Erschienen in: HUWER, Johannes, Hrsg., Timm WILKE, Hrsg., Amitabh BANERJI, Hrsg.. Progress in digitalisation in chemistry education 2024 : digitales Lehren und Lernen an Hochschule und Schule im Fach Chemie. Münster: Waxmann, 2025, S. 113-118.
ISBN 978-3-8188-0042-0
https://doi.org/10.31244/9783818850425

Lars-Jochen Thoms und Johannes Huwer

Das Projekt OrChemSTAR

Strukturformeln durch Augmented Reality zeichnen lernen

1 Einleitung, Stand der Forschung und Forschungsfragen

Für die Beschreibung chemischer Verbindungen und Reaktionsmechanismen haben sich in der Chemie eine Vielzahl abstrakter Formalismen etabliert, die je nach Anwendungszweck und Kontext unterschiedliche Funktionen erfüllen. Chemiker*innen wählen je nach Anwendungszweck und Kontext eine geeignete Darstellungsweise, können aber auch zwischen verschiedenen Notationen übersetzen. Da die Kommunikation chemischen Wissens ohne geeignete Formalismen erheblich erschwert wäre, lernen Chemiestudierende von Beginn ihres Studiums an verschiedene Notationen chemischer Formeln und bauen kontinuierlich ihre wissenschaftlichen Kommunikationskompetenz aus. Es sollte aber nicht unterschätzt werden, wie vielseitig und komplex die chemische Formelsprache ist. Verschiedene Darstellungen beschreiben je nach Bedarf die Zusammensetzung oder die Struktur der Verbindung und geben Hinweise auf die räumliche Anordnung. Projektionen wie Fisher-, Natta-, Haworth- oder Newman-Projektionen heben ausgewählte Aspekte der räumlichen Anordnung hervor. Ohne grundlegende fachspezifische Lese- und Darstellungskompetenzen können Studierende weder ein Chemiestudium erfolgreich abschließen noch einen Beruf in der Chemie ergreifen (Herron & Greenbowe, 1986). Viele Studierende haben Schwierigkeiten im Umgang mit abstrakten Darstellungen wissenschaftlicher Konzepte, deren Verständnis ein hohes Maß an räumlicher Visualisierung erfordert (Sahin & Yilmaz, 2020). Während Expert*innen fließend zwischen mehreren Darstellungen (Kozma, 2020) sowie zwischen der makroskopischen, der symbolischen und der sub-mikroskopischen Ebene (Johnstone, 1983, 1991) übersetzen können, müssen Anfänger*innen die erforderlichen mentalen Modelle zunächst aufbauen (Sunyono et al., 2015). Dieser Prozess muss von außen z. B. durch die Verwendung multipler Repräsentationen unterstützt werden (Kozma & Russell, 2005; Sunyono et al., 2015).

Augmented-Reality-Anwendungen (AR) sind ein vielversprechender moderner Ansatz, um das Lernen zu erleichtern (Azuma, 1997) und Lernende beim Verständnis chemischer Strukturen zu unterstützen (Mazzuco et al., 2022). AR-Apps haben sich als effektiv für das Lernen erwiesen (Garzón & Acevedo, 2019), insbesondere für die Visualisierung und das Verständnis abstrakter chemischer Konzepte in dreidimensionalen Darstellungen (Chen & Liu, 2020; Thees et al., 2020) und das Einblenden von Zusatzinformationen (Milgram et al., 1995). Darüber hinaus wurden positive Effekte der Nutzung von AR-Apps auf Motivation und Interesse, Einstellungen zur naturwissenschaftlichen Bildung und akademische Leistungen gezeigt, und AR konnte erfolgreich zur Förderung explorativen und kollaborativen Lernens eingesetzt werden (für eine Übersicht siehe Henne et al., 2024). Die besondere Bedeutung der Implemen-

Konstanzer Online-Publikations-System (KOPS)
URL: http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:352-2-146wc7pxfd6wb2

tierung von AR in die Chemieausbildung aus einer disziplinspezifischen Perspektive wurde kürzlich deutlich, als die International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) Virtual Reality zu einer der „Top Ten Emerging Technologies in Chemistry 2022“ erklärte (Gomollón-Bel, 2022).

Obwohl die Stärken von AR in vielen Studien empirisch nachgewiesen wurden und es interessante Prototypen für den Einsatz im Chemieunterricht gibt, ist der Einsatz von AR im Klassenzimmer noch nicht etabliert. Dies könnte unter anderem auf technische Notwendigkeiten bei der Implementierung von AR zurückzuführen sein. Damit AR eine sinnvolle Verbindung zur realen Umgebung der Lernenden herstellen kann, muss die AR-App in der Lage sein, einen Auslöser in der realen Welt zu erkennen. Es haben sich drei Klassen von AR herausgebildet: Markerbasierte AR nutzen z. B. QR-Codes, vordefinierte Bilder oder vorbereitete 3D-Objekte. Markerlose AR hingegen kommt ohne physische Marker aus, stellt aber selbst keinen Bezug zur Umgebung her. GPS-basierte ARs schaffen dies in Bezug auf die aktuelle Position des Benutzenden, würden jedoch eine vorherige Einrichtung für den spezifischen Standort für den Einsatz im Chemieunterricht oder im Labor erfordern. Dementsprechend hat sich markerlose AR weitgehend durchgesetzt, auch wenn dies bedeutet, dass das Potenzial für den mobilen und flexiblen Einsatz nicht vollständig ausgeschöpft werden kann. Die Abhängigkeit von physischen Markern ist bedauerlich, da der Aufbau mentaler Modelle zum Verständnis komplexer Strukturen extern unterstützt werden muss und adaptives Scaffolding hier besonders vielversprechend wäre. Eine AR-Lernumgebung, die verschiedene mögliche Marker erkennt, sie kontextuell interpretiert und sinnvolle Visualisierungen als AR über die Marker legt und zusätzliche Informationen zum Lerninhalt bietet (technische Adaptivität) und idealerweise sogar auf den Lernenden abgestimmt ist und individuelle Lernpfade bietet, würde die Möglichkeiten der Nutzung von AR für das Lehren und Lernen der Chemie viel besser nutzen.

Die Leistung der derzeit verfügbaren Smartphones und Headmounted Displays (sogenannte AR/VR Brillen) ermöglicht es nun, Künstliche Intelligenz (KI) in Echtzeit für technische Adaptivität und adaptive Lernpfade zu nutzen. Zudem können mit fortgeschrittenen Deep-Learning-Methoden neuronale Netze erfolgreich trainiert werden, um chemische Strukturen aus der Literatur oder handgezeichnete Formeln und Strukturen zu erkennen und sogar den Kontext zu berücksichtigen. Verschiedene große Datenbanken mit (teilweise bereits dekodierten) Bildern chemischer Formeln sind verfügbar (z. B. CASIA-CSDB).

Ein markanter Unterschied entsteht jedoch, wenn die Bilderkennung zur Unterstützung von Lernenden eingesetzt werden soll. Die KI muss nicht nur die korrekte Zeichnung chemischer Formeln erkennen, sondern auch in der Lage sein, fehlerhaft gezeichnete Formeln zu interpretieren und die von den Lernenden gemachten Fehler zu erkennen. Für eine adaptive Anpassung an das Kompetenzniveau und den Lernprozess der Lernenden ist genau diese Fähigkeit erforderlich. Dieser Aspekt wurde bisher in der Forschung nicht berücksichtigt, weshalb die folgende erste unkonventionelle, aber wichtige Forschungsfrage des Projekts *OrChemSTAR* sich klar von früheren Forschungsarbeiten unterscheidet:

Forschungsfrage 1: Können neuronale Netze ausreichend trainiert werden, um typische Lernendenfehler in handgezeichneten Strukturformeln zu erkennen?

Wenn es möglich wird, die Fehler der Lernenden in den Zeichnungen von Formeln zu erkennen und zu klassifizieren, kann dies als Grundlage für adaptive Unterstützung genutzt werden. Es ist jedoch derzeit unklar, ob und wie Lernenden effektiv beim Lernen durch die Ansprache der identifizierten Fehler und der Bereitstellung adaptiver Hilfen geholfen werden kann. Es ist jedoch anzunehmen, dass interaktive dreidimensionale Darstellungen Lösungsansätze und Verbesserungshilfen besser veranschaulichen als planare Projektionen. Darüber hinaus liegt es nahe, dass eine immersive Verbindung des Lerninhalts mit den Ausgangszeichnungen, wie sie mit AR implementiert werden kann, grundsätzlich vorteilhaft ist. Daraus folgt die zweite Forschungsfrage:

Forschungsfrage 2: Unter welchen Bedingungen ist der Einsatz einer AR-App zum Erkennen gedruckter und handgezeichneter chemischer Formeln, die mehrere Darstellungen der erkannten chemischen Verbindungen anzeigen kann, beim problemorientierten Lernen des Zeichnens chemischer Formeln erfolgreich?

Insgesamt wird erwartet, dass die Lernenden die neu entwickelte AR-App sowohl zum Kodieren als auch zum Dekodieren der Formalismen für das Zeichnen chemischer Verbindungen sowie zum Erwerb spezieller chemischer Kenntnisse wie Stereochemie verwenden. Um die Lerneffektivität des geplanten Konzepts zu analysieren, wird der Einfluss der Lernumgebung (in drei Stufen: EG1 – adaptives Lernen: AR passt sich an Lernende an und bietet individuelle Lernpfade; EG2 – technische Adaptivität: AR passt sich an Kontext und Inhalt an; KG – keine Adaptivität: nur AR) auf den Erwerb fachspezifischen Wissens und fachspezifischer Kompetenzen in einem Prä-Post-Design untersucht. Darüber hinaus wird die Akzeptanz der App sowie die kognitive Belastung und die intrinsische Motivation während des Lernens mit der App gemessen. Zusätzlich werden die Teilnehmenden der Laborstudie eingehender interviewt. Eye-Tracking-Studien werden durchgeführt, um tiefere Einblicke in die kognitive Informationsverarbeitung während des Lernens mit der App zu gewinnen (z. B. Aufmerksamkeit und extrinsische kognitive Belastung). All dies wird durchgeführt, um die dritte Forschungsfrage des Projekts zu beantworten:

Forschungsfrage 3: Unter welchem Maß an Adaptivität lernen Schüler*innen am besten mit einer AR-App zu chemischen Strukturformeln und wie groß sind die Effektstärken der verschiedenen Interventionen (adaptives Lernen vs. technische Adaptivität vs. keine Adaptivität)?

2 Methoden

Das Projekt *OrChemSTAR* soll zwei hochaktuelle Forschungsbereiche der naturwissenschaftlichen Bildung zusammenführen und in der Synthese ein neues Forschungs- und Anwendungsfeld mit besonderer Relevanz für die Unterrichtspraxis im Che-

mieunterricht schaffen. Als Beispiel wird untersucht, in welcher Form Intelligente Tutorielle Systeme Lernende am besten beim Lernen in einer AR-Umgebung unterstützen können. Um die formulierten Forschungsfragen sowohl in Laborstudien als auch im Feld untersuchen zu können, wird zunächst die erforderliche AR-App entwickelt, die gedruckte und handgezeichnete chemische Molekül- und Strukturformeln erkennt und je nach Bedarf der Lernenden eine oder mehrere zwei- und dreidimensionale Darstellungen der erkannten Strukturen über die jeweiligen Formeln legt. In einem Tutorial-Modus kann die App verwendet werden, um Lernenden zu helfen, chemische Formeln in verschiedenen Darstellungen zu zeichnen und somit fachspezifische Kommunikationsfähigkeiten aufzubauen. Die App sollte in der Lage sein, Lernschwierigkeiten der Benutzer*innen zu erkennen und adaptiv individuelle Lernpfade bereitzustellen. Da Tablets weit verbreitet und leicht zugänglich sind, wird die App zunächst für Tablets bereitgestellt. Head-Mounted-Devices wie Smartglasses bieten dagegen große Chancen für den Einsatz in Experimenten, da die Hände frei bleiben.

Der Kern dieses Forschungsprojekts ist die Durchführung einer ersten Pilotstudie zur Lerneffektivität, Akzeptanz und den Erfolgsbedingungen der Integration intelligenter Tutorieller Systeme in eine mobile AR-Lernumgebung. Der Grad der Adaptivität (adaptives Lernen vs. technische Adaptivität) wird verglichen, um die Effektstärke der Implementierung zu bestimmen. Zu diesem Zweck wird zunächst in Zusammenarbeit mit Chemielehrenden an Schulen und Universitäten das am besten geeignete Lernmaterial für die Untersuchungen erörtert. Bekannte häufige und mögliche Fehler und Missverständnisse werden gesammelt und ein Pool von Zeichnungen ausgewählter chemischer Formeln mit typischen Fehlern zusammengestellt. Lernpfade zur Erkennung eigener Fehler und zum adaptiven Lernen aus eigenen Fehlern werden zusammengestellt.

In einem Prätest-Posttest-Design werden die Auswirkungen der Interventionsbedingungen auf den Erwerb von Fachwissen und fachspezifischer Kommunikationskompetenz sowie die Akzeptanz und Einstellungen zu AR und KI im Chemieunterricht (nach Davis, 1998; Holden & Rada, 2011; Mayer & Girwidz, 2020) bewertet. Als Kontrollvariablen werden die mentale räumliche Rotationsfähigkeit (nach Peters et al., 1995), die kognitive Belastung (nach Thoms, 2019), das Flow-Erleben (nach Rheinberg et al., 2003) und die intrinsische Motivation (nach Wilde et al., 2009) der Lernenden erfasst. Datenquellen werden durch qualitative Interviews zu den Lernerfahrungen in der Lernumgebung und explorative Eye-Tracking-Studien zu den Augenbewegungen während des Lernens in AR ergänzt.

3 Fazit und Ausblick

OrChemSTAR hat das Potenzial, zwei bisher unabhängige Forschungszweige in der naturwissenschaftlichen Bildung zusammenzuführen und somit ein neues, besonders vielversprechendes Forschungsfeld in der naturwissenschaftlichen Bildung zu eröffnen. Künstliche Intelligenz zur Erkennung von Fehlern (der Lernenden und nicht nur technischer Natur) könnte in Zukunft für die automatisierte Bewertung von Tests und Prüfungen in Schulen und Universitäten eingesetzt werden (Zhang et al., 2023). Für

Menschen mit besonderen Bedürfnissen (z. B. Sehbehinderte) kann die kontextuelle Erkennung chemischer Formeln chemische Inhalte zugänglich machen (Knaeble et al., 2022) – dies gilt sowohl für die Chemieausbildung als auch für chemiebezogene Berufe. Aufgrund des weitreichenden Potenzials von KI und AR im naturwissenschaftlichen Unterricht steht eine frühzeitige evidenzbasierte Untersuchung der Bedeutung von KI und AR für den Chemieunterricht und damit als notwendiger Bestandteil naturwissenschaftlicher digitaler Kompetenzen von Lehrkräften und der naturwissenschaftlichen Lehrerausbildung aus (Huwer et al., 2024).

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

Azuma, R. T. (1997). A Survey of Augmented Reality. *Presence: Teleoperators and Virtual Environments*, *6*(4), 355–385. https://doi.org/10.1162/pres.1997.6.4.355

Chen, S.-Y. & Liu, S.-Y. (2020). Using augmented reality to experiment with elements in a chemistry course. *Computers in Human Behavior*, *111*, 106418. https://doi.org/10.1016/j.chb.2020.106418

Garzón, J. & Acevedo, J. (2019). Meta-analysis of the impact of Augmented Reality on students' learning gains. *Educational Research Review*, *27*, 244–260. https://doi.org/10.1016/j.edurev.2019.04.001

Gomollón-Bel, F. (2022). IUPAC top ten emerging technologies in chemistry 2022: Discover the innovations that will transform energy, health and materials science to tackle the most urgent societal challenges and catalyse sustainable development. *Chemistry International*, *44*(4), 4–13. https://doi.org/10.1515/ci-2022-0402.

Davis, F. D. (1989). Perceived Usefulness, Perceived Ease of Use, and User Acceptance of Information Technology. *MIS Quarterly*, *13*(3), 319. https://doi.org/10.2307/249008

Henne, A., Syskowski, S., Krug, M., Möhrke, P., Thoms, L.-J. & Huwer, J. (2024). How to Evaluate Augmented Reality Embedded in Lesson Planning in Teacher Education. *Education Sciences*, *14*(3), 264. https://doi.org/10.3390/educsci14030264

Herron, J. D. & Greenbowe, T. J. (1986). What can we do about Sue: A case study of competence. *Journal of Chemical Education*, *63*(6), 528. https://doi.org/10.1021/ed063p528

Holden, H. & Rada, R. (2011). Understanding the Influence of Perceived Usability and Technology Self-Efficacy on Teachers' Technology Acceptance. *Journal of Research on Technology in Education*, *43*(4), 343–367. https://doi.org/10.1080/15391523.2011.10782576

Huwer, J., Becker-Genschow, S., Thyssen, C., Thoms, L.-J., Finger, A., von Kotzebue, L., Kremser, E., Meier, M. & Bruckermann, T. (Hrsg.). (2024). *Kompetenzen für den Unterricht mit und über Künstliche Intelligenz: Perspektiven, Orientierungshilfen und Praxisbeispiele für die Lehramtsausbildung in den Naturwissenschaften*. Waxmann.

Johnstone, A. (1983). Macro- and micro-chemistry. *School Science Review*, *64*, 337–379.

Johnstone, A. (1991). Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem. *Journal of Computer Assisted Learning, 7,* 75–83. https://doi.org/10.1111/j.1365-2729.1991.tb00230.x

Knaeble, M., Chen, Z., Schwarz, T., Sailer, G., Yang, K., Stiefelhagen, R. & Maedche, A. (2022). Accessible chemical structural formulas through interactive document labeling. In K. Miesenberger, G. Kouroupetroglou, K. Mavrou, R. Manduchi, M. Covarrubias Rodriguez & P. Penáz (Hrsg.), *Computers helping people with special needs* (S. 38–46). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-031-08648-9_6.

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*. Routledge. https://doi.org/10.4324/9780429443961

Kozma, R. & Russell, J. (2005). Students becoming chemists: Developing representational competence. In J. K. Gilbert (Hrsg.), *Visualization in science education* (S. 121–145). Springer. https://doi.org/10.1007/1-4020-3613-2_8.

Mayer, P. & Girwidz, R. (2019). Physics Teachers' Acceptance of Multimedia Applications – Adaptation of the Technology Acceptance Model to Investigate the Influence of TPACK on Physics Teachers' Acceptance Behavior of Multimedia Applications. *Frontiers in Education*, *4*, 73. https://doi.org/10.3389/feduc.2019.00073

Mazzuco, A., Krassmann, A. L., Reategui, E. & Gomes, R. S. (2022). A systematic review of augmented reality in chemistry education. *Review of Education*, *10*(1). https://doi.org/10.1002/rev3.3325

Milgram, P., Takemura, H., Utsumi, A. & Kishino, F. (1995). Augmented reality: A class of displays on the reality-virtuality continuum. *Proc. SPIE Proceedings, 2351,* 282–292. https://doi.org/10.1117/12.197321

Peters, M., Laeng, B., Latham, K., Jackson, M., Zaiyouna, R. & Richardson, C. (1995). A Redrawn Vandenberg and Kuse Mental Rotations Test – Different Versions and Factors That Affect Performance. *Brain and Cognition*, *28*(1), 39–58. https://doi.org/10.1006/brcg.1995.1032

Rheinberg, F., Vollmeyer, R. & Engeser, S. (2003). Die Erfassung des Flow-Erlebens. In J. Stiensmeier-Pelster & F. Rheinberg (Hrsg.), *Diagnostik von Motivation und Selbstkonzept* (S. 261–279). Hogrefe.

Sahin, D. & Yilmaz, R. M. (2020). The effect of Augmented Reality Technology on middle school students' achievements and attitudes towards science education. *Computers & Education*, *144*, 103710. https://doi.org/10.1016/j.compedu.2019.103710

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.

Thees, M., Kapp, S., Strzys, M. P., Beil, F., Lukowicz, P. & Kuhn, J. (2020). Effects of augmented reality on learning and cognitive load in university physics laboratory courses. *Computers in Human Behavior*, *108*, 106316. https://doi.org/10.1016/j.chb.2020.106316

Thoms, L.-J. (2019). *Spektrometrie im Fernlabor*. Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-658-25708-8

Wilde, M., Bätz, K., Kovaleva, A. & Urhahne, D. (2009). Überprüfung einer Kurzskala intrinsischer Motivation (KIM). *Zeitschrift für Didaktik der Naturwissenschaften*, *15*, 31–45.

Zhang, T., Wang, Y., Jin, X., Gu, Z., Zhang, X. & He, B. (2023). An auto-grading oriented approach for off-line handwritten organic cyclic compound structure formulas recognition. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, *135*(3), 2267–2285. https://doi.org/10.32604/cmes.2023.023229.

Keywords: Künstliche Intelligenz, Augmented Reality