

# 第一性原理思维在精细化学品化学课程教学中的应用思考

余传明<sup>1</sup>, 陈 蕾<sup>2</sup>, 廖铭能<sup>1</sup>

<sup>1</sup>广东海洋大学化学与环境学院, 广东 湛江

<sup>2</sup>广东海洋大学创新创业学院, 广东 湛江

收稿日期: 2026年5月15日; 录用日期: 2026年6月18日; 发布日期: 2026年6月25日

## 摘 要

《精细化学品化学》教学中, 传统模式易导致学生知识碎片化、思维被动, 难以适配行业创新需求, 为此提出引入第一性原理思维重构教学逻辑。该思维以回归化学本质、拆解核心问题为导向, 有望破解知识零散难题, 衔接原理与实践, 激活学生创新能力。以染料教学为例, 通过问题导入、原理拆解、计算实践、实验验证、认知升级的教学过程实施, 构建“结构-性质-功能”的本质关联。尽管应用面临教师跨学科能力不足、学生基础薄弱、教学工具缺失等挑战, 但该思维能实现教学从知识覆盖到能力提升的转型, 为精细化工领域培养具备底层逻辑与创新素养的复合型人才, 也为同类课程教学改革提供参考。

## 关键词

第一性原理, 精细化学品化学, 教学改革, 构效关系

# Reflections on Integrating “First-Principles Thinking” into the Fine Chemicals Chemistry Course

Chuanming Yu<sup>1</sup>, Lei Chen<sup>2</sup>, Mingneng Liao<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Chemistry and Environmental Science, Guangdong Ocean University, Zhanjiang Guangdong

<sup>2</sup>College of Innovation and Entrepreneurship, Guangdong Ocean University, Zhanjiang Guangdong

Received: May 15, 2026; accepted: June 18, 2026; published: June 25, 2026

## Abstract

In the teaching of Fine Chemicals Chemistry, traditional models tend to result in fragmented

knowledge and passive thinking among students, making it difficult to meet the innovative needs of the industry. To address this, it is proposed to introduce “first-principles thinking” to reconstruct the teaching logic. Guided by returning to the essence of chemistry and decomposing core problems, this thinking is expected to solve the problem of scattered knowledge, connect principles with practice, and activate students’ innovative abilities. Taking dye teaching as an example, the essential connection between “structure-property-function” is established through the implementation of a teaching process consisting of problem introduction, principle decomposition, computational practice, experimental verification, and cognitive upgrading. Although its application faces challenges such as insufficient interdisciplinary capabilities of teachers, weak foundational knowledge of students, and a lack of teaching tools, first-principles thinking can realize the transformation of teaching from knowledge coverage to ability improvement. It cultivates interdisciplinary talents with underlying logic and innovative literacy for the fine chemical industry, and also provides a reference for the teaching reform of similar courses.

## Keywords

First-Principles, Fine Chemicals Chemistry, Teaching Reform, Structure-Activity Relationship

Copyright © 2026 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

《精细化学品化学》是应用化学专业的核心课程之一，内容涵盖表面活性剂、洗涤剂、染料、涂料、胶粘剂、食品添加剂、化妆品等数十个门类，其知识体系兼具理论深度与应用广度，是连接化学原理与工业实践的关键桥梁[1]。然而，精细化学品不同品类的结构、功能、应用场景差异显著。传统教学多以门类划分与知识点罗列为重，使得学生易陷入记性质、背配方的机械记忆模式，难以建立“分子结构 - 反应机理 - 功能特性 - 应用场景”的内在逻辑关联，导致只见树木、不见森林的认知困境，知识碎片化问题突出，体系化认知严重薄弱。

《精细化学品化学》课程的核心本应是化学原理支撑工业应用，但大学生普遍缺乏化工生产实践经验，对为何选择该合成路线、如何优化工艺参数、功能需求如何转化为分子设计等核心问题理解浅表。教学中往往容易出现重性质介绍、轻原理拆解的极端现象，最终导致学生面对复杂工业问题时难以实现知识迁移[2]。精细化工行业的核心竞争力在于产品定制化与性能优化[3]，但传统教学多采用“定义 - 性质 - 应用”的线性讲授模式，缺乏对底层逻辑、问题拆解和方案设计的有效引导，学生习惯被动接收知识，面对绿色化工要求下的配方改良、特定功能需求的分子设计等新场景时，难以突破既有框架，缺乏原创性思考能力。此外，跨学科融合的欠缺也限制了学生综合能力的提升。精细化学品的研发需要融合有机化学、物理化学、分析化学、材料科学等多学科知识，但在教学实施中，这些知识点常常彼此割裂，学生难以运用不同领域的原理解决实际问题，这与行业对复合型化工人才的需求尚有一定距离。

以上教学现状，既与新时代高等教育改革的方向有所脱节，也难以充分呼应精细化工行业的创新发展需求，凸显了课程自身进行教学优化与重构的紧迫性。在此背景下，第一性原理思维的引入正是回应这一需求的重要路径。现代高等教育强调知识传授、能力培养、价值塑造三位一体，化工类专业的核心目标是培养具备底层逻辑思维、创新能力与工程素养的人才。第一性原理思维以回归本质、拆解问题、独立推导为核心，恰好契合从知识型人才向能力型人才的培养转型，是落实新工科建设中创新能力培养

要求的关键路径[4]。

从行业发展来看,当前精细化工行业正面临着向原创驱动的转型,绿色化、高性能化、定制化将成为未来的发展主流[5],行业急需能够穿透现象看本质的研发人才,比如从降低 VOCs 排放的核心需求出发,回归分子极性与挥发性的关系本质设计新型溶剂,从提高催化剂活性的目标出发拆解“活性中心结构-反应路径-传质效率”的关键要素,传统教学模式培养的记性型人才已难以适配这种创新需求。

从课程自身优化来看,《精细化学品化学》的本质是以化学原理为核心,以功能需求为导向的系统性工程思维,而非零散知识点的堆砌,第一性原理思维的引入本质上是重构教学逻辑,从按门类罗列知识转向按原理整合知识,从被动接收转向主动推导,从而破解课程固有的局限,实现教学从知识覆盖到能力提升的升级[6]。

## 2. 第一性原理思维引入课程教学的必要性

首先,第一性原理的引入能有效破解知识碎片化问题,帮助学生构建体系化认知框架。第一性原理思维强调回归最基本的公理与逻辑[7][8],不依赖经验或类比,在教学中可引导学生以分子结构、化学键理论、热力学与动力学原理为底层公理,将不同门类精细化学品的知识进行重构,无论是涂料、胶粘剂还是染料、化妆品,其核心逻辑都是通过分子间相互作用实现特定功能,通过这一本质逻辑将碎片化的门类知识串联成“原理-应用-拓展”的体系化网络,帮助学生实现从记忆知识点到掌握思维方法的转变。

其次,第一性原理思维能衔接原理与实践,提升学生的知识迁移能力。第一性原理思维注重问题拆解与本质归因,比如在讲解表面活性剂时,不局限于 HLB 值的计算与应用,而是引导学生回归“界面张力的本质是分子间作用力差异”这一核心,推导如何通过调整分子结构调控 HLB 值、不同体系为何需要特定 HLB 值的表面活性剂,让学生理解现象背后的原理而非仅记忆现象对应的结论,从而在面对生物相容性表面活性剂设计等新场景时,能通过本质推导形成解决方案。

更为重要的是,第一性原理思维能激活学生的创新思维,培养原创性能力。它鼓励打破既有经验,从本质出发寻找最优解,这与精细化工的创新逻辑高度契合。在讲解绿色精细化学品时,引导学生回归降低能耗、减少污染、提高原子利用率的核心要求,拆解合成路线优化、溶剂选择、催化剂设计等关键问题,而非仅介绍现有绿色产品案例,让学生跳出模仿既有产品的思维定式,学会从功能需求出发通过原理推导设计原创性方案。同时,它还能强化跨学科融合,提升学生的综合素养,其问题拆解过程天然要求跨学科知识的整合,比如在设计食品防腐剂时,需回归抑制微生物生长的本质是破坏细胞结构或代谢过程,整合有机化学、生物化学等多学科知识,通过第一性原理引导学生拆解复杂问题、分配学科资源,有效提升学生的跨学科综合应用能力,适配行业多领域协同研发的工作模式。

此外,第一性原理思维方法还契合大三学生的发展阶段,他们刚刚经历了四大基础化学和两大基础化工课程的学习,正处于从基础知识向应用知识的转变期,逻辑思维能力正待开发。利用第一性原理思维从本质出发、逐步推演的学习模式能简化许多复杂问题,厘清问题的核心所在,有利于形成“底层逻辑贯通多门专业课程”的学习模式,为整个大学阶段的专业学习奠定坚实基础。

## 3. 第一性原理思维引入课程教学的实践

以“染料”一章为例,将第一性原理思维融入课堂教学的完整实施流程设计如下,旨在实现从经验认知到原理探究的教学升级。

### 3.1. 课程导入

以“为什么同是偶氮结构的染料,有的呈黄色、有的呈红色?”、“户外塑料老化为什么是发黄,而不是发红、发蓝?”、“上火的人尿液为什么是黄色而不是其他颜色?”、“炒糖色时,冰糖为什么

会无色变成黄色、褐色？”等常见生活问题引发思考。在学生初步讨论后，教师明确指出：传统教学中“共轭链越长颜色越深”的经验性结论，无法对上述现象给出全面且本质的解释。由此自然引出核心观点——第一性原理“从微观电子结构解释宏观性质”的思维模式，可突破经验认知的局限，为探究染料颜色本质提供科学支撑，从而激发学生的探究兴趣。

### 3.2. 原理解析

考虑到量子力学公式的抽象性，本环节弱化复杂理论推导，重点拆解第一性原理在染料显色领域的核心思维：分子的颜色本质是其电子吸收特定波长的可见光后发生跃迁，而跃迁所需能量由电子所处轨道的能级差决定。在此基础上引入前线轨道理论(HOMO-LUMO)，明确染料分子显色的核心逻辑：最高占据分子轨道(HOMO)与最低未占据分子轨道(LUMO)之间的能级差，与分子吸收光的波长呈负相关关系。即能级差越小，电子跃迁所需能量越低，吸收光的波长越长，分子呈现的颜色越深[9]。通过这一简化处理，使学生快速把握原理核心，建立微观能级与宏观颜色的认知关联。

### 3.3. 计算实践

本环节以设计橙色硝基偶氮染料为具体目标，将学生划分为10个小组，每组承担不同取代基修饰的偶氮染料分子研究任务，取代基类型涵盖：无取代基、对位甲基、对位乙基、对位乙烯基、对位氨基、对位硝基、对位二甲氨基、对位甲氧基、对位氯、对位溴。教师通过示范操作引导学生掌握关键技能：运用Gaussian软件中的第一性原理算法，计算目标染料分子的HOMO-LUMO能级差及对应的吸收光谱[10]；借助AI工具对吸收光谱进行颜色匹配与推测，形成“分子结构→计算数据→颜色预测”的完整实践链。该设计既保证了研究内容的系统性，又通过分组协作提升了学生的实践参与度。

### 3.4. 规律总结

组织小组汇报，引导学生用第一性原理思维分析数据，并总结染料结构与颜色之间的规律：偶氮键(-N=N-)的共轭体系是电子跃迁的通道，取代基的电子效应会通过共轭体系改变轨道能级分布而调控颜色，进而建立“结构修饰→电子分布变化→能级差调整→颜色改变”的思维链。同时，针对供电子基与吸电子基均能使染料颜色加深的共性现象，引导学生突破诱导效应决定颜色的固有认知，回归前线轨道理论与分子显色的本源，深化对原理本质的理解。

### 3.5. 性能关联

通过紫外-可见分光光度计测得的染料吸收曲线，并与计算预测值进行对比分析。针对两类数据存在的偏差，教师引导学生运用第一性原理思维开展溯源分析：计算过程采用的是单分子气态模型，未考虑实验体系中乙醇溶剂的极性影响；溶剂极性会使分子轨道能级差略有增大，导致实际吸收波长较计算值发生蓝移，从而清晰解释偏差成因。这一环节使学生认识到，第一性原理的应用需结合实际体系的边界条件，为后续的偏差分析积累实践经验。

### 3.6. 认知升级

通过“计算预测→实验验证→偏差分析”的完整闭环，教师重点引导学生实现认知突破：第一性原理思维并非绝对精准的计算工具，而是指导实验方向、解释实验现象的科学逻辑框架。当实验结果与计算预测不符时，可从多维度排查原因，如：计算模型与实验体系的差异(单分子 vs 聚集态)、取代基反应不完全、溶剂化效应及环境因素的影响等。通过这种原理指导实践、实践反哺原理认知的训练，培养学生基于核心原理反向推导问题根源的科学探究能力。

### 3.7. 实践练习

为实现知识的迁移应用, 课后任务聚焦纺织企业的真实需求——开发耐光性优良的橙色偶氮染料。教师引导学生建立需求与原理的关联: 染料的耐光性与其分子稳定性直接相关, 而偶氮键的键能是决定分子稳定性的核心指标, 该键能可通过第一性原理计算精准获取。

学生自主设计实验方案, 在偶氮染料的不同位点引入各类取代基, 通过计算不同结构分子的偶氮键键能, 分析取代基效应(电子效应、空间效应)对键能及耐光性的影响规律, 并撰写专题总结报告。这一任务设计使第一性原理思维从颜色调控延伸至性能优化, 进一步强化学生对原理应用价值的认知。

## 4. 第一性原理思维引入课程教学面临的困难与挑战

首要挑战是授课教师的跨学科综合能力。《精细化学品化学》授课教师多深耕于有机化学、精细化学品合成、工艺设计与优化等领域, 具备扎实的应用化学专业功底, 但第一性原理的教学转化需要融合量子化学核心逻辑、计算工具操作及教育教学设计三类能力——既需剥离科研级公式, 提炼“微观电子结构决定宏观性质”的核心思维, 又要能指导学生使用专业计算工具, 还需设计贴合课程的教学环节。这种跨学科要求与教师单一学科背景形成鲜明矛盾, 且多数教师缺乏计算化学专家、教育技术人员组成的跨学科教研团队支持, 独自推进时易陷入过度简化原理失其本质的困境。

其次是学生的基础短板与思维惯性。应用化学专业本科生虽已掌握有机化学、物理化学的基础概念, 但量子化学知识储备薄弱, 虽能辨识分子轨道、共轭等术语, 但对 HOMO-LUMO 能级差、电子云分布与染料颜色、催化剂活性等宏观性质的关联缺乏深层理解。物理化学中虽对量子化学部分作了简化理论介绍, 但并未结合精细化学品的实际案例展开, 导致学生在《精细化学品化学》中接触用能级差解释颜色、用电子效应分析催化活性等内容时, 缺乏必要的知识铺垫, 难以快速建立微观与宏观的关联认知, 增加了教学难度。更突出的问题是思维路径依赖——传统教学中的经验结论, 让学生习惯通过记忆规律解题, 而第一性原理则要求从电子结构、轨道能级等微观本质推导结论, 这种从经验到本质的思维转变, 会使部分学生因抽象性强、推导逻辑复杂产生畏难情绪, 甚至抵触这种“绕远路”的学习方式。

轻量化教学工具与教学案例的缺失是现实瓶颈。当前主流的第一性原理计算工具如 VASP、Gaussian 均为科研导向, 操作烦琐、计算耗时久(高精度任务需数小时至数天), 还存在商业软件授权费用高昂的问题[11], 与本科课堂的教学节奏与成本预算适配性差。适配教学场景的工具应具备封装化、易操作、快计算的特点, 能预设精细化学品分子模板、简化算法, 但这类工具的开发需要跨学科团队协作, 且目前缺乏成熟的开源资源可供直接使用, 教师自主开发又面临技术、时间双重压力, 因此教学化案例开发难度大。《精细化学品化学》覆盖染料、涂料、表面活性剂等数十种品类, 每类物质的构效关系逻辑各异, 但现有第一性原理相关案例多来自科研论文, 聚焦某一特定体系, 如某种 MOF 催化剂的活性位点分析, 未转化为贴合课程知识点的教学案例, 缺乏提出问题、计算分析、实验验证的完整教学链。更关键的是, 案例开发需同时满足前沿性与适配性: 既要对接精细化学品近年研究热点, 又要匹配学生的知识基础, 避免因涉及过深科研内容导致学生无法理解, 这种平衡的把握对教师提出极高要求。

## 5. 结语

第一性原理思维为解决《精细化学品化学》传统教学困境提供了核心路径, 其回归本质、拆解问题的核心逻辑, 不仅能重构课程“原理-结构-功能-应用”的教学体系, 也有望实现从知识传授到能力培养的教学重心转移。染料教学实践表明, 该思维能有效串联多学科知识, 引导学生建立微观本质与宏观性质的关联, 激活原创性思考与知识迁移能力。尽管可能面临教师跨学科能力不足、学生思维惯性、教学资源短缺等挑战, 但随着跨学科教研团队的搭建、轻量化教学工具的开发及教学案例的积累, 这些

问题将逐步得到解决。未来，将第一性原理思维深度融入课程教学，既是响应新工科创新人才培养的要求，也是赋能精细化工行业高质量发展的教育实践，为同类应用化学课程教学改革提供有益借鉴。

## 基金项目

广东省本科高校教学质量与教学改革工程建设项目(2024-728)、广东海洋大学本科教学质量与教学改革工程项目(PX-142024001)、广东海洋大学教育教学改革项目(PX-972024137)。

## 参考文献

- [1] 常美佳, 王银霞, 王永刚, 等. 立德树人理念下“精细化学品化学”课程思政研究[J]. 云南化工, 2023, 50(4): 157-159.
- [2] 吴倩, 杨兴兵, 刘长路, 等. 应用型人才培养视角下精细化学品化学课程教学改革探索[J]. 四川文理学院学报, 2024, 34(2): 90-93.
- [3] 姜立萍, 魏惠荣, 牛腾, 等. 面向工程应用的课程重构策略和实践——以“精细化学品化学”课程为例[J]. 兰州文理学院学报(自然科学版), 2024, 38(5): 118-122.
- [4] 易兰, 方红明, 吴晓琴, 等. 新工科背景下应用化学专业精细化工工艺学课程教学改革的探索[J]. 化工设计通讯, 2025, 51(11): 87-89.
- [5] 中华人民共和国中央人民政府. 工业和信息化部等九部门关于印发《精细化工产业创新发展实施方案(2024—2027年)》的通知[EB/OL]. [https://www.gov.cn/zhengce/zhengceku/202407/content\\_6962816.htm](https://www.gov.cn/zhengce/zhengceku/202407/content_6962816.htm), 2024-07-02.
- [6] 刘皓冰, 刘晶, 单焯, 等. 基于“第一性原理”的工科大类专业导论课程设计与实践[J]. 高等工程教育研究, 2025(6): 54-58.
- [7] 徐新煌, 洪明. “第一性原理”思维——马斯克“新星学校”改革初探[J]. 全球教育展望, 2025, 54(2): 132-144.
- [8] 周尧, 杨焦, 张月皎, 等. 面向新能源研发人才培养的大学本科化学教学[J]. 大学化学, 2025, 40(1): 82-90.
- [9] 杨莉, 夏泽吉. 对物质颜色变化规律的探讨[J]. 达县师专学报, 1994(2): 101-104.
- [10] 张春芳, 张翠妙, 李江涛, 等. 将密度泛函理论计算纳入高等化学教学初探——对乙酸乙酯碱性水解机理的理论研究[J]. 大学化学, 2019, 34(6): 81-86.
- [11] 焦诗哲. 第一性原理分子动力学算法和程序的发展[D]: [博士学位论文]. 合肥: 中国科学技术大学, 2025.