# 大学有机化学教学中计算化学软件应用论文

来源：网络 作者：雾花翩跹 更新时间：2023-12-21

*随着互联网新时代的到来，计算机给我们工作的各个领域带来了生机的同时，也给我们的学习工作带来了福音，因此，在大学有机化学教学中扮演重要角色的计算化学软件凸显出了其魅力所在，计算化学软件可以把一串串化学元素符号不再是以前传统的二维平面展示学习，...*

随着互联网新时代的到来，计算机给我们工作的各个领域带来了生机的同时，也给我们的学习工作带来了福音，因此，在大学有机化学教学中扮演重要角色的计算化学软件凸显出了其魅力所在，计算化学软件可以把一串串化学元素符号不再是以前传统的二维平面展示学习，替代它的是最新的三维模式，使化学元素在课堂上表现得栩栩如生，吸引住了当代大学生好奇的眼球，并且同时还可以更彻底理解有机物质的内部构造，给想象力空间感差的学生带来了学习的兴趣，提高了同学们主动学习的浓厚的兴趣，从而改变同学们过去被动学习的坏习惯，再到现在的发现问题解决问题的能力的培养，这种模式改变了投影仪加幻灯片的传统上课模式，不但对传统教学的缺陷加以弥补，而且培养了同学们的学习有机化学的兴趣，高效的达到了大学有机化学教学的目的。

>一、大学有机化学现阶段面临的问题

（一）同学对有机化学立体结构存在想象力欠缺问题

通过对中学有机化学的学习，我们了解了有机物中，简单的有机分子内部结构及其性质，但是在大学的有机化学学习中，对有机化学中有机物的研究更趋于专业化，多元化。所以我们所接触的有机物的内部立体结构也变得极其变化多端，往往在复杂结构的大前提下，所伴随发生的变化也五花八门，一种性质微小的改变就可导致整个反应产物的改变，所以大部分同学对有机物内部立体结构的学习也就产生了恐惧和厌倦心理，长久发展下去也就对有机化学的学习失去了信心，对于大学有机教学中所存在的这个问题，学者也进行了综合分析，导致这一情况发生的根本原因就是同学普遍存在空间想象力欠缺的问题，为了弥补同学们普遍存在的这个问题，所以引进计算软件的普及显得尤为重要。

（二）传统的上课模式失去了兴趣

众所周知，兴趣是最好的老师，进去了大学，老师运用傳统的ppt讲课，对于新时代的大学生也就失去了新鲜感，吸引不住大众的眼球，导致学生接受知识很被动，被传统的教学模式感到厌倦，所以同学们不能在课堂上积极的活跃起来，久而久之同学就对这种传统的上课模式上课感到疲惫，也就失去了学习有机化学的兴趣，而对于现阶段的最新计算软件的提出，对这个问题的出现也可以得到及时解决，不仅可以解决老师备课难的问题，更可以活跃课堂气氛，抓住学生的眼球，使每节课都可以达到教学大纲上高效的达到目的。

（三）相对于发达城市，教学条件的落后

由于我国各个城市经济发展并不均衡，导致教育水平也有所差距，在沿海发达城市的教育水平相对于内地相对较高，我国坚持科教兴国，人才强国的伟大战略，教育水平的决定性因素除了软件设施之外，硬件设施更是一个难以逾越的因素，许多地区至今仍然使用传统的教学仪器，无法与现代化教学相接轨，大大落后与当代水平，比如现代计算软件的使用，给贫困地区带来了极大困扰，利用现代化计算机软件可以很大程度调动孩子的学习积极性，培养孩子独立思考和解决问题的能力，在大学有机化学学习展现的尤为突出，通过传统的教学模型已经远远不能达到教学目的。

>二、计算软件对于有机化学教学的立体模型的展示

传统的有机化学教学模式，在有机分子立体结构通过教材的讲解，以及实验室所提供的曲棍模型对有机分子内部结构了解，这种途径使同学很难理解较为复杂有机物质的内部构造，无法突破有机化学教学中的重难点，这样的教学模式仅仅处于表面的学习，很难进一步深入学习，更无法到达活学活用的教学理念，可见在有机化学的教学中，有机分子的立体结构的想象变得尤为重要，也是有机化学教学中的难点突破口，突破了物质内部结构以及包含的键和自由基的类型，可以准确判断该物质所发生的变化及其产物。因为它与物质所发生的化学及其物理变化所发生的变化类型和结构有着密切关联，而科技的发展，巧妙地弥补了这个缺陷，比如可以利用现在较为普遍的软件chemoffice等相关化学辅助类的教学软件，可以清楚的展示有机化学分子的立体构造，使同学透彻理解有机化学分子的本质，我们用Gaussian03软件研究甲烷分子结构，步骤也较为简单：首先需要建立甲烷分子模型，之后对甲烷分子立体模型进行优化，为了有效体现甲烷的立体结构，就需要改变四个c—H键之间的角度，将scan输入其中，最后对整体进行调整，达到稳定的立体结构。可以形象的展示出来甲烷的立体结构及其内部所包含的键的类别。

>三、对有机物的特性研究分析

对于有机物的某些潜在性质的研究，除了观察其发生的化学，物理反应来进行判断，还可以运用辅助软件进行透彻模拟，例如我们进行有机物的周围电子的存在形式，凭借纯粹的想象，想象电子的跃迁，从基态变为激发态，其中电子的得失，仅凭想象很难达到学习应有的效果，可以运用计算软件帮助学生理解概念性的知识，这样可以把抽象的概念转化为生动形象的动画来进行演示，可以一目了然的表达效果，不仅降低了学生学习时的难度，更缓解了老师备课时的压力，可谓一举两得，通过对有机物的相对参数和物理特性分析，我们可以借助che—mortice软件辅助完成教学任务，可以分为以下几个步骤：首先打开chemoffice来描绘一个苯环的分子结构式，接下来通过点击view菜单下的选项进一步计算其相对分子量，其中包含的键数目，从上图我们可以一目了然地看出苯环属于有碳碳键交替构成的6元环，键角也可以更透彻明了的看出来，从我们实验室的实验可以得出，苯不能使溴水或酸性KMn04褪色，这说明苯中没有碳碳双键。进来研究证明，苯环主链上的碳原子之间并不是由以往所认识的单键和双键排列（凯库勒提出），所以每两个碳原子之间的键均相同，是由一个既非双键也非单键的键连接。（可理解为平均化的价键，介于单键与双键之间，兼具二者性质，既可以取代，又可以加成），进而我们对苯环的研究更深入了一步。

>四、演示动态情况下的反应机理

在有机化学反应中，往往伴随着内部能量的变化和新产物的产出，我们运用新计算软件将其抽象的过程加以模拟化，使反应机理过程所伴随的变化得到展现，使我们将其难点一网打尽，牢固掌握核心课程内容，我们以一氯甲烷取代卤素的反应为例子进行论证分析，可以使用Gaussian03软件进行模拟，首先分别对反应物CH3CL+Rr一和对应产物的分子模型进行构建，使用QST2方法搜索反应物过度的中间产物，得出整个反应过程的发生情况，在整个反应过程中，可以看到亲试剂Rr一从基态的CL一的背面逐步接近中心的碳原子，逐步形成Br—c键，同时中心的碳原子也发生了变化，其上部的基态氢原子也向离去基态的方向发生偏转，当在中间过渡态时，中心碳原子呈现的为sp2杂化，而在同时其他三个3个基态原子与形成的直线在同一平面上，最终完全离开基态中心形成产物，整个取代过程展现的由抽象变得更形象。

>五、总结

分析表明，信息量大，理论性强，空间感强等是高等化学的显著特点，而要摆脱这一要素的困扰，我们必须借助现代化的条件对其进行以另外一种方式展示，根据其物质的本质及其属性发生的变化也极为复杂，所以我们必须紧跟时代发展，采取一定的辅助措施，在教学活动中，紧随科技的发展的潮流，巧妙高效的运用计算机软件辅助教学，利用计算机软件辅助性教学，可以极大的调动同学学习化学的热情，使同学积极思考，探讨，及时发现问题和处理问题，在这一过程中可以牢固的掌握相关知识，同时也培养了同学学习的能力，计算机走进有机化学的教学课堂，使传统的教学模式得到改善，由原来的抽象化到现在的简单化，与此同时积极鼓励同学使用掌握现代化的计算机软件，可以培养同学对有机化学微观世界的研究，给教学质量起到如虎添翼的益处，使同学们在今后的大学有机化学学习的当中受益匪浅。

本DOCX文档由 www.zciku.com/中词库网 生成，海量范文文档任你选，，为你的工作锦上添花,祝你一臂之力！