

## 人工智能时代背景下的仪器分析科教融合模式探索

张天龙, 张容玲, 汤宏胜\*, 李延\*, 李华

西北大学化学与材料科学学院, 西安 710127

**摘要:** 针对传统仪器分析方法在应对更复杂的化学样品、更微量的化学分析和更精准的化学测量要求时所遇到的挑战, 本文提出了一种将人工智能融合入科学仪器分析的应用研究和教学实践的策略。通过采用科学研究新范式, 探讨分析仪器的研发与应用, 在科教融合视域下, 借助人工智能新方法提升实验教学效果, 并实现虚拟仿真实验、智能实验数据分析和多元化智能评价等方面的融合。通过运用人工智能新技术, 紧扣时代发展趋势, 培养具备全面科学素养、创新能力和社会责任感的高素质人才, 进而落实高等教育立德树人根本任务。

**关键词:** 人工智能; 仪器分析; 科教融合

**中图分类号:** G64; O6

## Exploration on the Integration Mode of Instrumental Analysis with Science and Education under the Background of Artificial Intelligence Era

Tianlong Zhang, Rongling Zhang, Hongsheng Tang\*, Yan Li\*, Hua Li

College of Chemistry & Materials Science, Northwest University, Xi'an 710127, China.

**Abstract:** Facing the challenges of traditional instrumental analytical methods in dealing with more complex chemical samples, more trace chemical analysis and more precise chemical measurements, this paper proposes a strategy for gradually integrating artificial intelligence into the applied research and teaching practice of scientific instrument analysis. By adopting a new paradigm of scientific research, the research and development and application of analytical instruments are discussed. From the perspective of integrating science and education, this approach aims to enhance experimental teaching effectiveness through artificial intelligence methods, and to integrate the virtual simulation experiment, intelligent experimental data analysis, and diversified intelligent evaluation. Leveraging the new technology of artificial intelligence, we align with contemporary trends to cultivate high-quality talents possessing comprehensive scientific knowledge, innovative abilities, and social responsibility, thereby fulfilling the fundamental task of fostering virtues and cultivating talents in higher education.

**Key Words:** Artificial intelligence; Instrumental analysis; Integration of science and education

基础研究是科技创新的源头和助推器。针对国家“十四五”规划提出的“科教兴国与人才强国”重大国家战略需求, 教育部全面启动了基础学科拔尖计划2.0, 旨在培养基础学科拔尖人才<sup>[1]</sup>。西北大学的化学学科至今已有百年历史, 已成为“基础拔尖人才计划”的主力军, 在教育理念、发展思路、教学模式等方面进行了全方位改革, 有效激发了广大教师的教学热情, 引导他们提升教学能力和潜心教书

收稿: 2024-03-03; 录用: 2024-07-04; 网络发表: 2024-07-12

\*通讯作者, Emails: tanghongsheng@nwu.edu.cn (汤宏胜); yanli@nwu.edu.cn (李延)

基金资助: 教育部高等学校化学类专业教学指导委员会教学研究与实践项目(H20210602, H20210603); 教育部基础课程拔尖学生培养计划2.0研究课题(20222159); 陕西高等教育教学改革研究项目(23BY040)

育人。

加强基础研究，离不开分析仪器的创新发展，也是实现科技自立自强、建设世界科技强国的必由之路。我国已成功组织了一系列重大基础研究项目、重大科技基础设施和大科学装置的研发，如同步辐射光源装置、全超导托卡马克核聚变实验装置、地球系统数值模拟装置等。分析化学作为化学学科的关键分支，通过发展分析仪器和技术，精确描述物质的特性。科教融合是一种创新的教育模式，将科研实践融入课堂，提升教学质量，培养学生的实践能力和创新思维。在人工智能日益渗透到各个领域的时代背景下，仪器分析作为科学研究的基石，其重要性日益凸显。然而，随着科技的飞速发展，传统的仪器分析方法与教学模式正面临着前所未有的挑战与机遇。

科教融合作为一种创新的教育模式应运而生<sup>[2]</sup>，不仅汲取了科研创新的最新成果，还极大地提升教学标准和质量，促进知识的持续更新与广泛传播。教师能够将科研实践融入课堂，使学生有机会直接接触到最前沿的科学知识，从而激发他们的学习热情和动力。与此同时，学生可以通过参与科研项目，有效锻炼自身的实践能力，不断提升科研素养，并培养创新思维和解决问题的能力。科教融合秉持“教师指导、学生主体”的原则，旨在激发学生的主动性和积极性，从而高效提升他们的科学素质、实验技能及创新能力。因此，科教融合是培养高素质、高水平分析化学人才、推动科学发展的关键途径。

## 1 人工智能(AI)引领科研新时代

AI已经成为化学研究的新帮手，被应用在分子设计、构效关系计算、计算机辅助合成、高通量表征等研究中。例如，2018年，上海大学Mark Waller团队<sup>[3]</sup>通过整合约1250万个化学反应数据，运用深度神经网络和蒙特卡洛树搜索算法，成功地规划出新的化学合成路线。该系统设计出一个分子的合成路线仅需5秒，其效率远超人类化学家。该研究极大地提高了化学合成的速度，被誉为“化学AlphaGo”<sup>[4]</sup>。中国科学技术大学罗毅、江俊教授团队与尚伟伟教授合作<sup>[5]</sup>，将移动机器人、化学工作站、智能操作系统与科学数据库等技术集成，研制出基于数据驱动的机器化学家系统(如图1所示)，实现了全流程自主实验、实验结果自主优化迭代、快速全局搜索、机器学习模型建立与优化等关键技术的突破。该系统在大数据和智能模型双驱动下可完成全流程化学合成-表征-测试，为化学研究带来了革命性的变革。

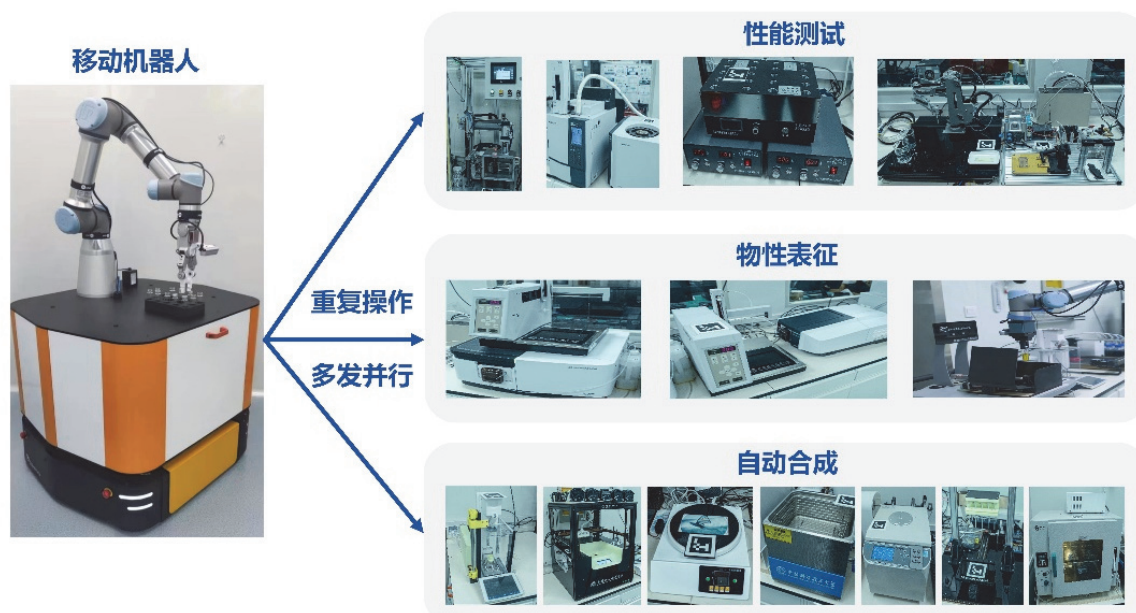


图1 移动机器人和智能工作站完成高通量测试、表征、合成的化学实验全流程<sup>[5]</sup>

21世纪以来,随着“材料基因组”“化学基因组”等概念的相继提出,基于数据库的AI分析已经成为推动基础科研领域快速发展的重要驱动力, AI技术也越来越多地被应用于分析化学等领域,它不仅可以将化学研究人员从繁重的手工劳动中解放出来,还为他们的研究提供有价值的参考和借鉴。由此可见,培养兼具AI技术和化学学科知识的复合型人才,是推动化学AI专家系统不断优化与更新,进而推动化学学科科研的持续创新的必由之路。

## 2 教学与科研

分析化学是一门致力于揭示物质组成、结构和性质的科学,在科学研究和生产实践中发挥着极其重要的作用,被誉为“科学技术的眼睛”。一个世纪以前, W. Ostwald指出,如果分析化学家仅将分析化学教学与实践纯粹视为一种追求技巧和精度的经验技艺,而未能充分利用物理化学的实验与理论成果,那么分析化学将始终处于一种从属学科的地位。早在1960年,高鸿院士<sup>[6]</sup>就明确指出分析化学研究的核心矛盾就是对象与方法的矛盾(如图2a所示)。这种矛盾是推动分析化学发展的动力,使学科不断取得新的突破和进步。生产实践和科学实验的不断发展,为分析化学的研究开辟了崭新的领域。正如恩格斯所言,科学的发展归根到底是由生产活动所决定的。随着数学、物理、计算机科学、信息科学及新型仪器等学科领域的持续发展,分析化学已经步入了全新的时代-分析科学时代。其特点主要体现在过程分析、微观分析、智能分析和活体分析等方面,使得分析化学实现了从“数据提供者”到“问题解决者”的角色转换,带来了生产和教学模式的革新。

在教学过程中,采用归纳法总结其共性与个性非常重要。以色谱法为例,复杂混合物的分离分析为共性,而个性则体现在如何根据待分离组合的性质选择合适的色谱条件,同时还要从分析仪器的结构流程和关键部件来处理整体与局部的关系。总的来说,分析化学研究的特殊矛盾就是研究对象与方法、微观与宏观、变化与平衡、模拟与实验之间的矛盾。从本质上讲,分析化学与整个世界及其规律是紧密相连、不可分割的(如图2b所示)。与此同时,分析化学也面临着更复杂的化学样品、更微量的化学分析和更精准的化学测量要求等挑战。其研究对商用科学仪器的严重依赖,独特性分析仪器的不足,核心技术方法发展欠缺,以及高端新型分析仪器的研发力量相对薄弱等问题也亟待解决。因此,科学仪器的研制应该以科学问题为驱动,紧密结合重要科学问题与新仪器创制,并在此过程中加强对复合型人才的培养。

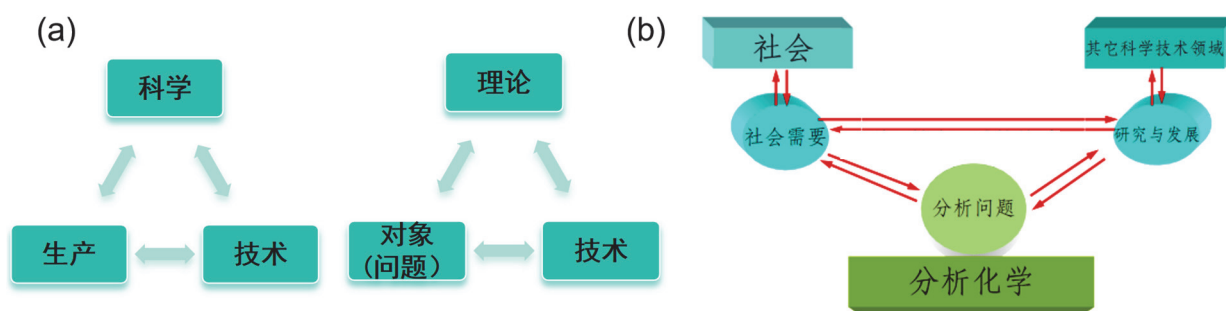


图2 (a) 分析化学研究的特殊矛盾; (b) 分析化学与社会和其他科学技术领域的关系<sup>[6]</sup>

## 3 仪器分析方法的革新

### 3.1 科学研究范式

近代自然科学的飞速发展以及科学技术的广泛运用使人们逐渐认识到:应用自然科学的理性思维方法可以高效地发现客观世界的内在规律。随着人类社会的不断进步,科学研究范式与方法也在不断演进。图灵奖得主,关系型数据库的鼻祖吉姆·格雷(Jim Gray)在加州山景城召开的National Research Council-Computer Science and Telecommunications Board (NRC-CSTB)大会上,发表了题为

“科学方法的革命”的演讲，提出了将科学研究分为四类范式的观点。此外，托尼·海(Tony Hey)在《第四范式：数据密集型科学发现》一书中提出了科学研究范式经历了四个发展阶段：实验、理论、计算和数据密集<sup>[7]</sup> (如图3a所示)。近十多年来，科学研究处于第四范式-大数据科学阶段，它是由科学实验、理论模型或算法、计算机模拟和大规模数据处理等多个方面组成。

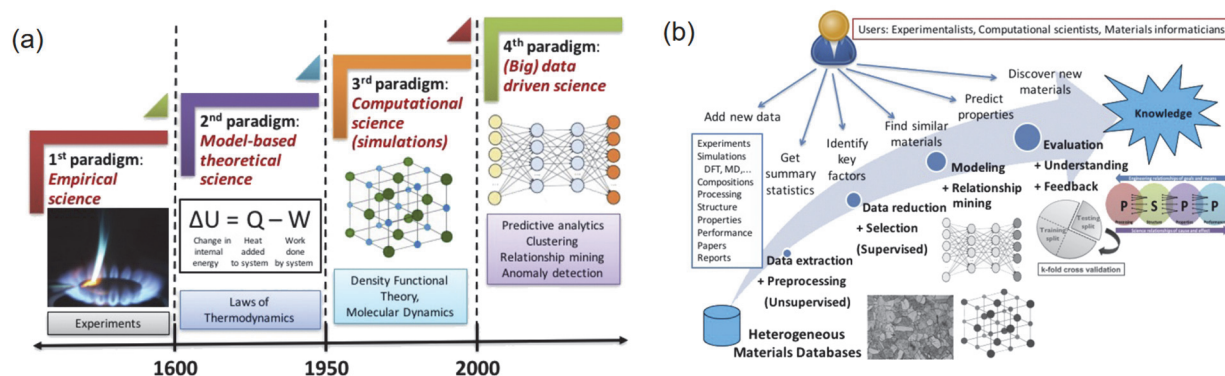


图3 (a) 科学的四种范式：实验、理论、计算和数据密集；(b) 数据驱动下的材料发现和设计<sup>[8]</sup>

分析化学学科传统上严重依赖实验数据，现在正逐步接纳大数据技术和计算机仿真模拟，也开辟了新的研究方向。然而，随着数据维数的增加，计算量呈现出指数的增长，导致了“维数灾难”。现代化学测量技术(如光谱、色谱、质谱及联用等技术)产生的大数据为深入解析化学体系的复杂性和多样性提供了丰富信息，但仍亟需借助智能技术实现从大数据到精准化学知识的质变。开普勒范式和牛顿范式的数据驱动方式的引入为高维数据的精准挖掘与解析提供了一种新的思路。数据挖掘技术和AI对复杂体系中组分、结构、工艺与性能之间关联关系的精准研究，已经成为大数据驱动下材料信息学的重要研究方向(如图3b所示)。因此，发展多维数据解析的化学计量学方法、机器学习和AI技术变得尤为迫切。

### 3.2 仪器分析新方法探究

原子光谱和质谱分析检测技术是现代化学分析领域中极为重要的技术手段，能够精确揭示物质中元素的种类和含量。主要的分析方法包括原子发射光谱(AES)、原子吸收光谱(AAS)、原子荧光光谱(AFS)、X射线荧光光谱(XRF)、电感耦合等离子体发射光谱(ICP-OES)以及电感耦合等离子体质谱(ICP-MS)。得益于精密制造和微电子技术的持续融合，AES仪器已跃升至高端发展阶段，展现出稳定且可靠的分析性能，并不断向高精密度和高可靠性发展。然而，在进行检测分析的过程中，光谱分析技术会受到现场复杂环境的干扰、仪器参数的波动、复杂基体效应的影响以及样品表面不均性的制约，使得光谱信号的质量下降，进而影响到对样品成分、浓度和结构等信息的准确提取和解释。

传统的单变量方法通常不能提供理想的预测结果。现代光谱分析产生的光谱信号本质上是一组包含多个相互依赖变量的矢量数据。为了更准确地捕捉多变量间的相互作用，需要转向更为复杂的回归分析方法，即多元回归分析。该方法需要同时考虑多个自变量对目标变量的影响，在处理具有复杂基体的样品时尤为重要。谷艳红等<sup>[9]</sup>采用激光诱导击穿光谱(LIBS)技术结合多元线性回归分析方法显著提升了土壤中Cr元素的定量分析的精度，定标曲线的拟合相关系数从传统方法的0.689大幅提升至0.980。此外，相较于传统定量分析方法和多元线性回归分析，支持向量机在训练集上取得的定标曲线斜率接近1，且拟合相关系数高达0.998，展现出更为优越的性能。在应用于验证集时，该方法的预测相对误差均保持在2.57%以内，进一步证明了其分析效果的优越性。通过探究的新方法，建立了一个更为全面和准确的模型，以揭示元素浓度与其特征谱线强度之间的复杂关系，从而提高光谱分析的准确性和可靠性。

### 3.3 分析仪器研发和应用

工欲善其事，必先利其器。科学仪器是认识世界的重要工具，人类科学发展史上任何一次大的飞跃都离不开科研工具的根本创新和变革。近年来，我国对科学仪器的创新与发展给予了高度重视，相继启动了“科学仪器基础研究专项”“国家重大科研仪器设备研制专项”等多项科研计划。这些举措旨在支持具有自主知识产权的科学仪器以及关键部件等的研发。高灵敏度、高通量、高效快速的分析检测仪器的不断推出为各种产品的质量检测提供了强有力的技术支撑。在面对食品安全、公共安全、环境污染等事件中，分析工作者们都能及时组织科技攻关，有针对地研发相应的检测技术和设备，并建立配套的国家标准，为维护国家利益和保障人民生命安全作出了重大贡献。

随着实际生产过程检测的自动化与智能化要求不断提高，传统的实验室分析仪器已难以满足连续自动化生产过程的监测和控制需求。LIBS技术作为一种新型原子发射光谱技术，具有无需复杂样品前处理、分析速度快、多元素同时分析及远程探测等优势，已经被广泛应用于火星探测、科技考古、环境监测、冶金分析和医学诊断等众多领域。由四川大学牵头，联合吉林大学、西安光机所、西北大学等单位，共同承担了科技部国家重大科学仪器设备开发专项“创新型多功能激光光谱分析仪器的研发与应用，No. 2011YQ030113”。该项目致力于开发激光诱导击穿拉曼光谱仪(LIBRAS)，以实现物质元素成分和分子结构信息的快速、准确、原位且同时表征<sup>[10]</sup>。针对现场LIBS分析的化学信息学需求，西北大学研究团队基于新理论和新方法，成功研发了一套集光谱预处理、定性分析、定量分析、数据库等功能为一体的LIBS在线分析系统，为现场检测提供了先进的分析手段和理论支撑<sup>[11]</sup>。在此基础上，针对稀土磁性合金材料典型工艺过程中快速、高效与精准分析的实际需求，研发了LIBS在线分析系统，并在实际工艺现场得到了应用验证(如图4a、b所示)，检测效果完全满足现场需求。Girón等<sup>[12]</sup>设计了一套专门针对钢铁企业大气气溶胶中的颗粒物的双脉冲远程LIBS系统，可实时、在线、高效地对钢铁厂内部不同来源的颗粒物进行追溯分析(如图4c所示)，是一种在极端环境下颗粒物检测的快速且有效的手段。



图4 (a) LIBS稀土矿石成分分析系统；(b) 稀土磁性合金材料现场监测；  
(c) 大气气溶胶中颗粒物成分现场监测<sup>[13]</sup>

## 4 仪器分析教学模式革新

仪器分析实验课程是高等院校化学、化工、环境、生命类等专业的基础实验课程，旨在培养学生获取知识、分析问题、解决问题、实践应用和科研实验等多方面的能力。然而，传统仪器分析实验教学仍然面临一些挑战。一方面，新型分析方法的不断涌现与课堂学时的不断缩减之间存在矛盾；另一方面，学生化学知识基础参差不齐，教师难以准确掌握学生的学情，传统授课模式往往无法顾及学生的个体差异和个性化学习需求。在新的历史时代背景下，高校实验教学需要积极适应时代发展潮流，转变教育理念，改革培养模式，以满足培养基础扎实、勇于创新的拔尖人才的需求，并探索解决实验教学中的关键问题。

科教融合协同AI是培养拔尖创新人才的重要途径之一，其核心理念是将科学研究与教育实践紧密结合，并借助AI技术的力量，共同推动创新人才的培养。倡导学生以问题导向研究性学习，鼓励

将基础知识应用于科研实践中,通过自由探索和问题解决,锻炼创新思维和科研能力。AI技术不仅给仪器分析带来革命性的变化,也给仪器分析教学带来了新的机遇。在这个信息与科技飞速发展的时代,仪器分析实验需要与新兴的教育技术与模式相结合。将AI技术引入仪器分析实验教学中,不仅能够有效降低实验成本、减少环境污染,还能通过新颖的展示手段激发学生的学习兴趣,帮助学生掌握分析仪器相关知识,并进一步加深对仪器原理的理解。总之,AI技术将丰富教学手段,提升教学效果,为培养未来的科研人才奠定坚实的基础。

#### 4.1 虚拟仿真实验

虚拟仿真技术是以学生为中心,旨在全面提高学生的综合素质。它采用“虚实结合”的实验设计理念、以问题解决为导向,通过学生自主探究式和情景互动式相结合的教学模式,推动学生从“被动接受”到“主动探索”的学习方式转变。它不仅极大拓展与延伸传统实验教学,使现代信息技术与实验教学深度融合,而且极大提升仪器分析实验教学的效果,特别是在解决贵重大型仪器机时缺乏、实验成本高昂和无法开展广泛实验教学的问题上具有非凡的意义。例如:大型仪器色谱与质谱仪属于综合性分离分析仪器,应用领域范围极为广泛。但是,该设备复杂精密、价格昂贵,机时紧缺、实验成本大,需要花费大量课时进行学习。应对这一挑战,中国科学技术大学的邵伟教授团队开发了一套分离分析仪器基础仿真实验系统,用于仪器分析实验教学<sup>[14]</sup>。该系统不仅解决了传统实验教学中的诸多难题,如学生人数众多、仪器设备不足、仪器及操作的封闭性强等,还能够生动地向学生展示仪器原理,并可选择五种经典分离仪器开展虚拟实验。此外,提供自由开放的学习时间,便于学生自主安排。通过共享学习资源作为实验补充和拓展,既丰富了实验教学内容,又极大地提升了教学效果。

针对LIBS仪器光路复杂、激光危险性高,且仪器相对昂贵,无法大量配置等特点,作者所在研究团队成功研发了一套基于LIBS分析的虚拟仿真实验系统<sup>[15]</sup>。通过虚拟仿真实验,学生可以在计算机上模拟实验操作,深入了解LIBS分析的基本原理,学习并掌握相关实验技能(如图5所示)。这种虚拟仿真实验不仅降低实验成本和危险性,提高学习效率,还为高素质人才培养和推动LIBS技术应用和发展提供有力支持。

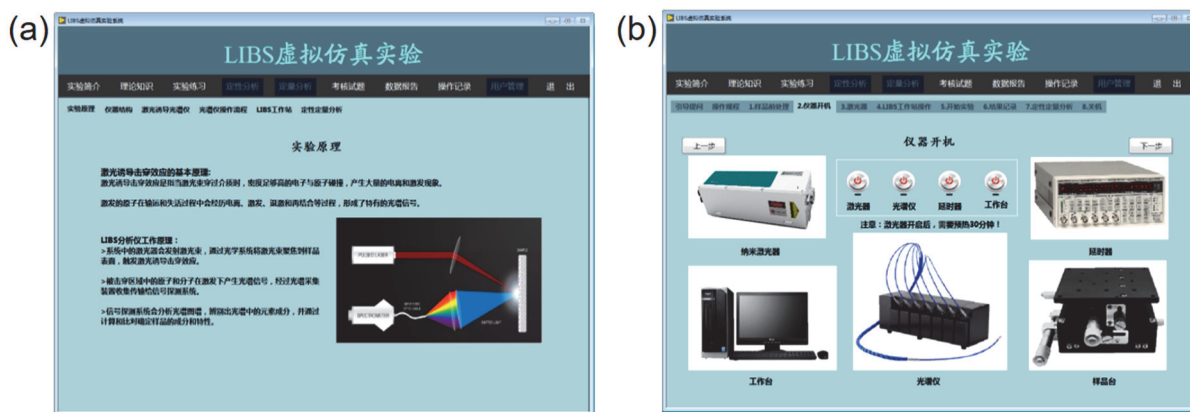


图5 (a) LIBS分析虚拟仿真实验原理; (b) 仪器核心部件

该系统主要有样品选择、实验参数优化、LIBS光谱采集、定性分析、定量分析和数据分析报告等实验环节。实验教学中,学生具体操作步骤如下:

- (1) 样品选择: 从虚拟的样品库中,选择至少5个具有不同浓度梯度的标准样品(包括金属、矿石、岩石等)作为研究对象。
- (2) 实验参数优化: 调整激光器的功率、脉冲频率和采样时间等参数,以优化实验条件,使其适合

于所选样品的分析。

(3) 光谱采集：通过虚拟仿真软件，模拟激光器对样品的照射和光谱信号的采集。通过调整实验参数并观察所采集的光谱信号，获得最优化的LIBS光谱，并进行记录和保存。

(4) 定性分析：对采集到的光谱信号进行峰识别和峰强度分析，通过比对已知标准样品的美国国家标准技术研究所(NIST)原子光谱数据库，找出样品中不同元素的特征峰，进行元素特征峰的归属。

(5) 定量分析：建立某元素的不同含量与特征峰强度之间的关系，利用已建立的工作曲线计算样品中各元素的含量。

(6) 数据分析报告：根据实验结果撰写数据分析报告，包括实验目的、方法、结果、讨论和结论等。

虚拟仿真实验通过模拟真实的实验环境和操作体验，一定程度上避免了实验材料和设备的限制。学生利用线上LIBS虚拟仿真系统进行课前预习，以此锻炼自主学习能力。通过观看教学视频和学习相关课件，深入了解LIBS技术的原理知识及实验操作流程，提升LIBS操作技能。通过对不同材料的样品的分析，增加了实验的灵活性和多样性。同时，实验参数的调整帮助学生理解参数优化对结果的影响，而直观观察光谱信号产生和特征峰的分析则进一步提升学生对LIBS光谱的理解和应用能力。该实验还提供数据分析和报告撰写平台，培养了学生实验结果处理和报告写作技巧。LIBS虚拟仿真实验在提升学生的理论学习能力、独立思考能力和问题解决能力发挥了重要作用，对于全面提高学生的综合素质具有积极意义。为检验学生的课前预习效果，教师在课前布置相应的预习思考题，并设置在线讨论环节，鼓励学生积极与老师进行线上互动交流。教师能及时了解学生对预习内容的掌握情况，获取宝贵的预习反馈。不仅有助于教师了解学生的学习状况，还能帮助教师根据实际情况对课堂教学内容进行针对性地调整和优化，从而提高教学效果。最后，对虚拟仿真实验的应用效果进行了问卷调查。结果显示，学生对于这种创新教学模式的接纳度极高。他们普遍认为虚拟仿真实验极具趣味性，并怀着浓厚的兴趣期待能够进一步走进实验室，完成后续的真实实验操作。

#### 4.2 智能实验数据分析

在分析化学或仪器分析实验设计中，对物质的选取、用量的确定、溶液pH的调节等方面进行准确定量是必不可少的。然而，常用的近似公式和经验判别准则往往存在一定的局限性，在追求精确求解过程中，常会遇到高次方程的问题，这往往只能得到特定点的数值关系。为克服这些挑战，分析化学以及仪器分析已经引入了多种分析工具，其中Matlab的应用已相当广泛。如在电位滴定曲线的分析中，采用导数变换可以提高仪器检出信号精度和确定曲线突跃点(如图6所示)<sup>[16]</sup>。利用主成分

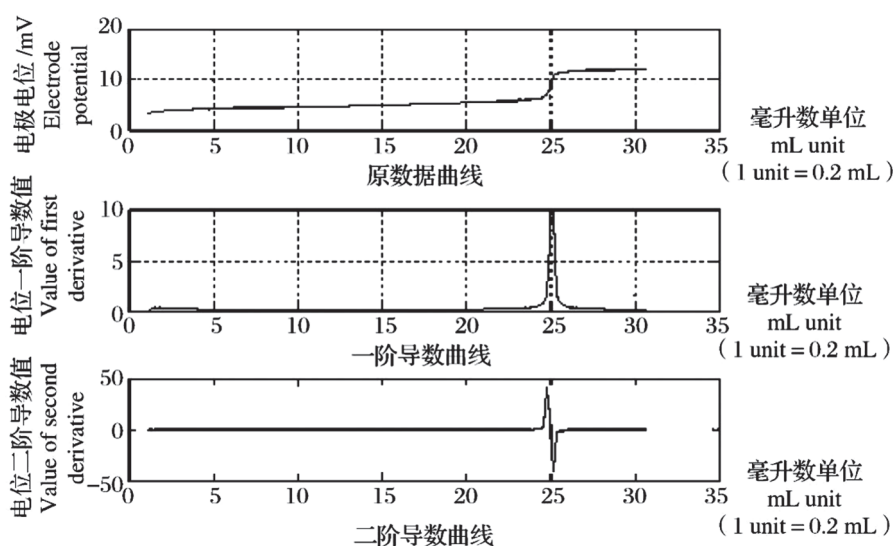


图6 电位滴定曲线及其一阶、二阶导数转换

分析和偏最小二乘法建立近红外漫反射光谱与草莓内部可溶性固形物含量之间的关系构建定量分析模型，并对模型应用价值进行评价以探讨其在草莓品质快速检测中的潜在应用<sup>[17]</sup>。本课题组将谱峰漂移校正技术与三维平行因子分析方法相结合，成功用于中药高效液相色谱中的重叠信号分辨，并利用多元曲线分辨方法验证了结果的真实性和准确性<sup>[18]</sup>。该方法结合了数据处理技术、机器学习和人工智能算法，用于从实验数据中提取有用的信息，使得对复杂数据的处理和分析变得更为高效和准确。

在过程分析化学中，科教融合的教学模式也为生产过程模拟、监测、优化和控制提供了强大的支持。通过在线分析技术监测整个生产过程，发现生产过程中的非最佳因素并对其进行优化，进而实现工业过程的经济效益最大化。针对含能化合物合成反应动态过程中活性中间体难以捕捉和精确表征的技术挑战，以3,5-二氨基-1,2,4-三唑(DAT)合成反应过程为例，作者所在研究团队采用多种光谱技术与多元曲线分辨-交替最小二乘(MCR-ALS)在线监测了典型含能化合物的合成反应过程，获取了DAT合成过程中不同组分在演变过程中的化学成分、含量及时空分布信息，从而实现了对含能材料合成反应体系的高通量表征和合成反应机理的解析(如图7所示)<sup>[19]</sup>。该方法无需借助示踪剂即可明确反应过程的中间体信息，为理解和控制含能化合物的合成反应提供了有力的支持。

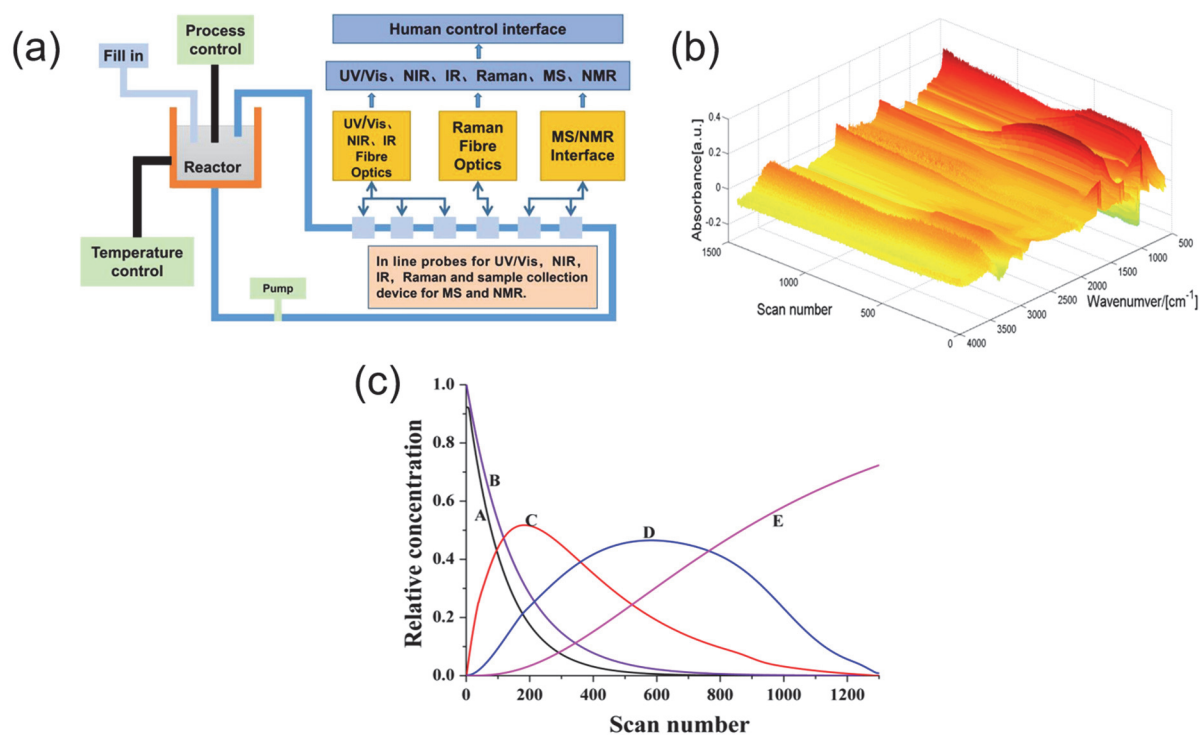


图7 合成反应过程瞬态活性中间体智能表征(a)在线监测设备；(b) 含能化合物合成过程光谱数据；(c) MCR-ALS解析结果<sup>[19]</sup>

在本科生实践教学环节中，过程化学实验数据的解析应被重视。以上文提及的含能化合物合成过程在线监测为例进行介绍。实验过程中，学生首先将反应物加入反应器中，并掌握红外、拉曼等监测设备的操作技巧，以便实时监测反应过程中的在线红外光谱图(如图7(b)所示)。随着反应的进行，学生观察到特征峰的位置及强度变化，并据此判断反应是否达到终点。这不仅锻炼了学生的观察能力，也加深了他们对化学反应动力学原理的理解。当反应谱图中特征峰的位置及强度基本不再发生变化时，表示该反应已基本达到反应终点，此时停止反应监测。在数据分析阶段，学生将采集到的

三维过程光谱数据导入Matlab多元曲线分辨工具箱中,并运用主成分分析、渐近因子分解算法以及MCR-ALS等方法计算各个组分的初始浓度值及响应曲线,然后基于MCR-ALS对各个组分的响应曲线进行迭代优化以获得最终的浓度变化曲线和响应曲线(谱图)。最后,根据浓度变化曲线可以判断反应进行的终点。此外,根据响应曲线可以分析获得含能化合物合成过程中各个组分的化学结构,从而对其反应机理进行解析,以实现反应过程优化。通过本次实验的组织与实施,学生不仅可以提高自身的实验技能和数据处理能力,还能培养团队协作精神和科学探索精神,进而激发创新能力与科研兴趣。

### 4.3 多元化智能评价

学生综合评价是对学生实验学习成效的重要检验,也是评价教学成果的重要环节。针对拔尖人才培养的实际需求,需改革传统的评价体系,摒弃单一的分数评价标准。借助人工智能技术,跟踪并详尽地记录学生的预习情况和实验过程中每一步操作,并能对其进行客观评价(如图8所示)。基于一致性、系统性、代表性和可操作性这四个基本原则,通过课前预习、课中考核、课后跟踪和期末考试等多种方式,对学生实验进行全面综合考评,构建了一个涵盖动机(包括内在动机和外在动机)、智力(包括分析智力、创造智力和实践智力)、知识(包括通识知识、专业知识及跨学科知识)、人格(包括容忍、毅力、超越自我、勇气和信心等特质)和思维风格(包括探究性思维、批判性思维和发散性思维)五个维度的拔尖创新人才潜力智能评价体系,推动学生全面发展。



图8 多元化智能评价考核方式

## 5 结语

为了持续提高教学质量,将人工智能技术融入本科生仪器分析实验教学课堂具有重要的意义。对于一些微观、抽象、机理复杂、难以重复、实验难度高且成本昂贵的教学内容,可以采用人工智能辅助教学。根据教学目的和教学对象的特点,合理选择和运用人工智能技术,同时采用科教融合的新模式,贯穿于教学的全过程。形成一个合理的教学结构,实现教学效果的最优化,从而更有效地培养学生不畏困难、乐观积极、敢于创新等的能力,进而培养出全面发展的创新性拔尖人才。

### 参 考 文 献

- [1] 教育部等六部门关于实施基础学科拔尖学生培养计划2.0的意见. [2024-07-10].  
[https://hudong.moe.gov.cn/srcsite/A08/moe\\_742/s3860/201810/t20181017\\_351890.html](https://hudong.moe.gov.cn/srcsite/A08/moe_742/s3860/201810/t20181017_351890.html)
- [2] 王淑莹, 杨燕, 李天瑞, 刘晓棠. 计算机教育, 2023, No. 6, 1.

- [3] Segler, M. H. S.; Preuss, M.; Waller, M. P. *Nature* **2018**, *555* (7698), 604.
- [4] Burger, B.; Maffettone, P. M.; Gusev, V. V.; Aitchison, C. M.; Bai, Y.; Wang, X. Y.; Li, X. B.; Alston, B.; Li, B. Y.; Clowes, R. *Nature* **2020**, *583* (7815), 237.
- [5] Zhu, Q.; Zhang, F.; Huang, Y.; Xiao, H. Y.; Zhao, L. Y.; Zhang, X. C.; Song, T.; Tang, X. S.; Li, X.; He, G. *Natl. Sci. Rev.* **2022**, *9* (10), 190.
- [6] 高鸿. 西北大学学报, **1994**, *24* (5), 377.
- [7] 潘教峰, 张晓林. 北京: 科学出版社, 2012.
- [8] Agrawal, A.; Choudhary, A. *APL Mater.* **2016**, *4* (5), 05320.
- [9] 谷艳红, 赵南京, 马明俊, 孟德硕, 王寅, 余洋, 胡丽, 方丽, 王园园, 刘建国, 等. 光谱学与光谱分析, **2016**, *36* (6), 1893.
- [10] He, J. L.; Peng, T.; Xie, J.; Dai, H. H.; Chen, D. D.; Yue, Z. F.; Fan, C. L.; Li, C. *Chinese J. Anal. Chem.* **2015**, *43* (1), 48.
- [11] 刘向前. 基于LIBS的稀土矿石成分分析方法研究及系统集成[硕士学位论文]. 西安: 西安石油大学, 2023.
- [12] Girón, D.; Delgado, T.; Ruiz, J.; Cabalín, L. M.; Laserna, J. J. *Measurement* **2018**, *115*, 1.
- [13] 牛广辉, 张业建, 林庆宇. 中国无机分析化学, **2024**, *14* (2), 168.
- [14] 胡万群, 邵伟. 大学化学, **2014**, *29* (2), 29.
- [15] 张天龙, 周嘉俊, 汤宏胜, 宁晓辉, 李延, 李华. 大学化学, **2024**, *39* (6), 295.
- [16] 应海松, 张会红. 冶金分析, **2010**, *30* (10), 16.
- [17] 宋白玉, 张瑞鑫, 庄程翔, 刘哲, 陈少华. 科技与创新, **2023**, No. 7, 9.
- [18] 王康, 贾泽慧, 张志琪, 李华. 高等学校化学学报, **2009**, *30* (2), 268.
- [19] Fu, H.; Li, M. G.; Guo, M. J.; Tang, H. S.; Zhang, T. L.; Li, H. *Spectrochim. Acta, Part A: Mol. Biomol. Spectrosc.* **2023**, *289*, 122231.