être observée. Si les élèves de 4^e et même de 5^e année présentent encore majoritairement des modèles limités au niveau macroscopique, la tendance s'inverse chez leurs condisciples de 6^e année qui proposent plutôt des modèles décrivant la situation submicroscopique et cela même à un niveau relativement avancé. Il ressort également de cette analyse que le niveau de compétences en conception autonome de modèles est corrélé à la capacité à analyser les informations d'un schéma de référence. Néanmoins, la proportion des élèves prenant en compte les interactions intermoléculaires et le mouvement thermique des particules dans leurs modèles reste faible. Ces constats soulignent la nécessité de revisiter plusieurs fois une situation spécifique au cours d'un parcours de formation en chimie pour développer progressivement des capacités cognitives à interpréter des représentations chimiques de cette même situation.

La seconde partie de notre travail est décrite dans les chapitres 3 et 4 qui présentent des ingénieries didactiques consacrées respectivement à la cinétique chimique et à la thermochimie, en proposant des activités progressives de modélisation schématique. Une première séquence concernant la cinétique chimique faisait découvrir expérimentalement à des élèves de 5^e année secondaire (N = 217) les facteurs influençant la vitesse de réaction. A la suite de chaque expérience, les élèves devaient compléter des schémas en vue de décrire et d'interpréter leurs résultats au niveau moléculaire et ionique. La démarche veillait donc à mettre en relation les niveaux macroscopiques de l'expérience visible et submicroscopique des particules en introduisant le langage symbolique approprié. Une attention spéciale était en effet accordée à la présence de légendes explicitant les symboles utilisés pour décrire les particules submicroscopiques.

L'analyse des différentes productions schématiques des élèves a révélé leur capacité à expliquer les quatre facteurs (concentration, surface de contact, température et catalyseur) influençant la vitesse de la réaction chimique.

Une progression des compétences en modélisation a été observée, en particulier dans la construction de modèles schématiques submicroscopiques appliqués à la cinétique chimique. Les résultats des tests en ligne indiquent une amélioration des

scores entre les différentes thématiques abordées : diffusion ($72 \pm 18 \%$), effet de la concentration ($63 \pm 17 \%$) et effet de la température ($77 \pm 22 \%$) avec un taux de participation avoisinant les 80 %. Malgré ces progrès, certaines difficultés persistent, notamment dans la représentation des aspects dynamiques et quantitatifs de la réaction chimique. L'influence du catalyseur, en particulier, reste moins bien intégrée que les autres facteurs. En analysant plus finement les critères liés à la modélisation quantitative (comme les vitesses de diffusion ou les proportions ioniques), il apparaît que moins de la moitié des élèves (entre 40 et 42 %) maîtrisent correctement ces aspects, même après les séquences d'apprentissage. Ces résultats traduisent une compréhension encore partielle de certains concepts fondamentaux comme la dissociation ionique, la proportionnalité des quantités de matière ou la taille des particules, essentiels à une modélisation scientifiquement rigoureuse.

L'intégration d'un site interactif a renforcé la connexion entre les observations macroscopiques et les représentations submicroscopiques, facilitant la visualisation des mécanismes en jeu. La séquence a ainsi permis aux élèves de dépasser une vision statique ou symbolique des modèles, pour construire des représentations plus dynamiques et argumentées, soutenues par des simulations numériques et des discussions en petits groupes. En somme, cette approche constructiviste, centrée sur l'élève, a non seulement favorisé l'engagement cognitif, mais aussi soutenu un changement conceptuel significatif, bien qu'incomplet, en lien avec la complexité intrinsèque des phénomènes abordés.

Cette séquence sur les facteurs cinétiques a été complétée par une seconde séquence consacrée au modèle de l'état de transition. Partant d'un mécanisme paradigmatique en chimie organique, la substitution nucléophile d'ordre 2, S_N2 , les élèves ont été invités par groupes de 3 ou 4 à modéliser à l'aide de modèles moléculaires artisanaux (sphères en polystyrène et tiges en bois, sans indication d'angles de valence spécifiques) les géométries des réactifs, des produits et de l'état intermédiaire permettant de passer des réactifs aux produits. Cette approche avait pour ambition de faire construire par eux-mêmes aux élèves le concept d'état de transition et de leur faire discuter la raison pour laquelle cet état est d'énergie

supérieure aux réactifs et aux produits, introduisant ainsi le concept d'énergie d'activation, central en cinétique chimique. Des enregistrements vidéo des interactions au sein des groupes ainsi qu'avec l'encadrant ont été réalisés.

L'analyse des productions écrites et des discussions montre une intégration progressive des concepts-clés tels que l'état de transition ou la dissociation ionique, bien que des difficultés persistent dans la formulation des justifications. Par exemple, 83 % des élèves ont correctement classé les états sur le diagramme énergétique, mais seuls 59 % ont mobilisé les critères théoriques attendus.

Cette approche de modélisation autonome a favorisé une meilleure appropriation des notions de géométrie moléculaire et d'énergie d'activation. Toutefois, elle souligne également le besoin de renforcer les compétences argumentatives et langagières des élèves, afin qu'ils puissent traduire leurs raisonnements scientifiques en formulations précises, rigoureuses et communicables.

L'ingénierie portant sur la thermochimie est présentée dans le chapitre 4. Elle a été testée sur 111 élèves de 5^e année secondaire. Les concepts fondamentaux de thermochimie (en particulier la différence entre chaleur et température et la notion de capacité calorifique qui les relie) sont abordés à partir d'expériences provoquant un conflit cognitif. Comme pour les facteurs cinétiques, chaque expérience est accompagnée d'un exercice de modélisation schématique au niveau submicroscopique. Des activités interactives ont été organisées en parallèle pour renforcer la capacité des étudiants à comprendre les phénomènes observés en classe, leur offrant davantage de temps pour assimiler leurs connaissances et comprendre les caractéristiques de ces phénomènes. Ces activités en ligne permettent aussi une évaluation de la progression conceptuelle des élèves.

Du point de vue quantitatif, les résultats des pré- et post-tests analysés par le test de Kruskal-Wallis ($\alpha = 0,05$) montrent une amélioration significative pour la majorité des concepts abordés. Les tests en ligne, réalisés volontairement par 85 % des élèves, confirment ces progrès : la majorité des élèves ont fourni des réponses

correctes, bien que les scores aient été plus faibles pour les concepts plus abstraits comme la capacité calorifique ou l'enthalpie.

Ces résultats montrent que la démarche proposée favorise non seulement l'appropriation de concepts complexes, mais permet aussi aux élèves de mieux relier théorie et expérimentation. Elle contribue également à développer des compétences transversales telles que l'argumentation, la modélisation et l'autoévaluation.

Pris ensemble, les différentes études présentées dans cette thèse ne doivent pas être lues comme une juxtaposition de travaux indépendants, mais comme des éclairages complémentaires d'une même problématique. L'analyse des manuels met en évidence les contraintes liées aux modèles de référence proposés aux élèves. L'étude des compétences révèle comment ces modèles sont interprétés et reconstruits. Les ingénieries didactiques explorent ensuite les conditions susceptibles de favoriser l'évolution de ces reconstructions. Enfin, l'échelle TRL prolonge cette réflexion en proposant un outil d'observation structuré. C'est dans leur articulation que ces études prennent pleinement sens.

Dans le chapitre 1, nous avons discuté la distinction entre validation externe, propre aux dispositifs quasi-expérimentaux, et validation interne, plus caractéristique des recherches didactiques fondées sur l'ingénierie. Les travaux présentés dans cette thèse s'inscrivent principalement dans cette seconde perspective. Ils ne visent pas à établir des causalités généralisables au sens strict, mais à analyser des processus d'apprentissage à travers une confrontation entre analyses a priori et a posteriori, ainsi que par le recours à des sources multiples de données.

Dans ce cadre, la question de l'évaluation des compétences en modélisation ne pouvait être réduite à une mesure ponctuelle des performances des élèves. Elle impliquait un outil susceptible de rendre compte de la structuration progressive des raisonnements et des trajectoires de construction des modèles. C'est dans cette perspective qu'a été élaborée l'échelle TRL (Transmission du Raisonnement Logique).

Composée de neuf niveaux, cette échelle distingue différentes étapes dans le développement des compétences de modélisation. Les premiers niveaux traduisent une démarche encore située, centrée sur la construction de modèles initiaux et leur confrontation à des contextes familiers. Les niveaux intermédiaires marquent une phase de transition conceptuelle, tandis que les niveaux supérieurs reflètent une capacité plus aboutie à mobiliser, combiner et transférer des modèles scientifiques. Conçue à la fois comme outil d'auto-évaluation pour les élèves et comme instrument de suivi pédagogique, la TRL vise à structurer l'observation des cheminements de raisonnement plutôt qu'à établir une classification normative.

L'étude exploratoire menée auprès de 26 élèves de 4^e secondaire, dans le cadre d'une séance composée de trois tâches de modélisation successives et d'activités d'auto-évaluation guidées, a permis de tester ce dispositif en conditions réelles. Les résultats obtenus sont encourageants : la majorité des élèves progresse jusqu'aux niveaux TRL 6 ou 7, témoignant d'une réelle capacité à transférer leurs acquis à des situations inédites et formulant des auto-évaluations globalement cohérentes. Néanmoins, environ 30 % d'entre eux restent cantonnés aux niveaux TRL 2 ou 3, souvent en surestimant leurs compétences, ce qui met en lumière la nécessité de renforcer l'accompagnement des profils les plus fragiles. Les niveaux 4 et 5 apparaissent comme un seuil critique, où l'élève doit dépasser une simple compréhension déclarative pour engager une application raisonnée et transférable des modèles scientifiques.

L'analyse qualitative des interactions a montré que, si les élèves mobilisent volontiers données et explications, leur engagement dans une argumentation véritablement structurée reste limité, en particulier en ce qui concerne l'usage de connecteurs logiques, de reformulations ou de réfutations. Ce constat suggère que les compétences argumentatives ne sont que peu exercées dans leur parcours scolaire antérieur, et que l'approche TRL pourrait constituer un levier pertinent pour combler cette lacune. Enfin, les questionnaires indiquent que plus de 70 % des élèves perçoivent positivement cette démarche, soulignant un impact favorable sur leur compréhension, leur motivation et leur autonomie.

Ce travail montre que la modélisation n'est pas seulement un outil pour représenter la chimie, mais un véritable moteur d'apprentissage. De l'analyse des manuels à l'expérimentation en classe, jusqu'à l'élaboration de l'échelle TRL, il apparaît que progresser en sciences, c'est apprendre à construire, tester et affiner des modèles. La TRL ouvre ainsi une voie prometteuse pour rendre visibles ces cheminements, soutenir l'auto-évaluation et accompagner le développement d'un raisonnement scientifique plus autonome et transférable.

La majorité des études ont été menées dans des classes de la Fédération Wallonie-Bruxelles et de la Communauté germanophone. Si ce choix s'explique en partie par des facilités d'accès institutionnelles, il n'est pas neutre. Les programmes, les cultures pédagogiques et les cadres curriculaires propres à ces contextes ont pu influencer les dynamiques observées. Bien que certains résultats semblent transférables à d'autres environnements éducatifs, leur généralisation nécessite des investigations complémentaires dans des systèmes scolaires différents.

Perspectives pour de futures recherches

Les perspectives ouvertes par ce travail peuvent être structurées autour de trois axes complémentaires.

Un premier axe concerne l'inscription des dispositifs de modélisation dans une perspective longitudinale. Les études présentées ici rendent compte d'évolutions observées à court ou moyen terme. Il serait particulièrement pertinent de suivre un même groupe d'élèves sur plusieurs années, de la 4^e à la 6^e année secondaire, afin d'analyser plus finement la stabilisation des compétences en modélisation schématique, en argumentation et en autoévaluation. Une telle approche permettrait de mieux distinguer les effets ponctuels liés à un dispositif spécifique des transformations plus durables des structures de raisonnement.

Un deuxième axe porte sur l'élargissement des contextes et des publics étudiés. Les recherches ont été menées principalement en Fédération Wallonie-Bruxelles et en Communauté germanophone. Il serait intéressant d'étendre ces investigations à d'autres systèmes éducatifs, ainsi qu'à des filières générales,

techniques et professionnelles plus diversifiées. Cette extension permettrait d'évaluer la robustesse des dispositifs proposés et d'examiner dans quelle mesure les résultats observés dépendent des cadres curriculaires et des cultures pédagogiques locales.

Un troisième axe concerne l'approfondissement des dimensions argumentatives et interactionnelles de la modélisation. Les analyses qualitatives ont montré que les élèves mobilisent des données et des explications, mais rencontrent encore des difficultés dans la structuration explicite de leurs raisonnements. Le recours à des outils tels que le schéma argumentatif de Toulmin, à des entretiens semi-directifs ou à un codage plus systématique des interactions verbales pourrait permettre de mieux comprendre les mécanismes par lesquels les modèles sont construits, négociés et stabilisés au sein des groupes.

Enfin, le développement et l'affinement de l'échelle TRL constituent une perspective de recherche en soi. L'élaboration de banques d'exercices calibrées pour chaque niveau, accompagnées de critères d'évaluation explicites, permettrait de renforcer l'objectivation des progrès des élèves et d'accompagner plus efficacement leur autonomie dans l'autoévaluation. Des études complémentaires seraient nécessaires pour analyser la validité, la sensibilité et la transférabilité de cet outil dans d'autres domaines scientifiques.

Ces perspectives s'inscrivent dans une ambition plus large : consolider la place de la modélisation dans l'enseignement des sciences, non comme un simple outil de restitution, mais comme un levier structurant du développement d'une compréhension approfondie, d'un raisonnement argumenté et d'une capacité de transfert durable.

Références

- [1] Johnstone, A. H. J. Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem Comput. Assist. Learn. 1991, 7, 75–83.
- [2] Kapon, S. In Converging Perspectives on Conceptual Change. Mapping an Emerging Paradigm in the Learning Sciences; Amin, T.G., Levrini, O. Eds.; Routledge: London and New York, 2018; pp. 198-205.
- [2] Johnstone, A. H. J. Chemistry Teaching - Science or Alchemy ,Chem. Educ. 1997, 74, 262–268.
- [3] Johnstone, A. H. Chemical education research in Glasgow in perspective, Chem. Educ. Res. Pract. 2006, 7, 49–63.
- [4] Sim, J.-H., & Daniel, E.-G.-S. Representational competence in chemistry: A comparison between students with different levels of understanding of basic chemical concepts and chemical representations, Cogent Education, 2014, 1, 991180.
- [5] Walliser, B. Systèmes et modèles, Seuil, Paris, 1977.
- [6] Karous, H., Nihant, B. & Leyh, B. (2022). Conceptual change in chemistry schematic modelling: a cross-sectional study of 10th–12th-grade Belgian student. *Can. J. Chem.*, 100, 8, 633 – 648.

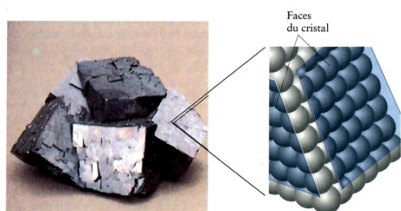
Annexes : Supplementary material

Conceptual change in chemistry schematic modelling: a cross-sectional study of 10th -12th grade Belgian students

In this situation of spontaneous productions, the emphasis is on cognitive and metacognitive processes. These dimensions dominate most theories of science education. The student is immersed in an interdependent atmosphere between thought and emotional experiences.

Supplementary 1. Questionnaire submitted to the students

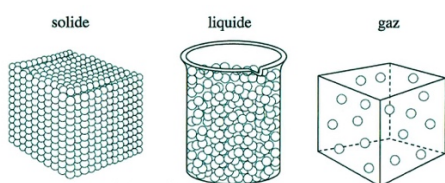
Part A : Abilities to interpret the content of a schematic model



Scheme n°1

From this schematic drawing I can conclude that:

- the transition between the visible level and the submicroscopic level can be represented schematically.
- all metals display the same structure at the atomic scale.
- the organization of atoms at the submicroscopic scale is similar to the structure at the macroscopic scale.



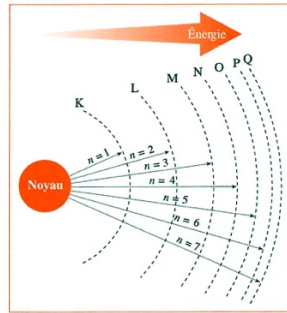
Scheme n°2

From the information contained in these three representations of solid, liquid and gaseous water at the same scale, I can conclude that:

- a transition between two matter states leaves the quantity of matter unaffected.
- ice has a higher density than liquid water.
- the density of water in the gaseous state is smaller than in the solid and liquid states.

On the basis of this representation, I can conclude that:

- the electrons move in regular circular motion around the nucleus.
- the electrons are distributed in

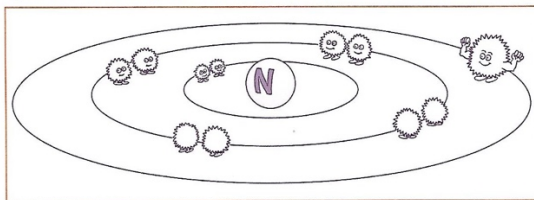


Scheme n°3

levels of increasing energy with increasing distance from the nucleus.

- the size of a given atom is finite.

Figure 2.3. Représentation imagée des niveaux d'énergie dans lesquels peuvent se trouver les électrons

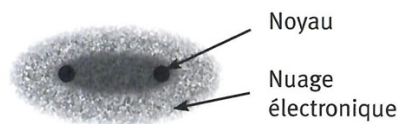


2. Ce dessin illustre 3 niveaux d'énergie. Comment qualifierais-tu les électrons proches du noyau, et ceux qui en sont plus éloignés ?

Scheme n°4

From this representation, I can deduce that:

- the electrons are moving particles (represented by a smiley) and are therefore alive.
- the atomic structure is analogous to a planetary solar system.
- the farther away the electrons are from the nucleus, the larger the size of the smileys, which corresponds to an increasing energy.



Ce dessin représente le nuage électronique de la molécule de dichlore.

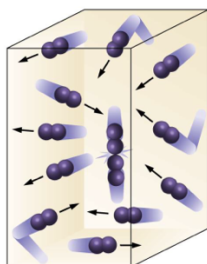
Scheme n°5

The scheme shows me that:

- the electrons are distributed over space and cannot be followed individually.
- there is an increase in electron density between the nuclei, which may explain the nature of the chemical bonding in the molecule.
- there is a sharp separation between the densest zone where the electrons have the largest probability to be and the least dense zone.

This scheme tells me that:

- there is no movement of the molecules in an ideal gas.



- no interaction exists between the particles of an ideal gas.
- the motions of the molecules of a gas take place within the whole volume of the gas container.

Scheme n°6

Scheme n°1 : Matthys, N. & Suys, B. (2004), Sciences 3^e. Biologie, chimie, physique, De Boeck (Bruxelles), page 52 from Chimie « molécule, matière, métamorphose », Atkins, page 352 fig.10.16 (ISBN 2-8041-3339-7)

Scheme n°2 : Pirson, P. et al. (2002), Chimie 3/4. Sciences 1^{er} et 2^e niveaux, De Boeck (Bruxelles), page 172 (ISBN 2-8041-4078-4)

Scheme n°3 : Pirson, P. et al. (2002), Chimie 3/4. Sciences 1^{er} et 2^e niveaux, De Boeck (Bruxelles), page 214 (ISBN 2-8041-4078-4)

Scheme n°4 : Delsate, P. et al. (2006), Sciences 4^e. Biologie, Chimie, Physique, De Boeck Bruxelles), page 53 (ISBN 2-8041-4838-6)

Scheme n°5 : Querton, I. et Loriau-Vandenbroeck, B. (2012), Chimie 4 (1 période chimie/semaine), Van In (Louvain-la Neuve), page 94 (ISBN 978-90-306-6486-4)

Scheme n°6 : Hill, J.W. & Petrucci R.H.(1999), General Chemistry An integrated approach, Prentice Hall (Upper Saddle River), page 179 (ISBN 0-13-918673-5)

Part B. Student perception of schematic graphical models

Items	Strongly disagree	Disagree	Agree	Strongly disagree
1. The content of an image must be supplemented by other information (other models, explanations, ...) to better understand reality.				
2. A picture helps me better than a long speech.				
3. A scientific scheme must be beautiful to be efficient.				

Part C. Autonomous schematic modelling task

Choose one of the three phenomena proposed below, then imagine and draw a schematic representation (which may possibly contain different subparts) describing and explaining the phenomenon:

- Vaporization of water
- Dissolution of solid sodium chloride (NaCl) in water
- Electric current flow through a piece of metal (iron for example)

Supplementary 2. Assessment criteria for Part C of the questionnaire

Level of representation	Level 1	Level 2	Level 3
Water vaporization	1. A simple symbol with legend 2. Separation of two phases	3. Difference of density between the two phases (suggested by the intermolecular distances) 4. Vaporization phenomenon at the interface	5. Interactions between molecules in the liquid 6. Symbolism for molecular movements
Dissolution of NaCl in water	1. Solid with particle structure and dissociated particles in water 2. Legend of symbols	3. Solid with ionic (cations and anions) structure and dissociated cations and anions in water 4. Reaction at the interface	5. Role of water molecules (no orientation required) 6. Solvated ions with correct orientation of the water molecules
Electric current flow through a piece of metal	1. Applied voltage and correct connections of the closed circuit 2. Correct direction of electron flow	3. Metal ionic cores and electrons symbolized differently 4. Legend of symbols	5. Random displacement of electrons without the application of a potential difference 6. No net motion of cations during electron flow with applied voltage.

Learning Chemical Kinetics at Secondary School Level by Developing Autonomous Modeling Skills. Part I. Influence of Kinetic Parameters

Hamad Karous^{a*}, Brigitte Nihant^{a**} and Bernard Leyh^{a***}

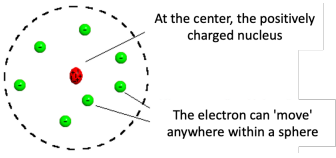
^a *Department of Chemistry, University of Liège and DIDACTIfen Research Unit, Allée du Six Août 11, 4000 Liège, Belgium*

A. Supplementary material S1

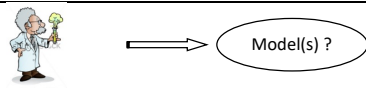
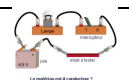
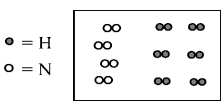
I. What are the words that come to mind when you hear the word "model"?

.....

II. In the table below, list some examples of models that you have had the opportunity to use during your years of study, filling in all four columns each time.

Example of a model	What is the role of this model?	What is the purpose of its use?	Form: mathematical or schematic? (Draw if it is schematic).	How has this helped to better understand an observed phenomenon?
Rutherford's atom model	Represent the composition of matter at the sub-atomic level.	Interpret the results of an experiment.	Atome scheme : 	Explain in the experiment conducted by Rutherford's team why certain alpha particles were reflected

III. For the following questions, circle the answers that you deem correct for each of the following questions:

1. An experimental observation can be explained by: a) a single model, with any other model being simply incorrect. b) multiple models that exist in parallel. c) different models that experience both successes and failures.	
2. When a new model is proposed, scientists must decide whether to accept it or not. This decision is: a) based on a set of facts that support this model. b) influenced by their personal feelings and/or motivations.	
3. To predict a chemical phenomenon: a) mathematical models are used. b) experiments must be conducted. c) nothing can be predicted.	
4. Modelling a chemical phenomenon (for example: the conductivity of an electrolyte solution): a) is constructing a model that can explain observations. b) is navigating between the macroscopic and atomic worlds. c) is creating a digital visualization using a computer.	
5. A model is: a) something one desires to imitate. b) a visualization of a phenomenon. c) a way to support creativity and imagination. d) a tool to understand and/or explain an observed phenomenon.	
6. Nitrogen gas and hydrogen gas react to form gaseous ammonia, according to the following reaction: $N_2 + 3 H_2 \rightarrow 2 NH_3$. Based on the diagram below showing the mixture of molecules before the reaction, which diagram (A, B, C, or D) illustrates a possible final mixture of the reaction?	

B. Supplementary material S2

Student modeling task for Students

• **Modeling task 1**

Equipment and products

- Glass tube (50-70 cm long, 5 cm in diameter) 2 corks of a size appropriate to the diameter of the tube - Cotton buds - Roll of universal pH paper	- Concentrated aqueous hydrochloric acid solution (HCl) - Concentrated aqueous ammonia solution (NH₃)
--	---

Realization

1. Attach pH paper along the entire length of the glass tube.
2. Insert 3 cotton buds into each cork.
3. Simultaneously dip the "cotton-tipped" parts of each cork into the HCl and NH₃ solutions respectively, then simultaneously insert them into each of the tube openings.



Questioning

Explain how the product in the gas phase was formed from the reaction and write the equation for the reaction. Use the following appendix to model the phenomenon that leads to this reaction at the submicroscopic scale. Draw a diagram that integrates a representation of molecules (circles, squares, etc.) and their motions

Exp.	Legends	Modelling
1		

Modeling task 2

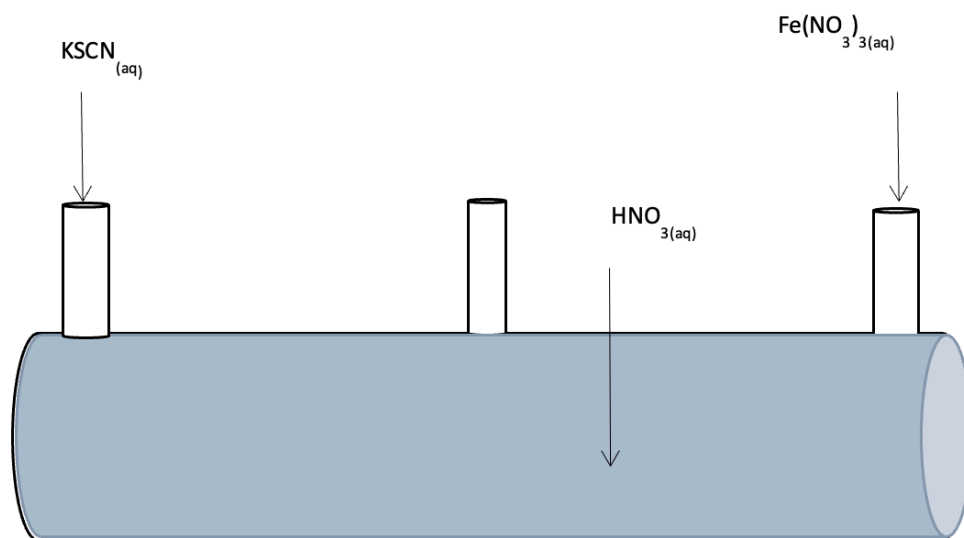
Equipment and products

- Three glass tubes (see figure below experiment 2) 2 stoppers, 2 pipettes or 2 syringes	Solution of iron nitrate ($c(\text{Fe}(\text{NO}_3)_3) = 1 \text{ mol / L}$), solution of potassium thiocyanate ($c(\text{KSCN}) = 1 \text{ mol / L}$), solution of nitric acid ($c(\text{HNO}_3) = 0.1 \text{ mol / L}$)
--	--

Realization

- In the tube (see picture below) filled with a 0.1M solution of nitric acid (de Berg, Maeder, & Clifford, 2016) at room temperature, inject 1 mL of $\text{KSCN}_{(\text{aq})}$ on the one side and 1 mL of $\text{Fe}(\text{NO}_3)_{3(\text{aq})}$ on the other side.
- Observe the phenomenon that is results.
- Do the experiment again with the second tube while checking the time that it takes for the phenomenon to begin.

- d. In a tube filled with a 0.1M solution of nitric acid at 60 °C, inject 1 mL of $\text{KSCN}_{(\text{aq})}$ on the one side and 1 mL of $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3_{(\text{aq})}$ on the other side.
- e. Check the time that it takes for the phenomenon to begin.

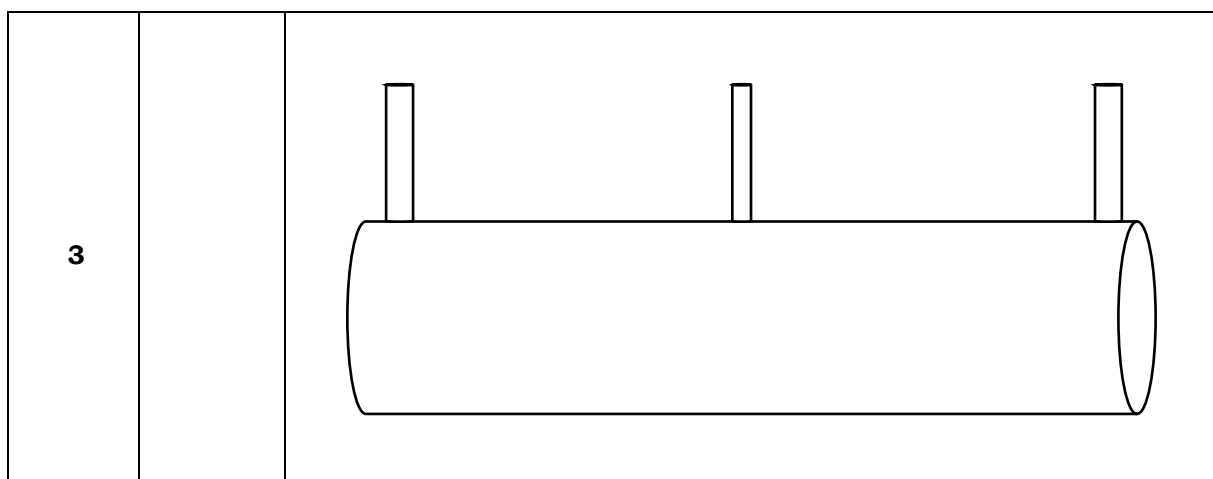


Questioning

Explain how the product in an aqueous solution was formed at two different temperatures from the reaction and write the equation for the reaction. Use the following appendix to model the phenomenon that leads to this reaction at the submicroscopic scale. Draw a diagram that integrates a representation of molecules (circles, squares, etc.) and their motions.

Compare the results of both experiments (at room temperature and at 60 °C) and suggest an interpretation.

Exp.	Legends	Modelling
2		



C. Supplementary material S3

To quantitatively study the evolution of a reaction system, we monitor, over time, the variation in the amount of a disappearing reactant or a formed product. Let's consider the reaction between magnesium and hydrochloric acid (HCl) (50 mL, $c(\text{HCl}) = 0.1$ mol/L) at 20°C and under a pressure of 1 atm (see diagram below).

Reaction:

Ionic Equation:

Molecular Equation:



In practice: Add 1.5 cm ($m=0.03$ g) of magnesium ribbon (previously cleaned) to 50 mL of HCl ($c=0.1$ mol/L) and measure the volume of hydrogen formed over time by the displacement of water in the graduated cylinder. The measurement results are presented in the following table: the quantities of substance (mol) of H_2 produced and those of HCl remaining are derived from the volumes of H_2 evolved.

t (in s)	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120	130	140	150	170	190	210	220
V(H ₂) in mL	0	10	18	24	30	34	38	41	44	47	49	51	53	55	56	57	58	59	60	60
n(H ₂) in 10 ⁻³ mol	0	0,42	0,75	1,00	1,25	1,42	1,58	1,71	1,83	1,96	2,04	2,13	2,21	2,29	2,33	2,37	2,42	2,45	2,50	2,50
n(HCl) in 10 ⁻³ mol	5,0	4,16	3,50	3,04	2,50	2,16	1,80	1,58	1,30	1,08	0,92	0,74	0,58	0,42	0,34	0,26	0,16	0,1	0	0
c(HCl) in 10 ⁻³ mol/L	100	82	70	61	50	43	36	30	26	21	19	15	11	9,5	7,0	5,2	4,0	2,0	0	0

.....

.....

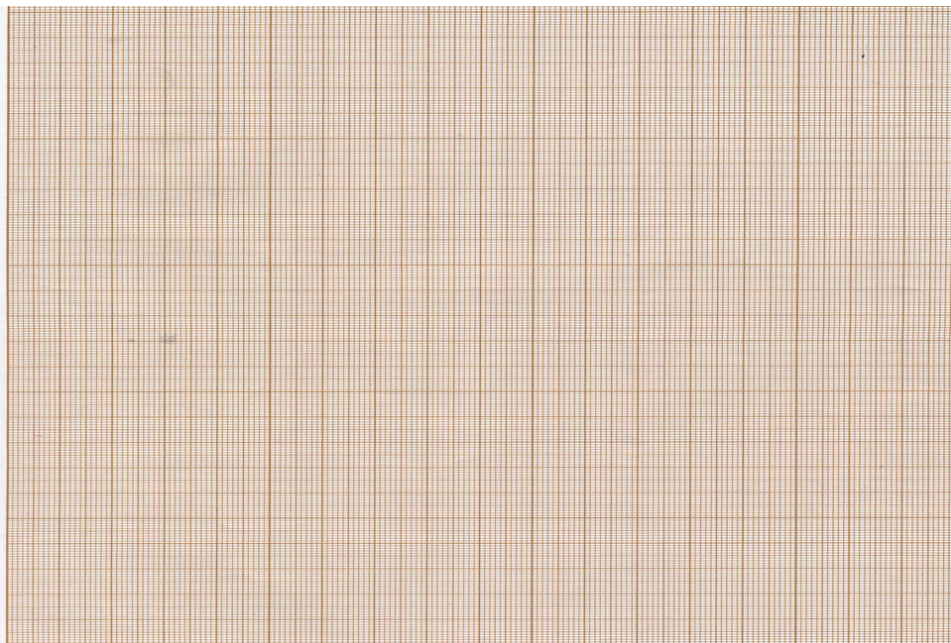
.....

.....

.....

.....

- Complete the graph of the variation of $n(\text{H}_2)$ and $n(\text{HCl})$ as a function of time.



What can be inferred from these two graphs?

.....

.....

.....

Now, let's calculate the variation in the number of moles of H₂ and HCl for different time intervals and compute the corresponding ratios $\frac{\Delta n(\text{H}_2)}{\Delta t}$ and $\frac{\Delta n(\text{HCl})}{\Delta t}$.

t₁(s)	t₂(s)	Δt (=t₂ -t₁)(s)	Δn(H₂) (mol)	$\frac{\Delta n(\text{H}_2)}{\Delta t}$ (mol.s⁻¹)	Δn(HCl) (mol)	$\frac{\Delta n(\text{HCl})}{\Delta t}$ (mol.s⁻¹)
0	20					
20	40					
40	60					
60	80					
80	100					
100	120					
120	140					
140	150					
150	170					
170	190					
190	210					
210	220					

1. What can be inferred from the calculated values of quotient $\frac{\Delta n(\text{H}_2)}{\Delta t}$ and quotient $\frac{\Delta n(\text{HCl})}{\Delta t}$?

.....

.....

2. What do these two quotients correspond to?

.....

.....

3. How to interpret mathematically this quotient in relation to the curves represented in the graph??

.....

.....

4. Compare the values of the two quotients $\frac{\Delta n(\text{H}_2)}{\Delta t}$ and $\frac{\Delta n(\text{HCl})}{\Delta t}$ for the same time intervals.
What can be concluded?

.....
.....

b) Collective Conclusions: Average rate and Instantaneous rate

➤ Definition of Average Rate ($\bar{v}$)

The average rate is defined as the rate of disappearance of a reactant or appearance of a product over a given time interval.

.....
.....
.....
.....

➤ Definition of Instantaneous Rate (v) at Time t :

The instantaneous rate, denoted as v , is defined at a specific moment, t , during the disappearance of a reactant or appearance of product.

.....
.....
.....
.....

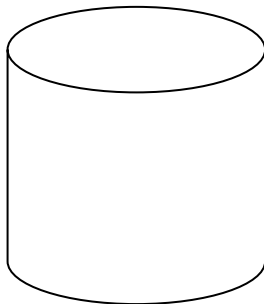
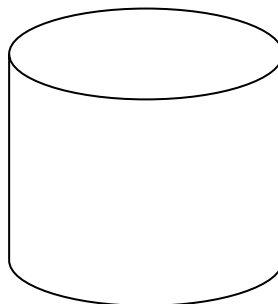
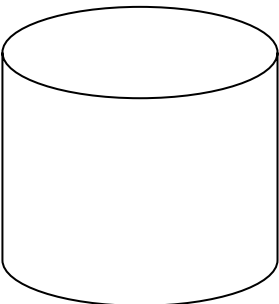
D. Supplementary material S4

• Modeling task 3

- In a beaker, add 15 mL of 0.5 mol / L HCl solution.
- Place a piece of pickled magnesium (1.5 cm = 0.03g) into the solution and start the stopwatch.
- Note the time required to observe the complete disappearance of magnesium metal.
- Repeat the same operation but using this time a solution of HCl ($c(\text{HCl}) = 1 \text{ mol / L}$) and then HCl ($c(\text{HCl}) = 3 \text{ mol / L}$).
- Compare the measured times for the three manipulations.

Last Name:

First Name :

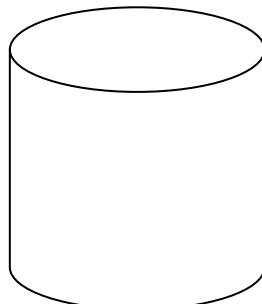
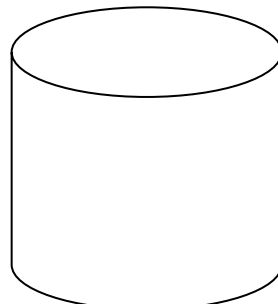
Legends			
Modelling			

• **Modeling task 4**

- In a beaker, pour 15 mL of a solution of HCl ($c(\text{HCl}) = 0.5 \text{ mol / L}$).
- Add 0.03g of magnesium powder to the solution and start the stopwatch.
- Note the time required to observe the complete disappearance of magnesium metal.
- Repeat the same operation but using this time a solution of HCl ($c(\text{HCl}) = 1 \text{ mol / L}$) and then HCl ($c(\text{HCl}) = 3 \text{ mol / L}$).
- Compare the measured times for the three manipulations.

Last Name:

First Name :

Legends		
Modelling		

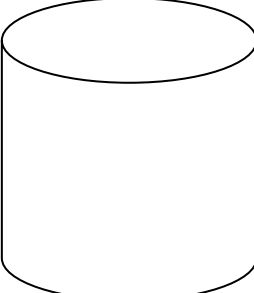
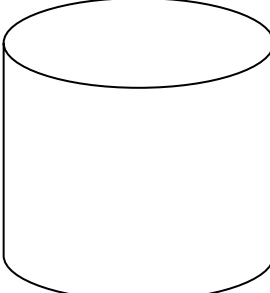
• **Modeling task 5**

- In a beaker, pour 15 mL of a solution of HCl ($c(\text{HCl}) = 1 \text{ mol / L}$).
- Note the temperature of the solution
- In a second beaker, pour 15 mL of a solution of HCl ($c(\text{HCl}) = 1 \text{ mol / L}$).
- Heat the second solution to 60°C .
- Place a piece of 1.5 cm of pickled magnesium in both solutions and immediately start the stopwatch.

- f. Note the time required to observe the complete disappearance of magnesium metal in both solutions.
- g. Compare measured times for both manipulations

Last Name:

First Name :

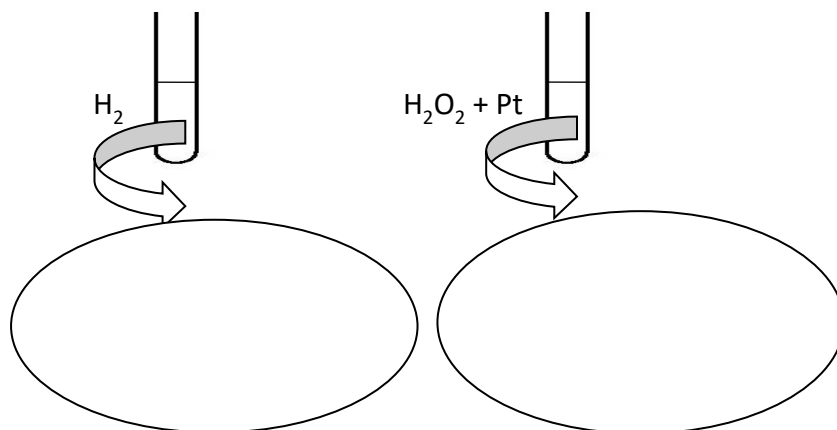
Legends		
Modelling		

• **Modeling task 6**

- a. Prepare 4 test tubes and introduce into each tube 5 mL of the 30% hydrogen peroxide solution.
- b. In tube 1, nothing should be added (witness).
- c. In tube 2, add a platinum plate (ask your teacher). Hold the fireball at the opening of the test tube.
- d. In tube 3, introduce 2.5 mL of iron (III) nitrate solution and test in the same manner as before.
- e. In tube 4, add a tip of yeast spatula and test with the speargun.
- f. Summarize the observations in a table

Last Name:

First Name :



E. Supplementary material S5

- **Multiple-Choice Questions (MCQs) on an interactive website**

- **Test 1**

Link :

<https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLScpMdPqhUDxnW8835ZWACwyjWofFri6Pl0glfJF6MzqELKyDg/viewform>

QR code:



- **Test 2**

Link :

https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLScJtuG_2OID5OJZbpwQ7Vvu41NPF-vF4iQah0O6gEbnePRjbQ/viewform

QR code:



- **Test 3**

Link :

https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfehUxjCto4nSXsUj2PZAEETzbnCHXAR3_KoTL6-rT1SCtc4g/viewform

QR code:



- **Test 4**

Link :

https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfr544XCIfcgF0lw8a5k52HT_htBXUcTcdtJnS0fg_QRzlx0w/viewform

QR code:



F. Supplementary material S6

Final online questionnaire

- **First part: Impact of Technology on Chemistry Learning**
- **Second part: Learning Through Modelling**

Link :

<https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSdjtXj6rCsr3lsDj7dHOHpCjkGKpfMeM4PQFbhYH5bmuRyF2w/viewform>

QR code:



Learning Chemical Kinetics at Secondary School Level by Developing Autonomous Modeling Skills. Part II. Activated complex and reaction coordinate diagrams

Hamad Karous^{a*}, Brigitte Nihanta^{a**} and Bernard Leyh^{a***}

^a Department of Chemistry, University of Liège and DIDACTIfen Research Unit, Allée du six Août 11, 4000 Liège, Belgium

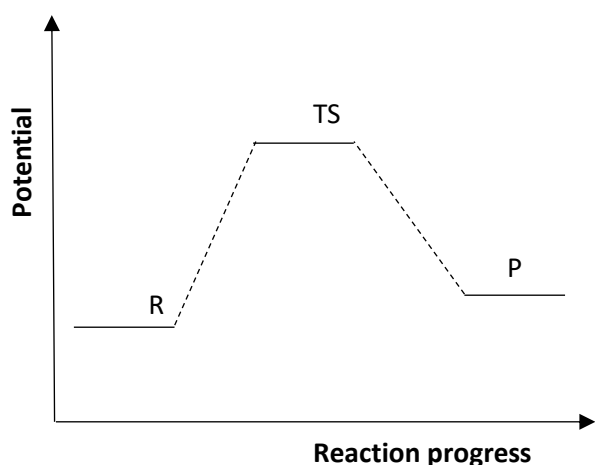
A. Supplementary material S1

Questionnaire: The energy evolution from reactants to products

Name and first Name :

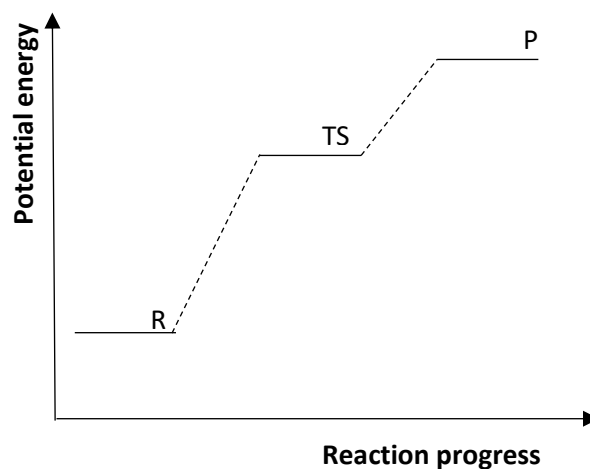
Consider the following reaction, which you have just modeled: $\text{CH}_3\text{Cl}_{(\text{aq})} + \text{OH}^-_{(\text{aq})} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}_{(\text{aq})} + \text{Cl}^-_{(\text{aq})}$.

Indicate and justify for each of the diagrams below whether or not it correctly describes the energy evolution of this chemical reaction. (Legend : R = Reactants ; TS = Transition State ; P = Products)



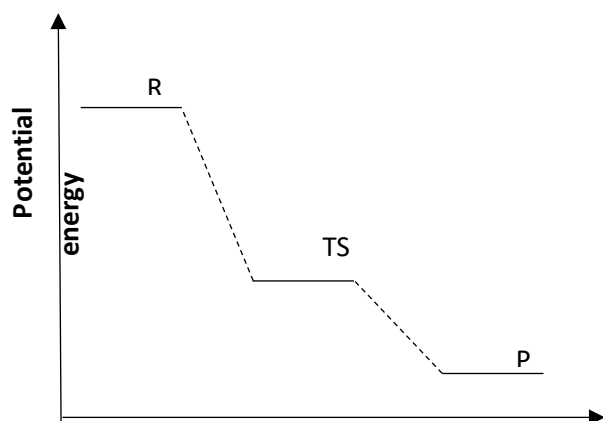
Yes / No : Why?

.....
.....



Yes / No : Why?

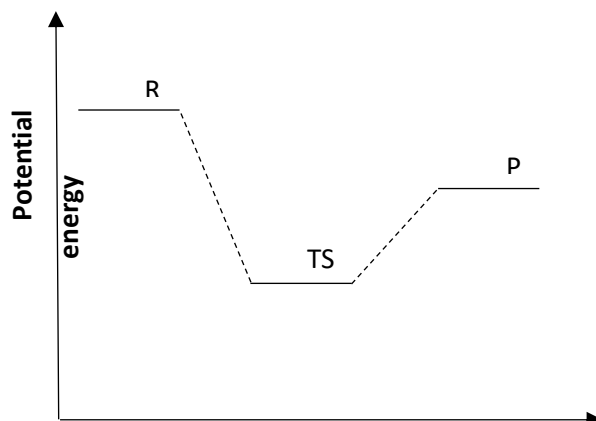
.....
.....



Yes / No : Why? Reaction progress

.....

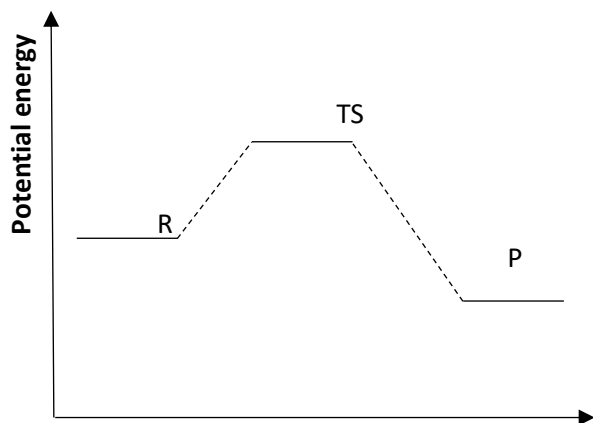
.....



Yes / No : Why? Reaction progress

.....

.....

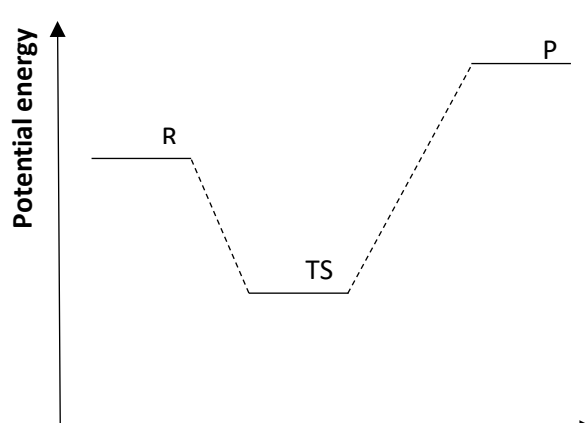


Reaction progress

Yes / No: Why ?

.....

.....



Reaction progress

Yes / No: Why ?

.....

.....

B. Supplementary material S2

Link :

https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSeFJ9a2jRSWbXYqWnwQykII9-DTq_u_wzbj2ta-TOGt3ZTj9Q/viewform

QR code:



Combining experimentation and modeling for learning thermochemistry at high school level

Hamad Karous^{a*}, Brigitte Nihant^{a**}, José-Carlos Arrebola^{b***} and Bernard Leyh^{a****}

^a *Department of Chemistry, University of Liège and DIDACTIfen Research Unit, Allée du Six Août 11, 4000 Liège, Belgium*

^b *Departamento de Didáctica de las Ciencias Sociales y Experimentales, Universidad de Córdoba, San Alberto Magno s/n, 14071 Córdoba, Spain*

A. Supplementary material S1: Pre-test / Post-test

Question 1

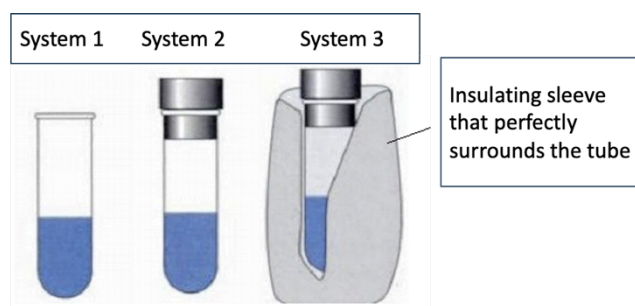
You went to the sea on a very sunny day and decided to go for a swim. Upon entering the water, you noticed that the water feels cooler than the sand. What is the reason for this difference in sensation between the two, even though both the water and the sand are exposed to the same heat source, the sun?

- ☐ Heat transfers more easily to water than to sand.
- ☐ Sand requires less heat than water to raise its temperature by the same number of degrees.
- ☐ The difference in sensation is due to the difference in the amount of matter between the sand and the water.
- ☐ The difference in sensation is physiological; in fact, the temperatures are identical.

Question 2

A chemist introduces 100 g of boiling water into each of the following systems (1, 2, and 3) located in a room maintained at 20°C. He then measures the mass (m) of water and its temperature (θ) in each system. What does he observe after half a day?

- ☐ $\theta_1 < \theta_2 < \theta_3$; $m_1 < m_2 < m_3$
- ☐ $\theta_1 < \theta_2 = \theta_3$; $m_1 < m_2 = m_3$
- ☐ $\theta_1 = \theta_2 < \theta_3$; $m_1 < m_2 = m_3$
- ☐ $\theta_1 = \theta_2 < \theta_3$; $m_1 = m_2 = m_3$



Question 3

For each of the following phenomena, choose the correct statement:

Phenomenon	Statement
	a) The fountain cools the hall of a Riad. Which phenomenon is primarily responsible for the cooling? ☐ The movement of water molecules consumes energy. ☐ There is a heat transfer between the air molecules in the atmosphere and the colder water molecules. ☐ The vaporization of the fountain water consumes energy, which is provided by the air molecules in the hall. ☐ The movement of water in the fountain creates an air current in the hall.
	b) Combustion is the result of chemical reactions that: ☐ exclusively produce heat. ☐ exclusively consume heat. ☐ produce heat, water, and carbon dioxide (CO₂). ☐ produce heat, water, and oxygen.

Question 4

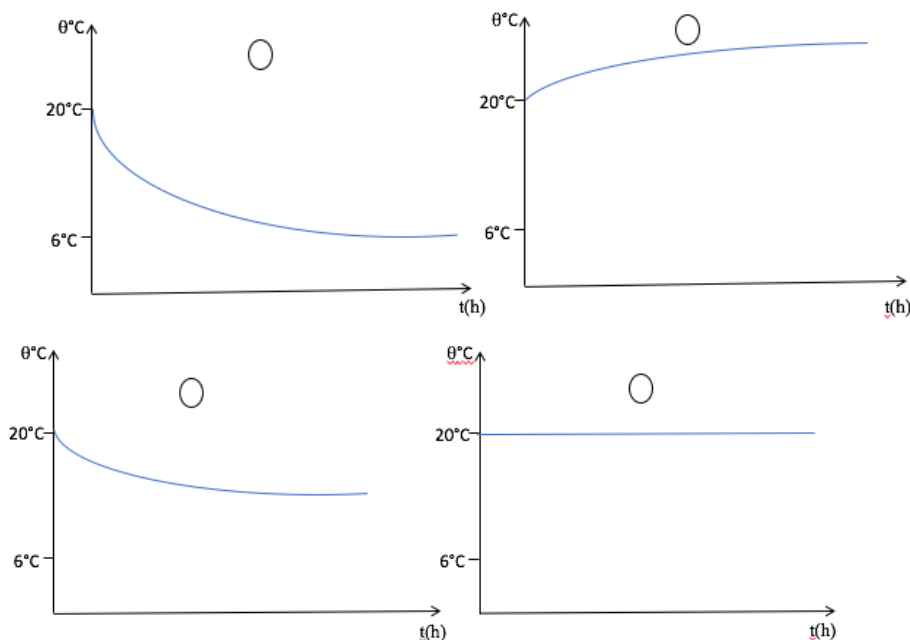
Polystyrene panels are used in house walls to:

- ☐ prevent the transfer of matter between the inside and outside environments.
- ☐ prevent the transfer of energy between the inside and outside environments.
- ☐ facilitate energy exchange with the outside environment.
- ☐ improve the mechanical resistance of the walls.

Question 5

You placed a bottle of milk (20°C) in the fridge (6°C) at a certain time ($t = 0$).

- a. Choose the graph that corresponds to the temperature (θ) evolution of the milk over time.

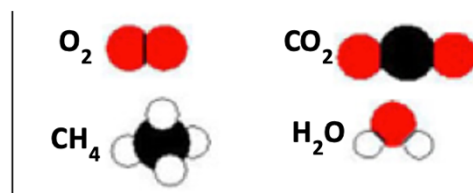
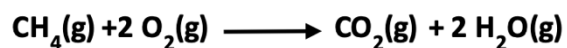


- b. Given the fridge temperature = θ_F , the milk temperature = θ_M , the thermal energy of the fridge = E_F , and the thermal energy of the milk E_M . If we wait long enough, the system reaches equilibrium, and thus:

- ☐ $\theta_M = \theta_F$; $E_M = E_F$
- ☐ $\theta_M = \theta_F$; $E_M \neq E_F$
- ☐ $\theta_M \neq \theta_F$; $E_M = E_F$
- ☐ $\theta_M \neq \theta_F$; $E_M \neq E_F$

Question 6

Consider the following methane combustion reaction and model the molecules as indicated.



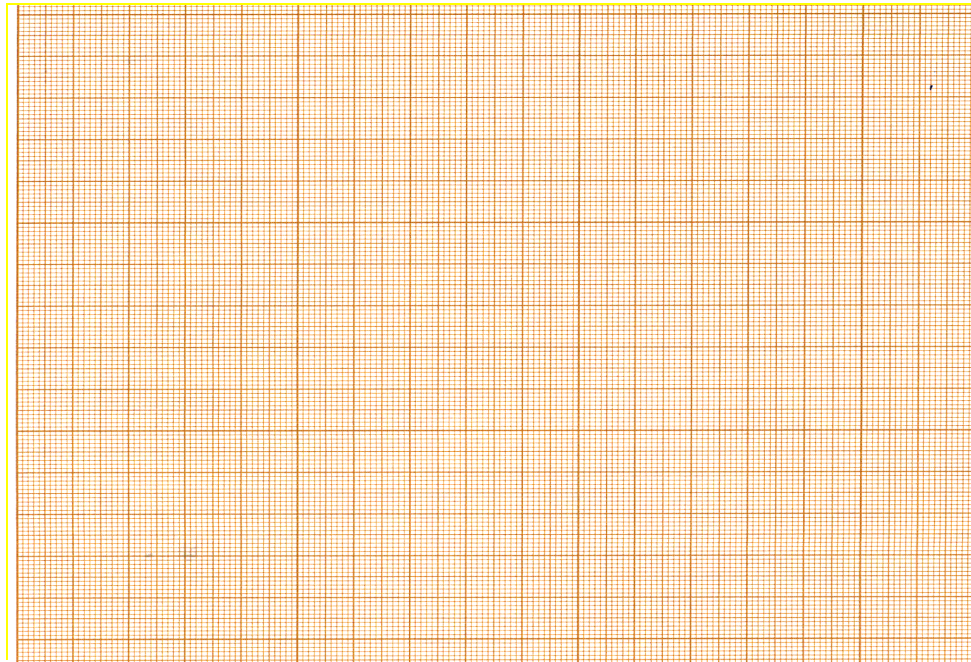
Describe the motion of the molecules with arrows starting from their centers and representing their velocity vectors (with the length representing the value of the velocity and the direction representing the direction of movement).

Before reaction	After reaction

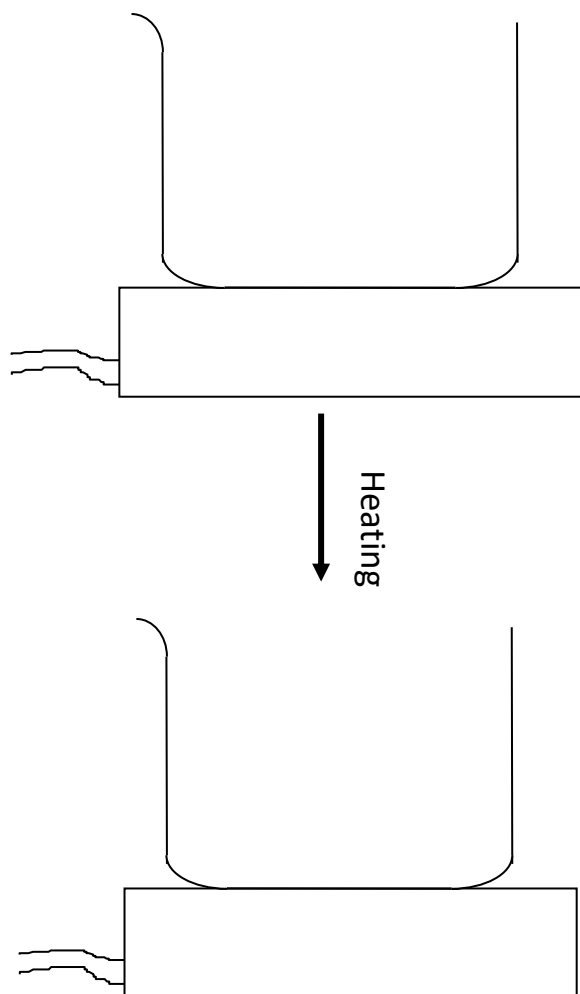
B. Supplementary material S2

The phenomena observed during the following experiment has to be modeled by the students at the submicroscopic level. A beaker is initially filled with crushed ice and its initial temperature (below 0°C) is measured. The beaker is then placed on the surface of a hot plate and gently heated, leading to progressive ice melting. The temperature is measured all along the process.

A. Plot on the following graph the evolution of the temperature as a function of time.



- B.** Make a schematic modeling, at the molecular level, of the observed phenomenon during ice melting. Don't forget to take into account:
- the presence of two phases (solid and liquid)
 - the observed behavior of the temperature evolution
 - the energy exchange with the external environment (hot plate)

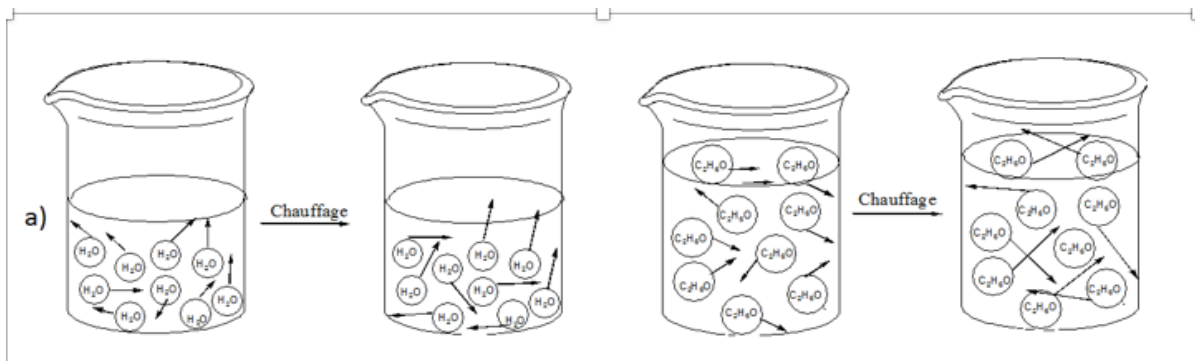


C. Supplementary material S3

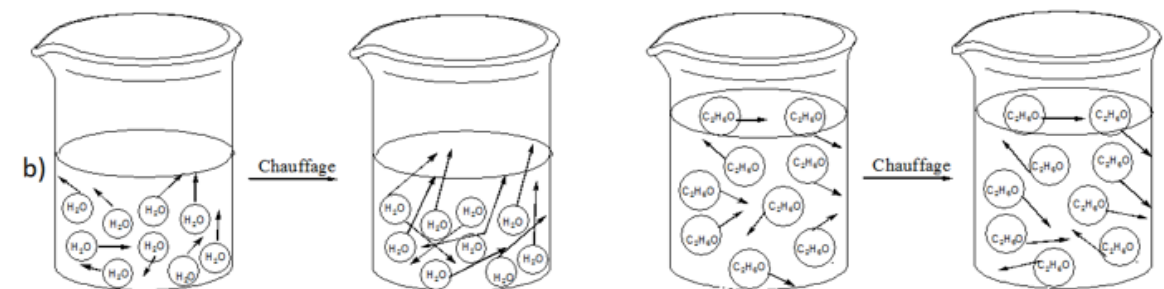
You realize the following experiment. Two beakers are filled with, respectively, 1.0 mol water and 1.0 mol ethanol. The walls and the top of the beakers are insulated with Styrofoam to prevent heat loss as much as possible. Both beakers are then heated on the same hot plate for the same amount of time (3 minutes) and the temperature increase is monitored.

From your observations of the respective temperature increases, choose the model (a, b, c, or d) that correctly represents the situation for water and ethanol.

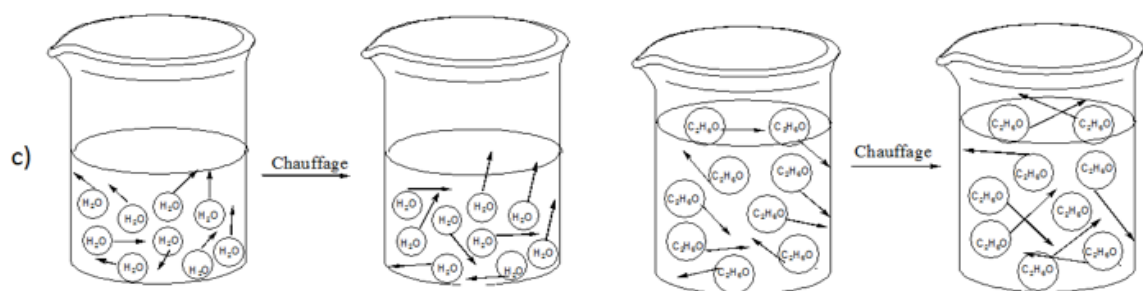
The length of the arrows represents the kinetic energy of the molecules, and the direction of the arrows represents the direction of movement.



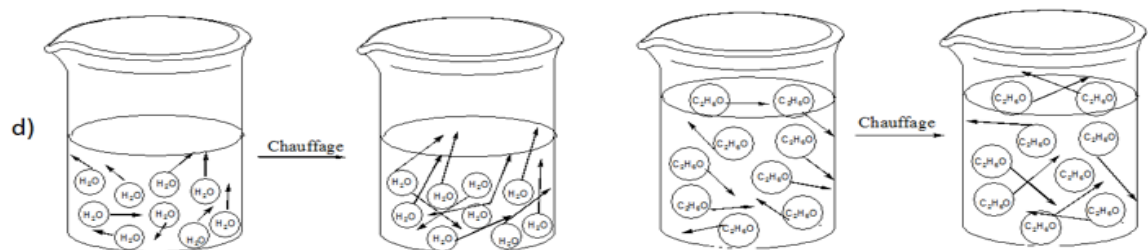
Yes / No. Why?.....



Yes/No. Why?.....



Yes/No. Why?.....



Yes/No. Why?.....

D. Supplementary material S4

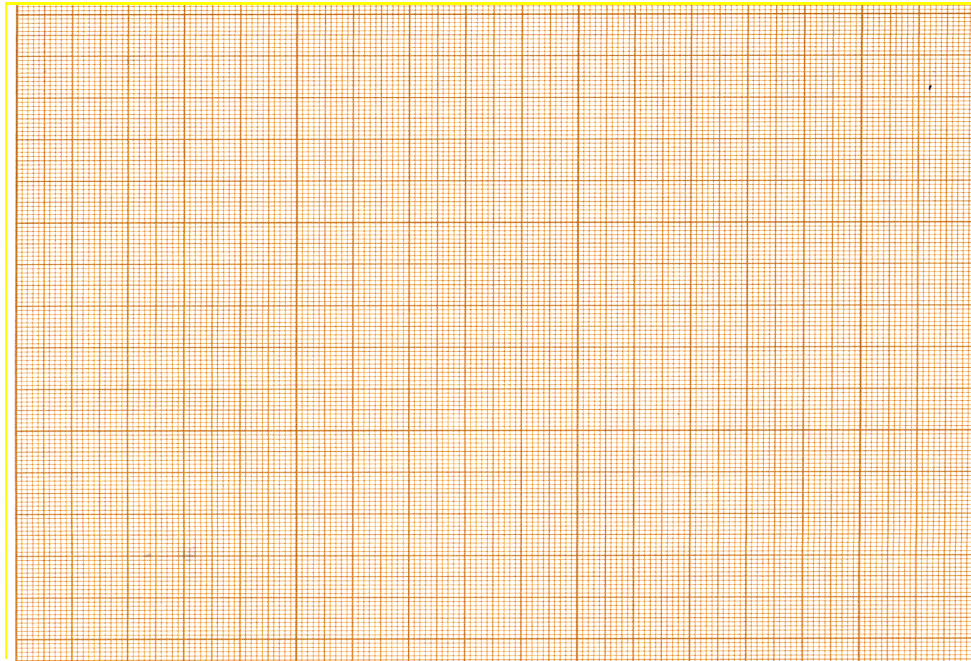
- **Heat Capacity**

Analysis of experimental data :

In beaker 1, 100 g of water was poured, and in another, 200 g of water, both at room temperature. The sides and opening of the beakers were insulated with polystyrene to prevent heat loss as much as possible. Both beakers were then heated with the same hot plate for 6 minutes, and the temperatures of the two beakers were measured every 20 seconds. The hot plate provided a constant amount of heat per unit of time (constant power). The table below shows the results of the measurements of the temperature rise, $\Delta\theta = \theta - \theta_0$, where θ_0 is the initial temperature, as well as the total amount of heat absorbed up to a given time. This amount of heat supplied depends on the setting of the hot plate.

t(s)	$\Delta\theta$ (°C) 100g of water	$\Delta\theta$ (°C) 200 g of water	Q(kJ)	t(s)	$\Delta\theta$ (°C) 100g of water	$\Delta\theta$ (°C) 200 g of water	Q(kJ)
0	0	0	0	200	5,3	2,7	2,17
20	0,1	0	0,03	220	6,1	3,1	2,43
40	0,3	0,1	0,12	240	7,0	3,4	2,70
60	0,6	0,3	0,26	260	7,8	3,9	2,91
80	1,0	0,4	0,43	280	8,5	4,2	3,19
100	1,5	0,7	0,68	300	9,1	4,6	3,45
120	2,2	1,0	1,01	320	9,6	5,0	3,70
140	2,9	1,4	1,34	340	10,1	5,4	3,97
160	3,7	1,9	1,70	360	10,6	5,7	4,23
180	4,5	2,3	1,93				

Plot on the same graph the values of $\Delta\theta$ (°C) for 100 g and 200 g of water as a function of the values of Q (kJ).



a. What type of mathematical relationship does this graph suggest?

.....

.....

b. Calculate the slopes of the two lines.

.....

.....

.....

.....

c. Which mathematical equation between $\Delta\theta$, Q , and the amount (mass) of water can be deduced?

.....

.....

.....

.....

c. Answer the questions from the second part of online test 1.

E. Supplementary material S5

- **Multiple-Choice Questions (MCQs) on an interactive website**
- **Test 1**

Link :

https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLScIrsV6lkuuXbI7_RbbqCih1GAUKyeBJpkNEqAXtANvwxFTiA/viewform

QR code:



- **Test 2**

Link :

<https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSc1g6dmmAMbS6ZIfhTypW9PVsGn8H-8aFnqbkea9lzlL-mgZA/viewform>

QR code:



- **Test 3**

Link :

https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSdMZiUEi59auNUCu0-FT6DLByeTGfxeZSTBUYbxwR_ToOMBLg/viewform

QR code:



An educational Transmission of Reasoning Logic (TRL) scale to assess the progress of learners' competences in modelling activities

Hamad Karous^{a*}, Brigitte Nihant^a, Sabri Mekaoui^b and Bernard Leyh^a

^a *Department of Chemistry, University of Liège and DIDACTIfen Research Unit, Allée du Six Août 11, 4000 Liège, Belgium*

^b *Project Adviser at European Commission, Space Unit, REA, Brussels Area, Belgium*

How can we explain the dissolution of a solute?

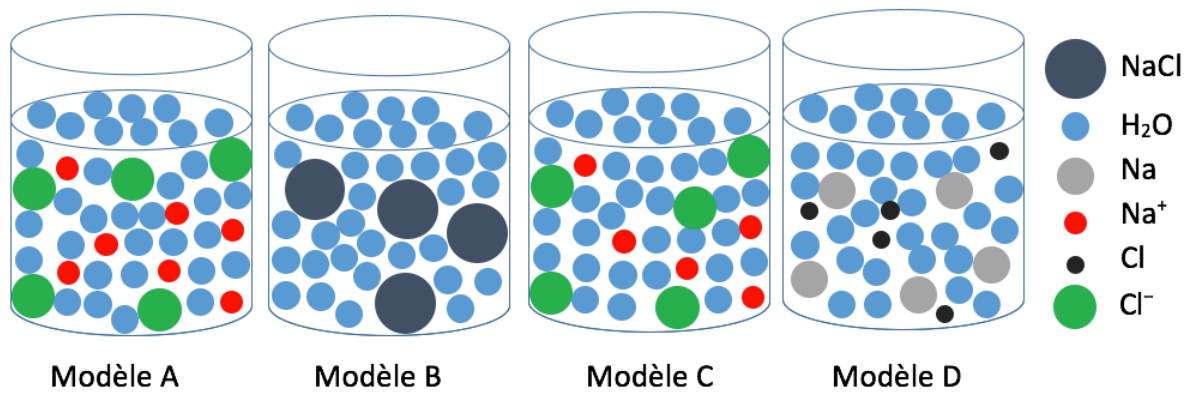
Study of ionic and molecular compounds

First Section: Conceptual Application and Transfer (Supplementary material S1)

I. Introductory Activity

Question 1:

- a)** What happens when a small amount of table salt (sodium chloride, NaCl) is mixed with water?
- b)** Now consider the level of matter particles (atoms, molecules, and ions). This is known as the submicroscopic level. Choose from the models below the one that best describes and explains the final state of the phenomenon. Justify your choice.



.....

.....

.....

.....

.....

.....

Question 2: When a saturated NaCl solution is poured into a Petri dish and the water is allowed to evaporate, the solid re-forms. Observe and describe the solid formed.

.....

.....

.....

When a saturated NaCl solution is poured into a Petri dish and the water is allowed to evaporate, the solid re-forms. Observe and describe the solid formed.

Individual Proposal	Optimized Collective Proposal



3.1.1 1st Evaluation:

Using the TRL scale (see appendix), try to self-assess your skills in relation to the introductory activity you just completed.

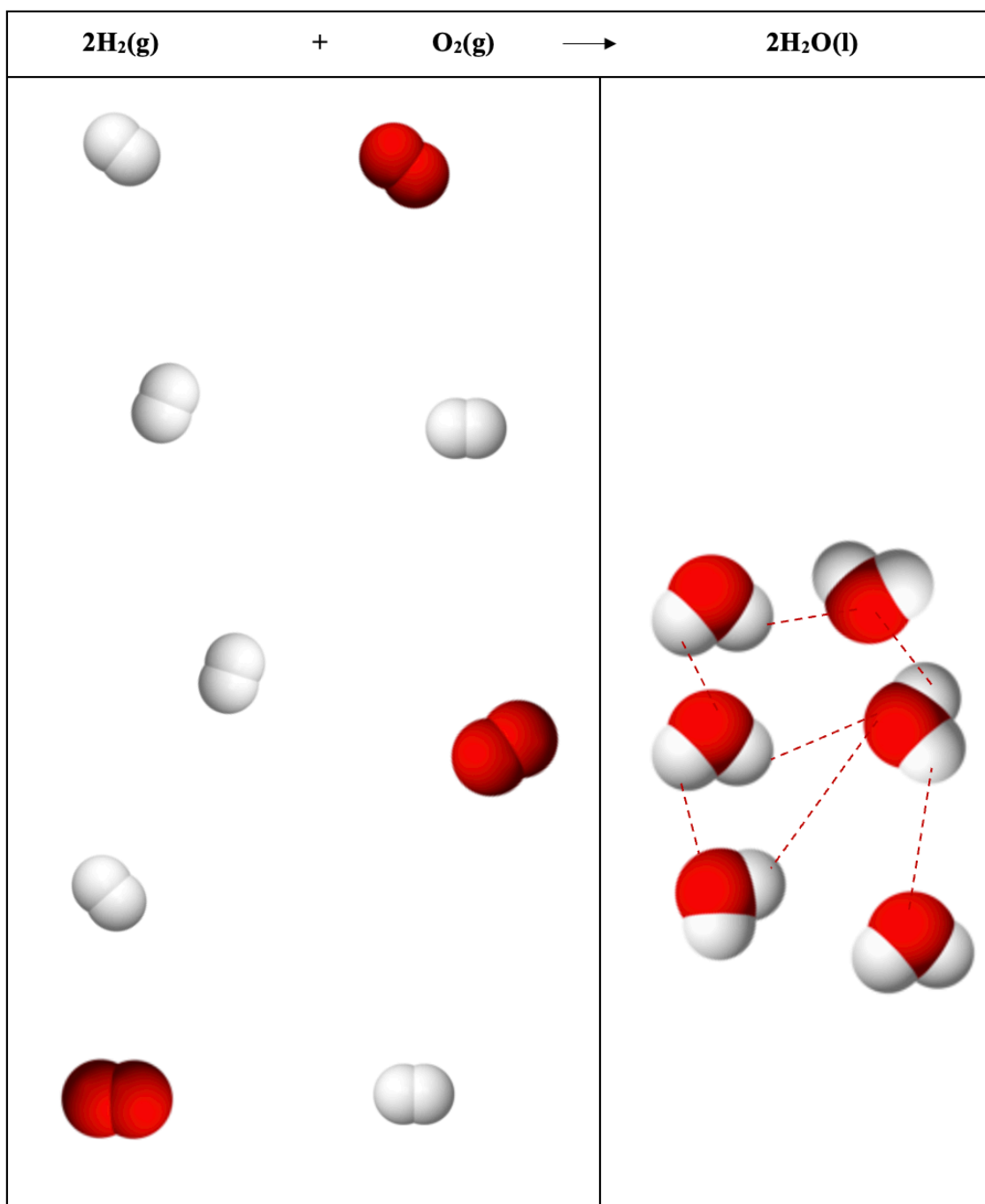
II. Main Activity

Question 3:

Consider the synthesis reaction of water at room temperature. We aim to understand why dihydrogen (H_2) and dioxygen (O_2) are gases, whereas the water (H_2O) formed is a liquid.

- Complete the table below

- Are the hypotheses you just made compatible with the molecular models below? Try to identify the key factor that explains the difference in aggregation states.



.....

.....

.....

.....

.....

- **Experiments:**

A negatively charged ebonite rod (rubbed with sheep skin) is brought close to a stream of water.

- Describe what you observe.
- What can be deduced about the water molecule at the molecular level?

[illegible]

Question 4: Determine whether the following molecules are polar:



To answer, build the molecules using the molecular models provided.

Molecule	Polar?	Justification
Carbon dioxide CO₂	Yes - No	
Tetrachloromethane CCl₄	Yes - No	
Methanol CH₃OH	Yes - No	
Heptane C₇H₁₆	Yes - No	



3.1.2 2nd Evaluation:

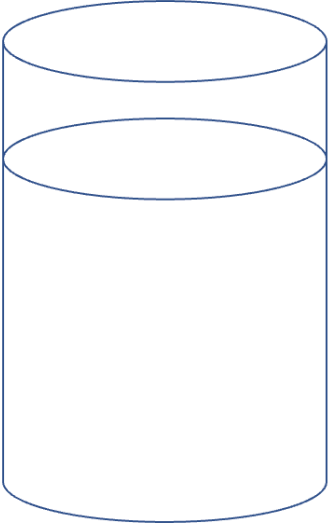
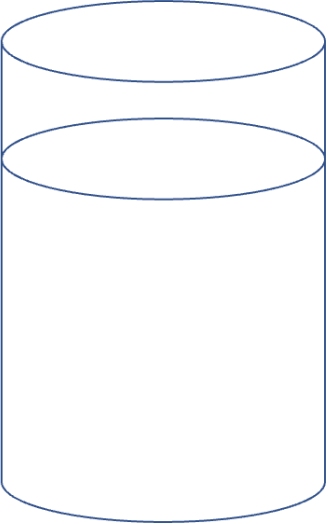
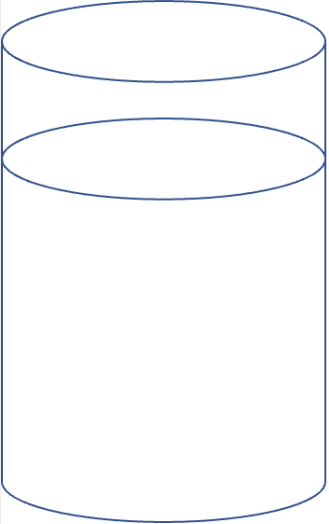
Using the TRL scale (appendix), try to self-assess your skills in relation to the **main activity** you just completed

III. Deepening Activity

Question 4: In the introductory activity, we examined the structure of solid sodium chloride (NaCl) and its solution in water. But how does the transition from one state to the other occur? How does water dissolve salt?

Propose a schematic model of the dissolution of solid NaCl in water. Base your model on the results from the introductory and main activities.

Represent, at the submicroscopic level, three stages in the dissolution mechanism of the NaCl crystal by water molecules using the provided boxes.

Question 5:

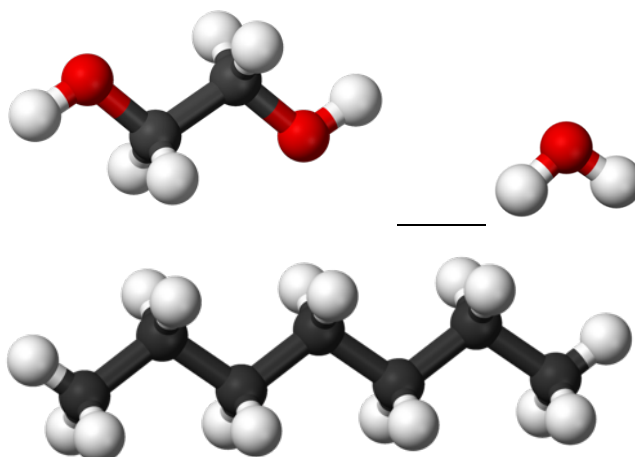
It's not only solids that dissolve in water—liquids can too. Additionally, substances don't dissolve only in water—they can dissolve in other liquids as well.

We will try to dissolve a liquid, **ethylene glycol**, in two different solvents: **water** and **heptane**.

Observe the experiments and **compare the solubility** of ethylene glycol ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2$) in water and heptane (C_7H_{16}).

Mixture	Ethylene glycol + water	Ethylene glycol + heptane
Observations		
Explanation		

Models of ethylene glycol, water, and heptane molecules are provided below:



3rd Evaluation:

Using the TRL scale (see attached sheet), try to self-assess your competencies regarding the **deepening activity** you just completed.

Second Section: Multiple-Choice Questions (MCQs) on an interactive website (Supplementary material S2)

Link :

https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSd3B5KO_iBsquZdacjnfQGpr0PjxXB8MLdEuIY631Ei_ly0zw/viewform

QR code:



