

Lars-Jochen Thoms<sup>1,2</sup>  
Florian Furrer<sup>1</sup>  
Meredith Rhiner<sup>1</sup>  
Martin Bullock<sup>1,2</sup>  
Tobias Rothlin<sup>3</sup>  
Leonie Däullary<sup>3</sup>  
Mitra Purandare<sup>3</sup>  
Frieder Loch<sup>3</sup>  
Johannes Huwer<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Pädagogische Hochschule Thurgau  
<sup>2</sup>Universität Konstanz  
<sup>3</sup>Ostschweizer Fachhochschule

## OrChemSTAR – mit AR und KI Strukturformeln zeichnen lernen

Die Strukturen chemischer Verbindungen können auf unterschiedliche Weise dargestellt werden. Diese mannigfachen Repräsentationsformen stellen jeweils bestimmte Eigenschaften einer Verbindung in den Vordergrund. Dazu gehören auch chemische Strukturformeln, die ein zentrales Mittel der fachspezifischen Kommunikation in der Chemie und regelmäßig Bestandteil der Bildungspläne sind. Sie ermöglichen es, die räumliche Anordnung von Atomen in Molekülen darzustellen, was jedoch insbesondere für Lernende herausfordernd ist. Häufige Schwierigkeiten liegen in der abstrakten Natur dieser Darstellungen und dem Übergang zwischen verschiedenen Repräsentationen oder Repräsentationsebenen (makroskopisch, submikroskopisch, symbolisch; Johnstone, 1983). Das Lesen dieser Darstellungen, die Auswahl einer für einen bestimmten Zweck geeigneten Darstellungsform und das Zeichnen chemischer Strukturformeln erfordern von Lernenden entsprechende Kompetenzen. Während Expert\*innen leicht verschiedenen Darstellungsformen ineinander übersetzen können (Kozma, 2020), müssen Anfänger die erforderlichen mentalen Modelle erst noch aufbauen (Sunyono et al., 2015) sowie die Gestaltungsregeln der verschiedenen Darstellungsformen erlernen und das Zeichnen einüben. Dieser Prozess kann von außen z. B. durch die Verwendung multipler Repräsentationen unterstützt werden (Kozma & Russell, 2005; Sunyono et al., 2015). Im vom Schweizerischen Nationalfonds geförderten Projekt **OrChemSTAR** (Schweizerischer Nationalfonds, 2024) wird untersucht, wie Lernende in diesem Lernprozess mithilfe einer auf **Künstlicher Intelligenz (KI)** und **Augmented Reality (AR)** basierender Lernumgebung unterstützt werden können, z. B. durch adaptive Hilfestellungen und individuelle Lernwege.

Die Forschungsfragen lauten konkret:

- Welche Erfolgsbedingungen existieren für den Einsatz einer AR-App, die chemische Verbindungen erkennt und multiple Repräsentationen der Verbindungen darstellt?
- Können tiefe neuronale Netze trainiert werden, um handschriftliche Strukturformeln zu erkennen, so dass sich typische Lernendenfehler in gezeichneten Formeln erkennen lassen?
- Wie wirkt sich der Grad der Adaptivität (adaptives Lernen vs. technische Adaptivität vs. keine Adaptivität) auf den Lernerfolg der Lernenden aus?

### Methoden

Im Projekt OrChemSTAR wurde zunächst eine App entwickelt, die sowohl gedruckte als auch handgezeichnete chemische Strukturformeln erkennt und analysiert. Die Entwicklung der App verfolgte eine mehrstufige Methodik. Zunächst wurden Chemielehrpersonen im deutschsprachigen Raum befragt, um die im Unterricht verwendeten Darstellungsweisen zu nennen und

typische Fehler bei der Erstellung von Strukturformeln zu identifizieren. An der Online-Umfrage nahmen 125 Lehrpersonen teil, gefolgt von 13 vertiefenden Online-Interviews. Diese Daten lieferten wertvolle Einblicke in die häufigsten Schwierigkeiten der Lernenden beim Lesen und Zeichnen von Strukturformeln aus Sicht der Lehrpersonen. Ergänzend wurden Strukturformeln ausgewählter chemischer Verbindungen von Schüler\*innen gezeichnet. Diese Zeichnungen wurden auf typische Lernendenfehler analysiert und außerdem für das Training des in der App verwendeten KI-Bilderkennungs-Modells (Jiang et al., 2022) genutzt.

Darauf aufbauend wurde die App entwickelt, die folgende drei Modi zur Verfügung stellt:

- **AR-Modus:** Dieser Modus erkennt gedruckte chemische Verbindungen und blendet interaktive Elemente direkt in das Kamerabild des Texts ein.
- **Scan-Modus:** Hier werden handgezeichnete chemische Strukturformeln analysiert und typische Fehler identifiziert (Abb. 1-2).
- **Übungsmodus:** In diesem Modus bearbeiten Lernende vorgegebene Aufgaben und erhalten Feedback, um aus ihren Fehlern zu lernen.

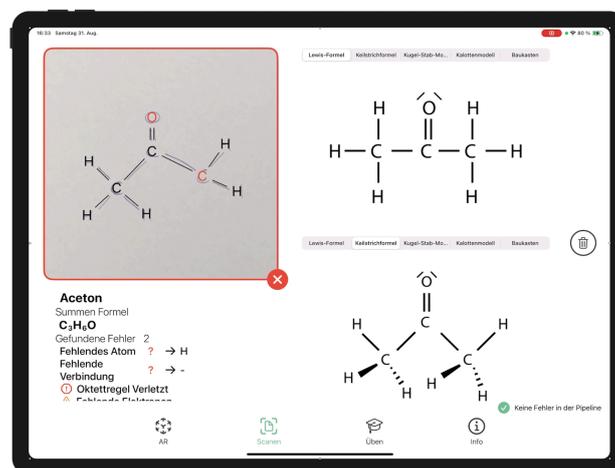


Abb. 1: Screenshot aus der App OrChemSTAR: Erkennen von Fehlern in Strukturformeln. Die eingescannte Strukturformel wird als Aceton erkannt. Das Sauerstoffatom und ein Kohlenstoffatom werden als problematisch gewertet und rot markiert (fehlende freie Elektronenpaare bzw. fehlendes H-Atom und fehlende Verbindung zum H-Atom).

## Ergebnisse

Die Befragung der Chemielehrpersonen ergab wichtige Erkenntnisse darüber, welche Darstellungsweisen ab welcher Jahrgangsstufe genutzt werden und welche chemischen Verbindungen den Schüler\*innen besonders oft Schwierigkeiten bereiten. Besonders häufig wurden einfache Verbindungen wie Wasser, Ammoniak, Kohlenstoffdioxid und Sauerstoff sowie einfache Alkane, Alkene und Alkine als relevant benannt, da Lernende hier oft falsche Bindungen (Einfach-, Doppel- oder Dreifachbindungen) oder falsche oder überschüssige Atome einzeichnen. Auch Fehler bei der Ladungsverteilung und die Verletzung der Oktettregel sind häufig. In den Interviews äußerten Lehrpersonen, dass Lernende durch umfassendes Üben ihre Fähigkeiten im Zeichnen von Strukturformeln verbessern können, allerdings fehle im Unterricht häufig die Zeit für ausreichende Übungseinheiten. Hierfür bietet die App OrChemSTAR eine

Möglichkeit, Lernenden individualisiertes Feedback zu geben und durch adaptives Lernen gezielt auf ihre Fehler einzugehen. Ein Prototyp der App wurde entwickelt und erfolgreich in ersten Tests eingesetzt. Die App konnte auch handgezeichnete chemische Strukturformeln erkennen und den Lernenden Feedback zu Fehlern wie fehlenden oder überschüssigen Bindungen, Atomen und Elektronen geben.

### Diskussion

Die Entwicklung der App OrChemSTAR zeigt vielversprechende Ansätze für den Einsatz von AR und KI im Chemieunterricht. Besonders der Aspekt des **adaptiven Lernens** und der **technischen Adaptivität** bietet großes Potenzial, um individuelle Lernpfade zu gestalten und so das Verständnis chemischer Strukturen bei Lernenden nachhaltig zu fördern. Die Befragungen von Lehrpersonen belegen, dass die größte Herausforderung in der Vermittlung chemischer Strukturformeln darin liegt, Lernenden das Übersetzen zwischen den verschiedenen Darstellungsweisen zu vermitteln. Hierbei kann OrChemSTAR unterstützen, indem es multiple Repräsentationen kombiniert (Abb. 2) und den Lernenden durch Echtzeit-Feedback hilft, ihre mentalen Modelle auf- und auszubauen. Diese basiert auf einer spezifischen **Fehlerdiagnose**. Die Ergebnisse der ersten Tests zeigen, dass die App insbesondere bei der Fehlererkennung in handgezeichneten Formeln hilfreich ist. **Zukünftige Schritte** beinhalten die Durchführung einer Hauptstudie, um die Wirksamkeit der App im Unterricht zu evaluieren und die Effekte verschiedener Lernmethoden (adaptives Lernen vs. technische Adaptivität) auf den Lernerfolg der Schüler\*innen zu untersuchen. Zudem soll erforscht werden, inwiefern die App und ihre Grundlagen in weiteren Kontexten eingesetzt werden können, z. B. in der Lehrpersonenbildung (Thoms et al, 2024).

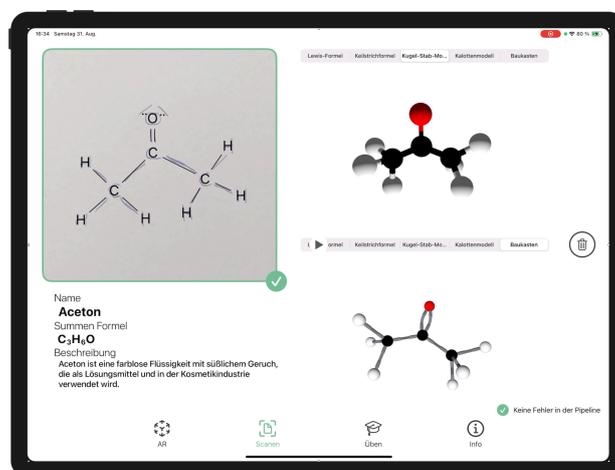


Abb. 2. Screenshot aus der App OrChemSTAR: Multiple Repräsentationen. Zwei Darstellungen (Lewis-Formel, Keil-Strich-Formel, Kugel-Stab-Modell, Kalottenmodell, Molekülbaukastenmodell) können ausgewählt und miteinander verglichen werden.

### Förderhinweis

Das Projekt „OrChemSTAR – Organic Chemistry Science Teaching and Learning with Augmented Reality“ (Projektnummer: CRSK-1\_221108) wird gefördert durch den Schweizerischen Nationalfonds (SNF).

## Literatur

- Jiang, P., Ergu, D., Liu, F., Cai, Y., & Ma, B. (2022). A Review of Yolo Algorithm Developments. *Proc. Comp. Sci.*, 199, 1066–1073. <https://doi.org/10.1016/j.procs.2022.01.135>
- Johnstone, A. (1983). Macro- and micro-chemistry. *School Science Review*, 64, 337–379.
- Kozma, R. B. (2020). Use of multiple representations by experts and novices. In P. Van Meter, A. List, D. Lombardi, & P. Kendeou (Hrsg.), *Handbook of Learning from Multiple Representations and Perspectives* (1. Aufl.). Routledge. <https://doi.org/10.4324/9780429443961>
- Kozma, R., & Russell, J. (2005). Students becoming chemists: Developing representational competence. In J. K. Gilbert (Ed.), *Visualization in science education* (pp. 121–145). Springer Netherlands. [https://doi.org/10.1007/1-4020-3613-2\\_8](https://doi.org/10.1007/1-4020-3613-2_8).
- Schweizerischer Nationalfonds. (2024). *OrChemSTAR – Organic Chemistry Science Teaching and Learning with Augmented Reality*. SNSF Data Portal. Abgerufen am 7. Juni 2024, von <https://data.snf.ch/grants/grant/221108>
- Sunyono, S., Yuanita, L., & Ibrahim, M. (2015). Supporting students in learning with multiple representation to improve student mental models on atomic structure concepts. *Science Education International*, 26(2), 104–125.
- Thoms, L.-J., Rothlin, T., Purandare, M., Loch, F., & Huwer, J. (2024). ChemStrucLearn – KI-basierte Bilderkennung zur Diagnose von Schülerfehlern beim Zeichnen von Strukturformeln. In J. Huwer, S. Becker-Genschow, C. Thyssen, L.-J. Thoms, A. Finger, L. von Kotzebue, E. Kremser, M. Meier, & T. Bruckermann (Hrsg.), *Kompetenzen für den Unterricht mit und über Künstliche Intelligenz: Perspektiven, Orientierungshilfen und Praxisbeispiele für die Lehramtsausbildung in den Naturwissenschaften* (S. 66–69). Waxmann.