

从分子可视化到深度学习：虚拟实验室赋能的有机化学教学范式转型研究

张文文, 张培超, 柴晓云, 邹燕, 赵庆杰, 盖聪昊*

海军军医大学(第二军医大学)药理学有机化学教研室, 上海

收稿日期: 2025年6月14日; 录用日期: 2025年7月14日; 发布日期: 2025年7月21日

摘要

随着信息技术的飞速发展与教育数字化转型的深入推进, 虚拟实验室及在线模拟工具已成为化学教育革新的重要驱动力。在有机化学教学中, 反应机制的理解不仅是课程的核心难点, 更是培养学生化学思维的重要基石。然而, 传统实验教学受限于实验条件、资源投入及微观过程的不可见性, 往往导致学生对复杂反应机制的理解停留在表象层面, 难以深入把握电子转移、过渡态演变等核心概念。在此背景下, 虚拟实验室凭借其动态可视化、交互式探索和安全无风险等特点, 为有机化学教学提供了革命性的解决方案。本研究以虚拟实验室在化学反应机理教学中的应用为切入点, 重点探讨其教学赋能机制。通过系统分析虚拟实验技术在分子层面动态可视化、三维空间结构展示、交互式情境模拟等方面的独特优势, 深入阐释了该技术对促进学生机理认知建构、激发自主学习动机以及培养科学探究素养的多维教育价值, 从而为化学教育创新提供理论与实践支撑。

关键词

虚拟实验室, 教学模式创新, 有机化学, 反应机理

From Molecular Visualization to Deep Learning: A Study on Virtual Laboratory-Empowered Transformation of Organic Chemistry Teaching Paradigm

Wenwen Zhang, Peichao Zhang, Xiaoyun Chai, Yan Zou, Qingjie Zhao, Conghao Gai*

Department of Organic Chemistry, School of Pharmacy, Naval Medical University (Second Military Medical University), Shanghai

Received: Jun. 14th, 2025; accepted: Jul. 14th, 2025; published: Jul. 21st, 2025

*通讯作者。

文章引用: 张文文, 张培超, 柴晓云, 邹燕, 赵庆杰, 盖聪昊. 从分子可视化到深度学习: 虚拟实验室赋能的有机化学教学范式转型研究[J]. 教育进展, 2025, 15(7): 749-753. DOI: 10.12677/ae.2025.1571280

Abstract

The rapid development of information technology and ongoing digital transformation in education have positioned virtual laboratories and online simulation tools as key innovators in chemical pedagogy. Understanding reaction mechanisms constitutes both a central challenge in organic chemistry education and a critical foundation for developing students' chemical reasoning. Yet traditional lab instruction, limited by physical constraints, resource availability, and the inherent invisibility of molecular processes, frequently leaves students with only a surface-level grasp of complex mechanisms. This approach particularly hampers comprehension of fundamental concepts like electron transfer dynamics and transition-state transformations. In this context, virtual laboratories offer transformative solutions for organic chemistry education by enabling dynamic visualization, interactive exploration, and safe experimentation. This study focuses on the enabling mechanisms of virtual laboratories in teaching chemical reaction mechanisms. Through a systematic analysis of the unique advantages of virtual experiment technology—including dynamic molecular-level visualization, three-dimensional structural representation, and interactive scenario simulation—it comprehensively explores the technology's multidimensional educational value in enhancing students' mechanistic cognition, fostering self-directed learning motivation, and cultivating scientific inquiry skills. The findings provide both theoretical and practical support for innovation in chemistry education.

Keywords

Virtual Laboratory, Teaching Model Innovation, Organic Chemistry, Reaction Mechanism

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

虚拟实验室作为信息技术赋能化学教育的重要创新形式,在解决传统有机反应机理教学难题方面展现出独特优势[1]。这类基于计算机仿真和虚拟现实技术的数字化教学平台,通过动态可视化呈现分子结构演变、电子转移等微观过程,有效突破了传统实验教学在抽象概念具象化和实验条件限制等方面的瓶颈[2]。从技术发展历程来看,虚拟实验室已实现从基础操作模拟到融合量子化学计算与分子动力学模拟的跨越式发展。其中,ChemCollective [3]和 PhET [4]等虚拟实验平台构建的成熟教学体系,不仅能够直观呈现抽象的化学反应机理[5],还能显著提升学生的互动学习效果和实验设计能力,促进其对复杂化学现象的深入理解[6]-[8]。我国在该领域的研究虽起步较晚,但发展迅速。目前,中国科学技术大学、浙江大学、大连理工大学等高校已相继开发了具有有机反应模拟功能的虚拟实验平台,支持消除反应、加成反应等典型反应的仿真实验,在一定程度上缓解了传统实验教学中的资源和条件限制问题[9]。然而,在高等有机化学课程教学实践中,虚拟实验室的应用仍面临两大核心挑战:一是缺乏系统的有机反应机理虚拟教学模型和设计框架;二是对技术赋能教学效果的实证研究不足,特别是在当前人工智能与大数据技术快速发展的背景下,如何构建“虚实融合、智能引导”的新型实验教学体系,已成为化学教育改革的重点方向。

值得注意的是,现有研究多聚焦于虚拟实验室的技术开发与应用实践[10],而针对有机反应机理这一特定教学内容的教学模式创新研究相对匮乏[11]。因此,虚拟实验室如何具体有效地辅助学生理解复杂的有机反应机理,尤其是在分子层面、反应路径和反应中间体的动态展示方面,仍是一个亟待解决的问题。

针对这些问题,本研究将从以下三个维度展开探索:首先,在理论建构层面,基于建构主义理论和分子可视化模型,构建虚拟实验室环境下的有机反应机理教学理论框架;其次,在教学实施层面,利用已开发的多尺度可视化交互模型,实现传统课堂讲授与虚拟实验的深度融合;此外,在效果评估层面,采用随机对照试验,结合过程性评价和终结性评价,从概念理解度、机理分析能力和问题解决能力三个维度,系统评估虚拟实验对提升学生有机反应机理认知水平的影响。

通过本课题的研究,旨在为有机反应机制教学提供创新的解决方案,提升学生对复杂化学反应机制的理解,推动教学改革,促进教育质量的提升。

2. 传统实验教学的困境与虚拟实验的创新应用

2.1. 传统有机化学实验教学的局限性与挑战

在当前高校有机化学实验教学中,实验条件和教学学时的双重限制对教学质量产生了显著影响。具体表现在以下几个方面:

1) **实验内容局限性:** 受限于3学时/次的实验课时安排,教师只能选择操作简单、耗时短的合成反应(如乙酰水杨酸的制备),导致许多重要的经典反应类型(如取代反应、加成反应等)无法纳入实验课程体系。

2) **教学深度不足:** 现有实验项目多为验证性实验,缺乏综合性、设计性实验内容,难以培养学生系统的有机合成思维。

3) **实践机会有限:** 学生接触的反应类型和实验技术单一,不利于其全面掌握有机化学实验技能和深入理解反应机理。

2.2. 虚拟实验室在有机反应机制教学中的优势与应用

随着教育信息化的发展,虚拟实验室在有机化学教学中的应用价值日益凸显^[12]。当前应用主要体现在以下三个方面:首先,在复杂反应过程模拟方面,通过分子动力学仿真和三维可视化技术,能够精准呈现传统实验难以观察的反应中间体、过渡态等微观结构;其次,在反应机理解析方面,借助动态电子云分布、键长变化等可视化手段,可直观阐释反应的电子效应与能量变化规律;最后,在交互式学习环境方面,提供了参数可调、过程可溯的虚拟操作平台,支持学生通过反复实验探究反应条件的影响机制。

相较于传统实验教学,虚拟实验室具有以下显著优势:

- 1) **突破时空限制,** 学生可随时随地进行实验探究;
- 2) **消除安全隐患,** 允许开展高危险性反应的模拟;
- 3) **降低实验成本,** 避免昂贵试剂和设备的消耗;
- 4) **增强教学效果,** 通过慢放、回放等功能强化重点难点理解。

研究表明,这种沉浸式的学习体验不仅能提升学生的空间想象能力和微观思维能力,更有助于培养其科学探究意识和创新精神。值得注意的是,虚拟实验室的应用并非要完全取代传统实验,而是与之形成优势互补。二者的有机结合将构建更加完善的实验教学体系,为培养创新型化学人才提供有力支撑。未来应进一步探索虚实结合的最佳教学模式,以充分发挥各自的教育价值。

3. 虚实融合的有机反应机理教学创新模式构建

针对当前有机化学实验教学中存在的实验条件受限、学时不足、反应类型单一等问题,结合虚拟实验室的可视化、交互性、安全性等优势,构建“理论-虚拟-实操-创新”四位一体的教学模式,实现从基础操作到反应机理、从验证性实验到探究性学习的全方位提升。

1) **教学模式优化——虚实结合,分层递进:** 采用“线下实操+线上虚拟拓展”的混合教学模式,优

化传统 3 学时实验安排,形成“课前预习 + 课上实操(X) + 课上虚拟拓展(3-X)”的弹性学习模式:首先,课堂基础实验应保留经典、简单的实验(如乙酰水杨酸制备),强化基本操作技能训练;其次,线上虚拟拓展可适当补充 S_N1/S_N2 取代、烯烃加成等经典反应,弥补实验条件限制;此外,对于需多步合成或危险实验(如格式试剂制备)以及机理复杂的反应,可以设计“线下观察,线上模拟”的教学方法,帮助学生既降低风险的同时,又能体验多种反应类型,理解反应机理。

2) 虚拟实验教学设计——强化机理理解与实践能力:虚拟实验室主要从三个方面提升教学效果:首先,通过动态分子模型展示电子转移和过渡态形成等微观过程,结合可交互的 3D 动画模拟亲核进攻和中间体重排等关键步骤,实现反应机理的可视化;其次,支持调节温度、溶剂和催化剂等参数以观察产率变化,并通过模拟 pH 不当导致水解等失败案例,强化学生的规范操作意识;最后,针对傅-克反应等高温高压、强腐蚀性实验开展安全模拟,突破传统实验的安全与条件限制。这些功能显著提升了学生对反应机理的理解能力和实践操作水平。

3) 深度学习促进策略——“课前-课中-课后”闭环训练:课前通过虚拟实验预习熟悉操作流程,减少实操失误;课中结合线下实验与线上机理回放,强化理论与实践的深度融合;课后则延伸拓展学习,包括虚拟设计实验任务(如反应条件优化)以及利用虚拟实验生成的大数据进行反应规律分析(如 Arrhenius 方程拟合),形成“预习-实操-探究”的完整学习闭环。

4) 评价体系创新——多元化考核,激励探究:通过虚拟实验室和有机反应机制教学整合应用策略的实施,可对教学形成性考核开展多元化评价机制。首先,在过程性评价方面,设置虚拟实验报告(30%)、实操表现(40%)和创新设计(30%)的综合性考核;同时引入创新考核环节,包括“实验方案设计”答辩(如绿色合成路径设计)和虚拟实验技能竞赛(如产率优化挑战赛),全面评估学生的实践能力、创新思维和问题解决能力。

4. 虚拟实验环境下学习成效的评估维度与方法

本课题的一个重要内容是评估虚拟实验室与在线模拟工具对学生学习成效的影响。通过量化和质化的研究方法,我们将对比虚拟实验室教学与传统教学模式在提升学生对有机反应机制理解、实验操作技能和创新思维培养方面的效果。具体的评估方式包括:

1) 学习成效的量化评估:通过测试学生在虚拟实验室学习前后的知识掌握情况,特别是在理解有机反应机理、识别反应步骤、反应路径选择等方面的能力变化,比较实验组与对照组学生的成绩差异,评估虚拟实验室教学在知识掌握方面的效果。

2) 实验操作技能的评估:通过学生在虚拟实验室中的实验操作表现,评估其实验技能的提升。学生可以在虚拟实验中反复操作,熟悉不同反应的条件和步骤。因此,研究将通过学生的实验操作测试,评估虚拟实验室在培养实验技能方面的作用。

3) 创新思维的培养:虚拟实验室提供了一个相对自由的实验平台,学生可以根据不同的实验条件进行反应设计和优化。通过对学生创新设计能力的评估(如设计反应路径、优化反应条件等),评估虚拟实验室在激发学生创新思维方面的效果。

4) 学生反馈与学习态度的调查:通过问卷调查和访谈收集学生对虚拟实验室学习的反馈,分析学生对虚拟实验室教学模式的态度和认同感,以及其在学习中的参与度和积极性,进一步探讨虚拟实验室对学生学习兴趣的促进作用。

5. 结论

本研究不仅致力于填补虚拟技术与有机化学教学融合的理论空白,更着眼于建立可推广的信息化教

学范式。研究成果将为深化化学教学改革提供理论支撑与实践范例,同时彰显虚拟实验室在促进深度学习、培养化学思维方面的独特价值,对推动教育数字化转型具有重要的现实意义。此外,这些发现也为一线教师开展信息化教学提供了包含教学设计、实施路径和评价方案在内的完整解决方案,对推进化学教育的数字化转型具有重要的理论价值和实践指导意义。

参考文献

- [1] 刘筱兰, 张薇, 程惠华, 等. 虚拟实验室的类型及发展趋势[J]. 计算机应用研究, 2004, 21(11): 8-10.
- [2] 蒋耘晨. 虚拟实验室技术[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 2011.
- [3] Davenport, J., Yaron, D., Karabinos, M., Leinhardt, G. and Greeno, J.G. (2009) The ChemCollective Digital Library. *Journal of Chemical Education*, **86**, 123.
- [4] 孙丹儿, 韦斯林. 探索仿真科学实验软件的专业化发展思路——以科罗拉多大学 Phet 项目为例[J]. 现代教育技术, 2012, 22(7): 114-117.
- [5] 李玲玉, 蔡宇, 杨丽, 等. 高校实验室信息化研究的文献计量分析[J]. 实验室研究与探索, 2025, 44(5): 250-254.
- [6] 王陆瑶, 张研研, 王玉贤. 虚拟实验室在有机化学实验教学中的应用研究[C]//首都师范大学化学系, 首都师范大学信息学院. 2010 年第三届教育技术与培训国际会议论文集. 2010: 369-371.
- [7] 史晶晶, 徐长亮. 虚拟实验法在有机化学实验教学中的应用[J]. 知识库, 2015(22): 88.
- [8] 张艺, 苏火煌. 虚拟仿真技术在“化学反应过程与设备”课程中的应用[J]. 化学工程与装备, 2024(10): 163-166.
- [9] 姜晓庆. 有机化学虚拟实验平台的构建和应用[J]. 化工设计通讯, 2019, 45(12): 151-152.
- [10] 刘振岭, 耿明江, 华远照, 等. 略论有机化学虚拟实验室的构建[J]. 网络与信息, 2010, 24(2): 7-8.
- [11] 卑占宇, 郭小慧, 何新蕾, 等. 药学专业有机化学虚拟实验室学习平台的构建与应用研究[J]. 中国医药导报, 2012, 9(15): 163-167.
- [12] 杨新娟, 耿会玲, 杨峰. 有机化学实验虚拟教学模式利弊分析[J]. 科技信息, 2012(35): 51-69.