

## 面向智能时代的化学信息学与人工智能化学理论课程建设

朱伟钢<sup>1,2,\*</sup>, 王建凤<sup>1</sup>, 齐强<sup>1</sup>, 李婧<sup>3</sup>, 张志成<sup>1,2</sup>, 于曦<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup>天津大学理学院化学系, 智能传感功能材料全国重点实验室, 有机集成电路教育部重点实验室, 天津市分子光电科学重点实验室, 天津 300072

<sup>2</sup>天津大学理学院化学系, 化学化工国家级实验教学示范中心(天津大学), 天津 300354

<sup>3</sup>天津理工大学材料科学与工程学院, 天津 300384

**摘要:** 近年来人工智能技术与化学课堂教学的融合催生了高等院校专业化学教育发展的新赛道, 如何改造化学教学内容、创新教学方法、推动课程建设成为改革前沿之一。本文介绍了天津大学化学信息学与人工智能化学课程建设概况, 阐述了课程立项建设的必要性, 归纳了课程教学目标、知识领域与授课内容、创新特色及运行成效, 提出了不足和未来改进计划, 希望能为相关领域教学同行提供借鉴参考。

**关键词:** 机器学习; 人工智能; 化学教学; 化学信息学; 跨学科教学

**中图分类号:** G64; O6

## Curriculum Development for Cheminformatics and AI-Driven Chemistry Theory toward an Intelligent Era

Weigang Zhu<sup>1,2,\*</sup>, Jianfeng Wang<sup>1</sup>, Qiang Qi<sup>1</sup>, Jing Li<sup>3</sup>, Zhicheng Zhang<sup>1,2</sup>, Xi Yu<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup> Tianjin Key Laboratory of Molecular Optoelectronic Sciences, Key Laboratory of Organic Integrated Circuits, Ministry of Education, State Key Laboratory of Advanced Materials for Intelligent Sensing, Department of Chemistry, School of Science, Tianjin University, Tianjin 300072, China.

<sup>2</sup> National Demonstration Center for Chemistry and Chemical Engineering Education, Department of Chemistry, School of Science, Tianjin University, Tianjin 300354, China.

<sup>3</sup> School of Materials Science and Engineering, Tianjin University of Technology, Tianjin 300384, China.

**Abstract:** In recent years, the integration of artificial intelligence (AI) technology and chemistry education has given rise to a new track for the development of professional chemistry education in higher education institutions. How to transform chemistry teaching content, innovate teaching methods, and promote curriculum construction has become one of the key focuses. This article introduces the overview of the course construction of "Chemical Informatics and AI Chemistry" at Tianjin University, discusses the necessity of carrying out the project construction of artificial intelligence chemistry course, summarizes the teaching objectives, knowledge areas and teaching content, characteristic innovations and operational effects of the course, and puts forward shortcomings and future improvement plans, hoping to provide reference for teaching peers in related fields.

**Key Words:** Machine learning; Artificial intelligence; Chemistry teaching; Cheminformatics; Interdisciplinary teaching

收稿: 2024-12-02; 录用: 2025-02-19; 网络发表: 2025-02-24

\*通讯作者, Emails: w\_zhu10@tju.edu.cn (朱伟钢); xi.yu@tju.edu.cn (于曦)

基金资助: 天津大学北洋学者英才计划启动经费二期; 2024年天津大学理学院本科教育教学改革研究项目; 2024年天津大学理学院研究生教育改革研究计划项目; 天津大学2024人工智能赋能课程建设专项项目

近年来,人工智能(Artificial Intelligence, AI)技术的飞速发展对高等院校化学教育教学产生了深远影响。AI技术与化学课堂教学的融合已成为教育改革的前沿方向,不仅推动了教学方法的多样化,还显著提升了教学效率。例如,在知识图谱构建、智能授课辅助、作业批改与学生学习伴随等方面, AI技术展现了极大的应用潜力。2024年全国教育工作会议明确指出,要以智能化赋能教育治理,引领教育变革创新, AI技术的广泛应用已成为推动我国教育现代化发展的重要力量。在化学领域,以机器学习为代表的AI技术正在加速从实验数据挖掘到研究范式革新的转变。AI能够深入挖掘化学反应数据,揭示潜在规律,优化实验条件,并在分子设计、逆合成路径分析、反应预测等方面表现出卓越能力。近年来,国际化学界已将AI技术视为科研的战略高地。然而,国内化学教育与研究在机器学习及AI方法的应用上仍处于起步阶段,特别是在化学信息学、数据处理及编程语言等现代技能的教育中存在明显不足。这种课程体系的空白,限制了化学专业学生在数据驱动与AI化学等新兴领域的发展潜力。

近年来,《大学化学》已发表多篇关于AI与化学教学结合的研究,探讨了知识图谱、虚拟仿真和AI助教等技术在教学中的应用<sup>[1-6]</sup>。这些研究多聚焦于特定技术的应用实例,例如知识图谱与AI助教的结合为个性化学习提供了新的解决方案, AI与化学实验课程的融合则重点在于实验教学的创新。相比之下,天津大学理学院化学系依托侯德榜化学拔尖基地,构建了以“化学信息学与人工智能化学”课程为核心的完整教学体系。该课程不仅覆盖从AI基础理论到化学应用的全链条内容,还融入翻转课堂、案例分析和小组讨论等多种教学方法,全面提升学生的实践能力和跨学科思维。通过学生反馈与教学评估验证,该课程在培养化学学科复合型人才方面展现出显著优势,为AI技术在化学教育中的综合应用提供了全新范式。本文系统介绍了课程建设的背景与必要性,归纳了课程目标、知识领域与授课内容、特色创新及运行成效,同时提出了不足与改进计划,为同类高校AI化学课程建设提供有益参考。

## 1 开展化学信息学与人工智能化学课程建设的基础

天津大学在化学课程教学方面拥有悠久的历史,早在1895年北洋大学(天津大学前身)创办时,次年便开设了化学课程,并邀请了黄子卿、侯德榜、丁绪淮、魏寿昆、陈新民、刘云浦等多位著名化学家任教,开创了我国化学高等教育的先河。2017年,化学学科入选国家“双一流”建设学科;2021年,获批侯德榜化学拔尖学生培养基地。近年来,化学系屡获殊荣,先后获得2022年天津市教学成果奖特等奖、2023年国家级教学成果奖二等奖等重要荣誉。化学系多门本科生课程已完成资源信息化建设,实现了线上公开在线教学,部分课程已经引入了AI技术进行实践<sup>[2]</sup>。近期,天津大学面向全体本科生开设了天津市首个数智化课程“人工智能导论”,通过智慧树平台进行全国共享。这些举措为本课程建设提供了宝贵的资源和技术积累,奠定了坚实的基础。

近年来, AI技术和机器学习蓬勃发展。机器学习是一门跨学科领域,涉及线性代数与概率论、统计学、数值分析、凸优化、算法复杂度等多方面内容。它专注于研究计算机如何模拟或实现人类的学习行为,从而获取新的知识或技能,并通过重新组织已有的知识结构来不断改善自身的性能,是AI技术的核心之一。机器学习在化学中的应用主要依赖于大量实验数据的积累和机器学习算法的应用(如图1所示),已经在诸如蛋白质结构预测、新分子设计、金属有机框架(Metal Organic Framework, MOF)新材料开发、有机高效发光材料等领域取得了显著进展<sup>[7,8]</sup>。利用大数据集训练<sup>[9]</sup>, AI能够学习分子功能团的模式,预测反应和逆合成;结合蒙特卡洛树搜索(Monte Carlo Tree Search, MCTS)等技术<sup>[10]</sup>, AI能够高效地提供可行的逆合成解决方案<sup>[9]</sup>;使用卷积神经网络, AI能够识别反应的主要产物<sup>[11]</sup>;通过随机森林模型能够预测偶联反应的产率<sup>[12]</sup>。这些前沿应用为AI化学课程建设奠定了坚实的科学基础,也促使我们必须加快培养适应未来智能时代的化学专业人才。

本课程“化学信息学与人工智能化学”课程为化学专业三年级的核心课程,旨在培养学生掌握化学信息学的基本原理及人工智能化学的前沿应用能力。课程面向本科化学专业学生开设,同时对

药学、材料科学等相关专业学生开放选修。课程的主要授课对象为具有基础化学知识的三年级本科生，每轮授课人数为50–60人，主要采用理论授课结合案例分析的教学模式。截至目前，课程已成功开设5轮，每轮持续16周，总课时48学时。学生反馈显示，课程内容具有高度的实践性和前沿性，满意度综合评分为4.8/5。

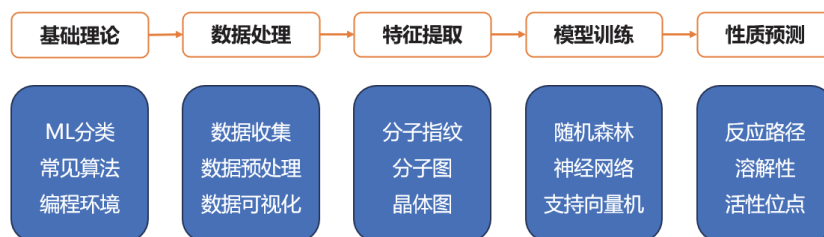


图1 机器学习在化学领域的应用示意图

## 2 课程教学目标

在智能时代的背景下，本课程旨在培养学生掌握化学信息学与AI的基础理论、方法及其在化学研究中的应用能力。此外，课程还注重培养学生的创新思维和实践能力，以适应未来化学研究的发展趋势。本课程的学习将为后续AI化学实验课程奠定理论基础，具体教学目标如下：

(1) 掌握基础理论与方法：初步了解AI与机器学习的概念，掌握基础理论与技术方法，理解化学数据与描述符的基本概念，学习并掌握常见的机器学习算法，能够正确应用这些算法解决实际化学问题。

(2) 提升信息素养与数据处理能力：具备利用计算机网络快速、准确获取和管理化学资源的能力，能够处理实验数据，使用多种科研软件进行数据可视化及绘制科技图形，提升自身的信息素养和数字化技能。

(3) 运用AI技术解决化学问题：能够利用AI技术进行化学数据分析、模式识别，预测化学反应结果，解决相关的化学实际问题，增强在数据驱动的化学研究中的实践能力。

(4) 培养社会责任感与职业道德：培养学生具有良好的社会责任感和职业道德，使学生具备责任担当、贡献社会、学术诚信等意识。

## 3 课程建设实施

课程建设与实施主要从课程内容与学时分配、教学方法与手段、教学实例，以及考核与评价方式等方面展开，具体有以下几个方面。

### 3.1 课程内容与学时分配

课程内容涵盖化学信息学的基础理论以及AI技术在化学领域的应用，包括机器学习的基础知识(如常用算法介绍、化学数据的获取与处理、化学体系描述符以及机器学习在化学反应预测和材料设计中的应用)，同时还涵盖深度学习在化学中的应用(包括神经网络的构建与训练，以及利用神经网络模型构建分子的势能面)。课程注重理论与实践的结合，通过案例分析帮助学生加深对知识的理解和应用能力，确保他们能够全面、深入地掌握AI在化学领域的实际应用(如表1所示)。课程总学时为32学时，2个学分，作为专业选修课面向高年级本科生开设。课程的内容与学时分配根据教学目标、学生基础和实际情况进行灵活调整。通过合理的学时分配和教学方法设计，确保学生全面深入地理解AI在化学领域的应用，并掌握相关的技能和知识。具体课程内容如下：

本课程“化学信息学与人工智能化学”围绕化学信息学的基础理论及其在人工智能(AI)领域的应用展开，旨在培养学生掌握化学信息学的基本概念、AI技术在化学中的具体应用能力，并将其运

用于实际问题的解决。课程共计32学时，2个学分，作为专业选修课面向高年级本科生开设。课程内容根据教学目标、学生基础和实际需求灵活调整，确保学生能够全面、深入地理解AI在化学领域的应用，并掌握相关的技能与知识。

表1 “化学信息学与人工智能化学” 课程内容

类型	大纲	内容
基础学习	机器学习与量子化学基础	人工智能与机器学习概述 AI与编程软件(库)Anaconda/TensorFlow/PyTorch 量化软件Gaussian/GaussView/RDKit
	常用算法介绍	监督学习(回归、分类)、无监督学习(聚类、降维)、模型的评估与选择
	化学数据与分子描述	化学数据的获取：实验数据收集、公开化学数据库 数据预处理：清洗、转换、标准化 化学信息学：分子描述符、化学信息软件、分子模拟
	化学中的机器学习模型	预测化合物属性、反应预测、材料设计 多元线性回归函数的编写、对未知化学物质催化活性、溶解度的判断
实用技巧	神经网络	建立训练集与测试集，训练两层神经网络系统，基于机器学习的化合物活性预测
	分子势能面	基于神经网络构建分子势能面
专题演练	体系能量计算	根据反应可能的途径，计算过渡态、中间体的能量 计算体系反应前后的能量变化
	手性色谱分离	基于随机森林的机器学习模型预测手性色谱分离效果

#### (1) 基础理论(4学时)。

课程开篇介绍人工智能的基本概念、技术原理及其在化学中的应用场景。内容包括机器学习和深度学习的基本原理及常见算法的技术特点，尤其是其在化学反应预测、产物识别及产率预估中的应用。此外，课程还将阐述相似性搜索、3-N-MCTS和Chematica等化学反应预测方法背后的技术原理，并提供开源训练数据与代码资源的使用指导。通过课堂讲授与小组讨论，学生能够建立对AI化学的整体认知。

#### (2) 数据处理与分析(12学时)。

数据处理与分析是课程的核心模块，重点教授学生如何利用Python等编程工具处理和分析化学数据。具体内容包括数据清洗、特征提取、模型构建和优化等操作流程。在此模块中，学生通过实际案例学习如何将化学数据转化为可解释的知识成果。例如，分析药物分子结构与生物活性之间的关系。通过编程练习与小型数据分析项目，学生将熟练掌握化学数据分析技能，为后续课程打下坚实基础。

#### (3) 分子模拟与预测(8学时)。

本模块介绍分子模拟的基本原理和方法，如量子化学计算与分子动力学模拟，结合AI技术讲解如何通过机器学习预测分子性质并加速新药研发与材料设计。此部分要求学生具备一定的数学和物理基础，通过讲授和案例分析帮助学生掌握分子模拟的基本原理，同时学会将AI方法应用于分子筛选和性质预测的实践。

#### (4) 智能实验设计与优化(4学时)。

该部分重点探讨AI技术在实验设计优化中的实际应用，包括如何通过智能算法优化实验条件以提高效率和精确性。通过案例分析，例如优化催化剂筛选条件的过程，学生能够直观理解智能实验设计的优势。这部分课程通过理论讲授与实例演示，帮助学生认识智能实验在化学研究中的潜力。

### (5) 前沿进展与趋势(4学时)。

课程最后通过讲座与研讨的形式介绍AI化学领域的最新研究进展与未来发展趋势。邀请领域专家分享前沿成果,并鼓励学生关注学科热点问题。这部分内容旨在激发学生的科研兴趣与创新思维,为其学术研究提供方向。

为增强学生对理论知识的理解与应用能力,课程结合具体实例开展教学。例如,在“分子对接与药物设计”单元中,教师通过实例展示基于机器学习的分子对接模型构建流程,学生使用公开数据库中的药物分子结构数据,训练一个预测分子对接自由能的模型,并讨论该模型在药物研发中的实际应用。此外,在“反应机理的AI预测”单元中,学生学习如何利用深度学习算法预测化学反应路径。课程选择经典反应机理(如 $S_N2$ 反应)作为实验对象,学生通过Python编程实现反应路径的可视化分析。这些实例将理论知识与实际操作相结合,不仅激发了学生的学习兴趣,还显著提升了他们解决实际问题的能力。

### 3.2 教学方法与手段

教学方法与手段是确保学生能够有效掌握相关知识和技能的关键。一、通过教师讲解向学生传授化学信息学与AI化学的基本概念、原理和方法,这种教学方法有助于学生建立对课程内容的初步认识和理解。利用PPT、视频等多媒体工具展示课程内容,使抽象的概念和复杂的过程更加直观易懂,多媒体教学还能够增加课堂的趣味性和互动性。二、使用案例分析,选取典型的AI化学应用案例,引导学生进行分析和讨论,这种方法能够帮助学生将理论知识与实际应用相结合,加深对知识的理解和记忆。三、组织学生进行小组讨论,共同探讨问题、分享观点,这种方法有助于培养学生的团队合作精神和沟通能力,同时促进知识的共享和交流。四、利用翻转课堂,将传统的课堂教学模式颠倒过来,让学生在课前预习课程内容,然后在课堂上进行讨论和实践,这种方法能够激发学生的学习主动性和积极性,提高学习效果。五、利用互联网上的在线课程、教程、论坛等资源,为学生提供丰富的学习材料和交流平台,这些资源能够帮助学生拓展视野、深化理解,并及时解决学习中遇到的问题。六、进行跨学科合作,与其他学科领域(如计算机科学、数学等)教师进行合作,共同开展教学活动和科研项目,这种方法能够促进不同学科之间的融合与交流,培养学生的跨学科思维 and 创新能力。

总之,采用线上线下相结合的教学模式,充分利用现代信息技术手段,如在线教学资源等,提高教学效果。在线下教学中,注重师生互动和小组讨论,鼓励学生提出问题并寻求解决方案。在线上教学中,通过视频教程、在线测试等方式,帮助学生巩固所学知识。

### 3.3 课程教学实例展示

分子势能面是描述分子内部原子间相互作用的关键工具,在反应动力学研究和分子模拟中具有重要应用。然而,传统量子化学计算在高维势能面构建中的计算成本较高,限制了其在复杂化学体系中的应用。近年来,神经网络凭借其强大的非线性拟合能力,成为高效构建分子势能面的重要方法,为复杂化学问题的研究提供了创新性解决方案。本案例通过指导学生利用神经网络构建分子势能面(如图2所示),帮助他们深入理解这一技术的核心原理及其实际应用价值。

学生首先利用量子化学计算程序Gaussian对目标分子进行高精度计算,获取分子势能面相关数据。这些数据包括多组不同分子几何构型(如键长、键角和二面角)及其对应的总能量值。学生在此过程中学习如何设置计算参数,确保计算结果的精度和一致性。之后将生成的数据整理为适合机器学习处理的格式,并对数据进行标准化处理,消除输入特征在量纲和数值范围上的差异,提高模型训练的稳定性和效率。通过划分训练集和测试集,学生学习数据分组的基本策略,并理解评估模型泛化能力的重要性。同时,学生利用数据可视化工具绘制能量分布图和几何参数的统计图,直观分析数据的特性及其分布规律。

在模型搭建阶段,学生使用深度学习框架PyTorch构建神经网络模型。输入层接收分子几何参数数据,输出层预测对应的势能值。在设计网络结构时,学生探索并优化隐藏层的数量、每层的神经

元个数, 以及常用激活函数的适用性。此外, 学生需要通过定义合适的损失函数, 确保模型在训练过程中能够有效衡量预测值与真实值的偏差。在模型训练过程中, 学生采用梯度下降法优化神经网络的权重参数, 并学习常用的优化算法(如Adam或RMSprop)的应用。为避免过拟合, 学生结合早停策略监控模型的训练表现, 同时利用交叉验证方法进一步评估模型的稳定性和泛化能力。训练结束后, 学生分析模型的预测结果, 确保拟合的势能面具备良好的连续性与光滑性。在误差分析阶段, 学生通过对残差分布的可视化和模型预测偏差的研究, 识别训练数据中可能存在的问题, 例如能量数据分布不均或样本数量不足的影响。针对这些问题, 学生需尝试引入正则化项减少模型复杂度, 或通过数据增强技术(如对几何参数进行微小扰动)扩充数据集, 从而进一步提升模型性能。

最后, 学生将训练好的势能面模型应用于化学反应路径的预测, 验证其在复杂化学体系中的实用性。这一过程帮助学生理解势能面模型在实际化学研究中的价值, 并掌握从数据处理、模型构建到结果应用的全流程, 为未来的量子化学研究奠定了坚实基础。

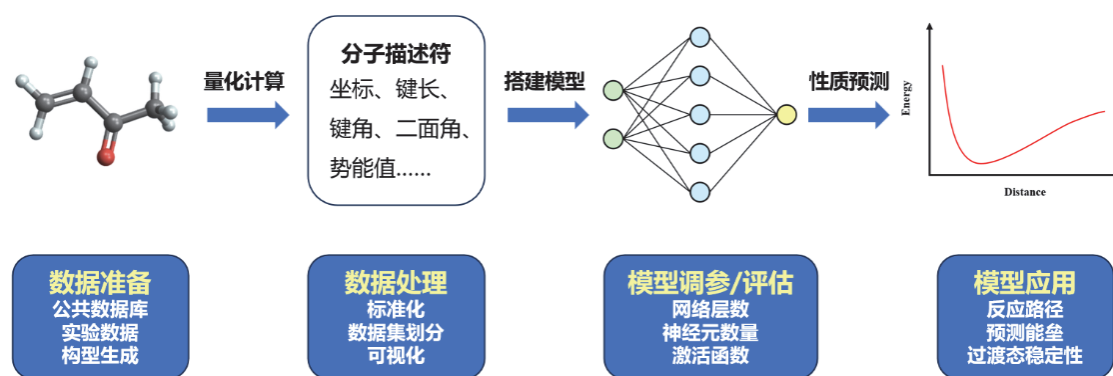


图2 基于神经网络的分子势能面构建流程

### 3.4 考核及评价方式

课程的平时成绩和期末考试成绩总和为100分, 其中平时成绩占比0–20%, 依据学生的作业完成情况和课堂表现确定。在进行教学改革(如混合式教学)时, 平时成绩比例可调整至20%–40%, 教师通过网络学习、课堂展示、线下作业的自评与互评以及线下单元测验综合评定。特别是通过组织学生进行小组讨论与展示, 评估学生的团队合作能力、沟通能力以及解决问题的能力。期末考试通常在学期末进行, 用于全面评估学生的学习成果, 其形式多样, 包括闭卷考试、开卷考试及项目报告等。其中, 选择项目报告的学生需完成一个与课程相关的项目, 并提交详细的项目报告, 内容包括项目背景、研究方法、结果分析及结论等, 以展示其实践能力和综合运用知识的水平。

设计一致的考核标准。为了确保学生在选择不同考核方式(如答卷考试与项目报告)时成绩的公平性, 课程在评分标准的制定上进行了详细设计。答卷考试侧重于评估学生对课程核心概念和理论知识的掌握程度, 而项目报告则注重学生的实践能力与创新思维。两种考核方式均设置统一的评分维度, 具体为: 知识掌握(40%)、分析能力(30%)、表达逻辑(20%)、创新性(10%)。此外, 为避免不同考核方式间可能产生的统计学差异, 课程组在试行阶段对历年学生成绩进行了数据分析。结果显示, 选择答卷考试与项目报告的学生最终成绩无显著差异( $P > 0.05$ )。这一结果表明, 课程在评分标准一致性设计上具有良好的可行性, 能够确保学生成绩的客观与公平。

### 3.5 课程建设运行的反馈情况

根据学生对课程的问卷反馈结果(如图3所示), 本课程在帮助他们理解AI在化学实际应用中的效果显著。大多数学生表示, 课程内容不仅有效提升了他们对机器学习和数据科学基础知识的理解, 还加深了对相关概念的掌握, 同时激发了他们对前沿领域的浓厚兴趣。课程设计注重理论与实践相

结合, 学生普遍表示, 通过课程掌握了实验设计、数据记录以及分子数据处理等关键技能, 尤其是运用Python编程处理化学数据的能力得到了显著提高。在课程内容的兴趣点上, 化学性质预测模型和分子指纹与分子相似性计算等主题广受学生关注, 体现了他们对前沿技术及其应用方向的浓厚兴趣。此外, 多数学生认为课程内容对未来的科研和职业发展具有积极作用, 尤其是在编程和软件应用能力的培养上。这些反馈充分说明了课程在教学内容设置和能力培养方面达到了预期目标。

此外学生的反馈也提出了一些改进建议。例如课程可以进一步强化高阶算法的实践环节, 特别是在分子模拟和深度学习相关内容的案例分析中, 增加更多具体应用的实践机会。此外, 部分学生建议课程引入更多跨学科的最新研究成果和实际应用案例, 以进一步激发学习兴趣, 同时拓宽视野, 帮助学生更好地理解 and 掌握前沿技术。

总体来看, 学生的反馈为课程的持续优化提供了宝贵依据, 这些意见和建议将成为未来课程改进的重要参考。通过不断完善教学设计, 提升教学内容的深度与广度, 本课程将更好地满足智能时代对化学人才培养的需求。

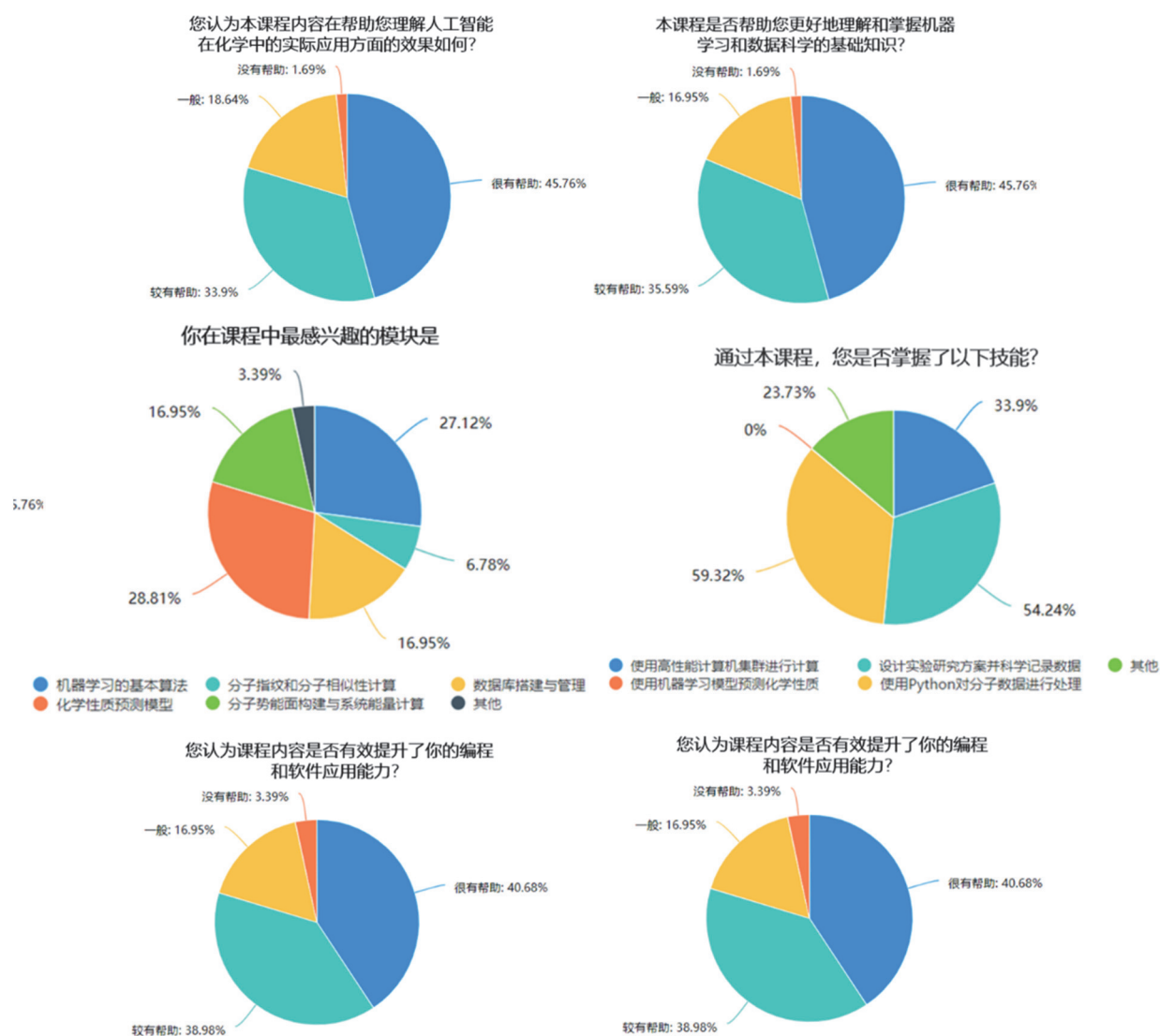


图3 课程的问卷调查结果统计

#### 4 初步教学效果、不足与改进计划

化学信息学与人工智能化学课程作为新兴的交叉学科，其教学效果体现在多个维度。一是，知识融合创新。课程将传统的化学知识与现代信息技术、人工智能技术相结合，为学生提供了全新的学习视角和思维方式。这种跨学科的知识融合不仅丰富了学生的知识体系，还激发了他们的创新思维和实践能力。二是，实践能力提升。通过引入实际案例和项目式教学，学生能够亲身参与到化学信息的处理、分析和模拟过程中，从而加深对理论知识的理解和应用。同时，课程中的实践活动也帮助学生提高了动手能力和解决实际问题的能力。三是，就业竞争力增强。随着化学信息学和人工智能技术的不断发展，相关领域的人才需求也在增加。通过学习该课程，学生能够掌握前沿的技术和知识，提高自己的就业竞争力，为未来的职业发展打下坚实的基础。

尽管如此，课程教学中仍存在一些不足之处。一是，教学内容更新滞后。由于化学信息学和人工智能技术发展迅速，部分教学内容可能无法及时跟上最新的技术进展，导致学生所学知识与实际应用之间存在一定差距。因此，我们需要持续关注行业动态，及时更新教学内容。二是，实践环节不足。虽然课程中已经引入了一定的实践环节，但相对于理论教学来说，实践环节的比重仍然偏小。这可能导致学生在实际操作和应用方面的能力相对较弱。因此，需要进一步加强实践环节的设计和实施。三是，师资力量有待加强。本课程涉及多个学科领域，对教师的专业素养和综合能力要求较高。目前该领域的师资力量尚显不足，高校需要通过加强师资培训和引进优秀青年人才来提升教学质量。四是，评价体系不完善。现有的评价体系主要侧重于理论知识的考核，而对学生的实践能力、创新能力和综合素质等方面的评价相对较少。这可能导致学生过于注重理论知识的学习，而忽视了实践能力和综合素质的提升。因此，需要进一步完善评价体系，注重对学生全面素质的考核。

增加实践内容的可行性。针对课程以理论授课为主的现状，未来课程规划将逐步引入课内实验，增加实践环节，提升学生的学习效果。例如，在“分子对接”模块中，设置小型实验任务，让学生实际操作分子对接软件(如AutoDock)进行药物靶点的对接模拟。此外，在“反应机理的AI预测”模块中，引入基于开源工具(如RDKit)的反应路径可视化实验，使学生能够直接体验人工智能工具在化学研究中的应用过程。通过引入课内实验，不仅能够帮助学生更好地理解理论知识，还能提升他们的实际操作能力和科研素养。同时，实验设计将注重趣味性与前沿性结合，确保学生在实验中获得知识与技能的双重提升。

未来，我们将通过增加实践环节、优化教学内容、完善评价体系以及提升师资力量，逐步解决当前存在的问题，进一步提高课程质量和学生的学习效果，从而更好地适应智能化时代对复合型人才的需求。

#### 5 结语

在科技飞速发展和我国高等教育数字化发展背景下，化学信息学与人工智能化学的课程建设显得尤为重要。随着大数据、云计算、人工智能等技术的不断进步，化学领域正经历着一场前所未有的变革。这些技术不仅极大地丰富了化学研究的手段和方法，也为化学教育带来了新的机遇和挑战。通过化学信息学与人工智能化学的课程建设，我们旨在培养学生掌握先进的信息技术和智能分析工具，提高他们处理复杂数据、解决实际问题的能力。同时，这些课程也致力于激发学生的创新思维，鼓励他们传统化学知识与现代技术相结合，探索未知的科学领域。

在未来，我们期待本课程能够继续发展和完善，为培养更多具有国际视野、创新能力和实践技能的化学人才做出更大的贡献。同时，我们也希望通过课程建设，能够推动天津大学化学学科的进一步发展，促进化学与信息技术、人工智能等领域的深度融合，共同开启化学研究的新篇章。总之，化学信息学与人工智能化学的课程建设是一个长期而艰巨的任务，需要我们不断地探索和努力，但只要我们坚持不懈，就一定能够培养出更多优秀的化学人才，为人类的科技进步和社会发展做出更大的贡献。

参 考 文 献

- [1] 李玲, 王国成. 大学化学, **2025**, *40* (6), 1.
- [2] 杜静, 于曦, 马骁飞, 赵温涛. 大学化学, **2024**, *39* (11), 65.
- [3] 张天龙, 张容玲, 汤宏胜, 李延, 李华. 大学化学, **2024**, *39* (8), 365.
- [4] 李平, 尹超. 大学化学, **2024**, *39* (10), 402.
- [5] 郑永和, 刘士玉, 王一岩. 中国远程教育, **2024**, *44* (6), 3.
- [6] 李志民. 中国教育信息化, **2024**, *30* (1), 71.
- [7] Rosen, A. S.; Iyer, S. M.; Ray, D.; Yao, Z.; Aspuru-Guzik, A.; Gagliardi, L.; Notestein, J. M.; Snurr, R. Q. *Matter* **2021**, *4*, 1578.
- [8] Gómez-Bombarelli, R.; Aguilera-Iparraguirre, J.; Hirzel, T. D.; Duvenaud, D.; Maclaurin, D.; Blood-Forsythe, M. A.; Chae, H. S.; Einzinger, M.; Ha, D.-G.; Wu, T.; *et al.* *Nat. Mater.* **2016**, *15*, 1120.
- [9] Cadeddu, A.; Wylie, E. K.; Jurezak, J.; Wampler-Doty, M.; Grzybowski, B. A. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 8108.
- [10] Segler, M. H. S.; Preuss, M.; Waller, M. P. *Nature* **2018**, *555*, 604.
- [11] Kayala, M. A.; Azencott, C.-A.; Chen, J. H.; Baldi, P. *J. Chem. Inf. Model.* **2011**, *51*, 2209.
- [12] Richter, M. F.; Drown, B. S.; Riley, A. P.; Garcia, A.; Shirai, T.; Svec, R. L.; Hergenrother, P. J. *Nature* **2017**, *545*, 299.