

Ausbildung und Studium

Digitalkompetenz in der universitären Chemie vermitteln

Digitalkompetenz oder Digital Literacy umfasst die Fähigkeit, digitale Forschungsdaten zu erzeugen, zu analysieren, zu dokumentieren und die dafür notwendigen Tools zu beherrschen. Drei Projekte zeigen, wie sich Digital Literacy in die Hochschullehre implementieren lässt und was dabei zu beachten ist.

Die fortschreitende Digitalisierung wissenschaftlicher Prozesse wirkt sich stark auf die Hochschullehre aus, insbesondere in den Naturwissenschaften. In der Chemie bedeutet *Digital Literacy* nicht nur, mit Software umzugehen, sondern Kompetenzen im gesamten Lebenszyklus wissenschaftlicher Daten zu erwerben: vom Planen mit Datenmanagement-Plänen, wie sie die Deutsche Forschungsgemeinschaft für geförderte Forschung erwartet,¹⁾ über Erzeugung, Analyse und Speicherung bis zur Publikation nach den FAIR-Prinzipien (findable, accessible, interoperable, reusable).²⁾

Smart Labs mit digitalen Labormanagementsystemen nutzt die Industrie, der wichtigste Arbeitgeber künftiger Chemiker:innen, seit Jahren. Und auch in der Akademie setzen sich elektronische Labornotebooks (ELN) immer mehr durch, lassen sich doch mit ihnen Daten von den Messgeräten bis zur Publikation reibungslos handhaben. Und das ist wichtig, denn Künstliche Intelli-

genz benötigt beim maschinellen Lernen große Datenbanken und ist daher auf digital veröffentlichte Daten angewiesen.

Im chemischen Curriculum

Die GDCh sprach im Jahr 2021 Empfehlungen aus, wie digitale Kompetenzen in der chemischen Ausbildung zu erweitern seien.³⁾ Dies umfasst Forschungsdatenmanagement (RDM), ELN, Repositorien, Metadaten, Ontologien – also Definitionen von Begriffen und deren Beziehungen, um ein gemeinsames Verständnis für Mensch und Maschinen zu schaffen –, rechtliche und ethische Fragen sowie die Prinzipien guter wissenschaftlicher Praxis.

Ziel ist es, digitale Kompetenzen nicht als Zusatzqualifikation, sondern als integralen Bestandteil wissenschaftlicher Arbeit zu vermitteln. Dies gelingt nachhaltig, wenn Studierende bereits in frühen Semestern mit digitaler Dokumentation, Datenanalyse und FAIR-konformen Arbeitsweisen vertraut gemacht werden. Die Mehrheit der Teilnehmenden der NFDI4Chem-Community-Umfrage im Jahr 2023 [*Nachr. Chem.* 2024, 72(4), 15] teilt diese Ansicht: 86 Prozent waren der Meinung, dass künftige Studierende und Arbeitsgruppen davon profitieren, wenn Forschungsdatenmanagement Teil des offiziellen Curriculums ist.⁴⁾

Diese Forderungen und die dargestellten Entwicklungen müssen eigentlich zu einer Anpassung universitärer Curricula führen. Aber traditionelle Lehrstrukturen, fehlende technische Infrastrukturen, unklare Zuständigkeiten und die Notwendigkeit, Lehrende und Studierende gleichermaßen zu schulen, lassen Curriculum-Anpassungen bis zu Jahre dauern. Studierende der aktuellen Jahrgänge würden also mit alten Lehrplänen durchs Studium gehen.

Aber es geht auch anders: Digitale Kompetenz lässt sich in Studieninhalte und -konzepte integrieren, ohne Curricula ändern zu müssen. Aufgrund der besonderen Bedeutung widmeten die Chemistry Data Days 2025 von NFDI4Chem dem Thema einen ganzen Tag. Die alle zwei Jahre stattfindende Veranstaltung bringt rund 80 Expert:innen und Interessierte zusammen, die sich in Form von Vorträgen, Poster-sessions und Workshops über Entwicklungen rund um Daten in der Chemie austauschen. Drei der an diesem Tag vorgestellten Projekte zeigen, wie verschieden sich Digitalisierung in der Lehre umsetzen lässt.

Elektronisches Laborjournal in der Lehre: RWTH Aachen

Ein seit 2020 erprobtes Beispiel ist die Integration des Chemotion ELN in das Bachelorpraktikum der

Diesen Beitrag haben Theo Bender und Sonja Herres-Pawlis verfasst. Bender war Autor, Verleger und Redakteur. Inzwischen verantwortet er die strategische Kommunikation für das Infrastruktur-Konsortium NFDI4Chem. Herres-Pawlis ist Professorin für anorganische Chemie an der RWTH Aachen. Sie ist Co-Sprecherin von NFDI4Chem und Sprecherin der Sektion „Education & Training“ der NFDI.

Das elektronische Laborjournal Chemotion in der Praxis.

Bild: Felix Garg, RWTH Aachen



anorganischen Chemie an der RWTH Aachen. Hier ist das ELN verpflichtender Software-Teil des Laborpraktikums für fortgeschrittene anorganische Chemie. Studierende dokumentieren darin ihre Experimente zur Synthese von Ferrocen vollständig digital, von der Planung bis zur Analyse.

Das Chemotion-ELN ins Praktikum zu integrieren verknüpft Laborpraxis mit Datenmanagement, FAIR-Prinzipien, International-Chemical-Identifier(InChI)- und Simplified-Molecular-Input-Line-Entry-System(SMILES)-Notation sowie rechtliche Aspekte der Datenpublikation. Begleitend haben Sonja Herres-Pawlis und ihr Team Lehrvideos, Tutorials und Online-Handbücher entwickelt.

Allerdings musste die Praktikumsordnung angepasst werden – es wurde aufgenommen, dass die Studierenden ein ELN einsetzen müssen –, auch war ein eigener Server notwendig, weil am IT-Center kein Server eingerichtet werden konnte. Denn der Betrieb eines ELN erfordert einen Server, auf den Nutzende per Webbrowser über Anmeldung zugreifen. Die Software kann nicht lokal auf Endgeräten installiert werden.

Begleitet wurde die Einführung des ELN in Praktika durch mehrere Evaluationen.⁶⁾ Diese zeigen wachsende Akzeptanz: Studierende schätzen insbesondere die bessere Datenauffindbarkeit, die Standardisierung der Dokumentation und die dadurch bessere Reproduzierbarkeit der Ergebnisse.

Hands-on-Ansätze und praxisnahe Implementierungen sind also wirksam. Die Integration in bestehende Praktika – ohne die Credit Points zu ändern – erleichtert die curriculare Verankerung und schafft eine langfristige Lösung.

Forschungsdatenmanagement als Lehrkultur: Universität Ulm

Im Rahmen des Projekts FDM-LIN (Lehrinkubator zum Forschungsdatenmanagement in der Lehre für Ingenieur- und Naturwissenschaften)⁷⁾ will ein Team aus Chemiker:innen, Physiker:innen und Ingenieur:innen digitale Methoden fest in die Praktika integrieren.

Technisch stützt sich das Konzept auf die Open-Source-ELNs eLabFTW und Chemotion. Sie werden über den Landesdienst

bwCloud gehostet, der eine Infrastructure-as-a-Service-Umgebung für Forschung und Lehre in Baden-Württemberg betreibt und entwickelt. So wird eine Infrastruktur geschaffen, die für alle beteiligten Fakultäten nutzbar ist. Die Projektlaufzeit umfasste zwei Jahre, in denen Erfahrungen gesammelt und der Einsatz der ELNs nach und nach auf immer mehr Kurse ausgeweitet wurde.

Didaktisch ersetzt das ELN das klassische Laborprotokoll. Studierende dokumentieren ihre Arbeitsschritte digital, während Lehrende über integrierte Feedbackfunktionen Rückmeldungen geben. Das kann spielerisch erfolgen, etwa wenn die Studierenden aufgefordert werden, den Prozess des Nudelkochens (beteiligte Substanzen: Nudeln, Wasser, Salz) mit der IUPAC-Gold-Book-Terminologie und sinnvollen Werten korrekt und vollständig in einem ELN zu erfassen – beispielsweise die Temperatur in Kelvin oder Celsius, nicht in Fahrenheit. In den Praktika hingegen waren alle klassischen Aufgaben digital zu erledigen, vom Vorbereiten der Synthesen über das Einbinden von Messspektren bis zur Reporterstellung.

Das Ulmer Modell zeigt: Digital-Literacy-Vermittlung erfordert Infrastruktur, Didaktik und institutionelle Unterstützung in Form der technischen Infrastruktur. Zudem hilft es, interdisziplinär zusammenzuarbeiten, um praktische und technische Aspekte effizient umzusetzen.

Schrittweise ins Curriculum: Universität Kaiserslautern-Landau

An der Rheinland-Pfälzischen Technischen Universität (RPTU) hat Georg Manolikakes elektronische Laborbücher und Data-Literacy-Inhalte eingeführt. Ausgangspunkt war, dass im Jahr 2021 weder Datenkompetenz noch Forschungsdatenmanagement im B.Sc.-Curriculum verankert waren. Aufbauend auf einem Lehrförderprojekt („Neue Lehrmethoden“) begann die Umsetzung schrittweise:

Phase I (2022/23): Die RPTU führte das Chemotion ELN im Fortgeschrittenen-Synthesepraktikum ein (5. Semester). Die Studierenden dokumentierten ein Experiment vollständig digital, begleitet von Online-Videos (unter anderem von der RWTH Aachen) und einer Einführung in FAIR-Prinzipien. Trotz Problemen mit dem Spektren-Editor, einem Teil des ELN, fiel das Feedback überwiegend positiv aus.

Phase II (2023/24): Zwei Experimente und zusätzliche Tools kamen hinzu, etwa NMRium zur Spektrenanalyse. Parallel begann der Fachbereich, auf Basis der GDCh-Empfehlungen ein neues Curriculummodul für das fünfte Semester zu planen, das Data Literacy abdeckt.

Phase III (ab Wintersemester 2024/25): Das neue Pflichtmodul „Anleitung zum selbstständigen wissenschaftlichen Arbeiten unter Verwendung digitaler Methoden“ wurde eingeführt (vier Semesterwochenstunden). Dieses Modul deckt den gesamten Bereich wissenschaftlicher Digital Literacy ab – von For-

schungsdatenmanagement (RDM) und FAIR-Prinzipien über Literaturrecherche mit KI-Werkzeugen bis zum wissenschaftlichen Schreiben und Publizieren.

Phase IV (2025): Auch im vierten Semester wird das Chemotion ELN im organischen Grundpraktikum jetzt für zwei Versuche eingeschränkt genutzt; für das OC-Synthesepraktikum im fünften Semester nutzen die Studierenden ausschließlich das ELN für Protokolle, kein Papier.

Diese stufenweise Integration soll Datenkompetenzen aufeinander aufbauend vermitteln. Das RPTU-Modell verbindet curriculare Reform, technische Infrastruktur (lebenslange Studierendenkonten) und kontinuierliche Evaluation.

Was sich daraus lernen lässt

Ein Vergleich der Initiativen in Aachen, Ulm und Kaiserslautern liefert gemeinsame Erfolgsfaktoren:

- frühe und kontinuierliche Integration digitaler Methoden in die Lehre;
- praxisnahe Vermittlung durch Laborarbeit und reale Daten;
- offene, interoperable Softwarelösungen wie Chemotion und eLabFTW;
- interdisziplinäre Teams, die Chemie, Informatik und Didaktik verbinden.

Trotzdem bleiben Schwierigkeiten: Lehrende schulen, nachhaltige Serverinfrastrukturen aufbauen, Prüfungsordnungen an digitale Arbeitsformen anpassen und Datenschutz. Wie die Erfahrung der vorgestellten Projekte jedoch zeigt, lassen sich diese Hürden durch Kooperation, Hartnäckigkeit und langfristige Strategie überwinden.

Allen drei Modellen ist gemein: Sie führen digitale Tools oder Lehrinhalte schrittweise ein. Dies war der Tatsache geschuldet, dass Neues erprobt wurde. Inzwischen gibt es genug Beispiele, mit denen Inte-

ressierte – basierend auf den Erfahrungen – direkt einen Studiengang-übergreifenden Einführung planen und durchführen können.

Eine zukunftsfähige Chemielehre wird sich nicht mehr allein durch Experimentierfertigkeit auszeichnen, sondern durch digitale Souveränität – den kompetenten, verantwortungsvollen und reflektierten Umgang mit Daten im gesamten wissenschaftlichen Prozess. Digitale Kompetenzen in die Ausbildung zu integrieren ist daher nicht nur pädagogisch notwendig, sondern eine zentrale Voraussetzung für Wettbewerbsfähigkeit und Nachhaltigkeit – auch vor dem Hintergrund des weltweiten Wettlaufs um die leistungsfähigste Künstliche Intelligenz. Damit wird digitale Souveränität ein wichtiger Standortfaktor der chemischen Forschung und Industrie im 21. Jahrhundert. ■

Das Konsortium NFDI4Chem wird von der DFG gefördert unter der PN 441958208.

- 1) Förderungsrichtlinien der DFG, Kurzlink: t1p.de/iu5xl
- 2) M. D. Wilkinson, M. Dumontier, I. J. Aalbersberg et al., *Sci. Data* 2016, 3, 160018
- 3) GDCh-Empfehlungen zu Digitalkompetenz, Kurzlink: t1p.de/rh1sw
- 4) J. Ortmeyer, D. Hausen, S. Herres-Pawlis, *Nachr. Chem.* 2024, 72(4), 15–17
- 5) nfdi4chem.de/event/chemistry-data-days-2025/
- 6) F. Fink, A. Hoffmann, S. Herres-Pawlis, *J. Chem. Educ.* 2023, 100, 11, 4287; pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jchemed.3c00380
- 7) uni-ulm.de/universitaet/profil/leitbild-lehre/ulmer-lehrinkubatoren/

Die den Praxisbeispielen zugrunde liegenden Vorträge sind hier veröffentlicht:

- S. Herres-Pawlis, doi: 10.5281/zenodo.15733412
- A. K. Engstfeld, doi: 10.5281/zenodo.15703324
- G. Manolikakes, doi: 10.5281/zenodo.15657845