

计算化学在有机化学理论教学中的应用

潘有禄, 曾申昕, 李军, 王尊元*

杭州医学院药学院, 浙江 杭州

收稿日期: 2024年5月14日; 录用日期: 2024年6月20日; 发布日期: 2024年6月29日

摘要

目的: 研究旨在评估计算化学在有机化学理论教学改革中的应用效果。方法: 文章以2022级药学专业学生为对象, 将其分为两组: 对照组采用传统教学方法, 而实验组则采用融入计算化学的教学策略。结果: 通过期末成绩分析和学生满意度调查, 文章对教学改革的效果进行了评估。研究结果显示, 实验组学生的有机化学期末成绩平均为73.94分, 标准差为1.69分, 显著高于对照组的68.17分, 标准差为2.10分。两组间的成绩差异在统计学上具有显著性(P 值为0.0157)。此外, 教学满意度调查显示, 实验组的学生满意度为96.4%, 明显高于对照组的82.1%。结论: 综上所述, 引入计算化学的有机化学理论教学方法能显著提升学生对有机化学反应位点和机理的理解, 进而提高学生的有机化学成绩及学习兴趣。

关键词

有机化学, 计算化学, 教学

Application of Calculational Chemistry in Organic Chemistry Education

Youlu Pan, Shenxin Zeng, Jun Li, Zunyuan Wang*

School of Pharmacy, Hangzhou Medical College, Hangzhou Zhejiang

Received: May 14th, 2024; accepted: Jun. 20th, 2024; published: Jun. 29th, 2024

Abstract

Objective: To evaluate the impact of computational chemistry on the educational of organic chemistry. **Methods:** Grade 2022 students were bifurcated into two distinct groups for following study: one group followed the conventional educational paradigm, designated as the Control Group, while the other was immersed in a curriculum enriched with computational chemistry group. The effi-

*通讯作者。

acy of the educational approaches was assessed through a comprehensive evaluation process, which included both final examinations and a detailed questionnaire survey. Results: The computational chemistry group achieved a significantly higher final average score of 73.94 ± 1.69 , as compared to the traditional group. A statistical analysis revealed a marked difference in the final scores between the two groups, with a P-value of 0.0157, indicating a significant disparity in educational outcomes when comparing the experimental group to the control. The experimental group demonstrated a higher level of satisfaction, with a reported rate of 96.4%, which surpasses that of the control group. Conclusion: Incorporating computational chemistry into the curriculum has been shown to markedly enhance students' final scores in organic chemistry.

Keywords

Organic Chemistry, Calculational Chemistry, Education

Copyright © 2024 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

有机化学是药学教育的核心课程，专注于分子结构、化学反应机理、化学反应位点以及合成路线设计等的关键概念。本课程内容覆盖了药学领域的多门专业课程，包括但不限于分析化学、药物化学和天然药物化学等，具有深厚的理论性[1]。有机化学以其理论的抽象性、化合物结构的多样性和知识点的复杂性而著称，这些特点常常导致学生在学习过程中遇到难题，难以深刻理解并有效运用各种有机化学理论进行反应推导。这种状况可能会使学生陷入一种负面循环，其中他们的有机化学成绩和整体水平难以得到提升[2]。因此，对有机化学理论教学进行改革显得尤为关键，这不仅能够提升学生的学业成绩，还能为他们未来的职业生涯或进一步的学术研究奠定坚实的基础。

当前，诸多教学方法如启发式教学[3]、基于项目的教学法(Project-Based Learning, PBL) [4] [5]、课题式教学[6]和案例剖析法[7]等各有特点，但在培养学生系统性地掌握有机化学的基本理论和基础知识方面，仍然存在一定的局限性。本研究基于现有的教学经验以及在教学实践中发现的问题，结合当前多样化的教学模式，提出了一种融合计算化学的有机化学理论课程教学方法。计算化学的应用涉及利用专业软件对化合物的电荷分布、分子轨道以及过渡态等特性进行模拟和计算，并通过多媒体手段生动地展示给学生，以便更直观地阐释化学反应的机理、反应发生的具体位点以及预测反应产物[8]。以一节课分为三个小时为例，教师首先进行两个小时的讲授，随后引导学生运用计算化学的理论在接下来的一个小时里完成课后练习题。课程结束后，教师会发布习题的答案和解题步骤，供学生们复习和学习。这种教学模式具有重点突出、形象直观、逻辑性强的特点，有助于学生高效地掌握有机化学的理论知识，并取得优异的学习成果。

2. 对象与方法

2.1. 对象

本研究选定本校 2022 级药学专业的 2 班和 3 班学生作为研究对象，其中 2 班作为对照组共有 28 名学生，3 班作为实验组亦有 28 名学生。两组学生均通过高考被统一录取，他们在性别、年龄、生源地等背景特征上的差异经统计检验后显示没有显著性，因此可以认为两组具有较好的可比性。

2.2. 教学方法

实验组与对照组在本研究中均采用了由陆涛主编、人民卫生出版社出版的《有机化学》教材第九版。同时，两组学生的授课教师也是同一位，以确保教学内容和方式的一致性。

对照组的教学采用了多媒体教学法，并结合了启发式教学和现场案例剖析等多种教学模式。实验组实施了一种融入计算化学的教学方法。在讲解每个章节(绪论和总论除外)时，教师会选取典型的化学反应作为案例，清晰地阐释化合物的结构、电荷分布和分子轨道等基础概念。基于化合物的基本结构，教师引导学生思考可能的反应位点和主要反应类型，帮助学生在理解化学反应的同时，掌握其在复杂化合物合成中的应用。在教学过程中，教师利用多媒体工具展示化合物分子的电荷分布、分子轨道和过渡态结构，使学生能够深入理解有机反应机理，并准确判断反应位点。这种方法旨在提升学生对有机化学反应机理的认识，以及他们在复杂化合物合成中应用这些知识的合理性。该教学方法不仅在有限的课堂时间内增强了学生对有机反应的理解，而且也锻炼了学生捕捉重点、筛选和提炼有效信息的技能。如图1所示，通过计算化学的内容，学生能够了解不同类型取代基对苯环电子云密度的影响，进而更深刻地掌握苯环的定位规则。这种方法有助于学生记忆关键知识点，理解反应机理，以及把握苯环亲电取代反应的本质，从而系统地掌握芳香族化合物及其相关反应。如图1(c)展示的，使用高斯软件(Gaussian 09) [9]计算了不同取代基的苯环结构的电子云密度。计算结果揭示了不同取代基如何影响苯环上的电子云密度分布，清晰地阐释了取代基定位规则的实质。与传统的共振理论相比，计算化学的方法更为直观，更易于学生理解。

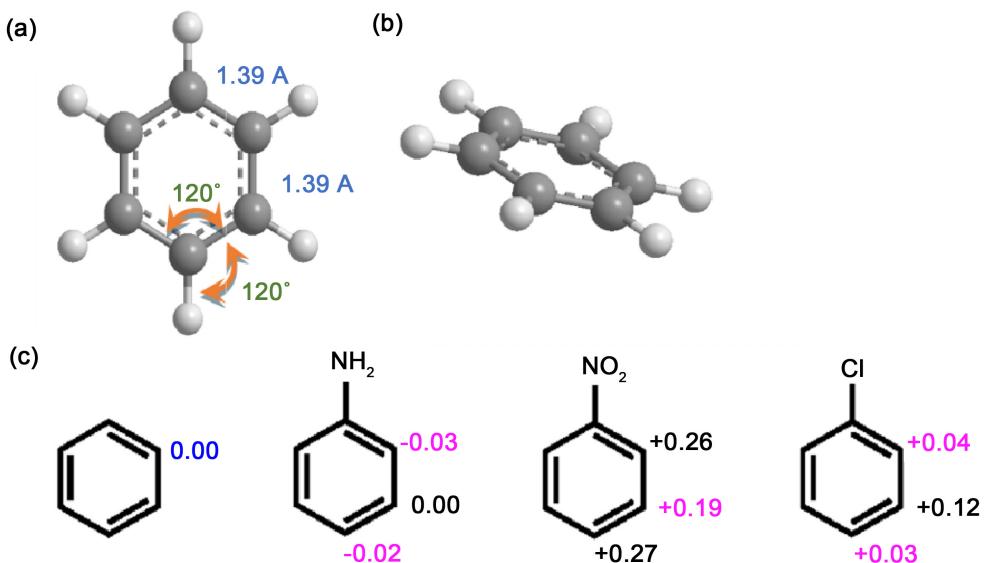


Figure 1. Applications of computational chemistry. (a): Calculation of C-H bond lengths and C-C bond lengths; (b): Calculation of the planar structure of the benzene ring; (c): Calculation of the charge distribution of benzene rings with different types of substitutions

图1. 计算化学的应用。(a): 计算 C-H 键长和 C-C 键长; (b): 计算苯环的平面结构; (c): 计算的不同类型取代的苯环电荷分布

3. 效果评价

3.1. 期末考试成绩

在教学周期结束后，实验组和对照组的学生将通过从试题库中随机抽取的一套试题进行理论知识的

考核。试题类型包括化合物的命名题、结构题、判断题、单项选择题、化学方程式题以及综合应用题。两组学生将使用相同的试卷进行测试，试卷总分为 100 分。

3.2. 教学满意度评价

课程教学完毕后，我们设计了一份自制的调查问卷，邀请参与基于计算化学教学模式与传统教学模式的学生们进行反馈评价。问卷中的满意度选项分为四个等级：非常满意、满意、一般和不满意。满意度的计算方法是将表示满意及非常满意的学生人数除以总的有效回收问卷数。本次调研共发放问卷 56 份，并成功回收了全部 56 份问卷，有效回收率达到了 100%。

3.3. 统计学处理

我们使用了 SPSS 18 软件对学生的学习成绩进行统计分析。在对期末考试成绩进行组间比较之前，首先对数据进行了正态性检验，以确保其符合正态分布的假设。正态性检验之后我们采用了两个独立样本 t 检验来比较实验组和对照组之间的成绩差异。在统计分析中，我们设定了 P 值小于 0.05 作为差异具有统计学意义的标准。

4. 结果

4.1. 期末成绩分析

实验组与对照组各 28 人，实验组有机化学期末平均成绩(73.94 ± 1.69)显著高于对照组(68.17 ± 2.10)，为进一步分析实验组与对照组的成绩是否存在显著性差异，本研究对两组成绩进行检验。

4.2. 正态性检验

由正态性检验结果(表 1)可知：期末成绩对照组和实验组的正态性检验的 P 值分别为：0.419 和 0.357，均大于 0.05，满足两独立样本 t 检验即正态分布假设，故采用 t 检验进行两组差异性分析。

Table 1. Normality test of end-of-term grades for control and experimental groups

表 1. 期末成绩对照组和实验组的正态性检验

名称	组别	柯尔莫戈洛夫 - 斯米诺 ^a			夏皮洛 - 威尔克		
		统计	自由度	显著性	统计	自由度	显著性
期末成绩	对照组	0.101	28	0.200 ^b	0.963	28	0.419
	实验组	0.111	28	0.200 ^b	0.960	28	0.357

^a里利氏显著性修正；^b真显著性的下限。

4.3. 两独立样本 t 检验

通过 t 检验分析结果(表 2)可知：实验组与对照组有机化学期末成绩组间比较 P 值为 0.0157 (P < 0.05)，认为实验组与对照组的有机化学期末成绩具有显著性差异，可推断基于计算化学的有机化学理论教学改革有助于提高学生有机化学的期末成绩。

Table 2. Independent samples t-test

表 2. 两独立样本 t 检验

Group	N	P
对照组和实验组	28	0.0157

4.4. 教学满意度评价

通过对课堂教学效果满意度调查问卷数据分析。如表3所示,实验组学生对课堂教学的满意度显著高于对照组。

Table 3. Comparison of students' evaluation of teaching satisfaction between experimental group and control group [N (%)]
表3. 实验组和对照组学生对教学满意度评价比较[N (%)]

组别	N	非常满意	满意	一般	不满意	满意度(%)
对照组	28	12	11	5	0	82.1
实验组	28	17	10	1	0	96.4

5. 讨论

本研究在启发式教学和PBL等成功教学模式的基础上,勇于对有机化学的课堂教学进行创新和改革,提出了一种融入计算化学的有机化学理论课程教学方法。通过这种教学改革,学生能够将有机化学的反应机理、化合物的电荷分布以及反应位点等知识点相互联系并整合,最终实现这些概念的可视化,有效解决了有机化学知识点分散和理论内容抽象难懂的问题。计算化学通过数学计算方法将抽象的化学理论具体化、数据化,有助于学生清晰地梳理出化学现象背后的逻辑关系。这种方法不仅提升了学生上课的专注度,还锻炼了学生筛选和准确提取有价值信息的能力,促使学生在学习过程中不断进行思考和总结,从而深化对有机化学理论的理解和掌握。

本次实验选取了一个班级作为实验组,对其实施了融入计算化学的有机化学理论教学改革,并对其效果进行了研究。结果显示,实验组学生在有机化学的期末成绩和教学满意度方面均显著优于对照组。与传统的填鸭式教学相比,融入计算化学的教学模式不仅提升了教师备课时的效率,帮助其明确重点知识点,也提高了学生上课记笔记的效率,从而增强了听课效果。学生在课后通过书本习题的练习进行知识点的巩固和补充,这一过程本身就是对知识的梳理和深入学习的机会,同时也鼓励学生在教师讲解的基础上进行知识的拓展和深化。在教学改革初期,学生在课后作业的完成质量上存在不足,主要表现在未能把握有机化学的核心要点,缺乏对知识点之间联系和逻辑关系的理解。随着教学改革的持续推进,教师与学生共同探讨了计算化学在有机化学教学中的应用重要性,并有优秀学生分享了他们的学习经验。经过一段时间的学习和实践,学生基本上能够利用计算化学的结果来理解化学反应的发生位置和机理,并掌握了合理的路线设计策略等关键知识点。有机化学涵盖的知识体系庞大且理论复杂,学生容易混淆和记忆混淆。基于计算化学的教学方法能够帮助学生更清晰地理解反应过程和反应位点,将分散的知识点有机地联系起来,有效解决了知识点混淆和学生依赖死记硬背的问题,显著提升了学习效率。

6. 结语

综合上述分析,将计算化学应用于有机化学理论教学不仅显著提升了学生的学习效率,而且实际提高了学生的考试成绩和对教学的满意度。尽管如此,计算化学在教学中的应用仍然处于初期探索阶段,如何根据课程特点有效地利用计算化学资源,仍是一个值得进一步研究和深入探讨的课题。本研究代表了对有机化学教学方法改革的一次积极尝试。随着计算化学在教学实践中的不断应用和经验的累积,我们计划将这一教学手段扩展到更多的化学课程中,以期激发学生的学习热情,提高学习效果。

基金项目

本论文得到浙江省“十四五”研究生教育改革项目(YJG202303)、杭州医学院研究生课程建设项目

(00004G26100548304-14)资助。

参考文献

- [1] 张敏, 袁先友. 基础有机化学教学改革的探索与实践[J]. 大学化学, 2005, 20(1): 18-20.
- [2] Fife, W.K. (1983) Organic Chemistry. *Journal of Chemical Education*, **60**, A239.
- [3] 陈传尧. 启发式教学与创造性思维的培养[J]. 高等教育研究, 1998, 19(5): 62-64.
- [4] 慕景强. PBL 教学法在我国可行性的研究[J]. 医学教育, 2003(6): 37-41.
- [5] 崔晓阳, 李益, 廖虎, 赵振刚, 李佳兵, 万学红. PBL 教学法在我国医学教育中的应用及存在问题[J]. 医学教育探索, 2010, 9(4): 439-442.
- [6] 丁晶, 周志尊, 赵君娣. 课题式教学法是高校培养创新型人才的必然趋势[J]. 中国医学教育技术, 2010, 24(1): 78-80.
- [7] 王青梅, 赵革. 国内外案例教学法研究综述[J]. 宁波大学学报(教育科学版), 2009, 31(3): 7-11.
- [8] 陈念贻. 计算化学及其应用[M]. 上海: 上海科技出版社, 1987: 209-273.
- [9] 和芹, 冯桂荣, 王秀阁, 蔡明建. 高斯计算应用于杂环亲电取代活性位点预测[J]. 化学教育, 2016, 37(8): 70-72.