

高中有机化学教学中 Material Studio 软件实践

于海超 贾紫舒 薛静漪 特日格勒 赛罕娜 宋亚娇*

内蒙古民族大学 化学与材料学院

DOI:10.32629/mef.v9i6.20971

[摘要] 高中有机化学是高中化学学习的重要部分,也是学生深入理解化学学科本质的必要基础。然而,在实际教学中,由于有机分子的立体结构特征以及化学反应机理等知识点要求学生具有较强的空间立体想象能力和逻辑推理能力,这导致部分学生在学习过程中感到抽象费解,学习兴趣不足。将Material Studio(MS)软件引入高中有机化学教学,能够将难以直观感知的有机分子立体结构进行可视化呈现,使原本抽象的有机反应机理变得清晰可见。因此,MS软件的应用有助于深化学生对有机化学知识板块的理解,激发学习热情与主动性,同时也能显著提升教师的教学便利性与教学效果。

[关键词] Material Studio软件; 高中有机化学; 立体结构; 可视化教学

中图分类号: G4 **文献标识码:** A

Practice of Material Studio Software in High School Organic Chemistry Teaching

Haichao Yu Zishu Jia Jingyi Xue Terigele Hanna Sai Yajiao Song*

College of Chemistry and Materials Science, Inner Mongolia Minzu University

[Abstract] High school organic chemistry is a crucial component of high school chemistry education and serves as an essential foundation for students to deeply understand the nature of chemistry as a discipline. However, in actual teaching practice, topics such as the three-dimensional structural characteristics of organic molecules and the mechanisms of chemical reactions require students to possess strong spatial imagination and logical reasoning abilities. This often leads to some students finding the learning process abstract and difficult, resulting in a lack of interest. Introducing Material Studio (MS) software into high school organic chemistry teaching enables the visualization of organic molecular structures that are otherwise difficult to perceive intuitively, making originally abstract organic reaction mechanisms clear and observable. Therefore, the application of MS software helps deepen students' understanding of organic chemistry concepts, stimulates their enthusiasm and initiative in learning, and significantly enhances teaching convenience and effectiveness for instructors.

[Key words] Material Studio software; high school organic chemistry; three-dimensional structure; visualized teaching

引言

在新课标指引下,高中化学愈发重视学生微观探索和模型认知核心素质的培养。本文结合高中有机化学课堂实际,以烷烃、溴乙烷相关内容为例,探究MS软件在教学中的具体应用方式与实践效果,为有机化学可视化教学提供参考。

1 MS软件简介

Materials Studio(简称MS)是由美国Accelrys公司开发的一款集建模、模拟、计算和分析等功能于一体的综合型软件,被誉为化学和材料科学领域的“万能工具箱”^[1]。MS软件用途十分广泛,可用于有机化学反应中的活化能,药物分子在体内的代谢动力学的相关机理,甚至是探索超分子化学中那些主-客体相互作用等问题。MS涵盖多种功能模块,主要分为五大类别,

其中,Visualizer是基本环境,主要用于构建有机分子模型,还能通过动画形式直观地展示模型优化过程中的微观变化,让使用者能“看见”分子的变化^[2,3]。Dmol3模块基于量子力学原理的密度泛函理论(DFT),能够模拟气相、溶液、表面及固体等体系过程与性质的商业化量子力学程序,可应用于研究催化反应、分子反应,预测溶解热等理化性质,还能计算相应体系的能带结构、态密度等电子特性。此外,Discover、Compass、Equilibria及Sorption等模块主要应用于分子力学与分子动力学,而CASTEP及VAMP等则主要应用于量子力学的相关计算^[4]。目前,MS已在多个行业得到广泛应用,部分高校甚至开设了相关的计算机材料软件研究课程,为本领域的教学与科研提供了有力支撑。

MS软件界面具有简洁明了,操作简单等优点,使用者能够较为方便地选用所需科研工具。在高中化学有机化学方向的教学实践中,必修第二册涉及的有机化学知识相对基础,主要包含简单有机物与生活常见有机物,教学目标侧重于学生的认知与了解层面。而在《选择性必修3 有机化学基础》中,课程要求显著提升,学生需深入理解有机反应的过程与机理,掌握分子结构等知识,并具备较强的空间想象能力。MS软件所具备的分子结构可视化功能,能够将抽象的有机反应过程、三维分子构型及反应中间态等直观呈现,从而有效辅助学生建立结构与机理之间的内在联系。因此,MS在高中有机化学教学中的引入,具有显著的教学辅助价值。

2 高中有机化学教学现状

在当前高中化学有机化学方向的教学过程中,教材内容以文字描述为主,辅助搭配简单的图示,缺乏更为直观、生动的呈现方式。虽然这种方式一定程度上也能达到传达知识的目的,但同时对学生的立体空间想象能力和抽象想象能力提出了较高要求,然而,绝大多数同学都很难达到这一能力要求,即使部分学生表面上掌握了相关知识,往往也只停留在浅层理解,未能真正把握有机化学的核心内涵,知识的灵活运用能力明显不足。

上述教学现状给教师教学和学生带来了双重困境。对于老师而言,在授课过程中既要兼顾教材知识点,又要尽力将抽象概念讲解清楚,往往耗费大量精力却达不到理想的教学效果。对学生而言,面对复杂的有机分子结构与反应机理,只能依靠机械记忆,学习内容繁杂且容易混淆,学习负担加重,兴趣与信心逐渐下降。此外,大多数学校受资金、场地、设备等条件的限制,难以开展真正地落实到每一个学生的有机化学实验。学生不能通过亲手操作实验,观察反应现象、验证理论知识,只能依靠课本上的文字和图片进行想象,这进一步加剧了理解难度。

《选择性必修3 有机化学基础》的教学内容中,涉及大量的有机反应机理和复杂的分子结构问题,内容本身十分抽象,难以直接观察,仅依靠教师的讲解和学生的想象,难以实现真正地掌握,师生双方均陷入“教难学亦难”的困境。因此,为了有效缓解这一教学困境,将抽象的有机结构进行可视化呈现,把课本上枯燥难懂的反应机理转化为动态化过程,让学生能够直观地看到有机分子构型、化学键的断裂与形成过程,具有重要意义。综上所述,在高中化学有机化学方向引入MS软件作为辅助教学工具,具有现实的必要性与可行性。

3 MS软件在高中有机化学中的应用

3.1 烷烃与MS结合教学案例

有机化学教学大纲要求学生能够准确区分和画出有机化合物的不同构型、构象和立体异构,例如:丁烷的交叉式与重叠式、环己烷的椅式与船式、费歇尔投影式以及纽曼投影式等^[5]。因此,结合MS软件的优点,本文首先以有机化学烃类结构这一知识点为例,通过教师演示,学生实操的方式,将MS软件应用于烃类有机分子结构的教学过程中。

首先,在教学实施开始之前,教师需使用MS软件进行建模,

建模过程如图1所示:首先,点击1处的new按钮,生成新的三维原子模型文档;第二步,点击铅笔状图标,绘制甲烷结构中的碳原子,最后,点击H图标,绘制甲烷结构中氢原子。通过以上步骤,可以较快地建立甲烷的立体结构。此外,教师在建模过程中通过选择Distance或Angle选项标注有机分子的键长和键角。

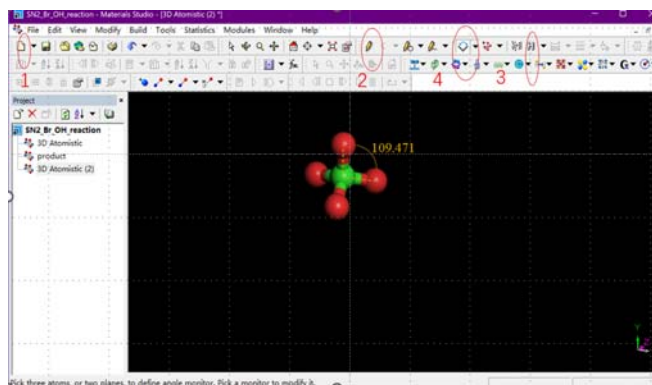


图1 甲烷的建模

课堂教学实施过程如下:

本课为实验课,首先由教师带领学生对于甲烷的相关知识要点进行回顾,对于甲烷的空间构型,键角等相关知识进行梳理,帮助学生们巩固旧知识,为新课的学习搭建知识桥梁,在教师的指引下,学生意识到甲烷的空间构型的绘制在平面上无法绘制从而引出了MS软件的绘制及使用,这也让学生们产生好奇和探索欲。其次,基于上述铺垫,教师对MS软件进行简介,操作介绍,指导学生进行甲烷分子的绘制,学生在分组进行甲烷绘制之后,拖拽模型,进一步加深对于甲烷分子的微观认识和相关知识点的理解。在学生对于MS软件操作熟悉的情况下,老师进一步指导学生绘制乙烷,溴乙烷等物质,实现知识的迁移,为后续学习打下基础。最后,在教师指导下,教师和学生对本节课的知识进行整理和回顾。

3.2 卤代烃取代反应与MS结合教学案例

溴乙烷的取代反应是理解卤代烃化学性质、学习取代反应机理的典型示例,在卤代烃反应的学习中具有重要作用。然而,溴乙烷的取代反应过程抽象、反应机理难以理解,大部分学生只能机械记忆,对氢氧根如何进攻、溴原子如何离去、分子结构如何发生变化等关键过程理解模糊,使得溴乙烷取代反应这一知识点成为高中有机化学教学过程中的难点之一。因此,本文通过MS的软件模拟溴乙烷取代反应过程,直观展示反应过程中氯代烃结构的变化,将抽象的取代反应可视化,以促进理解反应本质。

教师在教学实施开始之前完成溴乙烷和氢氧根的建模,以及溴乙烷取代反应的模拟:如图2所示,教师首先建立三维原子模型文档,并命名为product。随后依次绘制溴乙烷结构中的碳原子、氢原子和溴原子,另外单独绘制氢氧根离子。另外,绘制过程中应严格遵循SN2反应的立体化学规律,即氢氧根离子从溴原子的背面(与溴原子相对的方向)进攻溴乙烷的 β -碳。此外再

新建reactant新演示图层,以同样的操作绘制反应结束后的乙醇分子和溴离子。最后,进行原子配对与轨迹生成:首先点击Windows,后选择Tile Vertically;点击Tools,后选择Reaction Preview,在Reactant下拉框选择reactant.xsd,在Product下拉框选择 product.xsd。之后,点击Match按钮,打开Find Equivalent Atoms对话框。根据反应机理,进行原子配对。匹配成功后,关闭Find Equivalent Atoms对话框,返回Reaction Preview,点击 Preview按钮,随后会生成一个名为reactant-product.xtd的轨迹文件,这就是反应过程的初始动画(如图3所示)。

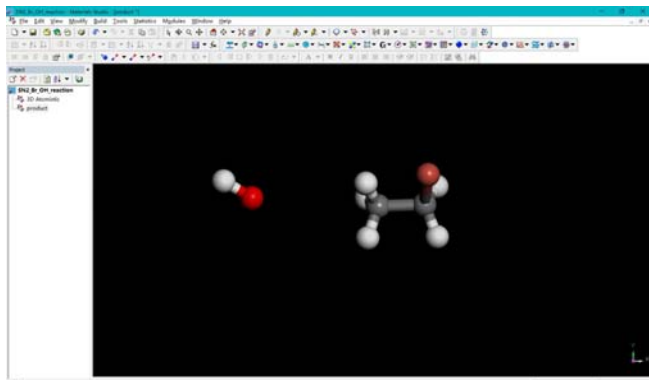


图2 溴乙烷和氢氧根的建模

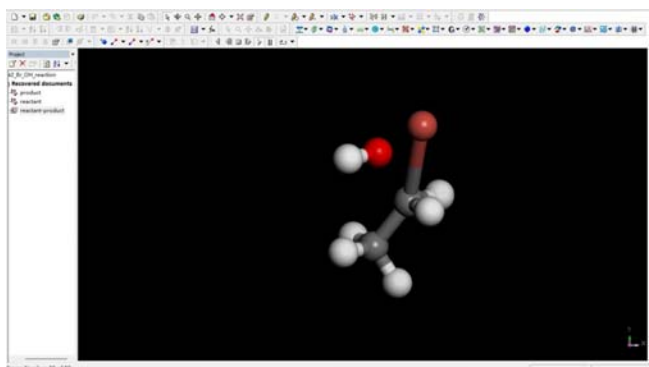


图3 溴乙烷取代反应过程示意图

课堂教学实施过程如下:

本课为新授课,教师首先通过PPT展示,向学生列举生活中常见的卤代烃物质,激发学生的学习兴趣。在教师对于卤代烃的

结构,性质讲解之后,对于书中溴乙烷水解反应的实验的微观原理进行共同探讨。教师通过MS软件对该反应进行模拟,并指导学生分组进行上机操作,通过学生的动手操作,使学生更直观地理解溴乙烷水解反应的微观机理。最后,教师带领学生将本节课知识点进行总结,回顾,强化学生对知识点的记忆和理解。

4 结论

通过烷烃、烯烃、炔烃结构教学与溴乙烷 S_N2 取代反应机理教学两个案例可以看出,MS软件能将抽象有机结构具象化、静态有机反应过程动态化。学生在建模、观察、模拟与操作等过程中,自主建构知识认知,既能提升空间想象能力与化学学科素养,又能更好地应对结构推断、机理分析等高频高考考点。未来在高中课堂的教学过程中,将化学模拟软件与教学相结合,既推动高中学生的化学素养的培养,又为信息化教学改革提供了思路。后续将进一步进行优化课程实施方案,完善操作步骤,为学生有机化学的学习提供强大的数字化支撑。

[基金项目]

内蒙古民族大学教育教学研究课题(YB2025016)。

[参考文献]

- [1]陈迪明,王晓杰.Material Studio软件在大学有机化学可视化教学中的应用[J].河南化工,2020,37(03):56-58.
- [2]王群,王雪倩,孙玉希,等.Materials Studio应用于有机化学教学中培养探索性思维[J].化学教育(中英文),2020,41(04):92-98.
- [3]王群,宋小东,林小龙,等.计算模拟软件在“有机化学”教学中探索性能力的培养[J].绵阳师范学院学报,2020,39(08):64-69.
- [4]李佳萱.Materials-Studio软件与高分子材料的结合应用[J].冶金与材料,2021,41(03):62-63.
- [5]郑倩,潘睿,向卉,等.MS分子模拟软件在有机化学立体异构教学中的应用[J].广州化工,2020,48(4):108-110.

*通讯作者:

宋亚娇(1987--),女,汉族,内蒙古牙克石市人,讲师,博士,研究方向:化学教学论。