

Wie nutzen Schüler*innen quantenchemische Simulationen?

Die Etablierung quantenchemischer Simulationen (QCS) hat die chemische Forschung revolutioniert (Seeman und Tantillo 2022; Houk und Liu 2017). Dies hat sowohl konzeptionell die Rolle des Energiekonzepts für das Verständnis chemischer Reaktionen gestärkt als auch Simulationen als Mittel der Erkenntnisgewinnung in der chemischen Forschung etabliert. Letzteres beeinflusst damit auch die epistemischen Grundlagen der chemischen Forschung und zeigt, dass Simulationen eine immer wichtigere Rolle in der naturwissenschaftlichen Wissensproduktion spielen (Seoane et al. 2022). QCS bieten somit Möglichkeiten, das Energiekonzeptverständnis von Schüler*innen zu fördern (Pölloth et al. 2023) wissenschaftliche Simulationen für den Erkenntnisgewinn nutzen (Seoane et al. 2022) und damit neue Möglichkeiten des forschenden Lernens zu eröffnen. Dennoch werden QCS bisher nur selten in der Schule eingesetzt (Traube und Blonder 2023; Hrubeš et al. 2024).

Um ein solches forschendes Lernen zu ermöglichen, sind Lernumgebungen erforderlich, die den Lernprozess gezielt unterstützen (Hmelo-Silver et al. 2007). Daher wurde in einem Design-Based-Research-Projekt (Barab und Squire 2004) die Lernumgebung Comp-Chem-Lab (www.comp-chem-lab.de) entwickelt, die es Schüler*innen ohne quantenchemisches Vorwissen ermöglicht, einfache Reaktionen mit Hilfe von Simulationen zu untersuchen. Am Beispiel des Einsatzes der Lernumgebung zur Untersuchung der exothermen Reaktion von Chlorgas und Wasserstoff sollen nun theoretische Erkenntnisse zum Lernen mit QCS in der Schule gewonnen werden.

Theoretische Rahmung

Obwohl die Lernwirksamkeit Forschenden Lernens empirisch gut belegt ist, sind die genauen Zusammenhänge zwischen Forschendem Lernen, Konzeptwechselprozessen und epistemischen Überzeugungen oft noch wenig verstanden (Lazonder und Harmsen 2016). Dies kann unter anderem auf die Komplexität der zugrunde liegenden Prozesse zurückgeführt werden. Forschendes Lernen wird in diesem Zusammenhang häufig mit der Anwendung wissenschaftlicher Praktiken zur Erkenntnisgewinnung beschrieben (Rönnebeck et al. 2016). Um solche naturwissenschaftlichen Praktiken sinnvoll einsetzen zu können, müssen Schüler*innen konzeptuelles Vorwissen aktivieren, das ihnen z.B. erlaubt, eine zielgerichtete naturwissenschaftliche Untersuchung zu planen. Aus einer dynamischen Perspektive auf Lernprozesse greifen Schüler*innen dafür nicht auf ein kohärentes Konzept zurück, sondern aktivieren in Abhängigkeit vom Kontext diverse Ideen („konzeptuelle Ressourcen“) (Hammer et al. 2005; diSessa 2014a). Zusätzlich müssen die Schüler*innen bewusst oder unbewusst epistemische Ressourcen aktivieren, die z.B. die Natur naturwissenschaftlichen Wissens und den Weg zu neuem Wissen beschreiben (Berland et al. 2016; Wickman 2004). Die besondere Komplexität Forschenden Lernens besteht darin, dass konzeptuelle und epistemische Ressourcen nicht nur für die Anwendung wissenschaftlicher Praktiken benötigt werden, sondern dass durch diese Anwendung auch neue konzeptuelle und epistemische Ressourcen aktiviert werden. Die Beschreibung von Lernprozessen erfordert daher eine sehr detaillierte „mikrogenetische“ Analyse von Lernprozessen (Parnafes und diSessa 2013). Bevor das Zusammenspiel mit epistemischen Ressourcen näher beleuchtet wird, wird in einem ersten Schritt die folgende Forschungsfrage untersucht:

FF1: In welchem wechselseitigen Verhältnis stehen die Anwendung wissenschaftlicher Praktiken beim forschenden Lernen mit QCS und die Aktivierung konzeptueller Ressourcen?

Methodik

In einer explorativen Laborstudie wurden die Problemlösestrategien von 30 Schüler*innen der 11. - 13. Klasse in 10 Fokusgruppen bei der Arbeit mit QCS im Comp-Chem-Lab untersucht (Pölloth 2025). Die Datenerhebung umfasste Audiographie, Bildschirmaufzeichnungen und Logdaten. In einer qualitativen Inhaltsanalyse nach Kuckartz (2018) wurden in Anlehnung an Rönnebeck et al. (2016) „Hypothesen generieren“, „Untersuchungen planen“, „Daten analysieren“, „Daten interpretieren“ und „Erklärungen konstruieren“ als deduktive Hauptkategorien zur Beschreibung der genutzten wissenschaftlichen Praktiken verwendet. Die aktivierten konzeptuellen Ressourcen wurden induktiv in Anlehnung an Pölloth et al. (2023) kategorisiert. Die Beschreibung der Ergebnisse erfolgt im Rahmen von Fallbeispielen.

Fallbeispiel 1: Was bedeutet energetisch günstig?

In der ersten Aufgabe untersuchte die Gruppe 2F den Bindungsabstand in einem Chlormolekül mit Hilfe von QCS. Die Gruppe verwendete initial trial-and-error Methoden, um den Zusammenhang zwischen Molekülstruktur und Energie zu untersuchen. Aus der *Analyse der Daten* leiteten sie ab, dass sie die Struktur mit „*keiner Energie*“ finden müssen: „Müssen wir schauen, da wo Energie null ist? Wo es weder zusammen noch auseinander gedrückt wird? Oder blick ich das jetzt falsch?“ Die konzeptuelle Ressource der Suche nach einer Struktur mit keiner Energie war dabei äußerst dominant und wurde von den Schüler*innen ausgiebig genutzt, um ihre quantenchemische Untersuchung zu *planen*. Durch eine genauere *Analyse der Daten* zeigte sich für die Schüler*innen, dass ihre Strategie nicht zielführend war: „Also hier ist es [die Energie] einmal fast Null, aber da sind die für die Mengeneinheit ewig weit auseinander.“ Den Moment der *Unsicherheit* konnten die Schüler*innen nicht selbstständig lösen. Erst der Hinweis durch das adaptive Feedbacksystem auf das Streben nach *minimaler potentieller Energie* erlaubte es den Schüler*innen, eine zielgerichtete Untersuchung zu planen. Dabei gingen sie sehr systematisch vor und konnten schließlich aus ihren Daten eine *Erklärung konstruieren*, warum Chlor und nicht Wasserstoff homolytisch gespalten wird: „Ja [Chlor] hat mehr Energie [als Wasserstoff], deshalb braucht es weniger Energie. Auch wenn es jetzt dumm klingt, weil man sagt ja es hat mehr Energie, deshalb braucht man weniger Energie, um es spalten. Es ist logisch, aber es klingt komisch.“

Diskussion Fallbeispiel 1

Das beschriebene Vorgehen entspricht dem archetypischen Ablauf der Problemlösungsstrategien in der Stichprobe (Pölloth 2025). Nahezu alle Arbeitsgruppen begannen mit trial-and-error und konnten - nach explizitem Hinweis auf die Energieminimierung - die quantenchemische Untersuchung sinnvoll planen und zum Aufbau einer Erklärung nutzen. Allerdings aktivierten nur zwei von zehn Gruppen ohne externen Hinweis die konzeptuelle Ressource der Minimierung der potentiellen Energie. Dies ist umso erstaunlicher, als die Frage nach dem stabilen Zustand der Materie eine Kernidee im Energiekonzept ist (National Research Council 2012). Die zentrale Frage nach den Gründen chemischer Reaktivität scheint somit kaum im Fokus von Chemieunterricht zu stehen (Taber 2024; Pölloth et al. 2024). Nach der einmaligen Aktivierung der Idee konnten alle Gruppen sehr produktiv damit umgehen. Die Ergebnisse zeigen damit einerseits, wie entscheidend die Aktivierung individueller konzeptueller Ressourcen für das Forschende Lernen sein kann. Es wird aber auch deutlich, dass die genaue Analyse von Lernprozessen genau diese kritischen konzeptuellen Ressourcen identifizieren kann und damit ein gezieltes Scaffolding ermöglicht. Die wiederholte Nutzung der Ressource im weiteren Verlauf des Problemlöseprozesses zeigt dabei einen Lernprozess auf, in dem wiederum forschendes Lernen zur Stärkung kritischer konzeptueller Ressourcen beitragen kann.

Fallbeispiel 2: Exothermer Bindungsbruch

Eine der häufigsten fachlich nicht anschlussfähiger Lernendenvorstellungen im Bereich chemischer Bindung ist die Idee, dass *Energie beim Brechen chemischer Bindungen frei wird* (Galley 2004; Hunter et al. 2022). Auch Gruppe 2B argumentierte zu Beginn der Fokusgruppenzeit in diesem Sinne: „Und wenn die [Chloratome] dann auseinander gehen, geben die wieder Energie ab, weil Energie ja nicht verloren gehen kann.“ Durch die *Analyse der Daten* aktivierten sie jedoch eine konzeptuelle Ressource, dass *Energie zum Brechen von Bindungen benötigt wird*: „2: Die Energie, die die Atome beinhalten, die in den Atomen drinsteckt, ist gleichzeitig die Energie, die man braucht, um die zu spalten.“ Basierend auf dieser Idee, konnten sie eine *Erklärung konstruieren*, „dass Chlor sich eher trennt [als ein Wasserstoffmolekül], weil es erstens einen weiteren Abstand zueinander hat und weniger Energie benötigt wird.“ Wenige Minuten später argumentierte die gleiche Person: „2: Ist das nicht einfach die Energie, die bei der Spaltung von dem Cl-Molekül frei wird?“ und aktivierte sich somit wieder auf die vorhergehende Idee.

Diskussion Fallbeispiel 2

Eine große Unsicherheit zeigte sich bei allen Schüler*innen bezüglich der Frage, wie Bindungsbruch und -bildung mit energetischen Fragen zusammenhängen. Durch die Analyse der quantenchemischen Daten konnten jedoch fast alle Gruppen die Zusammenhänge verstehen und teilweise sogar mit Hilfe von dreidimensionalen Energiehyperflächen komplexe Zusammenhänge zwischen chemischer Struktur und Reaktionswegen argumentieren. Das oben ausgeführte Fallbeispiel zeigt jedoch eindrücklich den dynamischen Charakter des Denkens von Schüler*innen. Auch wenn also einzelne Äußerungen auf die Aktivierung neuer Ressourcen hindeuten, ist für eine erfolgreiche konzeptuelle Veränderung nicht die einmalige Instruktion, sondern die wiederholte Nutzung konzeptueller Ressourcen in unterschiedlichen Kontexten notwendig (Hammer et al. 2005). QCS bieten hierfür vielfältige Möglichkeiten, deren langfristige Konsequenzen jedoch noch nicht untersucht sind.

Schlussfolgerung und Ausblick

Die Ergebnisse zeigen, dass Schüler*innen QCS produktiv zum forschenden Lernen nutzen können - insofern geeignete Methoden des Scaffolding genutzt werden. Dabei zeigt sich in Übereinstimmung mit anderen Studien, dass zentrale Ideen zum Verständnis des Energiekonzepts von den Schüler*innen nur selten aktiviert werden. Dies betrifft insbesondere die konzeptuellen Vorstellungen zur Antriebskraft und zum Zusammenhang zwischen Energie und chemischen Bindungen (Hunter et al. 2022; Taber 2024; Cooper und Klymkowsky 2013). QCS zeigen hierbei ein besonderes Potential, da sie den Schüler*innen forschendes Lernen zu genau diesen Zusammenhängen ermöglichen.

Die Auswertung zeigt auch, dass es nach wie vor schwierig ist, die Komplexität von Lernprozessen empirisch adäquat zu erfassen. Dazu ist es notwendig, nicht nur Konzepte vor und nach Lernprozessen zu untersuchen, sondern auch die Lernprozesse selbst direkt zu analysieren (diSessa 2014b). Learning Analytics können gerade in komplexen digitalen Lernumgebungen wichtige und vielfältige Erkenntnisse liefern und sollen daher zukünftig verstärkt zur Analyse von Lernprozessen eingesetzt werden. So soll auch der langfristige Einfluss des Lernens mit QCS und der Zusammenhang mit der Aktivierung epistemischer und konzeptueller Ressourcen untersucht werden.

Literatur

Barab, S. & Squire, K. (2004). Design-Based Research: Putting a Stake in the Ground. *Journal of the Learning Sciences*, 13(1), 1–14.

- Berland, L.K., Schwarz, C.V., Krist, C., Kenyon, L., Lo, A.S. & Reiser, B.J. (2016). Epistemologies in practice: Making scientific practices meaningful for students. *JRST*, 53(7), 1082–1112.
- Cooper, M.M. & Klymkowsky, M.W. (2013). The trouble with chemical energy: Why understanding bond energies requires an interdisciplinary systems approach. *CBE life sciences education*, 12(2), 306–312.
- diSessa, A.A. (2014a). A history of conceptual change research. In R.K. Sawyer (Hrsg.), *The Cambridge Handbook of the Learning Sciences* (S. 88–108). Cambridge: Cambridge University Press.
- diSessa, A.A. (2014b). The construction of causal schemes: learning mechanisms at the knowledge level. *Cognitive Science*, 38(5), 795–850.
- Galley, W.C. (2004). Exothermic bond breaking: A persistent misconception. *J. Chem. Ed.*, 81(4), 523.
- Hammer, D., Elby, A., Scherr, R.E. & Redish, E.F. (2005). Resources, framing, and transfer. In J. Mestre (Hrsg.), *Transfer of Learning from a Modern Multidisciplinary Perspective* (S. 89–120). Information Age Publishing.
- Hmelo-Silver, C.E., Duncan, R.G. & Chinn, C.A. (2007). Scaffolding and achievement in problem-based and inquiry learning: A response to Kirschner, Sweller, and Clark (2006). *Ed. Psy.*, 42(2), 99–107.
- Houk, K.N. & Liu, F. (2017). Holy grails for computational organic chemistry and biochemistry. *Accounts of Chemical Research*, 50(3), 539–543.
- Hrubeš, J., Jaroš, A., Nemirovich, T., Teplá, M. & Petrželová, S. (2024). Integrating computational chemistry into secondary school lessons. *Journal of Chemical Education*.
- Hunter, K.H., Rodriguez, J.-M.G. & Becker, N.M. (2022). A review of research on the teaching and learning of chemical bonding. *Journal of Chemical Education*, 99(7), 2451–2464.
- Kuckartz, U. (2018). *Qualitative Inhaltsanalyse. Methoden, Praxis, Computerunterstützung*.
- Lazonder, A.W. & Harmsen, R. (2016). Meta-analysis of inquiry-based learning. *Review of Educational Research*, 86(3), 681–718.
- National Research Council (2012). *A framework for K-12 science education*. National Academies Press.
- Parnafes, O. & diSessa, A.A. (2013). Microgenetic learning analysis: A methodology for studying knowledge in transition. *Human Development*, 56(1), 5–37.
- Pölloth, B. (2025). High school students experimenting with computational chemistry: Design-based research on and through the “Comp-Chem-Lab”. *Journal of Chemical Education*, 102(4), 1367–1379.
- Pölloth, B., Diekemper, D., Bosch, C. & Schwarzer, S. (2024). Reply to the ‘Comment on “What resources do high school students activate to link energetic and structural changes in chemical reactions? – A qualitative study”’ by K. S. Taber. *Chemistry Education Research and Practice*, 25(3), 958–965.
- Pölloth, B., Diekemper, D. & Schwarzer, S. (2023). What resources do high school students activate to link energetic and structural changes in chemical reactions? – A qualitative study. *Chemistry Education Research and Practice*, 24(4), 1153–1173.
- Rönnebeck, S., Bernholt, S. & Ropohl, M. (2016). Searching for a common ground – A literature review of empirical research on scientific inquiry activities. *Studies in Science Education*, 52(2), 161–197.
- Seeman, J.I. & Tantillo, D.J. (2022). Understanding chemistry: from “heuristic (soft) explanations and reasoning by analogy” to “quantum chemistry”. *Chemical Science*, 13(39), 11461–11486.
- Seoane, M.E., Greca, I.M. & Arriasecq, I. (2022). Epistemological aspects of computational simulations and their approach through educational simulations in high school. *SIMULATION*, 98(2), 87–102.
- Taber, K.S. (2024). Comment on “What resources do high school students activate to link energetic and structural changes in chemical reactions? – A qualitative study” by B. Pölloth, D. Diekemper and S. Schwarzer. *Chemistry Education Research and Practice*, 25(3), 949–957.
- Traube, T. & Blonder, R. (2023). A computational chemistry course for teachers: From research laboratories to high-school chemistry teaching. *J. Chem. Ed.*, 100(11), 4360–4368.
- Wickman, P.-O. (2004). The practical epistemologies of the classroom: A study of laboratory work. *Science Education*, 88(3), 325–344.