

《计算机在化学化工中的应用》课程教学实践*

周凌云¹, 通讯作者 王艳² 冷艳丽¹, 通讯作者

(1. 贵州民族大学化学工程学院, 贵州 贵阳 550025;

2. 贵州省龙里中学, 贵州 黔南布依族苗族自治州 551200)

摘要: 本文结合贵州民族大学学生的实际情况以及笔者的科学研究经验, 针对《计算机在化学化工中的应用》这门课程进行教学实践。从提高教学效果、增强学生课堂参与感、激发学习兴趣等角度出发, 通过任务式驱动的授课方式, 精心规划和设计了教学内容、课程实例、教学方法和考核模式, 以期达到提高学生利用相关软件解决实际问题的能力, 满足快速发展的社会对化学化工类专业人才的需求。

关键词: 教学实践 任务驱动式教学 ChemOffice Origin Microsoft Office

中图分类号: O639 **文献标识码:** A **文章编号:** 1003-9082 (2023) 02-0248-03

《计算机在化学化工中的应用》作为化学化工类专业学生的必修课或选修课, 近年来许多国内高校对这门课程的教学进行了实践和改革^[1-6]。然而, 在课程的建设过程中还存在一些共性问题。大多论文列出了具体的软件和教学目标, 但并未展示教学过程中该如何通过详细的教学实例达到该目标。尤其是针对基础相对薄弱的学生, 教学内容选择、教学方法和考核模式都有待优化。本文结合笔者所在学校的实际情况以及个人从事科学研究的实践和经验, 对这门课程的教学内容、课程实例、教学方法和考核模式方面进行了一系列的实践。课程形成了一定的特色, 本文对此进行了梳理和总结。

一、软件的择优选择

开设这门课程旨在让化学化工类专业的学生掌握常见相关软件的使用, 并能够将其运用于解决实际问题, 最终为毕业论文的设计、就业、工作或科学研究奠定基础。随着琳琅满目的实用软件相继出现, 为合适教学软件的选择提出了难题。例如, 关于化学结构式绘制的软件有ChemWindow、ChemSketch、ISIS/Draw、Chemdraw、KingDraw等; 关于科学数据计算、分析和统计的软件有Microsoft Excel、Origin、Matlab、Spss、DesignExperte等; 关于化工流程模拟的软件有Aspen Plus、PRO/II、Hysys、ProMax等; 关于化学化工工作图的软件有AutoCAD、Visior、Cup tower、PDSOft等; 其它画图软件Photoshop、3Dmax、Microsoft PPT等; 关于理论模拟的软件有Gaussian、GAMESS、VASP、Chem3D。

软件的选择决定了这门课程的教学内容。然而, 针对这门课程, 选择哪几种软件作为授课的主要内容, 到目前为止没有统一的标准。不同的学校, 使用的软件存在差异。例如, 天津工业大学环境与化学工程学院的卞希慧选择了Microsoft Word、Microsoft PPT、Origin、ChemDraw、AutoCAD、Photoshop、3dsMax、Matlab、Gaussian、NAMD^[7]。这门课程的课时一般为32学时。许多专业相关的软件操作繁琐、流程复杂, 且大多都是纯英文界面。针对基础相对薄弱的学生, 想要在有限的学时内学习并会使用3个甚至更多软件, 十分困难。教师教授的种类越多, 学生掌握的情况越不理想。更何况有些学生在上完本课后很少使用相关软件, 很快就会将课程内容遗忘。因此, 合适软件的选择十分重要, 只要达到教学目的, 相似的软件, 应选择一款操作相对简单, 且更容易被记住的即可。

笔者所在学校为西南地区的普通高校, 学生的基础相对薄弱, 尤其是还有专升本的学生。针对这样的情况, 笔者认为这门课程教授的内容不宜过多, 且选择的软件是比较流行或学生使用过但对其许多功能又不熟悉的。对于化学化工类专业的学生, 可以使用软件解决以下四个方面的问题即可: (1) 化学结构、常用仪器的绘制和分子模拟, (2) 数据的统计、分析和归类, (3) 简单美观图形的绘制, (4) 内容排版。目前的教改论文显示Chemoffice、Origin以及Microsoft Office这三款软件及其组件特别受欢迎, 且能够满足我们学院对该门课程的教学需求。因此, 在选择这三款软件的基础上, 笔者对每款软件的教学内容进行了精心

* **基金项目:** 贵州省教育厅高校科学研究项目(青年项目): 贵金属表面氧化物物种调控H转移作用机制的理论研究, 项目编号: 黔教技[2022]161号; 国家自然科学基金项目: Cu基催化剂中碱金属助剂作用机制的理论研究, 项目编号: 22202048; 贵州民族大学新工科专项教改项目: 新工科背景下煤化工创新型人才培养模式探索与实践。

的规划和设计。

二、合理设计和规划教学内容

1. ChemOffice 的教学内容

ChemOffice 是由英国的 CambridgeSoft Corporation 开发的综合性科学应用软件包，是众多集成化软件中的一种，主要集成了化学结构绘图 ChemDraw，分子模型及仿真 Chem3D，化学信息搜寻整合系统等软件 ChemFinder 等。ChemOffice 也是化学化工教学和科学研究中被广泛使用的软件。ChemDraw 和 Chem3D 两个组件绘制的内容不仅能与 Microsoft Office 等软件完美兼容，还有国内外许多高档次的论文期刊专门为其指定文件格式用来投稿。因此，这两个组件的内容是本门课程的教学重点之一。

ChemDraw 的教学内容规划和设计如下：(1) 模板工具的介绍；(2) 有机分子化合物单双三键、环状、链状、芳香烃等的绘制；(3) 文字编辑功能的介绍；(4) 反应方程式的绘制；(5) 轨道图形的绘制；(6) 反应实验装置设备的绘制；(7) 分子结构的核磁共振；(8) 其它扩展功能。Chem3D 的教学内容规划和设计如下：(1) 从 ChemDraw 中导入结构到 Chem3D；(2) 分子结构显示模式的设置等；(3) 分子轨道和电荷的计算及显示；(4) 分子的优化和动力学模拟；(5) 变更分子二面角查找其构象空间；(6) 其它扩展功能。

ChemDraw 和 Chem3D 教学内容的实际例子，在前人的基础上进一步做了优化和设计。不仅会选择经典的海胆霉菌素分子结构进行绘制，还会选择一些人们日常生活中比较熟悉的分子如葡萄糖、乳糖、阿莫西林、蛋白质分子等。此外，还会将笔者部分已发表文章上的结构、轨道或原子排布示意图作为教学素材。值得一提的是，这类素材的选取可以更加直观地让同学们了解学习此类软件的用途和意义。

2. Origin 的教学内容

Origin 是由美国的 OriginLab 公司开发的一个科学绘图、数据分析软件。这款软件简单易学且功能十分强大，支持各种各样的 2D/3D 图形的绘画，支持数据分析和曲线拟合等。Origin 教学内容的规划和设计如下：(1) 曲线、直线图的绘制；(2) 反应能垒图的绘制；(3) 线性拟合和数据分析；(4) 多图形的组合；(5) 科技论文作图技巧。Origin 作图数据来源于 Chem3D 教学中的分子动力学模拟。

3. Microsoft Office 的教学内容

Microsoft Office 是所有软件中大家相对比较熟悉的软件之一，但该软件的许多功能还未被完全发掘，尤其是利用

Microsoft PPT 画精美图形的功能往往会被忽视掉。相比于 Photoshop、3dsMax 等这类专业的作图软件，Microsoft PPT 操作简单、使用简便，更容易被同学们掌握。因此，利用 Microsoft PPT 作图是该部分主要讲解的内容之一。另外，当前，许多重要的国家级申请项目的答辩都采取了提交视频的方式进行。笔者曾参与了长江学者奖励计划、国家杰出青年科学基金以及国家优秀青年科学基金答辩视频的制作，发现该类视频是利用 Microsoft PPT 里面的一些基本操作合成而得，其中主要涉及幻灯片排版、动画设计、语音导入及配置等。当然，最后也会讲解 Microsoft word 文字内容的排版、图形插入、表格制作、公式的输入、特殊符号的插入、页眉页脚设置以及目录的制作等，更好地为学生毕业论文的设计和科技论文撰写做铺垫。除此之外，在教学过程中网络资源的有效利用也会适当提及。

4. 其他软件

大学教师不仅要教授学生相应的知识，更重要的是培养学生运用各种技术、技巧和技能，来解决学习和研究过程中遇到问题的能力。以上课程教学内容包括了化学和化工专业共性的学习内容。针对不同专业的一些特殊软件的内容，在课程教学上也进行了规划。例如，在课程刚开始让所有学生分别挑选一个与专业相关的软件，自己课后进行学习和研究，并在最后 2 次课上将软件的安装步骤、使用方法进行现场演示和说明。在这个过程中教师会提供相应的资料，并对学生讲解软件进行点评和总结。对于化工类的学生可以选择流程模拟软件 Aspen Plus、塔设备设计软件 Cup tower、化工厂三维设计软件 PDSOFT 等，而对于应用化学可以选择专业制图软件 AutoCAD、Visior 等。

三、初步优化教学方法

《计算机在化学化工中的应用》是一门实践性非常强的课程，需要学生在学习过程中反复练习相关软件才能达到理想的教学效果。因此，笔者在教学过程中采取了任务驱动式教学方法。首先，在第一次课堂上，将这门课程的总任务目标告知同学，即做一个视频。视频素材来源于学习所有软件过程中绘制的结构或图片。因此，视频内容包括了 ChemDraw 绘制的分子结构、化学方程式、轨道结构图和分子的核磁共振 (NMR) 结果等；Chem3D 模拟的分子动态变化、分子的最高占据分子轨道 (HOMO)、最低未占据分子轨道 (LUMO) 及电荷分布等；Origin 制作的图和相应数据分析结果等；Microsoft PPT 绘制的精美图形等。其次，为了充分吸引同学们，激发其学习兴趣，向同学们展示提前制作好并嵌入音频的视频。当然，每部分结构或图片内容

都是用较为明亮的颜色,且使用的动画是比较炫酷的类型。

在学习每个软件内容之前先展现该软件所能实现的功能,有助于调动学生的积极性。对于单次课的教学方法也是采取这种任务驱动的模式,即每次上课的第一件事就是告知同学们相应的任务目标,再进行教学和演示。例如,“海胆霉菌素原子的标记和说明”一图中涉及了单双键、芳香烃的绘制、文本的编辑、键长/键角的控制、线条的选择等,是ChemDraw教学的经典例子。在讲解ChemDraw绘制分子结构时,笔者首先将相应的分子结构向同学们展示。然后,再用ChemDraw软件实际操作来演示图中涉及到的关键知识点,演示结束后马上让同学们实际操作。然而,即使这样,仍然还有许多学生在使用软件时,很快忘记或者根本找不到相应的按钮进行操作。因此,学生在实操过程中,不仅要单独指导个别基础差的学生,还要及时将课堂上同学们反馈的问题进行讲解。值得一提的是,目前教改论文显示大多高校将理论课时和上机课时的比例进行明确的划分。通过实践我们发现直接将大量的理论知识灌输给学生,再让他们上机操作的效果并不好。而我们的课堂以学生实际操作为主,任课教师讲解为辅,并根据学习情况,实时调整学习进度。实践操作更能反映学生在使用软件的过程中遇到的问题,所以以任务—演示—操作—反馈这样的方式进行课堂教学,不仅提高了同学们的积极性,还增加了他们在课堂上的参与感。而通过与部分高中老师沟通发现任务驱动式教学在高中课堂的教学效果也是十分良好的。

除此之外,每次教学任务的内容都是在上次任务的基础上进行精心地设计,如在学习计算分子的NMR时,向同学们展示阿莫西林的结构,再演示其¹H-NMR和¹³C-NMR的计算方法。那么,同学们在计算NMR时,就必须先画出阿莫西林的结构才能进行下一步操作。这样既复习了分子结构绘制的内容,也学习了新知识。这样反复的练习,可以使同学们更熟练地使用相应的软件。在学习Chem3D的分子动力学模拟时,教会同学们通过改变阿莫西林或葡萄糖分子结构中部分原子的二面角,并利用分子动力学模拟寻找其空间构象和能量。同时告知同学们这一步得到的能量数据,要用于Origin软件进行数据分析和画图。

四、创新课程的考核模式

创新课程的考核模式是教学改革中一个非常重要的环节。最终成绩是对学生掌握软件水平的一个重要判标,而考核方式对促进其学习具有非常重要的导向作用。这门课程以实际操作为主,需要设计以应用能力为中心的考核方

式,全面考察学生掌握各个软件的情况。在这门课程的考核中,笔者提高了平时成绩所占的比例,并增加了自主学习能力的考察,进行了学习过程评价和拓展能力评估相结合的考核方法探索。

最终成绩分为平时成绩和期末成绩两部分组成,比例分别占70%和30%。平时成绩主要包括学生上课的考勤和课堂任务完成的质量,期末成绩主要考察学生自主学习专业相关软件的能力。任务完成质量可以反映学生掌握软件的使用情况,而期末介绍新软件的使用可以反映学生自主学习新知识的能力。学生只有上课认真完成任务,仔细研究自学新软件的使用,才能获得较优的最终成绩。

五、效果与讨论

通过《计算机在化学化工中的应用》这门课程的学习,培养学生解决实际问题的能力,为化学化工类专业的学生处理实验数据、设计毕业论文、就业或科学研究奠定基础。课程内容选择了世界上比较流行的软件进行介绍,教学方法采取任务驱动的模式,考核方式提高了平时成绩所占的比例。实践证明以任务—演示—操作—反馈这样的方式进行课堂教学,不仅提高了同学们的积极性,还增加了其课堂参与度。从学生们完成任务的质量来看,这样的授课方式取得了较好的教学效果。

参考文献

- [1]陈义磊,陶海燕.《计算机在化学中的应用》课程的教学改革与探索[J].广州化工,2019,47(16):187-189.
- [2]张光彦,安俊健,王鹏.基于平台统计数据的课程教学改革探索——以《计算机在化学中的应用》为例[J].教学研究,2019,42(04):79-83.
- [3]刘清芝,杨爱萍,杨登峰.计算机在化学中的应用课程教学探讨[J].大学化学,2011,26(03):27-29.
- [4]彭浩,郭静,李兵等.《计算机在化学化工中的应用》课程的教学内容和教学模式探索[J].广东化工,2017,44(23):149,154.
- [5]高道伟,牟宗刚,陈国柱等.《计算机在化学化工中的应用》课程教学探究[J].广州化工,2018,46(15):155-156,159.
- [6]牛永平,张军凯,汪小伟.《计算机在化学化工中的应用》课程的教学改革与探索[J].广州化工,2014(15):270-271.
- [7]卞希慧,代昭,赵世怀等.化学软件基础课程教学[J].科教导刊(上旬刊),2015(13):136-137.

通讯作者:

周凌云 Email: lyzhou@gzmu.edu.cn

冷艳丽 Email: gslengyanli123@126.com