

Künstliche Intelligenz

Entdecken zwischen Wahrscheinlichkeit und Intuition

Penicillin, Röntgenstrahlung, Teflon – wissenschaftliche Zufallsfunde, die das Leben der Menschen veränderten. Derartige Durchbrüche erfordern Glück, Neugier, Erfahrung und den richtigen Instinkt. Kann künstliche Intelligenz solche unerwarteten Entdeckungen vorhersehen?

Irving Langmuir definierte Serendipität als die Kunst, von unerwarteten Vorkommnissen zu profitieren.¹⁾ In der Chemie geht es dabei um das zufällige und unerwartete Entdecken neuer Verbindungen, Reaktionen oder Phänomene, die sich nicht durch Plänen oder Hypothesen vorhersehen lassen. Künstliche Intelligenz (KI) unterstützt die chemische Forschung, indem sie Synthesen automatisiert oder molekulare Eigenschaften vorhersagt. KI hilft zudem, neue Bereiche der Chemie zu erschließen und Prozesse zu beschleunigen – etwa durch autonome Labore, in denen KI-gesteuerte Roboter Hochdurchsatzprozesse durchführen, optimieren und Ergebnisse dokumentieren, oder durch generative Modelle, die neue Verbindungen entdecken. Kann KI auch die Serendipität in der chemischen Forschung ersetzen?

Wissenschaft beschleunigen

Durch AlphaFold 2 hat KI seit dem Jahr 2020 die Proteinforschung revolutioniert,^{2,3)} und die Entdeckung des Breitband-Antibiotikums Halicin durch maschinelles Lernen im Jahr 2019 läutete eine neue Ära in der Arzneimittelentwicklung ein.⁴⁾ Besonders vielversprechend für die Chemieforschung sind KI-Methoden, die auf tiefen Lernverfahren (Deep Learning) basieren. Sie



Andreas T. Wolf ist promovierter Chemiker und war 36 Jahre bei Dow Corning (heute Dow Silicones) in verschiedenen Positionen als Gruppenleiter und Wissenschaftler tätig. Nach seiner Pensionierung arbeitete er über zehn Jahre lang als selbstständiger Berater und ist nun als Wissenschaftsjournalist tätig.



Eine Symbiose von Mensch, KI-gesteuerter Robotik und Datenauswertung könnte die Zukunft chemischer Innovationen sein.
Bild: vom Autor erstellt mit KI

generieren neue synthetisierbare Moleküle mit vorgegebenen Eigenschaften. Deep-Learning-Modelle, die auf umfangreichen Reaktionsdatenbanken wie Reaxys trainiert wurden, schlagen plausible, zuvor unbekannte Reaktionswege vor, die experimentell noch nicht validiert sind.⁵⁾ Ein Beispiel sind Retrosynthese-Algorithmen. Einen solchen nutzt etwa die kostenlose Cloud-Plattform RXN for Chemistry, die das IT- und Beratungsunternehmen IBM im Jahr 2018 eingeführt hat.⁶⁾

Während frühere KI-Systeme wie Chatbots, Schreibassistenten und Search-engine-optimization (SEO)-Tools vorwiegend textbasiert arbeiteten, dominieren seit 2024 multimodale, agentische KI-Systeme. Diese analysieren nicht nur Informationen, sondern steuern auch Labore, generieren Hypothesen und treiben so wissenschaftliche Entdeckungen voran. KI übernimmt zunehmend eine Führungsrolle, statt nur zu unterstützen.⁷⁾

Serendipität in der Chemie

Zufallsentdeckungen haben in der Vergangenheit häufig zu Innovationen geführt und die Wissenschaft entscheidend vorangebracht. Beispiele hierfür sind die Entdeckung der Fullerene im Jahr 1985 und des Graphens 2004, die Teflonsynthese aus dem Jahr 1938 sowie die Anwendung von Phosphodiesterase-5-Hemmern wie Sildenafil gegen erektile Dysfunktion seit den 1990er Jahren.

Eine im Jahr 2024 veröffentlichte Studie analysierte 1,2 Millionen biomedizinische Publikationen und zeigt: 70 Prozent der Erkenntnisse in diesen Arbeiten gehen auf unerwartete Ergebnisse zurück, die in den

zugehörigen Forschungsförderungsanträgen nicht vorhergesehen waren. Zu Zufallsentdeckungen kam es besonders häufig in komplexen, diversen Projekten, die mit besonders hohen Beträgen über eine Million Dollar sowie über mehr als dreieinhalb Jahre gefördert wurden und etliche Prozesse umfassten. Serendipität ist kein seltener Glücksfall, sondern systemischer Bestandteil der Wissenschaft.⁸⁾

Serendipität bedeutet nicht einfach nur Glück, sondern erfordert, Unerwartetes in Experimenten zu erkennen, zu interpretieren und weiterzuverfolgen. Es braucht Aufmerksamkeit und ein tiefes Verständnis chemischer Prinzipien, um aus einer Auffälligkeit wissenschaftlichen Erkenntnisgewinn zu destillieren. Zufällige Entdeckungen sind meist ein fortlaufender Prozess, kein einzelnes Ereignis.⁹⁾ Serendipität ist daher eng verbunden mit Neugier, Intuition, Erfahrung und Beharrlichkeit.¹⁰⁾

Wie die KI „denkt“

Die klassische KI analysiert, extrapoliert und klassifiziert auf Grundlage vorhandener Daten und trainierter Modelle. Ihr „Denken“ ist nicht intuitiv, sondern probabilistisch: Sie berechnet Wahrscheinlichkeiten für bestimmte chemische Eigenschaften oder Reaktivitäten, indem sie Muster in Trainingsdaten erkennt. KI-Modelle machen nur Vorschläge, die innerhalb ihres chemischen „Denkraums“ plausibel erscheinen. Fehlen bestimmte Reaktionen oder Molekülklassen in den Trainingsdaten oder sind unterrepräsentiert, wird die KI diese nicht vorschlagen. Ein Beispiel: Wie Karl Alexander Müller und Johannes Georg Bednorz im Jahr 1986 entdeckten, ist keramisches Lanthan-Barium-Kupferoxid bereits bei relativ hoher Sprungtemperatur von 35 Kelvin supraleitend. Bis dahin war jahrzehntelang eine Sprungtemperatur von rund 20 Kelvin als obere Grenze angenommen worden. Die Hochtemperatur-Supraleitung bei Cupraten lässt sich bis heute nicht anhand bekannter Theorien ableiten.¹¹⁾ Eine auf damaligen Daten trainierte KI hätte sie also nicht vorhersehen können.

Es gibt Ansätze, um diese Limitierung zu überwinden. Generative KI-Modelle wie Variationale Autoencoder (VAEs), Diffusion Models oder Generative Adversarial Networks (GANs) nutzen stochastische Samplingverfahren, um neue chemische Strukturen zu erzeugen. Ein Zufallsrauschen ist in die Algorithmen integriert, um bisher unerforschte chemische Räume zu erschließen. Dieses Rauschen wird kontrollier- und parametrisierbar in die Modelle eingespeist. So lässt sich das Ausmaß des Zufalls beim Trainieren des Modells anpassen. Derzeit kann KI jedoch noch keine völlig unerwarteten Phänomene außerhalb bekannter Datenmuster erkennen oder unkonventionelle Hypothesen entwickeln. Das geht nur mit menschlicher Intuiti-

on, denn KI versteht bisher keinen Kontext, der über Zahlenwerte hinausgeht. KI arbeitet, indem sie den bekannten chemischen Raum oder den durch Zufallsvariationen erschlossenen Raum systematisch erforscht, nicht durch spontane Assoziation scheinbar unabhängiger Beobachtungen.

Mensch und KI gemeinsam

Wahrscheinlich liegt die Zukunft chemischer Innovationen in einer Symbiose: Der Mensch bleibt der kreative Entdecker mit KI als Werkzeug, das den Suchraum erweitert. KI könnte die Wahrscheinlichkeit für zufällige Entdeckungen erhöhen, indem sie Experimente beschleunigt und unerforschte Gebiete aufdeckt.

In der Chemie wird KI die Serendipität also nicht eliminieren, sondern sie neu definieren. Anstatt auf glückliche Zufälle zu warten, werden Forschende künftig KI-gestützte Systeme nutzen, die Daten analysieren, wissenschaftliche Aussagen formulieren, Experimente und Erkenntnisse vor dem aktuellen Forschungsstand bewerten und Folgeexperimente vorschlagen.¹²⁾ Durch simulierte Neugier wird maschinelles Lernen helfen, unbekannte Gebiete zu erforschen, auch bei geringen oder fehlenden Datenmengen.¹³⁾

Algorithmische Durchdringung und menschliche Wahrnehmung zu kombinieren wird Forschung effizienter machen. ■

- 1) P. van Andel, *Creat. Innov. Manag.* 2006, 1, 20–32, doi: 10.1111/j.1467-8691.1992.tb00018.x
- 2) J. Skolnick, M. Gao, H. Zhou et al., *J. Chem. Inf. Model.* 2021, 61, 4827–4831, doi: 10.1021/acs.jcim.1c01114
- 3) O. S. Pratt, L. G. Elliott, M. Haon et al., *Comput. Struct. Biotechnol. J.* 2025, 27, 467–477, doi: 10.1016/j.csbj.2025.01.016
- 4) J. M. Stokes, K. Yang, K. Swanson, K. et al., *Cell* 2020, 180, 688–702.e13, doi: 10.1016/j.cell.2020.01.021
- 5) Zur Reaxys-Datenbank: reaxys.com
- 6) Zur Cloud-Plattform RXN for Chemistry: rxn.app.accelerate.science/rxn/
- 7) T. Hartung, *Front. Artif. Intell.* 2025, 8, doi: 10.3389/frai.2025.1649155
- 8) Y. Aslan, O. Yaqub, B. N. Sampat et al., *Res. Policy* 2024, 53, 105075, doi: 10.1016/j.respol.2024.105075
- 9) S. Copeland, *Synthese* 2019, 196, 2385–2406, doi: 10.1007/s11229-017-1544-3
- 10) V.P. Glăveanu, *What's 'inside' the prepared mind? Not things, but relations.* In: *The art of serendipity* [Hrsg.: W. Ross & S. Copeland], S. 23–39. Palgrave Macmillan/Springer Nature, 2022; doi: 10.1007/978-3-030-84478-3_2.
- 11) Zum Forschungsbericht 2009 des Max-Planck-Instituts für Festkörperforschung: mpg.de/367999/forschungsschwerpunkt1
- 12) L. Yao, S. Samantray, A. Ghosh et al., *arXiv* 2025, arXiv:2508.06569
- 13) L. Bustillo, T. Laino, T. Rodrigues, *Chem. Sci.* 2023, 14, 10378–10384, doi: 10.1039/D3SC03367H