



表面络合物分子模拟实验教学设计

陈素霞^{1,2}, 张姿琪³, 赵志西^{3*}

(1. 新疆师范大学 教育科学学院, 乌鲁木齐 830017; 2. 新疆医科大学 马克思主义学院 乌鲁木齐 830000;
3. 新疆师范大学 化学化工学院, 乌鲁木齐 830017)

摘要: 针对化工过程模拟教学过程中存在的问题, 将二甲基胂酸表面络合物分子模拟引入到课堂教学中, 系统论述了分子模拟教学实施过程中的教学目标、教学内容、教学形式、课程思政、教学评价等环节, 助力化工过程模拟一流课程建设。通过对分子模拟教学实践的研究发现, 微观结构的具象化、可视化能够提高学生对分子结构的认知, 加深对化学反应机理的理解。分子模拟教学拓展了课堂教学内容, 培养了学生的探索性思维能力, 能有效提高学生化学素质, 体现了课程高阶性。分子模拟教学运用小组汇报和讨论教学模式, 使学生接触学科发展前沿, 具有较强创新性。分子模拟教学对学生学习能力和教师教学能力有较高要求, 充分体现课程挑战度。

关键词: 实验教学; 分子模拟; 表面络合物; 二甲基胂酸

中图分类号: G642

文献标志码: A

DOI: 10.12179/1672-4550.20230119

Experimental Teaching Design for Molecular Simulation of Surface Complex

CHEN Suxia^{1,2}, ZHANG Ziqi³, ZHAO Zhixi^{3*}

(1. College of Education, Xinjiang Normal University, Urumqi 830017, China;

2. College of Marxism, Xinjiang Medical University, Urumqi 830000, China;

3. College of Chemistry and Chemical Engineering, Xinjiang Normal University, Urumqi 830017, China)

Abstract: In response to the problems existing in the teaching process of chemical process simulation, the simulation of surface complex molecules of dimethylarsonic acid is introduced into classroom teaching. The teaching objectives, teaching content, teaching form, course ideology, and teaching evaluation in the implementation process of molecular simulation teaching are systematically discussed to assist in the construction of first-class courses in chemical process simulation. Through the study of molecular simulation teaching practice, it has been found that the concretization and visualization of microstructure can improve students' understanding of molecular structure and deepen their understanding of chemical reaction mechanisms. Molecular simulation teaching expands classroom teaching content, cultivates students' exploratory thinking ability, effectively improves their chemical quality, and reflects the advanced nature of the curriculum. Molecular simulation teaching utilizes group reporting and discussion teaching modes to expose students to the forefront of disciplinary development with strong innovation. Molecular simulation teaching has high requirements for students' learning ability and teachers' teaching ability, fully reflecting the challenge of the curriculum.

Key words: experimental teaching design; molecular simulation; surface complex; dimethylarsonic acid

量子力学是 20 世纪人类文明发展的一个重大飞跃。应用量子力学的规律和方法, 从量子化学这一视角研究各种化学现象的微观本质, 对于培养具有现代化学观念和技能的大学具有不可替代的意义。量子化学先后历经原始薛定谔方程、

基于波函数的 Hartree-Fock 方程、密度泛函理论 (density functional theory, DFT) (1998 年诺贝尔化学奖) 和 Kohn-Sham 方程的不断演进和完善, 为现代化学研究奠定了物质结构基础, 引发了一系列划时代的科学发现与技术发明。其中, 将量子化

收稿日期: 2023-03-08; 修回日期: 2024-05-05

基金项目: 新疆师范大学教改项目 (SDJG2020-23); 新疆维吾尔自治区社会科学基金项目 (2024BJYX153)。

作者简介: 陈素霞 (1984-), 女, 博士, 讲师, 主要从事大学生课程思政方面的研究。

* 通信作者: 赵志西 (1981-), 男, 博士, 教授, 主要从事化学教学理论方面的研究。E-mail: zhixizhao@xjnu.edu.cn

学计算应用于污染物在矿物表面的配位机制是其重要应用之一。通过量子化学计算,可以建立一些与表面配合物相似的分子团簇,计算出这些分子团簇的理论谱图,通过与实验谱图对比,获取结构信息^[1-5]。

使用密度泛函理论计算二甲基胂酸在氧化铁簇上的表面吸附,有助于对反应结合机制的理解。在中性、微碱性条件下二甲基胂酸带负电,在酸性条件下二甲基胂酸被质子化。但是,在两种条件下的二甲基胂酸双齿双核表面络合物吉布斯自由能均小于单齿单核表面络合物吉布斯自由能。因此,在中碱性和酸性条件下,二甲基胂酸双齿双核表面络合物均为优势构型。然而,有研究发现单齿络合物转化为双齿络合物需要较高的活化能垒,而外球络合物转化为单齿络合物的活化能垒较低。因此,单齿络合物不易向双齿络合物转化,这使得在实验中可观察到二甲基胂酸单齿单核构型为优势表面络合物^[6-10]。

化工过程模拟课程的开设仍然存在教学内容更新缓慢,不能呼应国家发展战略需求和人才培养需求的问题。将二甲基胂酸在铁氧化物晶面吸附过程的分子模拟教学引入课堂,对于提高学科发展前沿关注度,注重科研人才的培养,加强与其他课程的关联性起到重要的作用,极大改善化工过程模拟课程存在的问题^[11-15]。随着社会经济的快速发展,重金属污染问题尤为严重,土壤中铬(Cr)、镉(Cd)、铅(Pb)、铜(Cu)、锌(Zn)、砷(As)和汞(Hg)污染情况较为严重。本文以二甲基胂酸化合物为实验教学对象,有利于贯彻“绿水青山就是金山银山”指导思想,引起师生对生态环境保护的重视,推动构建美丽中国。

1 表面络合物分子模拟教学“两性一度”剖析

1.1 表面络合物分子模拟教学高阶性

表面络合物分子模拟教学高阶性体现在应用现代晶体结构知识、有机物结构知识与表面络合物分子模拟计算能力紧密结合。培养学生面对复杂污染物吸附体系微观机制的探索和研究能力,掌握由科学假设出发、经由严密论证获得科学结论的研究型高级思维模式,并在晶体结构和有机物结构基础上,分析和讨论晶体表面有机胂酸表面络合作用,锤炼严谨细致和勇于探索创新的思维。

在晶体结构知识教学中,往往存在学生由于知识掌握不全面或结构抽象导致理解不深入等问题,对晶体结构学习存在困难。因此,应用深入化、可视化的分子模拟教学对学生理解和思维能力的提升显得尤为重要。部分学生习惯性地就把晶体定义为“复杂、混乱”,实际上,晶体具有规则性、均匀性、周期性、对称性的特点,这也是其与非晶体在本质上的差别。目前,已知的铁氧化物有16种,这里以最常见的针铁矿、赤铁矿、水铁矿和磁铁矿为例对其晶体结构进行概括。铁氧化物由铁原子和氧原子紧密堆积而成,针铁矿、水铁矿和赤铁矿是 α 型六方紧密堆积,其中针铁矿属于斜方晶系,水铁矿和赤铁矿属于六方晶系,磁铁矿是 γ 型立方紧密堆积,属于等轴晶系。

在有机物结构知识教学中,把结构与性质相统一的思想作为教学的核心思想。在涉及有机化学的教学过程中发现学生通常对反应物、生成物、反应条件等组成要素并不理解,仅仅通过死记硬背的方式去记住。部分学生可以进一步延伸到官能团的性质上,但更进一步延伸到化学键和电子云密度就少之又少。以二甲基胂酸-铁氧化物双齿双核吸附构型为例,通过量子化学计算可以得到二甲基胂酸在铁氧化物表面所形成络合物的分子结构,如图1所示。根据DFT理论计算,As—O₁的键长为0.1683 nm, As—O₂的键长为0.1698 nm, Fe₁—O₂的键长为0.1965 nm, Fe₂—O₁的键长为0.2058 nm, O₁—As—O₂键角为113.3°, C₁—As—C₂键角为35.2°。通过计算结果可以推测,二甲基胂酸由于As上连有一个羟基,在与铁氧化物发生络合时由于电子云分布不均而形成的As—O键长存在0.0015 nm的微小差异。因此,发展和应用分子模拟到教学中,对提升学生认识结构和解决思维障碍起着积极作用。

1.2 表面络合物分子模拟教学创新性

创新性的“新”表现在表面络合物分子模拟教学能够充分体现科学研究前沿性和时代性。在表面络合作用研究和讨论中,使用DFT计算二甲基胂酸在铁氧化物上的吸附构型,在单齿络合物形成的情况下,由于铁氧化物的体积大,体系中甲基不易靠近As原子,导致电荷分布不均,有利于单齿络合物的形成。在双齿络合物形成的情况下,体系中形成两个As—O—Fe键,As与Fe的原子数目比为1:2,此时能够更好地保持As的氧

化状态, 从另一个角度说明了双齿络合物的稳定性。另有研究表明, 体系中形成热力学稳定的双齿络合物与二甲基胂酸分子结构密切相关。无机砷、苯基取代、甲基取代与铁氧化物形成的络合物分别存在双齿和单齿络合物共存、单齿络合物、双齿络合物等不同的优势构型。考察几何优

化后的键矩以及原子间距离发现, 外球络合物和单齿双核络合物因受色散的影响, As—Fe 的原子间距离在 0.04~0.1 nm 之间变化。经过色散校正后的 As—Fe 原子间距离为 0.33 nm, 同双齿双核构型的络合物测量值在 0.329~0.332 nm, 说明双齿双核构型为优势构型。

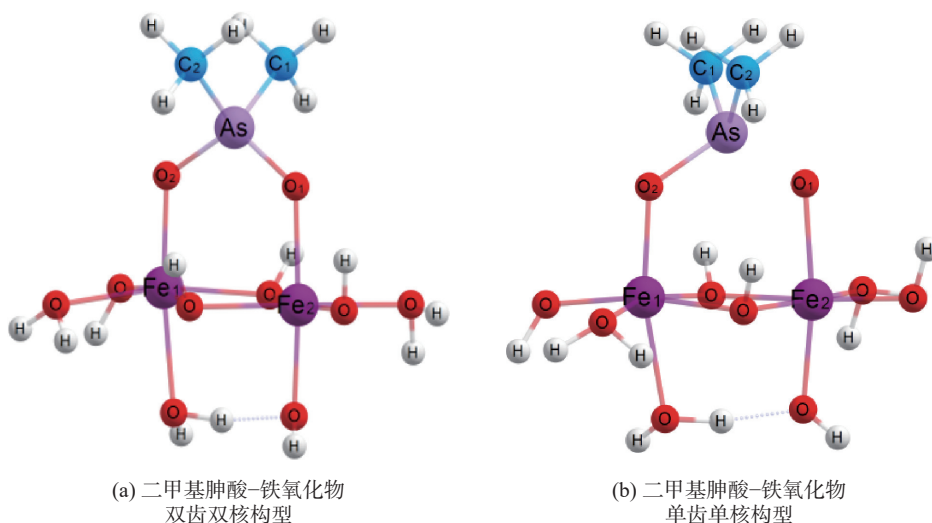


图 1 DFT 计算分子结构图

1.3 表面络合物分子模拟教学挑战度

有关微观层面探究这类课程, 其抽象性和逻辑性对学生来说难度较大, 学生的学习能力也参差有别, 极大地增加了实现课程高阶性目标的难度。分子模拟立足于先进的量子力学, Material Studio 是量子化学计算软件, 因其算法先进、操作方便、运算速度快, 在环境化学和材料化工等领域应用广泛。本文以 Material Studio 中 CASTEP 模块为载体, 通过 Chemcraft 软件实现 Material Studio 输入文件的可视化。使用 Material Studio 软件创建二甲基胂酸在铁氧化物表面的吸附模型, 对二甲基胂酸-铁氧化物表面络合物进行全优化。DFT 理论计算反应微观作用机制, 帮助学生以最小单元为基础深入理解反应机理, 在很大程度上提高学生学习的主动积极性和积极性。

传统教学中, 在有限的时间内, 教师对涉及难点的理论或构型难以深入分析和引导。在分子模拟的帮助下, 教师能够合理分配及优化教学时间和内容。以分子模拟二甲基胂酸在铁氧化物上形成的表面络合物为例, 教师可以通过分子模拟软件展示二甲基胂酸以及铁氧化物的结构, 发布课前预习和学生能独自完成的任务, 使学生对教学内容

有初步的认识。教师在课中和课后设计灵活的课程内容, 包括启发式教学、小组讨论探究等教学形式, 在形成轻松课堂氛围的同时考察和巩固学生学习效果。通过课程交叉融合, 一方面提高教学内容的高阶性和创新性; 另一方面以课程交叉融合为手段, 提高教学挑战度, 全面实施课程改革。

2 二甲基胂酸表面络合物分子模拟教学实施方案

2.1 明确教学目标

根据“核心素养”课程目标要求下的教学目标, 在设计二甲基胂酸表面络合物分子模拟教学目标时要围绕“知识技能、数学思考、问题解决、情感态度”这 4 个方面构建。

1) 知识技能

在教学过程中利用分子模拟技术能够使学生正确掌握二甲基胂酸与铁氧化物的分子和晶体结构及探究二甲基胂酸在铁氧化物上的吸附构型。

2) 数学思考

微观层面的变化具有抽象性和逻辑性, 因此, 在教学过程中注重培养学生数学建模能力, 利用分子模拟软件正确构建分子结构, 激发学生

创新实践能力。

3) 问题解决

将所学的知识运用于实践,在发挥知识作用的同时发展能力。如分子模拟的二甲基砷酸在铁氧化物上的表面结构在实际解决有机砷污染研究中的作用。

4) 情感态度

感受化学微观世界的趣味性,发展探索性思维,帮助培养学生自主学习、合作探究学习、创新学习的能力。

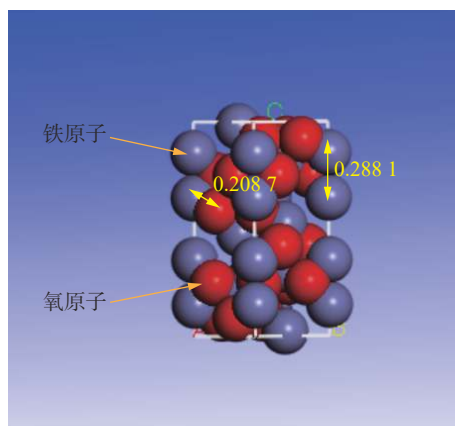
2.2 凝练教学内容

首先,构建并优化铁氧化物晶胞。铁氧化物以选取 Fe_2O_3 为例。点击根目录创建一个新的文件夹并重命名为 Fe_2O_3 (铁氧化物)。右击新建的文件夹,选择 Import,在弹出的对话框里,依次定位到 Structures(结构)、Metals(金属)、Metals-oxides(金属氧化物)、 Fe_2O_3 .mis(铁氧化物晶体),点击打开,将数据库中的 Fe_2O_3 晶胞结构导入操作页面上。由于导入的 Fe_2O_3 晶胞结构不够精确,所以需对导入的晶胞结构进行结构优化,点击 CASTEP 的下拉扩展按钮,选择 Calculation(计算),在弹出的对话框中,将 Task(任务)从 Energy(能量)调整为 Genometry Optimization(结构优化),Quality 从默认 Medium 调整为 Fine,点击 Run 按钮,对晶胞结构进行结构优化。优化前 Fe—O 键长为 0.208 7 nm,Fe—Fe 键长为 0.2881 nm;优化后 Fe—O 键长为 0.202 9 nm,Fe—Fe 键长为 0.250 1 nm,如图 2 所示。

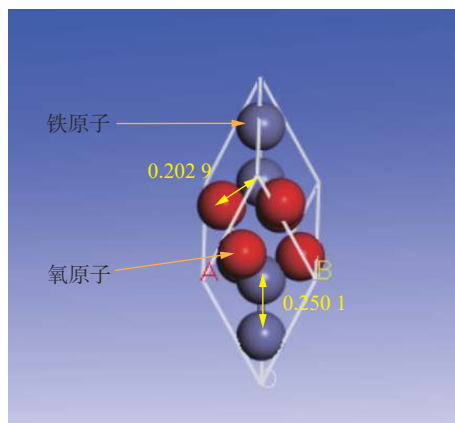
其次,构建并优化二甲基砷酸分子。点击根目录创建一个新的文件夹并重命名为 $\text{C}_2\text{H}_7\text{AsO}_2$ (二甲基砷酸)。CASTEP 只能对周期性体系进行计算,所以首先要把分子放到晶格中添加周期性后,再对分子进行结构优化。从菜单栏中依次选择 Build(创建)、Crystals(晶体)、Build Crystals(创建晶体),在新的对话框里,选择 Lattice Parameters(晶格参数)选项卡,将晶胞的长宽高值均设为 8,点击 Build 按钮,创建一个边长为 8 的正方体晶格。利用菜单栏的画图工具在新的 3D 页面绘制出一个 $\text{C}_2\text{H}_7\text{AsO}_2$ 分子,绘制完成后选中 $\text{C}_2\text{H}_7\text{AsO}_2$ 分子,点击菜单栏中的 CLEAN 按钮,对创建分子的结构进行初步的优化。

接着选中初步优化后的 $\text{C}_2\text{H}_7\text{AsO}_2$ 分子将其复制粘贴到创建好的晶格中。点击 CASTEP 的下拉

扩展按钮,选择 Calculation(计算),在新弹出的对话框中,将 Task(任务)从 Energy(能量)调整为 Genometry Optimization(结构优化),点击 Run 按钮,对分子结构进行结构优化。得到 As—C 键长为 0.198 0 nm,As—O 键长 0.195 0 nm,As=O 键长为 0.194 9 nm,如图 3 所示。



(a) 铁氧化物优化前结构



(b) 铁氧化物优化后结构

图2 铁氧化物结构(单位: nm)

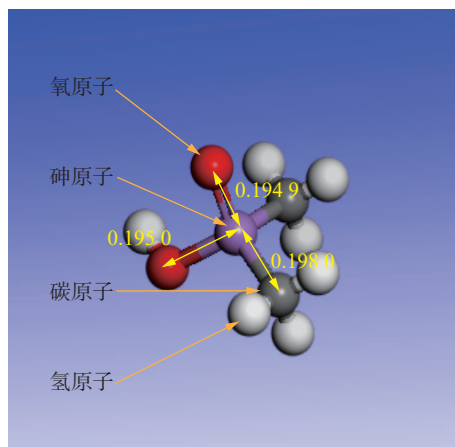


图3 优化后 $\text{C}_2\text{H}_7\text{AsO}_2$ (二甲基砷酸)模型结构(单位: nm)

最后, 构建二甲基胂酸在铁氧化物表面的吸附模型。点击根目录创建一个新的文件夹并重命名为“ $C_2H_7AsO_2$ on Fe_2O_3 ”。将结构优化好的 Fe_2O_3 表面结构文档复制粘贴到新建的文件夹下, 把优化好的 $C_2H_7AsO_2$ 分子吸附到优化好 Fe_2O_3 表面。最后需要对新建立的吸附体系进行结构优化, 点击 CASTEP 的下拉扩展按钮, 选择 Calculation(计算), 在新的对话框中, 将 Task(任务)从 Energy(能量)调整为 Genometry optimization(结构优化), 点击 Run 按钮, 计算完成保存后, 关闭对话框。得到优化后的 $C_2H_7AsO_2$ 在 Fe_2O_3 表面的吸附模型。根据键长数据观察比较得到, 吸附后的 $Fe-O_1$ 键距离为 0.1965 nm; $As-O_1$ 键距离由吸附前 0.1949 nm, 变为吸附后的 0.1683 nm, $As-O_2$ 键距离在吸附前后均为 0.1950 nm, 如图 4 所示。

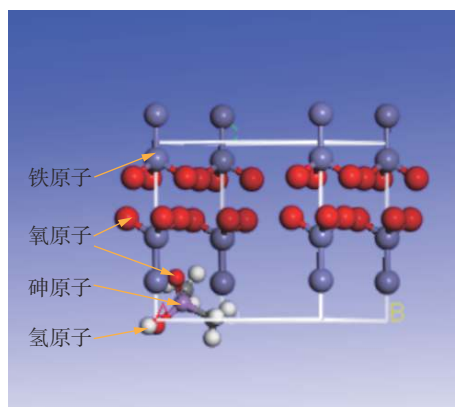
2.3 创新教学形式

教学过程中充分利用小组汇报作为主要教学形式, 此种教学形式在有效促进学生分析、创造、思辨等能力的同时, 培养了学生团结协作、严谨自信的优秀品质, 进一步融合课程思政要素。

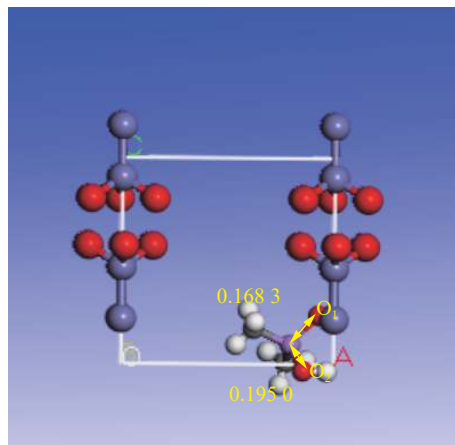
二甲基胂酸在铁氧化物上表面络合物的分子模拟课程结束后, 学生 3~4 人为一个小组, 分组完成一个课程项目。利用分子模拟对铁氧化物结构的探究, 或对利用分子模拟开展研究的相关文献进行汇报总结。每个小组在开展本组课题研究前, 构思设计好大纲, 并与老师讨论所选课题的合理性与科学性后, 可正式开展研究。在课题设想提出后, 学生查阅文献并进行总结, 写出开题报告, 定期与教师汇报交流研究进展, 如果在研究过程中遇到难以解决的问题及时与小组成员和教师进行探讨, 寻找解决方案。最后每个小组需提交课程论文一篇, 同时把研究的课题内容做成 PPT, 小组每个成员对负责的部分进行课题汇报, 每组汇报时间为 8~10 min。

2.4 融合课程思政

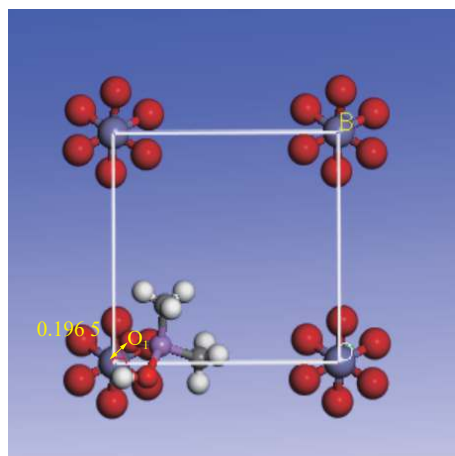
以“立德树人”为根本目标, 在教学设计时深入挖掘分子模拟课程中所蕴含的思想教育价值。通过课程设计, 加强学生分享合作的能力, 增强学生信心和文化自信, 提高学生批判能力, 注重培养学生的探究能力, 培育坚强严谨的性格和服务社会的专业情怀。



(a) 优化后 $C_2H_7AsO_2$ (二甲基胂酸) 在 Fe_2O_3 表面上吸附结构



(b) 吸附模型的侧视图



(c) 吸附模型的俯视图

图 4 $C_2H_7AsO_2$ (二甲基胂酸) 在 Fe_2O_3 表面上吸附结构(单位: nm)

1) 在分子模拟教学中融入分享合作教育
合作与分享学习会使学生对学习有浓厚兴趣, 明确自己是学习的主人, 在合作中学会与他人分享成功、体验收获、获得进步。对于像分子模拟这类使用难度较高的软件, 学生在学习使用

软件完成教师发布的任务时, 由于存在知识面有限, 探索应用能力发展不够完全等问题, 因此, 在学习过程中与他人交流思路, 分享心得, 会有效帮助学生完善并明确解决分子模拟难点的思路。学生之间的分享合作学习, 一方面能够激励学生对分子模拟的探索; 另一方面推动了学生善于发现问题、提出问题, 能在合作中创造性解决问题的能力。

2) 在分子模拟教学中融入文化自信教育

当今中国, 正处在国内国外各种思潮碰撞的重要时期, 在接受国外优秀文化的同时对本民族优秀文化的学习和传承同样重要。早在 20 世纪 50 年代, 我国著名科学家唐敖庆先生开创了我国理论化学的先河, 被称为“中国量子化学之父”。唐敖庆先生带领一众科学家对前沿的量子化学领域展开了研究, 先后完善建立了配位场理论、分子轨道图形理论、高分子反应统计理论、原子簇化合物结构规则, 为量子化学研究奠定了基础。通过课堂教学引入老一辈科学家的故事使青年学生从他们身上汲取中国力量, 这种力量不论是在学习还是生活中都将焕发生机与活力。

3) 在分子模拟教学中融入批判思维教育

高等教育机构必须教育学生, 使他们能够批判地思考和分析问题。分子模拟在计算过程中存在需要学生具有辩证看待理论与实际问题的能力。如模拟过程中, 一些参数需要手动进行输入, 课程教材中虽然对这些参数给出了具体数值, 而在实际模拟情况下, 所用参数的数值往往与教材中的参数有出入, 这就需要学生在不断地实践过程中引发自身的思考并发现解决问题的最优解, 而不是盲目跟随教材内容。大多数学生在学习过程中, 几乎很难自发进行批判的思考, 因此, 这就需要教师在教学过程中适度的引导。

4) 在分子模拟教学中融入坚强严谨教育

困难是人生中的常客, 当对新事物进行学习探索时, 困难就会出现。分子模拟的学习也是如此, Material Studio 是一个具有很多程序模块的理论计算软件, 以本文使用的 CASTEP 程序模块为例, 在对二甲基胍酸及铁氧化物结构进行优化时, 有的学生为得到优化的分子模型, 反复调整计算精度、晶格优化等需要设定的参数, 在完成学习目标的同时磨炼了坚韧不拔、严谨细致的性格, 培养了做事有始有终、坚持到底的良好习惯。

2.5 优化教学评价和实施效果

在教学过程中优化教学评价, 依据评价体系中多元评价主体的理念, 根据学生、同行教师在教学活动中各自的角色和优势, 借助观察法、访谈法和问卷调研对教学进行评价。通过实施课前评教问卷发放、课后访谈座谈、定期公开课集体观摩等方法, 促进教与学的信息反馈, 帮助教师把握课程结构, 进行教学优化。

针对学校参加化工过程模拟课程学习的 60 名大学三年级学生及 8 名同行教师发放了 5 轮课前评教问卷, 再进行数据清理, 消除异常值、缺失值等对结果有不利影响的信息, 确保样本的代表性和调查的稳定性。根据反馈, 分子模拟对化工过程模拟课程“两性一度”提升较明显, 如表 1 所示。问卷结果显示, 在提升化工过程模拟课程“两性一度”关键指标方面, 学生及同行教师认为提升很明显的比例均超过 75%, 最高达到 80.3%。绝大部分学生及同行教师均认为将二甲基胍酸表面络合物分子模拟融入化工过程模拟课程教学, 能够显著提高教学效果, 促进课程面向创新前沿, 开阔学生视野, 促进学生对先进技术工具的掌握和运用。

表 1 分子模拟教学评价及实施效果

评价类别	教学实施效果	选择占比/%			
		很明显	比较明显	一般	没有
高阶性	对课程高阶性提升效果如何	77.8	19.7	2.5	0
创新性	对课程创新性提升效果如何	80.3	16.0	3.7	0
调整度	对课程挑战度提升效果如何	75.1	19.7	6.2	0

通过分子模拟教学, 学生空间想象能力、逻辑性、分子结构建模能力有大幅提高, 学生对课程知识基本了然于心。在负向反馈方面, 部分学生认为课堂教学需要进一步提高简洁性与紧凑

性, 及时了解学生对知识的掌握程度, 针对出现的不同问题进一步思考和设计解决方案, 提高学生学习效果。经过不断的教学评价和反思, 帮助教师灵活调整教学策略, 充分整合利用教学素材

和教学资源,对课程设计和教学方法进行深入思考,营造良好的课堂氛围。

3 结束语

本文利用 Material Studio 软件中 CASTEP 模块对二甲基胍酸在铁氧化物上形成表面络合物的结构开展研究教学。分子模拟课程作为一种具有创新性的课程,其知识的前沿性与时代性培养学生更高层次的探索思维,在普通课程的基础上对学生的思维与能力进行拔高。由于分子模拟综合多门学科内容,因此,在学习时存在一定难度,需要学生“跳一跳”才能够到。在教学过程中建立以“知识技能、数学思考、问题解决、情感态度”为基础的教学目标,以实践与理论结合的形式深化学生对模型构建并优化的过程理解,通过小组汇报的形式巩固知识内化,提升学生合作探究能力。课程构建充分考虑了思政要素,从分享合作、文化自信、批判思维、坚强严谨 4 个模块培养学生的好习惯和学习能力。课后反馈过程中,充分发挥了学生与同行教师的评价作用,及时发现教学中存在的不足,有效达到教师“教”与学生“学”的有机统一。

参考文献

- [1] 孟素慈,陈敏,谢吉民.量子化学计算软件在大学化学教学中的应用[J].*教育教学论坛*,2016(50):176-179.
- [2] 张春春,付海燕,王晓燕.现代测试技术及分子模拟在假紫罗兰酮合成教学改革中的探索[J].*实验科学与技术*,2021,19(3):88-92.
- [3] 陈广慧,杜信明,林旺强,等.针对原子轨道对称性匹配原则的分层次教学研究[J].*大学化学*,2022,37(11):83-91.
- [4] 陈国博,李苓,高先池.DFT 导向的物理化学综合性实验教学探索[J].*实验技术与管理*,2021,38(4):231-234.
- [5] 尚成新,郝俊生,王松柏.新工科背景下高分子化学实验教学模式的探索与实践[J].*应用化学*,2024,41(3):452-458.
- [6] 李天宇,柴肇云,杨泽前,等.高岭石表面水化机理及电场弱化其吸附性能的分子模拟[J].*材料导报*,2024,38(1):119-125.
- [7] 刘子龙,王宁,石迪,等.基于分子模拟的表面活性剂吸附行为实验设计[J].*实验技术与管理*,2022,39(10):172-177.
- [8] 李晓艳,张怀玉,孟令鹏,等.计算化学实验线上线下混合教学模式的探究与实践[J].*大学化学*,2022,37(12):68-74.
- [9] 张恒,宋其圣,贾春江,等.分子及团簇的分子动力学模拟:介绍一个计算化学实验[J].*大学化学*,2023,38(5):172-180.
- [10] 陈文轩,李茜,王珍,等.中国农田土壤重金属空间分布特征及污染评价[J].*环境科学*,2020,41(6):2822-2833.
- [11] 宋先雨,武卫荣,梁克中,等.多尺度分子模拟技术在化工课程中的应用[J].*山东化工*,2021,50(23):198-199.
- [12] 张芹,岳大光,刘文杰,等.“两性一度”框架下的实践课程混合式教学改革研究[J].*实验科学与技术*,2022,20(4):42-46.
- [13] 荀振芳,王银梅.核心素养导向下大学课程目标三维建构探析[J].*教育科学探索*,2022,40(5):19-27.
- [14] 樊佳,郑冬超,阎臻,等.教育信息化背景下的生物化学实验改革探索[J].*实验科学与技术*,2023,21(4):86-90.
- [15] HOU Y Q, WANG M, HE W, et al. Virtual simulation experiments: A teaching option for complex and hazardous chemistry experiments[J]. *Journal of Chemical Education*, 2023, 100(4): 1437-1445.

编辑 钟晓