

Rapport:

Kvantkemisk Konceptinventering

tillämpad på 1KB501 VT 2017 (och HT 2017)

Roland Lindh

Programmet för teoretisk kemi

Institutionen för kemi – Ångström

Uppsala Universitet, Sverige

Abstrakt

Denna rapport beskriver implementeringen av en kvantkemisk konceptinventering (KKKI) och dess tillämpning på kursen 1KB501 under vårterminen (och höstterminen) 2017 vid Uppsala Universitet. KKKIn är en adaptation av en "Quantum Chemistry Concept Inventory" (QCCI) som har presenterats i litteraturen ("A Quantum Chemical Concept Inventory for Physical Chemistry Classes", M. Dick-Perez, C. J. Luxford, T. Windus, and T. Holme, *Journal of Chemical Education*, 2016, **93**, 605-612, DOI:10.1021/acs.jchemed.5b00781). Rapporten beskriver i någon detalj anpassningsarbetet med att översätta och anpassa KKKIn till svenska förhållande och till den kurs som den skall tillämpas på. Kortfattat beskrivs hur KKKIn har implementerats på Student Portalen vid Uppsala Universitet. Slutligen presenteras resultaten av tillämpningen av detta redskap på kursen "Kvantmekanik och Kemisk binding I" (1KB501) när denna gavs vårterminen (och höstterminen) 2017. Denna rapport demonstrerar med all tydlighet att konceptinventeringar är ett värdefullt komplement till kursutvärderingar och tentaresultat, i den pedagogiska analysen av en kurs.

INTRODUKTION

Den pedagogiska forskningen, när det gäller undervisning av naturvetenskapliga ämnen, har gjort stora framsteg dom senaste 30 åren. Nya undervisningsmodeller har presenterats (t.ex. Peer-instruction, the-reversed class room, etc.), som den pedagogiska forskningen entydigt visar har större utvecklingspotential och nytta för den enskilda studenten än den traditionella tavelundervisningsmodellen, som praktiseras vid många universitet idag. Dessa framsteg har gjorts parallellt med att nya metoder för att objektivt utvärdera kvalitén av olika undervisningsmodeller och situationer. Ett sådant instrument är de så kallade konceptinventeringar, där elevernas kunskapsnivå, för grundläggande koncept centrala för målen i en kurs, mäts före och efter utbildningstillfället. Detta instrument hjälper också till att belysa om elever kommer in till kursen med bristfälliga kunskaper eller, ännu värre, med missförstånd som den tidigare undervisningen har cementerat – värdefull information för lärarna i deras arbete att förbättra undervisningen och uppnå kursmål. Instrumentet upplyser klart och tydligt om kursen har bidragit till att förbättra sin konceptuella förståelse inom ramen för kursmålen. Dessa inventeringsinstrument är ett värdefullt komplement till traditionella utvärderingar av en kurs som, t.ex. anonyma och obligatoriska studentkursutvärderingar och utfallet procent studenter som klarade tentamina.

Författarna av denna rapport fann dessa konceptinventeringar intressant och inspirerande. Här vill vi rapportera om processen att anpassa en sådan inventering till svenska förhållande och en kurs i kvantmekanik och kemisk bindning (1KB501). Rapporten inkluderar också resultaten från användandet av inventeringsinstrumentet för första gången samt förslag till förbättringar. Vi hoppas att denna rapporten skall inspirera andra pedagoger till att starta liknande arbeten vid Uppsala och andra svenska universitet.

Rapporten som följer är strukturerad i följande sektioner, först presenteras anpassningsarbetet av instrumentet från engelska till svenska, därefter beskrivs hur instrumentet implementerades på Uppsala Universitets studentportal (SP), detta följs av en redovisning av detaljerna kring användandet av instrumentet på kursen 1KB501 VT17 vid Uppsala Universitet. En redovisning av resultatet av instrumentet för detta undervisningstillfälle redovisas i all detalj. Avslutningsvis presenteras tankar kring resultaten samt förslag till hur arbetet med konceptinventeringarna kan göras enklare och bättre. En kortfattad redovisning av resultatet för HT17 redovisas i bilaga 4.

ANPASSNINGSGARBETE

Anpassningsarbetet inbegriper tre faser. Först, konceptinventeringen skall översättas till svenska och svenska förhållande. Sedan, konceptinventeringen skall implementeras på Uppsala Universitets (UUs) studentportal (SP). Slutligen, resultaten i SP skall extraheras och införas i ett excel-dokument för analys. Dessa tre steg redovisas nedan.

Den kvantkemiska konceptinventeringen är en flervälsfrågeformulär med 14 frågor. Dom 14 frågorna är baserade kring grundläggande koncept inom den grundläggande kvantmekaniken och teorin kring den kemiska bindningen. Den ursprungliga konceptinventering har hur utvecklats för amerikanska förhållande och har nyligen publicerats.¹ Den fullständiga och ursprungliga QCCIn laddades ner från artikels associerade sidan för "Supporting Information" (se bilaga 1). Dokumentet finns där tillgängligt både i pdf och doc format. Först översattes den ursprungliga QCCIn till en KKKI (se bilaga 2). Att notera, vid denna typ av arbete är det av vikt att det inte får slarvas, så att anglofioringar undviks och korrekta svenska standarduttryck används. Vid arbetet formulerades svarsalternativen till fråga 9 till att exkludera ett svarsalternativ som skulle kunna anses korrekt om studenten besitter kunskaper i partikelfysik.

Den översatta KKKIn implementerades därefter på UUs SP. SP har en funktion som heter tester (hittas under "lägg till ny funktion"), olika tester samlas under rubriken "Testsamlingar". KKKIn skapades utan förlaga, med det flexibla interface som SP erbjuder. Funktionen är fylld av många alternativ och ibland kan det vara förvirrande, men för det mesta är det självinstruerande. Där är, dock, ett par saker som bör påpekas. Först, för att SP skall notera tiden det tar en student att ta provet behöver provet ha en tidsbegränsning, samt, det är viktigt att man också sätter så att numret på studenternas svarsalternativ tabuleras snarare än texten för det faktiska svaret (det senare är viktigt för analysen av resultaten). Båda dessa inställningar finner man under "Settings". När en test är klar kan denna publiceras och görs tillgänglig för studenterna under en begränsad tid. SP tillåter också att existerande tester kan kopieras och överföras till nya kurstillfällen.

Slutligen, resultaten skall extraheras för analys. Då vi råkar känna en av ursprungsförfattarna har vi fått tillgång till de excel-dokument som har använts som underlag för det ursprungliga arbete. Därför har inga nya excel-dokument utvecklats men originalen har anpassats något. Vid arbetet med att extrahera resultatet från de två testerna, som hade gjorts på SP, noterades det att rapporteringssättet för en individuell test inte kan ändras efter att testen har publicerats. Denna missen renderade oss ett extra arbete om ca två dagar att extrahera och konvertera resultaten till ett format som är lämpligt för fortsatt analys. Med korrekta inställningar föreställer vi oss att tiden för denna processen kan reduceras signifikant.

DETALJER KRING ANVÄNDANDET

Konceptinventeringen är ett frivilligt moment i kursen. För att säkra ett så högt deltagande som möjlig fick studenterna två bonuspoäng, att om möjligt höja sitt betyg vid nästa tentatillfälle, om de deltog vid de två olika testtidpunkterna. Konceptinventeringen gjordes tillgänglig för studenterna på UUs SP vid två tillfällen, 20-31/3 och 2-9/6 2017, respektive. Personliga email skickades ut till studenterna för att upplysa dom om att testen var tillgänglig på kurssidans i SP. Notera att kursen startade 20/3 och att det därför är möjligt att studenter kan redan ha varit exponerade för undervisningen när det deltog vid "före" tillfället. Antalet studenter som deltog var 68 och 50 vid före, respektive, efter kursens genomförande. Antalet studenter som deltog vid båda testtillfällena var 48. Vid det första tillfället var testen inte tidsbegränsad och därför noterades inte tiden det tog för studenterna att fylla i frågorna. Vid "efter" tillfället noterades tiden för hur lång tid det tog att fylla i testen, nu begränsad till max 3 h. Ytterligare 3 av resultaten eliminerades, antingen för att dom använde 3 h för att göra klart testen (antagligen avslutat dom inte testen korrekt), eller att testen gjordes klar på en tid mindre än 3 minuter. I dessa fallen anses resultatet inte representera svar som har fyllts i på ett sätt som är seriös, därför har dessa resultaten eliminerats i den slutgiltiga analysen. Sålunda, resultaten är en redovisning baserad på svaren från 45 studenter.

RESULTAT

I denna sektionen redovisas resultaten från användandet av inventeringsinstrumentet vid kursen 1KB501 VT 2017, vid Uppsala Universitet. Konceptinventeringen tillåter ett stort antal olika analyser, nedan kommer vi att begränsa oss till fyra av dessa: (1) en studie av hur studenternas svar på de olika frågorna varierar före och efter kursen, (2) en studie av total resultatet, (3) en studie av frågornas svårighetsgrad, samt (4) en presentation av den normaliserade förbättringen som kursen representerar.

Före och efter analys

I denna analysen betraktar vi studenternas svarsdistribution för de olika svarsalternativen på de individuella frågorna före och efter kurstillfället (se Illustrationer 1 och 2). Här visas i färgkodade staplar, svarsalternativ efter svarsalternativ, hur många procent som har svarat på dom olika alternativen (A, B, C, och D, rätt svarsalternativ redovisas nedanför varje stapel). Då det gäller resultaten från före kursen har vi att total ignorans skulle rendera att dom fyra alternativen hade samma svarsfrekvens (25%). Avvikelse från detta kan indikera att studenterna har redan förkunskaper från tidigare kurser som förklarar att det korrekta svarsalternativet har en svarsfrekvens som är högre än 25%. Samtidigt skall man ha ögonen öppna för fall då ett felaktigt svarsalternativ (en distraktor) har en hög svarsfrekvens. I det senare fallet skall man vara försiktig så man inte övertolkar höga svarsfrekvenser. Med svar från en liten grupp av studenter är det inte otroligt att felaktiga svar lätt slumpmässigt kan få svarsfrekvenser i storleksordningen 25-35%.

Vid en detaljerad analys av resultaten från före kurstillfället (Illustration 1) finner vi att fråga 1 (likheter mellan AOer or MOer), och 7 (tolkningen av en vågfunktion) hade redan en hög svarsfrekvens för det

korrekta svarsalternativet. Då testen genomfördes under samma vecka som kursen startade kan man inte avgöra om detta berodde på förkunskaper eller att kursen redan hade behandlat detta. Vidare finner vi att fråga 4 (karaktären av energiändringen när en bindning bildas), samt 12 (en korrekt matematisk approximation av en vågfunktion i tre variabler) ger oss näring till att fastslå att eleverna tror att bildandet av en kemisk bindning är exoterm eller endoterm beror på de inblandade atomerna (51.1%), samt en felaktig förståelse i hur en funktion kan approximeras (42.2%). I båda dessa fallen bör man fråga sig hur undervisningen i termodynamik och fysikalisk kemi har misslyckat med att förmedla grundläggande kunskap om den kemiska bindningen, samt hur undervisningen i matematik inte har förberett studenterna i kunskaper om hur man approximerar funktioner. Om frågan inte går att lösas på denna nivå bör undervisningen ta detta faktum till overseende. Det bör påpekas att individuella testtillfällen kan peka ut icke-existerande brister och att faktiska brister kan endast säkerställas genom att konceptinventeringar över en längre tid entydigt ger samma resultat.

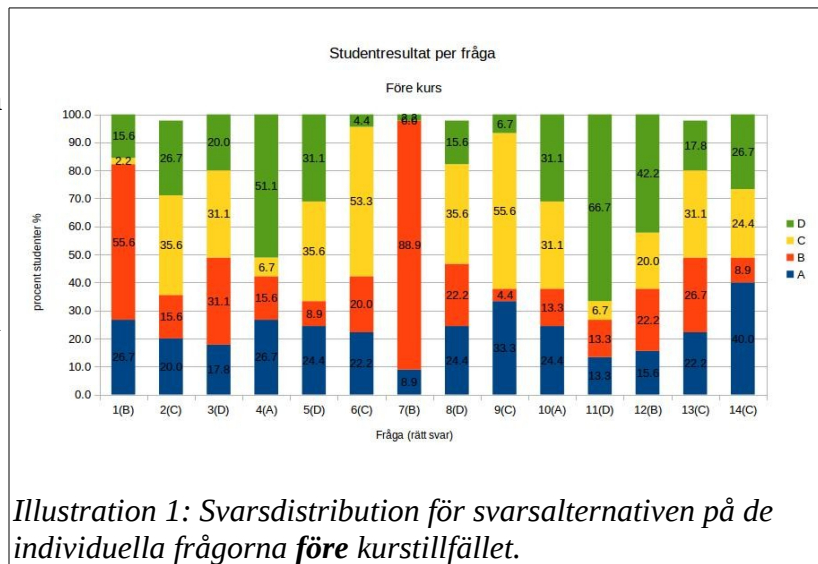


Illustration 1: Svardsdistribution för svarsalternativen på de individuella frågorna före kurstillfället.

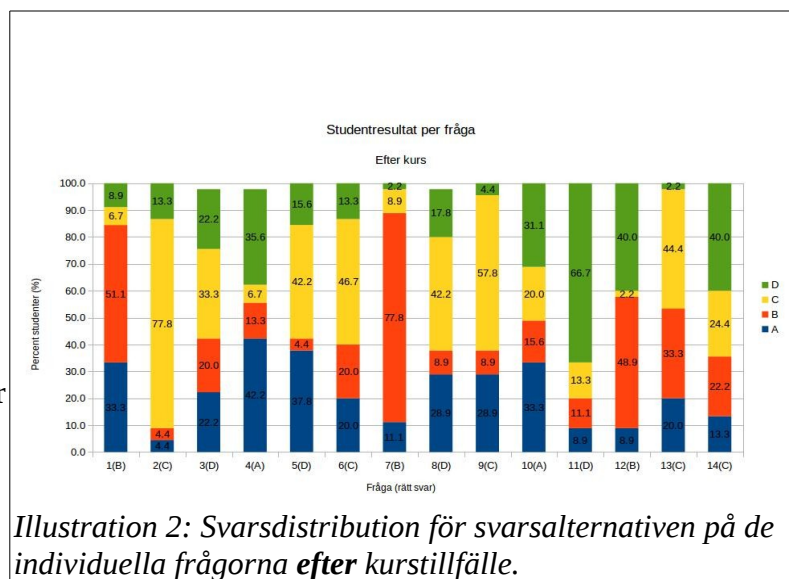


Illustration 2: Svardsdistribution för svarsalternativen på de individuella frågorna efter kurstillfälle.

Vid en analys av jämförelse av resultaten från efter kursen med före finner vi att rätt svarsalternativ har ökat sin svarsfrekvens i dom flesta fallen. Vi noteras detta speciellt för fråga 2 (varför det inte finns analytiska lösningar på den icke-relativistisk modellen för helium) och 12 (se texten ovan), här ökar svarsfrekvensen från 35,6% till 77,8% och från 22,2% till 48,9%, respektive. Men, dessa fallen verkar vara undantag, generellt är ökningarna högst marginella, och i en del fall har rätt svarsalternativ minskat sin svarsfrekvens (frågorna: 1, 5, 6, och 7). Vi noterar, t.ex., att för fråga 5 (förståelsen av en kvantmekanisk oscillator) har rätt svarsalternativ ändrat sig från 31,1% till 15,6%. Vi noterar att rätt svarsalternativ får mer än 50%-ig svarsfrekvens för frågorna 1(51,1%), 2(77,8%), 7(77,8%), 9(57,8%), och 11(66,7%). Detta bör mana till eftertanke och förslag på förbättringar så att kursen ökar förståelsen av grundläggande koncept inom kvantmekaniken och den kemiska bindningen.

Analys av totalresultatet

En analys av totalresultatet (hur många rätt en student fick, för och efter kursen) kan ge en effektiv bild av hur undervisningen har lyckats med sina mål att förmedla kunskaper om grundläggande koncept. I Illustration 3 redovisar vi distributionen av totalresultatet före (röda staplar) och efter (blå staplar) för de 45 studenter som deltog i båda under-

visningstillfällena. Vi kan notera att höga staplar för låga resultat från före kursen har eliminerats, se t.ex. staplarna vid 4 och 5, och ersatts med höga staplar för högre resultat efter kursen. Detta vittnar om hur kursens har lyckats med att förbättra studenternas kunskapsnivå. Ett annat sätt att analysera resultaten är att betrakta medelvärdet (med standard avvikelsen) samt medianvärdet före och efter kursens genomförande. Vi finner att medelvärdet är $5,51 \pm 2,05$ och $6,27 \pm 2,58$ och medianvärdena är 5 och 6 före respektive efter kursen. Ett resultat som ligger visar

att studenterna efter kursen behärskar mindre än 50% av dom grundläggande koncept som konceptinventeringen testar. I jämförelse med resultaten från artikel¹ (se Tabell 1), $4,47 \pm 2,3$ och $7,2 \pm 2,5$, ser vi att vår undersökning ger resultat som över- respektive underpresterar för testen, före och efter kurstillfället.

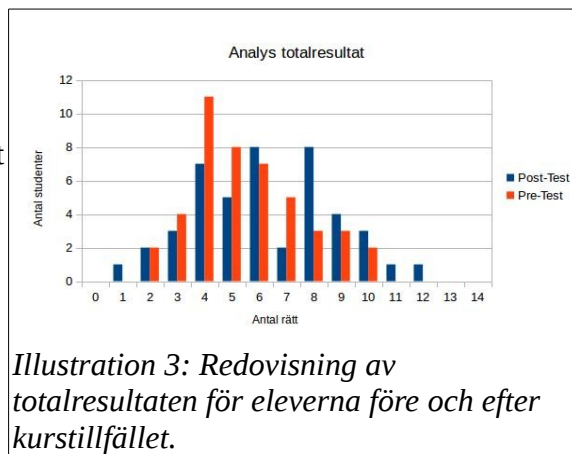


Illustration 3: Redovisning av totalresultaten för eleverna före och efter kurstillfället.

Frågornas svårighetsgrad

För att en konceptinventering skall vara bra på att skilja på studenters förståelse av ett ämne är det av vikt att inventeringen innehåller relevanta frågor. För att studera detta finns där flera olika analyser som kan göras, bland dessa är Fergusons delta som mäter vidden av studenternas totalresultat.^{2,3} Ett annat sådan instrument är förhållandet mellan varje frågas svårighetsgrad och "point biserial correlation coefficient" för de individuella frågorna.⁴

Vi börjar med Fergusons delta (δ) mätningar, generellt brukar mätningar där elevernas resultat har en större spridning en bättre möjligheten att särskilja studenternas förståelse av ämnet. Tester med ett δ som är större än 0,9 klassificeras att uppfylla detta kriterium. För KKKIn, som genomfördes för 1KB501 på VT 2017, uppmättes $\delta_{\text{före}}=0,92$ och $\delta_{\text{efter}}=0,95$. Detta indikerar att testerna var acceptabla och att resultaten inte var uppdelade i två distinkt motsatta grupper, där ena gruppen studenter inte klarade knappt några frågor och att den andra gruppen, omvänt, nästan klarade all frågorna.

Vi går vidare och tittar på testens svårighetsgrad (P) och "point biserial correlation coefficient" (r_{pbi}) (se Illustration 4). Svårighetsgraden (P) är förhållandet mellan antalet studenter som besvarade frågan korrekt och antalet studenter som tog testen. Typiskt beskrivs en uppgift som enkel ifall $P > 0,8$ och som svår om $P < 0,3$. "point biserial correlation coefficient" (r_{pbi}) används för att mäta korrelationen mellan studentens dikotomiska resultat på en fråga och studentens totala resultat.⁵ Denna parametern kan indikera om en fråga kan diskriminera mellan hög och låg presterande studenter eller om sannolikheten för att en student svara rätt på en fråga inte korrelerar med studentens totala resultat. Ett lågt värde på r_{pbi} indikerar en låg korrelation. Ett värde på r_{pbi} över 0.2 anses tillfredsställande.⁶ I Illustration 4 har vi kompletterat figuren med hjälplinjer motsvarande $P=0,30$ och $P=0,80$, samt $r_{pbi}=0,20$. Frågor med låga r_{pbi} kan bero på missförstånd i att förstå frågan, eller att konceptet inte har berörts i undervisningen. Vi förväntar oss att efter kursen skall frågornas svårighetsgrad ha sjunkit (d.v.s. P-värdet har ökat).

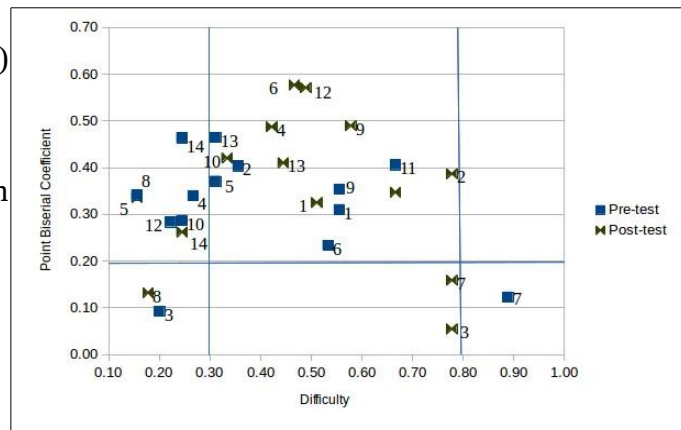


Illustration 4: Förhållandet mellan frågornas svårighet (difficulty, P) och deras "point biserial correlation coefficient" (r_{pbi}) för och efter kursens genomförande.

Låt oss betrakta resultaten vid de aktuella mätillfällena. Generellt noterar vi att frågorna får ett högre P-värde (d.v.s. dom är lättare) efter kursens genomförande. Fråga 7 är den enda som anses för lätt och detta endast innan kursens genomförande. Ett stort antal frågor är för svåra ($P < 0,30$) före kursen men de flesta av dessa har efter kursens genomförande en acceptabel svårighetsgrad. Undantagen är frågorna 8 (harmoniska oscillator) och 14 (partikeln i lådan), som fortfarande efter kursen har en hög svårighetsgrad. När det gäller r_{pbi} finner vi att för frågorna 3 (kvalitativ förståelse av en kemisk binding) och 7 (förståelse av vad vågfunktionen står för), både före och efter kursens genomförande, inte korrelerar studenternas sannolikhet för ett korrekt resultat med deras totala resultat. Det samma gäller för fråga 8 (harmonisk oscillator) men endast efter kursens genomförande. Resultaten från fråga 3 och 7 bör analyseras bättre och kanske resultera i att frågorna formuleras om.

Normaliserad förbättring

I denna sektionen presenterar vi den normaliserade förbättringen (definition: antalet studenter som har lärt sig något dividerat med antalet studenter som skulle ha kunnat lärt sig något) för varje fråga, för att undersöka studenternas resultat före och efter kurstillfället (se Tabell 1). Vidare så identifierar vi distraktorer med hög svarsfrekvens efter kursens genomförande. Detta för att finna missförstånd som kvarstår efter kursen och ge indikationer på var en stor förbättringspotential existerar.

På det hela taget så representerade kursen en förbättring i förståelsen av koncept. Dock kan vi konstatera att för fyra av dessa koncept (frågorna 7, 5, 6 och 1), mäter vi en faktisk försämring. Vi noterar också att för 5 av frågorna är den normaliserade förbättringen svag (0.00-0.05). Detta kan vi

jämföra med resultaten i ursprungsartikeln, gjord på 140 studenter, som hade ett koncept med en negativ utveckling och att den normaliserade förbättringen för de övriga koncepten låg i intervallet 0.15-0.57. Vi registrerar att en motsvarande förbättring fanns för 5 av koncepten när mätningen gjordes för 1KB501 VT 2017.

Fråga	Innehåll	Normaliserad förbättring
7	Partiklars vågegenskaper	-1,00
5	Korrespondensprincipen – den klassiska gränsen	-0,23
6	Egenskaper hos kemiska bindningar	-0,14
1	Orbitaler	-0,10
11	Kvalitativ beskrivning av kvantmekaniska fenomen	0,00
14	Partikeln i lådan	0,00
8	Harmoniska oscillatorn	0,03
3	Egenskaper hos kemiska bindningar	0,03
9	Potentiella energikurvor	0,05
10	Egenskaper hos vågfunktioner	0,12
13	Energiniivåer och spektroskopi	0,19
4	Egenskaper hos kemiska bindningar	0,21
12	Egenskaper hos vågfunktioner	0,34
2	Egenskaper hos kemiska bindningar	0,66

Tabell 1: Normaliserad förbättring för de 14 frågorna i KKKIn för de 45 studenterna som deltog i testen både före och efter kurstillfället.

När det gäller missförstånd som kvarstår efter kursen finner vi ett antal frågor där en distraktor attrahera mer än 30% svarsfrekvens. Dessa är frågorna 1, 4, 5, 10, 12, och 14. På fråga 1 har alternativ A en svarsfrekvens på 33,3 % – att orbitaler beskriver positionen för en eller flera elektroner. På fråga 4 har svarsalternativ D en svarsfrekvens på 35,6 % – att om en kemisk bindning är exoterm eller endoterm beror detta på de inblandade atomerna. På fråga 5 har alternativ A en svarsfrekvens på 37,8 % – den kvantmekanisk vågfunktionen för en oscillator vibrerar med tiden på samma sätt som en fjäder. På fråga 10 har svarsalternativ D en svarsfrekvens på 31,1 % – att en vågfunktion inte tvunget måste vara integrerbar över hela rummet. På fråga 12 har svarsalternativ D en svarsfrekvens på 40,0 % – ett matematiskt missförstånd om hur man approximerar en funktion som beror av tre variabler. Samt, på fråga 14 där svarsalternativ D har en svarsfrekvens på 40,0 % – att en lådpotential som är oändlig utanför lådan leder till att det inte finns analytiska lösningar. In ursprungsartikeln fann man två distraktorer som hade en svarsfrekvens som var större än 30 % (41 och 32 %), samt i spannet 25-30% fanns där 4 distraktorer.

SAMMANFATTNING OCH FÖRSLAG

I denna rapport beskriver vi anpassningen, implementationen och tillämpningen av en kvantkemisk konceptinventering, som nyligen har publicerats i litteraturen för kemisk pedagogik.¹ Anpassningen var ganska så enkel, medan implementationen av KKKIn på UUs SP kräver lite ytterligare anpassningar för att förenkla proceduren att extrahera resultat och analysera dessa. Vi tänker använda KKKIn igen hösten 2017 och hoppas då kunna finslipa dessa detaljerna.

När det gäller användningen av KKKIn för 1KB501 är vi, efter att ha använt den en gång, övertygade om att instrumentet kan ha en positiv effekt så att undervisningen på kursen kan bli bättre. Vi fann vid vår mätning, baserad på svar från 45 studenter, att totalresultatet för dom 14 frågorna ökade från $5,51 \pm 2,05$ till $6,27 \pm 2,58$. Vi fann att den normaliserade förbättringspotentialen indikerade signifikanta förbättringar för 4 av frågorna och försämringar för 4 av frågorna. Instrumentet belyser brister i förkunskaper och etablerade missförstånd, som tidigare undervisning antingen har bidragit till eller, som bäst, inte lyckats reda ut. Här vill vi speciellt nämna elevernas missförstånd när det gäller att förstå konceptet en kemisk bindning från ett energetiskt koncept, eller att förstå skillnaden mellan en klassisk och en kvantmekanisk pendel. Dom specifika resultaten som denna inventering ger belyser samband som vi i vår lärargrupp kommer att diskutera och finna förslag till förbättringar på, dessa redovisas inte här. Vi kommer under 2017 och 2018 att fortsatt använda instrumentet för att identifiera var kursen har sin största utvecklingspotential, att för dessa föreslå förbättringar och implementera dessa vid följande kurstillfälle. En kort rapport om resultaten för 1KB501 HT 2017 finns i bilaga 4. Denna rapporten befäster och stödjer resultaten och konklusionerna för VT 2017.

Avslutningsvis, vi finner att konceptinventeringar är ett intressant komplement till den obligatoriska kursutvärderingen, samt information som, t.ex., hur många studenter som klarade provet. Konceptinventeringar är nyttiga i ett fortgående arbete med att säkerställa kvalitén på undervisningen vid universitetet. Vi föreslår att UU, i sin strävan att vara ett modernt världsledande universitet, med undervisning med högsta pedagogiska kvalitet, fortbildar lärarkåren i användandet av konceptinventeringar och att dessa blir en obligatorisk del av kvalitetssäkringen av utbildningsportfölj.

Normalt görs konceptinventeringar utan att resultatet korreleras med tentaresultatet. I denna rapporten gör vi ett undantag, efter som denna informationen har efterlysts av flera personer. Resultatet av denna korrelation redovisas i bilagan 3.

Författarens tack R.L tackar TUFF för finansiellt stöd genom ett stipendium för ett projekt att implementera moderna pedagogik i kursen "Kvantmekanisk och Kemisk Binding I". I detta projektet är konceptinventeringen ett av de nya instruments som skall prövas. R.L. tackar Erik Sjöqvist för hjälp med att översätta ursprungsinstrumentet från engelska till svenska och svenska förhållanden, samt Felix Ho för upplysningar om testoptionen på SP.

Referens

1. "A Quantum Chemical Concept Inventory for Physical Chemistry Classes", M. Dick-Perez, C. J. Luxford, T. Windus, and T. Holme, *Journal of Chemical Education*, 2016, **93**, 605-612.
DOI:10.1021/acs.jchemed.5b00781
2. "On the Theory of Test Discrimination", G. A. Ferguson, *Psykometrika*, 1949, **14**, 61-68.
3. "Approaches to Data Analysis of Multiple-Choice Questions", L. Ding and R. Beichner, *Phys. Rev. Spec. Topics, Phys. Educ. Res.*, 2009, **5**, 1-17.
4. "Development of the Bonding Representations Inventory to Identify Student Misconceptions about Covalent and Ionic Bonding Representations", C. J. Luxford and S. L. Bretz, *J. Chem. Educ.*, 2014, **91**, 312-320.
5. "Understanding the State of the Art for Measurement in Chemistry Education Research: Examining the Psychometric Evidence", *J. Chem. Educ.*, 2013, **90**, 536-545.
6. "A Handbook of Test Constructions: Introduction to Psychometric Design", P. Kline, Methuen: New York, 1986.

Bilaga 1:

A Quantum Chemistry Concept Inventory for Physical Chemistry Classes

By

Marilu Dick-Perez,[†] Cynthia J. Luxford,[‡] Theresa L. Windus,[†] Thomas Holme^{†*}

[†]Department of Chemistry, Iowa State University, Ames, Iowa 50011, United States

[‡]Department of Chemistry and Biochemistry, Texas State University, San Marcos, Texas 78666, United States

The QCCI items are shown below, with correct answers underlined.

- Which is a key similarity between atomic orbitals (AOs) and molecular orbitals (MOs)?
 - Both describe the position of an electron or pair of electrons.
 - Both can be used to determine the probability of finding an electron in space.
 - Both are derived from hydrogen, AOs from H atoms and MOs from H₂ molecules.
 - Both are constructed from functions that are analytic solutions to simpler quantum systems.
- What makes the solution of the quantum treatment of He atoms impossible to solve analytically (so approximations must be made)?
 - Having neutrons as well as protons in the nucleus.
 - Having more than one proton in the nucleus.
 - Having more than one electron.
 - Having a filled 1s orbital.
- Which statement about a chemical bond in H₂⁺ is correct?
 - It cannot exist because it does not have a pair of electrons.
 - It cannot exist because a single electron cannot overcome nuclear repulsion.
 - It does exist because the electron spin creates a magnetic field between the protons.
 - It does exist because there is a buildup of electron density between the two protons.
- Which statement best describes the energy change when a chemical bond is formed?
 - When a chemical bond forms, the system becomes more stable and energy is released.
 - Energy is required to form the bond and that energy is stored within the bond.
 - There is no overall energy change when a bond is formed because energy can be neither created nor destroyed.
 - Energy may be absorbed or released when a bond is formed depending on which atoms form the bond.

5. How is the harmonic oscillator model in quantum mechanics (QM) analogous to the motion of a classical mechanics (CM) spring?
- The wavefunction oscillates in time like a spring.
 - The motion of the harmonic oscillator slowly damps until motion has stopped.
 - The QM wavefunction has oscillating momentum much like the CM spring.
 - The classical limit of the QM harmonic oscillator, for the most probable location, yields the CM spring results.
6. What happens when two hydrogen atoms form a molecule of H₂?
- A bond forms once the two hydrogen atoms reach the distance that is most stable. A process which requires energy.
 - The hydrogen molecule becomes more stable because it contains more energy than two non-interacting hydrogen atoms.
 - The potential energy of the system decreases making the system more stable.
 - The pair of electrons make a single rigid bond forming a stable connection between the two hydrogen atoms - like a stick joining the two atoms together.
7. In quantum mechanics, electrons in atoms are described by a wavefunction. What do wavefunctions describe about the system?
- The average position of electrons over time.
 - Once squared, the probability of finding an electron.
 - The combination of all pathways the electrons can take to orbit the nucleus.
 - The amplitude of the vibrations that electrons make as they move around the nucleus.
8. What is a major effect of anharmonicity on the vibrational energy?
- The ground state vibrational energy increases in energy.
 - The ground state vibrational energy decreases in energy.
 - The difference between vibrational energy levels increases.
 - The difference between vibrational energy levels decreases.
9. Practically speaking, what happens if you try to push the atoms in a hydrogen molecule closer to each other?
- At first the potential energy increases, but after the atoms are brought very close to each other the system releases energy to the surroundings.
 - The potential energy of the system increases to form bond energy, which causes the two atoms to be more strongly held together.
 - The potential energy of the system drastically increases as the electrons and the nuclei of the two atoms repel each other.
 - The electron pair no longer fits between the nucleus and the H-H bond is broken.
10. If a specific mathematical function is not ____ it can still be used as a wavefunction.
- antisymmetric
 - continuous
 - continuously differentiable
 - integrable over all space
11. Which observation about burning sodium requires quantum mechanics to explain?

- a) The metal liquefies once the melting point is reached.
 - b) The flame gets larger when adding oxygen.
 - c) The temperature of the metal increases.
 - d) The flame turns yellow.
12. If you have three variables (r , θ , and ϕ) describing a wavefunction and the three variables do not depend on each other, then
- a) the full wavefunction can be written as a sum of single variable functions.
 - b) the full wavefunction can be written as a product of single variable functions.
 - c) the three variables should be transformed into variables that depend on one another.
 - d) the full wavefunction can be written as a linear combination of single variable functions.
13. Among the spectroscopic transitions that can be observed for ozone, O_3 , are lines at 31 cm^{-1} , 1110 cm^{-1} and $10,000\text{ cm}^{-1}$. What type of transition is occurring for each of these lines?

	31 cm^{-1}	1110 cm^{-1}	$10,000\text{ cm}^{-1}$
a)	Electronic	Vibrational	Rotational
b)	Electronic	Rotational	Vibrational
c)	<u>Rotational</u>	<u>Vibrational</u>	<u>Electronic</u>
d)	Rotational	Electronic	Vibrational

14. Consider the solutions to the one dimensional “particle in a box” model. How does the quantum mechanical solution change for a particle contained within a zero potential energy, fixed length “box” surrounded by an infinite potential versus the same particle surrounded by a finite potential?
- a) The solutions are the same because the length of the “box” is fixed.
 - b) The gaps between energy levels decrease in the solution of the infinite potential as compared to the finite potential box.
 - c) The solutions differ in that the finite potential allows tunneling while the infinite potential does not.
 - d) The solution to the finite potential can be solved analytically, while the infinite potential solution cannot be, thus approximations must be used.

Bilaga 2:

Kvantkemisk Konzeptinventering (KKKI)

KKKIns frågor beskrivs nedan, med rätt svar understruket.

- Vad är den viktigaste likheten mellan atomorbitaler (AOer) och molekylorbitaler (MOer)?
 - Båda beskriver positionen för en eller ett par av elektroner.
 - Båda kan användas för att bestämma sannolikheten att hitta en elektron någonstans i rummet.
 - Båda har sitt ursprung från väte, AOer från H atomer och MOer från H_2 molekyler.
 - Båda är konstruerade från funktioner som är analytiska lösningar till enklare kvantsystem.
- Vad är det som gör det omöjligt att finna en analytisk lösning till den icke-relativistiska kvantmekaniska beskrivningen av He atomer, där kärnan beskrivs med en punktladdning?
 - Helium har både neutroner och protoner i kärnan.
 - Helium har mer än en proton i kärnan.
 - Helium har mer än en elektron.
 - Helium har en fylld 1s-orbital.
- Vilket påstående angående den kemiska bindningen i H_2^+ är korrekt?
 - Där är ingen eftersom den inte har ett elektronpar.
 - Där är ingen eftersom en ensam elektron kan inte kompensera för kärnrepsulsionen.
 - Den finns eftersom elektronens spinn skapar ett magnetiskt fält mellan protonerna.
 - Den finns på grund av att där är en ökad elektrontäthet mellan protonerna.
- Vilket påstående beskriver bäst energiändringen när en bindning bildas?
 - När en kemisk bindning bildas blir systemet stabilare och energi frigörs.
 - Energi behövs för att bilda en bindning, energin lagras i bindningen.
 - Där är ingen ändring av energin på det hela taget då energi varken kan skapas eller förstöras.
 - Energi kan absorberas eller frigöras beroende på vilka atomer som bildar bindningen.
- På vilket sätt är energi-egenfunktionerna till en kvantmekanisk harmoniska oscillator analog till rörelsen hos en fjäder i klassisk mekanik?
 - Den kvantmekaniska vågfunktionen oscillerar med tiden på samma sätt som en fjäder.
 - Rörelsen hos en kvantmekanisk harmonisk oscillator dämpas långsamt till den står helt stilla.
 - Rörelsemängden för den kvantmekaniska vågfunktionen oscillerar på samma sätt som den klassiskt mekaniska fjädern.

- d) I den klassiska gränsen för den kvantmekaniska oscillatorn är den mest sannolika positionen den samma som för den klassiska fjädern.
6. Vad händer när två väteatomer bildar H₂ molekyl?
a) En bindning bildas när de två väteatomerna har uppnått det mest stabila avståndet. Denna processen kräver energi.
b) Vätemolekylen blir mera stabil, än två fria icke-växelverkande väteatomer, på grund av att den innehåller mer energi än dessa.
c) Den potentiella energin minskar vilket gör molekylen mera stabil.
d) Ett par av elektroner bildar en fast rigid bindning som utgör en stabil anslutning mellan atomerna - ungefär på samma sätt som en pinne mellan två bollar.
7. I kvantmekaniken beskrivs elektroner i atomer med vågfunktioner. Vad beskriver vågfunktionen hos systemet.
a) Den genomsnittliga positionen för en elektron medelvärdat över tiden.
b) Kvadrerat beskriver den sannolikheten att finna en elektron vid en given position.
c) En kombination av alla möjliga vägar en elektron kan ta då den snurrar runt kärnan.
d) Amplituden hos de vibrationer som elektronen har då den rör sig kring kärnan.
8. Vad är den största effekten som icke-harmonisiteter i potentialenergin, som t.ex. i Morsepotentialen, har på vibrationsenergierna?
a) Vibrationsenergin för grundtillståndet ökar.
b) Vibrationsenergin för grundtillståndet minskar.
c) Skillnaden mellan dom vibrationella energinivåerna ökar.
d) Skillnaden mellan dom vibrationella energinivåerna minskar.
9. Vad händer om du försöker att trycka ihop de två atomerna i vätemolekyl?
a) Elektronerna får inte plats på samma ställe och hoppar över till den anti-bindande orbitalen. Detta ger upphov till en stark repulsion.
b) Den potentiella energin ökar så att bindingsenergin ökar, vilket leder till att atomerna binds ännu starkare.
c) Den potentiella energin ökar dramatiskt då atomkärnorna och elektronerna repellerar varandra.
d) Elektronparet får inte längre plats mellan atomkärnorna och H-H bindningen bryts.
10. Om en utvald matematisk funktion inte är _____ kan den ändå användas som en vågfunktion
a) antisymmetrisk
b) kontinuerlig
c) kontinuerligt differentierbar
d) Integrerbar över hela rummet
11. Vilken observation angående brinnande natrium kräver en kvantmekanisk förklaring?
a) Metallen blir flytande när smältpunkten har uppnåtts.
b) Lågan blir större när man tillför syre.
c) Metallens temperatur ökar.

- d) Lågan har en gul färg.
12. Om du har tre variabler (r , θ , and ϕ) som beskriver en vågfunktion, och dessa tre beror inte på varandra, då
- kan den totala vågfunktionen skrivas som en summa av en-variabel funktioner.
 - kan den totala vågfunktionen skrivas som en produkt av en-variabel funktioner.
 - bör dessa tre variabler transformeras till variabler som beror av varandra.
 - kan den totala vågfunktionen skrivas som en linjärkombination av en-variabel funktioner.

13. Bland de spektroskopiska övergångarna som har observerats för ozon, O_3 , finner man övergångar vid 31 cm^{-1} , 1110 cm^{-1} and $10,000\text{ cm}^{-1}$. Vilken typ av övergångar rör det sig om i dessa fallen?

	31 cm^{-1}	1110 cm^{-1}	$10,000\text{ cm}^{-1}$
a)	Elektronisk	Vibrationell	Rotationell
b)	Elektronisk	Rotationell	Vibrationell
c)	<u>Rotationell</u>	<u>Vibrationell</u>	<u>Elektronisk</u>
d)	Rotationell	Elektronisk	Vibrationell

14. Betrakta lösningen till den endimensionella "partikel-i-lådan" modellen. Hur ändrar sig den kvantmekaniska lösningen för en partikel i lägsta energi-egentillståndet fixerad i en lådpotential med oändligt höga väggar, i jämförelse med samma partikel, under samma förutsättning, men omgiven av en begränsad potential?
- Lösningarna är dom samma då storleken på "lådan" är den samma.
 - Skillnaden mellan energierna på lösningarna för den begränsade potentialen minskar i jämförelse med en oändlig potential
 - Lösningarna skiljer i det avseendet att för en begränsad potential förekommer tunneling, så är inte faller för en oändlig potential.
 - Lösningen för en begränsad potential kan finnas analytiskt, så är inte faller för en oändlig potential, där approximativa metoder måste användas.

Anpassat och översatt av Roland Lindh och Erik Sjöqvist, Institutionen för kemi – Ångström, Uppsala Universitet, Sverige, från

A Quantum Chemistry Concept Inventory for Physical Chemistry Classes

By

Marilu Dick-Perez,[†] Cynthia J. Luxford,[‡] Theresa L. Windus,[†] Thomas Holme^{†*}

[†]Department of Chemistry, Iowa State University, Ames, Iowa 50011, United States

[‡]Department of Chemistry and Biochemistry, Texas State University, San Marcos, Texas 78666, United States

Bilaga 3:

Korrelationen ”procent rätt” på tentamen respektive ”efter”-inventeringen redovisas grafiskt i Illustration 5. Notera att studenter med ett tentaresultat mindre än 50% underkändes. I figuren har en hjälplinje dragits motsvarande en linjär korrelation mellan resultaten på inventeringen och tentamina. Generellt finner vi att studenternas tentaresultat är signifikant bättre än deras konceptuella förståelse av ämnet. Har vi tränat dom till att klara tentor men misslyckats med att förklara koncepten? Spridningen av punkterna ovan diagonalen reflekterar en låg korrelation mellan de två olika resultaten. Speciellt noterar vi att om en student har mer än 80% rätt på tentamen saknas korrelation med resultatet på inventeringen – vi finner det ungefär lika sannolikt för en student med ett resultat i intervallet 25-90% på konceptinventeringen att få ett tentaresultat som är bättre än 80%. Illustration 5 visar med all tydlighet behovet av ytterligare instrument för att bedöma kvalitén av undervisningen – konceptinventeringar är ett sådant instrument.

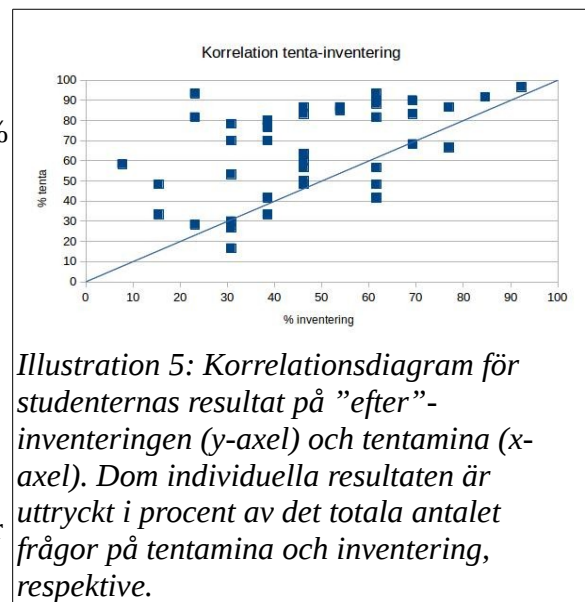


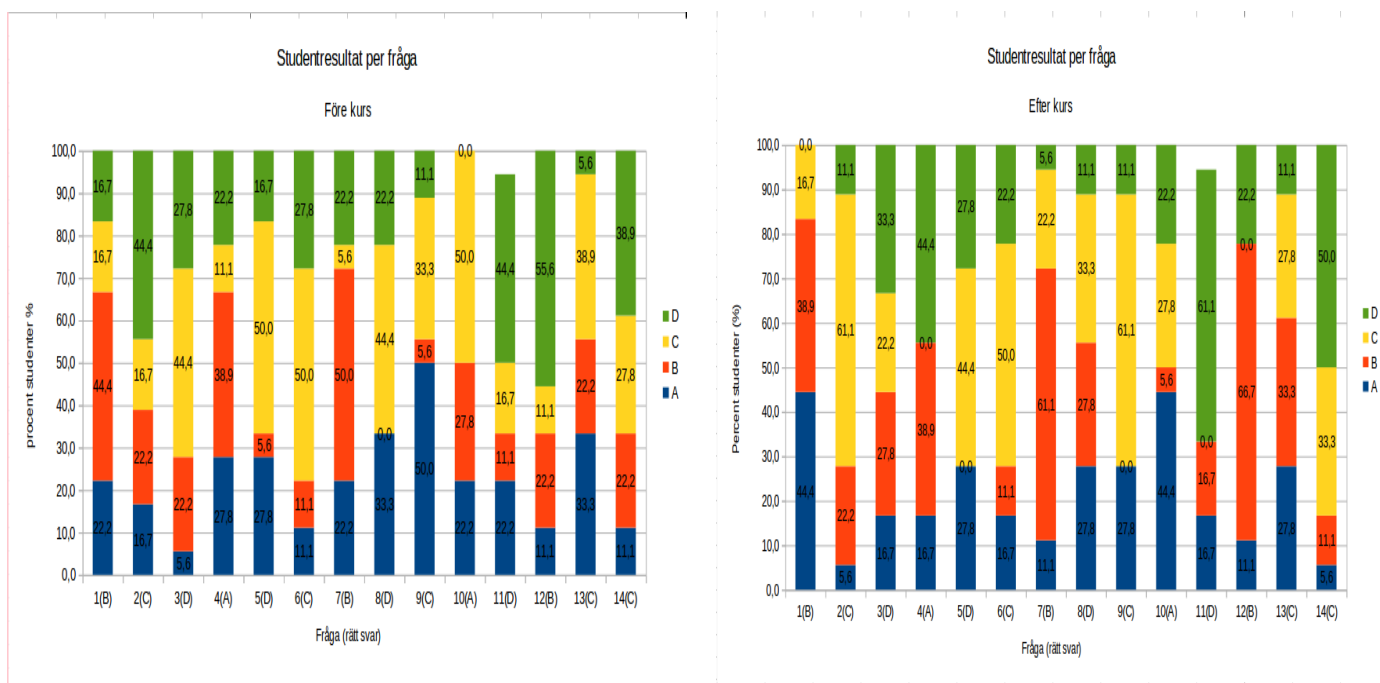
Illustration 5: Korrelationsdiagram för studenternas resultat på ”efter”-inventeringen (y-axel) och tentamina (x-axel). Dom individuella resultaten är uttryckt i procent av det totala antalet frågor på tentamina och inventering, respektive.

Bilaga 4:

Kortfattad redovisning av resultat för 1KB501 HT17.

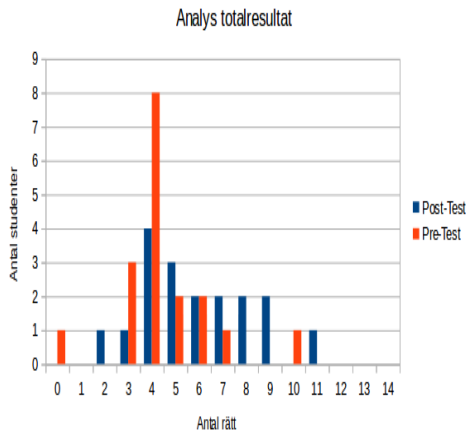
Av 32 registrerade studenter deltog 18 studenter i båda enkäterna.

Före och efter analys



Resultatet för 1KB501 HT17 är i många avseende liknande de för VT17. T. ex. vi finner att missförståndet, när det gäller karaktären av energiförändringen när en bindning bildas (fråga 4), vara det samma. På samma sätt som tidigare finner vi att en del frågor har fått en ökad svarsfrekvens för rätt svarsalternativ "efter kurs" in jämförelse med "före kurs". Men, vi finner också det motsatta, se frågorna 1, 4, 8, och 13.

Analys av totalresultat



Här ser vi också samma tendenser som vi noterade för VT17 resultatet. Vi finner att medelvärdet är $4,44 \pm 2,04$ och $5,94 \pm 2,39$ och medianvärdena är 4 och 5,5 före respektive efter kursen.

Normaliserad förbättring

Fråga	Innehåll	Normaliserad förbättring
7	Partiklars vägegenskaper	0,22
5	Korrespondensprincipen – den klassiska gränsen	0,13
6	Egenskaper hos kemiska bindningar	0,0
1	Orbitaler	-0,10
11	Kvalitativ beskrivning av kvantmekaniska fenomen	0,30
14	Partikeln i lådan	0,08
8	Harmoniska oscillatorn	-0,14
3	Egenskaper hos kemiska bindningar	0,08
9	Potentiella energikurvor	0,42
10	Egenskaper hos vågfunktioner	0,29
13	Energivåer och spektroskopi	-0,18
4	Egenskaper hos kemiska bindningar	-0,15
12	Egenskaper hos vågfunktioner	0,57
2	Egenskaper hos kemiska bindningar	0,53

I tabellen ovan är svarsalternativen rangordningen lägst till högst enligt resultatet för VT17. Vi noterar att de två frågor som redovisar störst normaliserad förbättring är dom samma, samt att för fråga 1 har det vid båda kurstillfällena skett en försämring. Vi finner försämring för fyra frågor, samt signifikanta förbättring för tre frågor. Variationen i resultaten kan möjligtvis hänföras till att antalet studenter är signifikant mindre vid denna inventeringen och att det också rör sig om en annan grupp av studenter.

