

Dominik Diermann¹
 Dennis Huber¹
 Steffen Glaser¹
 Jenna Koenen¹

¹Technische Universität München

Entwicklung einer digitalen Lernumgebung zur NMR-Spektroskopie

Beinahe alle Studierende des Faches Chemie und vieler weiterer naturwissenschaftlicher Studiengänge, z. B. gymnasiales Lehramt lernen in ihrem Studium über die Kernspin- oder NMR-Spektroskopie (engl. nuclear magnetic resonance spectroscopy) (Martin et al., 2011). Hierbei liegt der Fokus meist auf der im Labor- und Studienalltag am häufigsten eingesetzten ¹H-NMR-Spektroskopie. Bei dieser handelt es sich um ein schwieriges und komplexes Thema für Studierende und Lehrende (Connor, 2021). Hier existiert ein Forschungsdesiderat speziell zum Konzeptverständnis von physikalisch chemischen Grundlagen, was noch nicht genauer untersucht ist (Connor, 2021). An dieser Stelle setzt dieses Projekt an, in dessen Rahmen eine digitale und interaktive Lernumgebung zu den Grundlagen der ¹H-NMR entwickelt und evaluiert wird, welche auf der Simulations- und Visualisierungssoftware für Spinsysteme und NMR-Spektren „SpinDrops“ beruht. SpinDrops (Glaser et al., 2018) ist ein an der Technischen Universität München entwickeltes und kostenlos verfügbares Simulationsprogramm für Spinsysteme, welches in einer momentan noch internen Version um eine interaktive Lernumgebungseinheit ergänzt wurde, in der zu den einstellbaren Parametern des Spinsysteme passende ¹H-NMR-Spektren simuliert und angepasst werden können. Zudem nutzt diese sogenannte „SpinDrops-Lernumgebung“ (kurz SDLU) zusätzliche interaktive Visualisierungen. Simulationen und Visualisierungen erweisen sich als lernwirksame und sehr sinnvolle Medien für die Lehre und das Verständnis von Naturwissenschaften (z.B. D’Angelo et al., 2014; Stieff, 2019; Develaki, 2019), auch wenn vor deren Einsatz Fragen zur Gestaltung und dem didaktischen Einsatz gestellt und beantwortet werden müssen. Um die SDLU für verschiedene Studierende und Dozierende verfügbar zu machen, wurde zunächst die Frage gestellt, auf welche Inhalte die Lernumgebung fokussieren soll.

Forschungsfragen und Methode

Auf Basis ähnlicher Untersuchungen (z.B. Martin et al., 2011; Fox & Roehrig, 2015) wurde zum Jahreswechsel 2021/2022 eine Online-Umfrage an über 70 verschiedene Dozierende der NMR-Spektroskopie an deutschen Universitäten versendet. Final haben wir $N = 39$ valide Antworten erhalten. Insgesamt wurden folgende Forschungsfragen an die Umfrage gestellt:

- Welche Inhalte der ¹H-NMR werden durch die Dozierenden mit besonderem Fokus gelehrt? (Inhaltsanalyse)
- Welche Inhalte haben eine hohe (subjektive) Bedeutung für das Verständnis der ¹H-NMR? (Relevanzanalyse)
- Sind besondere Muster/Trends in den Antworten der Dozierenden zu erkennen?

Auf Grundlage einer ausführlichen Literatur- und Onlinerecherche wurde eine Liste an 33 Items erstellt, die Lerninhalte der ¹H-NMR-Spektroskopie auflisten. Aufgrund weniger zusätzlicher Nennungen durch die Dozierenden kann von einer erschöpfenden Liste

ausgegangen werden. Neben statistischen und offenen Fragen zur Fokussierung, Zielgruppe und Lernschwierigkeiten wurden die Teilnehmer*innen im Herzstück der Umfrage gebeten diese 33 Items in Hinblick auf zwei Fragen jeweils auf einer 3-stufigen Likert-Skala (vgl. Fox & Roehrig, 2015) zu bewerten. Die Fragen lauteten:

- *Geben Sie an, ob und falls ja, wie tief Sie diese Inhalte in Ihrer Lehrveranstaltung behandeln? (1 = Gar nicht, 2 = In moderatem Maß, 3 = In hohem Maß)*
- *Für wie wichtig halten Sie (unabhängig davon) den jeweiligen Inhalt für das Verständnis der NMR-Spektroskopie? (1 = Optional, 2 = Moderat wichtig, 3 = Grundlegend)*

Hiernach konnten Mittelwerte der Antworten gebildet und die Items bezüglich beider Fragen nach Rängen sortiert werden. Zur Auswertung wurden allgemein nicht-parametrische (d.h. verteilungsfreie) Verfahren eingesetzt.

Ergebnisse

Bezüglich der beiden Fragen ergab sich ein ähnliches Bild: Speziell die Konzepte der chemischen Verschiebung (inklusive dem lokalen/effektivem Magnetfeld, typische ppm-Werte, ...) und der skalaren Kopplung (inklusive Kopplungskonstante J, Multiplet-Strukturen, ...) scheinen an deutschen Universitäten am häufigsten gelehrt und als besonders relevant für die ¹H-NMR (vgl. Abbildung 1) angesehen zu werden.

NMR-Item der Umfrage sortiert nach Relevanz für Dozierende (Antworten auf Frage 2)			... sortiert nach Vorkommen in Lehrveranstaltungen (Antworten auf Frage 1)		
	Rang	M_R	SD_R	Rang	M_A	SD_A
Spin-Spin-Kopplung und Multiplizität (Herleitung, Erklärung, Beispiele, ...)	1	2.90	0.31	2	2.72	0.51
Die chemische Verschiebung (Herleitung und effektives Magnetfeld)	2	2.90	0.31	1	2.79	0.47
Typische ppm-Werte funktioneller Gruppen	3	2.85	0.37	5	2.59	0.59
...						
Die Kopplungskonstante (Definition, Eigenschaften, Beispiele, Pascal'sches Dreieck, ...)	6	2.82	0.45	3	2.67	0.58
Magnetische und chemische Äquivalenz	7	2.77	0.43	7	2.56	0.60
...						
Die Resonanzbedingung (Herleitung, Definition Larmor-Frequenz, ...)	10	2.72	0.60	9	2.51	0.60
Die "N+1"-Regel	11	2.64	0.58			
Präzession von Spins im Magnetfeld	12	2.62	0.54			
...						
Magnetisches Moment μ und gyromagnetische Konstante γ	16	2.46	0.72			

Abb. 1: Items sortiert nach den Rängen der Antworten auf die Frage 2 zur Relevanzanalyse. Die Ränge bezüglich Frage 1 zur Inhaltsanalyse sind daneben aufgelistet. Dargestellt sind alle Items, die jeweils signifikant (Wilcoxon-Test) über den Skalenmittelpunkt aller Antworten lagen und inhaltlich in die SDLU eingeflossen sind.

Speziell die Kopplung scheint ein wichtiges Thema zu sein, auch wenn die kategorisierten Antworten auf eine offene Frage zu den häufigsten Lernschwierigkeiten der Studierenden ebenfalls Verständnisschwierigkeiten dieses Themas aufzeigen. Die skalare Kopplung (wie auch die chemische Verschiebung) bildet daher einen fundierten Inhalt für die SDLU. Ein

genauerer Blick in die Antworten auf die vielversprechende Frage der Relevanzanalyse legt eine Faktoranalyse nahe. Nach einer Maximum-Likelihood Faktoranalyse (mit Varimax-Rotation) konnten die beiden resultierenden Faktoren aufgrund der auf sie fallenden Items inhaltlich mit „Wissen über die physikalisch-chemischen Hintergründe und Grundlagen der NMR-Spektroskopie (Faktor 1)“ und „Notwendiges Wissen zur Analyse und Auswertung von NMR-Spektren (Faktor 2)“ beschrieben werden. Faktor 2, der Konzepte wie die skalare Kopplung und die chemische Verschiebung enthält, zeichnet sich durch Konzepte aus, die notwendig sind um ^1H -NMR-Spektren richtig auswerten und interpretieren zu können, wohingegen Faktor 1 (auf den z.B. Inhalte wie die Spin-Definition, Präzession oder Relaxation fallen) die weiteren Hintergründe zur Wirkungsweise der NMR beschreibt, ohne welches Wissen die Analyse der Spektren dennoch möglich ist. Bezüglich der Relevanzeinschätzung ergibt sich mit $M_{\text{Relevanz}_F2} = 2.66$ ($SD = 0.35$) zu $M_{\text{Relevanz}_F1} = 2.32$ ($SD = 0.48$) ein signifikant höherer Wert für Faktor 2 (Wilcoxon-Vorzeichen-Rang-Test, $z = -2.96$, $p = .003$, $r = -.47$). Gruppenvergleiche zwischen den Angaben von Dozierenden für Einsteiger- und Fortgeschrittenen-Lehrveranstaltungen (Gruppen E und F) ergaben bezüglich der Faktorwerte wenig Unterschiede. Einzig scheint Faktor 1 für fortgeschrittene Studierende relevanter zu sein, als für Einsteiger ($M_{\text{Relevanz}_F1_GruppeE} = 2.21$, $SD = 0.48$ vs. $M_{\text{Relevanz}_F1_GruppeF} = 2.60$, $SD = 0.33$; Kruskal-Wallis-Test, $H(1) = 5.23$, $p = .022$; Faktor 2 zeigt hier keinen Unterschied mit $M_{\text{Relevanz}_F2_GruppeE} = 2.65$, $SD = 0.36$ und $M_{\text{Relevanz}_F2_GruppeF} = 2.66$, $SD = 0.33$). Die Mittelwerte bzw. Ränge einzelner Items unterscheiden sich jedoch zwischen den Gruppen E ($N = 29$) und F ($N = 9$) bezüglich der Fragen zum Lehrveranstaltungsinhalt (Frage 1) und der Relevanzeinschätzung (Frage 2): Bezüglich der Frage zum Lehrveranstaltungsinhalt (Frage 1) tauchen u.a. die Konzepte chemische Verschiebung (Ableitung und effektives Magnetfeld) (Kruskal-Wallis Test, $H(1) = 5.54$, $p = .019$), Spin-Spin-Kopplung und Multiplets (Ableitung, Erklärung, ...) ($H(1) = 5.50$, $p = .019$) und weitere Spektroskopie-Methoden ($H(1) = 9.39$, $p = .002$) signifikant häufiger in Einsteiger-Veranstaltungen auf. Bezüglich der Frage zur Relevanzeinschätzung (Frage 2) sind die u.a. Konzepte Präzession von Spins im Magnetfeld ($H(1) = 6.60$, $p = .010$), Messprozedere ($H(1) = 4.43$, $p = .035$), rotierendes Koordinatensystem ($H(1) = 5.06$, $p = .024$), Relaxation ($H(1) = 3.84$, $p = .050$), andere Kerne ($H(1) = 7.01$, $p = .008$) und quantenmechanische Betrachtungen ($H(1) = 6.64$, $p = .010$) signifikant wichtiger für Dozierende auf einem fortgeschrittenen Niveau (Gruppe F).

Diskussion und Zusammenfassung

Insgesamt ergibt die Umfrage einen guten Überblick über die Inhalte der deutschen NMR-Lehre und die Einschätzungen besonders wichtiger Punkte durch NMR-Dozierende verschiedener Bundesländer. Auch wenn typische Fehlerquellen von Umfragen nicht ausgeschlossen werden können und die Ergebnisse zunächst streng nur für Deutschland gelten, zeigt sich ein Mehrwert für Dozierende (Vergleich der Lehre) und für die Konzeption der SDLU. Diese behandelt auf Grundlage der dargestellten Ergebnisse nun die Konzepte der chemischen Verschiebung (durch das lokale Magnetfeld und den Einfluss von elektronischer Abschirmung) und die skalare starke und schwache Kopplung (am einfachen Beispiel von Dubletts, Dubletts von Dubletts und einem Triplett) aufeinander abgestimmt und mit interaktiven Visualisierungen (NMR-Spektren, Magnetisierungsvektoren, Kopplungsbäumen und einem lokalen Magnetfeld-Schema) mit offenen und geschlossenen Aufgaben.

Literatur

- Connor, M. C. (2021). *Teaching and learning ¹H nuclear magnetic resonance spectroscopy* (Dissertation, University of Michigan). Zugriff auf 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
- Fox, L.J. & Roehrig, G.H. (2015) Nationwide Survey of the Undergraduate Physical Chemistry Course. In *J. Chem. Educ.*, 92, 9, 1456–1465
- Glaser, S., Tesch, M. & Glaser, N. (2018). *SpinDrops*. Zugriff am 12.04.2021 auf <https://spindrops.org>
- Martin, C. B., Schmidt, M. & Soniat, M. A. (2011) Survey of the Practices, Procedures, and Techniques in Undergraduate Organic Chemistry Teaching Laboratories. In *J. Chem. Educ.*, 88 (12), 1630–1638.
- 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>