

## Lernen quantenmechanischer Grundlagen durch Simulationen in SpinDrops

Visualisierungen und dynamische Simulationen werden als lernförderliche und motivierende Werkzeuge in der Lehre im Fach Chemie angesehen und seit kurzem auch zur Vermittlung quantenmechanischer Konzepte eingesetzt. Tatsächlich bieten Visualisierungen durch eine Art Isomorphismus zur submikroskopischen Ebene die Möglichkeit, Systeme zugänglich zu machen, die sonst nicht zu beobachten oder untersuchen wären. Das an der Technischen Universität München (TUM) entwickelte Programm SpinDrops (Glaser et al., 2018) visualisiert Spinsysteme (mit bis zu drei Spin- $1/2$ -Teilchen) über interaktiv gestaltbare Pulssequenzen hinweg, wie sie auch in NMR-Experimenten (engl. „nuclear magnetic resonance“) vorkommen. Den Spinsystemen können dabei Pulse (die sich u.a. als eine Rotation des visualisierten Bloch-Vektors auswirken) oder zeitliche Delays hinzugefügt werden, welche die freie Entwicklung des Systems simulieren. Bestimmte Parameter des Systems (z.B. offset-Frequenzen oder Kopplungskonstanten) können ebenfalls variiert werden und werden direkt visualisiert.

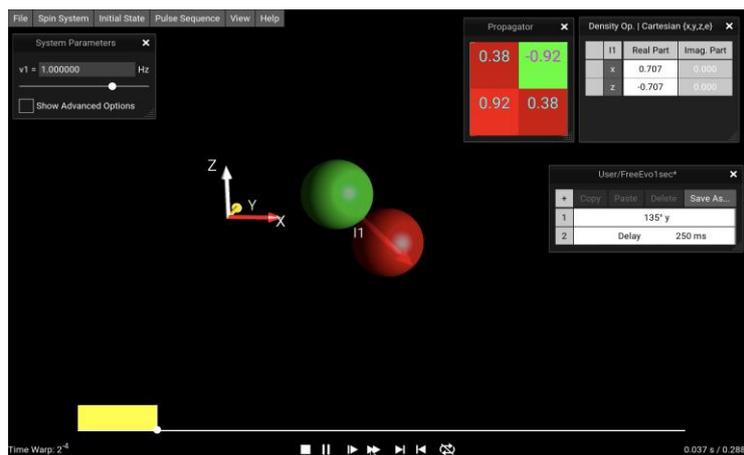


Abb. 1: Das SpinDrops-Interface während der Studie (Lösung der Aufgabe 2).

Speziell für Chemiker\*innen ist die Vorstellung eines Spins und das damit verbundene Anwendungsgebiet der NMR-Spektroskopie von großer Bedeutung. Dennoch erweisen sich diese Konzepte als schwierig zu lernen und zu lehren (Connor, 2021). Hier könnten Visualisierungen und interaktive Simulationen einen Lösungsansatz darstellen, denn einige Studien zeigen insgesamt positive Effekte von computergestützten Simulationen beim Lernen von Naturwissenschaften (z. B. D'Angelo et al., 2014; Stieff, 2019; Develaki, 2019).

### Methode und Forschungsfrage

Daher wurde erstmalig eine Untersuchung der Auswirkungen der Simulationssoftware SpinDrops auf das Lernen und Verstehen quantenmechanischer Grundlagen der NMR-Spektroskopie von Studierenden vorgenommen.

Es wurden die folgende Forschungsfrage formuliert:

Wie beeinflussen die Visualisierung und die Simulation quantenmechanischer Konzepte durch die Software SpinDrops das Verständnis von Studierenden beim Lernen mit Aufgaben zu Magnetisierungsvektoren und Spin-Wellenfunktionen während NMR-Pulssequenzen?

Die Studie wurde an zwei parallelen Aufgaben (Aufgabe 1 ohne die und Aufgabe 2 mit der Nutzung von SpinDrops) zur Wirkung von Pulssequenzen auf den Magnetisierungs- bzw. Bloch-Vektor eines einzelnen Spins durchgeführt. In beiden Aufgaben waren Berechnungen und (quantenmechanisches) Hintergrundwissen notwendig. Der gesamte Studienablauf ist in Abbildung 2 dargestellt.



Abb. 2: Schematische Darstellung des Studienablaufs. F steht für den Einsatz eines Fragebogens zur Motivation und der Selbstwirksamkeitserwartung. SD steht für den Einsatz der Software SpinDrops. I steht für ein kurzes Interview nach Aufgabe 2.

Aufgrund der Methodenwahl des Lauten Denkens und einer geringen Fallzahl ( $N = 6$ ) war die Untersuchung hypothesengenerierend angelegt. Es wurden Hypothesen zur Wirkung von SpinDrops auf das Denken und das Konzeptverständnis sowie zu möglichen Einsatzgebieten der Simulation induktiv generiert, die es in weiteren Untersuchungen empirisch zu belegen oder zu widerlegen gilt. Die Audio- und Bildschirmaufnahmen der Aufgabenbearbeitungen (mit Lautem Denken) wurden transkribiert und mit einem teils induktiv entwickelten Kodiermanual codiert und ausgewertet (Zweitkodierung mit Cohens Kappa zu insgesamt  $\kappa = .70$ ).

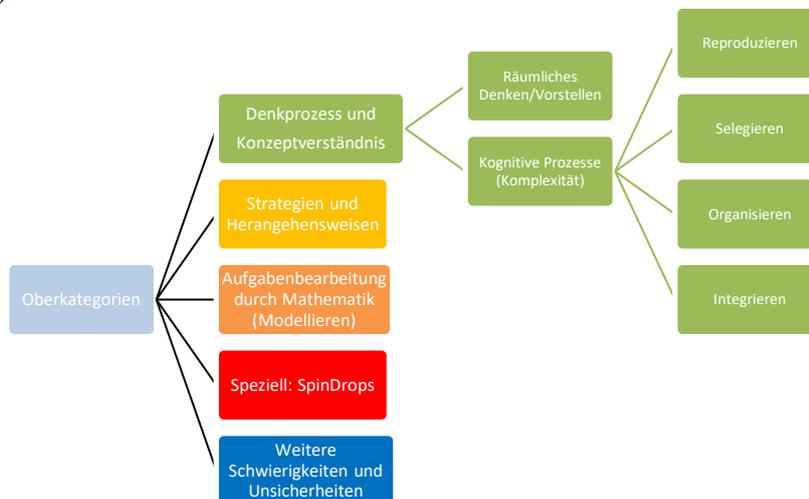


Abb. 3: Überblick über die relevanten Kategorien des Kodiermanuals (auf eine genauere Untergliederung sowie die Aufteilung der kognitiven Prozesse in fachlich richtig und fachlich falsch/unpassend wurde zur besseren Übersicht verzichtet).

Abbildung 3 zeigt einen Einblick in das Kategoriensystem der Auswertung. Die Einteilung der dabei gefundenen Denkprozesse und dem Konzeptverständnis ist an das ESNaS-Projekt (Walpuski et al., 2010) angelehnt - der Punkt kognitive Prozesse unterteilt sich dabei in die aufeinander aufbauenden Denkweisen *Reproduzieren* (Identifizieren von Information), *Selektieren* (Auswählen von Information), *Organisieren* (Strukturieren von Information) und *Integrieren* (Einbinden von Information in die bisherige Wissensbasis). Daneben waren die genutzten Oberkategorien *Strategien und Herangehensweisen*, *Aufgabenbearbeitung durch Modellieren (Mathematik)*, *Speziell: SpinDrops* und *weitere Schwierigkeiten und Unsicherheiten* von Interesse.

### **Ergebnisse**

Insgesamt wurden aufgrund der Analyse der Lernprozesse der Studierenden bei der Bearbeitung der Aufgaben u.a. die folgenden Hypothesen zur Wirkung und Nutzung von SpinDrops generiert:

- **H 1:** SpinDrops trägt positiv zur Motivation und der Selbstwirksamkeit bei.
- **H 2.1:** Der Einsatz von SpinDrops führt zu etwas besser strukturiertem Wissen und dem besseren Verständnis von Zusammenhängen.
- **H 2.2:** SpinDrops eignet sich besonders, um das Verständnis dynamischer NMR-Konzepte, wie etwa der Präzessionsbewegung durch Veranschaulichung/Simulation zu vertiefen.
- **H 2.3:** SpinDrops führt zu einer kleinschrittigeren und „zeitabhängigeren“ Erklärung der Wirkung von Pulssequenzen auf den Bloch-Vektor.
- **H 3.1:** SpinDrops unterstützt das Lernen, Verstehen und die Aufgabenlösung durch die Möglichkeit zur einfachen Kontrolle der eigenen Ideen und Ergebnisse.
- **H 3.2:** SpinDrops unterstützt Studierende bei der Ideenfindung in Aufgaben zu Pulssequenzen und Magnetisierungsvektoren.
- **H 3.3:** SpinDrops kann als Strukturierungshilfe für Erklärungen zu Pulssequenzen und Verbalisierungen des Konzeptwissens dienen.
- **H 3.4:** Der Einsatz von SpinDrops kann dazu führen, weniger Überlegungen und Berechnungen anzustellen als ohne die Software.

Die Daten legen die Vermutung nahe, dass SpinDrops die Erfolgserwartungen und die Selbsteinschätzung von Studierenden steigert und als Strukturierungs- und Kontrollhilfe auch zu besser vernetzten quantenmechanischen Wissen führen kann, was sich besonders beim Verständnis dynamischer Grundlagen der NMR-Spektroskopie zeigte.

Dies wurde u.a. daran fest gemacht, dass in Aufgabe 2 komplexere Denkprozesse codiert und gefunden wurden als noch in Aufgabe 1 ohne SpinDrops.

### **Diskussion und Ausblick**

Neben möglicher Kritik an der Methode des Lauten Denkens muss beispielsweise angemerkt werden, dass es sich bei der vorgestellten Studie um qualitative Einzelfallbetrachtungen handelt, die uns jedoch einen optimistischen Blick auf weitere Untersuchungen mit SpinDrops werfen lassen. Die gewählten Aufgaben deckten nur einen Teil der Möglichkeiten und Features von SpinDrops ab. Die gut erkennbaren Verbesserungen im Bereich der kognitiven Prozesse in Aufgabe 2 (mit SpinDrops-Nutzung) könnten neben den Einflüssen der SpinDrops-Visualisierungen ebenfalls teilweise durch Lerneffekte der Aufgabenreihenfolge erklärt werden. SpinDrops wird in Zukunft weiterentwickelt und auf die Bedürfnisse der Studierenden angepasst werden, um in der Lehre weiterer passender Konzepte der Quantenmechanik oder der NMR-Spektroskopie effektiv und gewinnbringend eingesetzt werden zu können.

## Literatur

- Connor, M. C. (2021). *Teaching and learning 1H nuclear magnetic resonance spectroscopy* (Dissertation, University of Michigan). Zugriff am 22.10.2021 auf [https://deepblue.lib.umich.edu/bitstream/handle/2027.42/167938/mcarole\\_1.pdf?sequence=1&isAllowed=y](https://deepblue.lib.umich.edu/bitstream/handle/2027.42/167938/mcarole_1.pdf?sequence=1&isAllowed=y)
- D'Angelo, C., Rutstein, D., Harris, C., Bernard, R., Borokhovski, E. & Haertel, G. (2014). Simulations for stem learning: Systematic review and meta-analysis. *SRI International*.
- Develaki, M. (2019) Methodology and epistemology of computer simulations and implications for science education. *Journal of Science Education and Technology*, 28. doi: 10.1007/s10956-019-09772-0
- Glaser, S., Tesch, M. & Glaser, N. (2018). *SpinDrops*. Zugriff am 12.04.2021 auf <https://spindrops.org>
- Glynn, S. M., Brickman, P., Armstrong, N. & Taasobshirazi, G. (2011). Science motivation questionnaire II: Validation with science majors and nonscience majors. *Journal of Research in Science Teaching*, 48 (10), 1159-1176.
- Rheinberg, F., Vollmeyer, R. & Burns, B. D. (2001). FAM: Ein Fragebogen zur Erfassung aktueller Motivation in Lern- und Leistungssituationen. [A questionnaire to assess current motivation in learning situations.]. *Diagnostica*, 47 (2), 57–66. doi: 10.1026/0012-1924.47.2.57
- Stieff, M. (2019). Improving Learning Outcomes in Secondary Chemistry with Visualization-Supported Inquiry Activities. *Journal of Chemical Education*, 96 (7), 1300–1307. Zugriff auf <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.9b00205>
- Walpuski, M., Kauertz, A., Kampa, N., Fischer, H. E., Mayer, J., Sumfleth, E. & Wellnitz, N. (2010). ESNaS - Evaluation der Standards für die Naturwissenschaften in der Sekundarstufe I. In A. Gehrman, U. Hericks & M. Lüders (Hrsg.), *Bildungsstandards und Kompetenzmodelle. Beiträge zu einer aktuellen Diskussion über Schule, Lehrerbildung und Unterricht*. (S. 171-184). Bad Heilbrunn: Klinkhardt.