

应用型药学人才培养下人工智能融入药物化学课程实践

周海山

安徽新华学院药学院

DOI:10.32629/mef.v9i7.21397

[摘要] 应用型药学人才培养强调将知识转化为实验操作、岗位判断和研发能力。药物化学兼具结构理论、合成方法与成药性分析,传统教学中仍有结构规律理解不深、方案照搬和数据处理薄弱等问题。人工智能可用于化合物检索、路线分析、分子对接、性质预测和学习评价。文章结合课程内容与岗位任务,分析现实难点,提出课程重构、虚拟仿真、分子模拟、项目实践、校企协同和多元评价路径。

[关键词] 应用型药学人才; 人工智能; 药物化学; 实践教学; 药物设计

中图分类号: TP18 **文献标识码:** A

Integrating Artificial Intelligence into Drug Chemistry Instruction to Cultivate Applied Pharmacy Professionals

Haishan Zhou

School of Pharmacy, Anhui Xinhua University

[Abstract] The cultivation of applied pharmacy professionals emphasizes the translation of theoretical knowledge into laboratory competencies, clinical and industrial decision-making acumen, and independent research and development capabilities. Drug chemistry—encompassing molecular structure theory, synthetic methodology, and structure-activity relationship analysis—remains constrained by conventional pedagogical approaches, which often result in superficial comprehension of structural motifs, rote replication of experimental protocols, and inadequate training in data interpretation and computational reasoning. Artificial intelligence (AI) offers transformative potential in compound database mining, retrosynthetic pathway planning, molecular docking simulation, physicochemical and ADMET property prediction, and formative learning assessment. This paper proposes a pedagogical framework that aligns course objectives with industry-relevant competencies, identifies key implementation challenges in practice-oriented instruction, and recommends evidence-informed innovations—including curriculum reconfiguration, AI-enhanced virtual laboratories, interactive molecular modeling exercises, authentic project-based learning, structured school-enterprise partnerships, and multimodal assessment strategies.

[Key words] applied pharmacy education; artificial intelligence; drug chemistry; experiential learning; computer-aided drug design

引言

药物化学是连接基础化学、药理学和药物研发实践的重要课程。应用型人才不仅要识记药物母核、构效关系与合成反应,还应能够读懂化合物数据、比较候选结构、判断路线可行性并规范表达研发结论。人工智能工具的进入,为课堂提供了快速检索、计算模拟和即时反馈条件,但工具使用若脱离课程目标,也容易演变为答案复制^[1]。因而,需要围绕真实任务重新设计教学流程,使技术应用服务于药学能力形成。

1 应用型药学人才培养下人工智能融入药物化学课程的现实基础

应用型药学人才培养面向药物研发辅助、生产技术、质量分析、注册支持和医药服务等岗位,课程目标应从掌握知识点延伸到完成具体任务^[2]。药物化学涉及化学结构、理化性质、靶点作用、代谢稳定性、合成路线和安全风险,以非甾体抗炎药教学为例,学生既要比较阿司匹林、布洛芬和塞来昔布的结构差异,也要解释酸性基团、疏水区域及选择性对药效和不良反应的影响。教师可将PubChem、ChEMBL等公开数据库中的基础信息整理为教学数据,使用结构检索、相似性分析和ADMET预测工具形成连续任务,让学生经历提出假设、获取数据、验证判断和修正方案的过程。人工智能融入课程并非另设一门计算机课程,而是把

工具嵌入药物命名、构效分析、合成设计、性质评价和实验复盘,使学生在有限课时内接触更接近岗位的工作方式^[3]。

2 应用型药学人才培养下人工智能融入药物化学课程实践面临的问题

2.1 课程内容与人工智能技术衔接不足

部分课程仍按药物类别依次讲授发现过程、结构、性质、合成和用途,人工智能内容只在章节末作简单介绍,与核心知识没有形成任务联系。学生虽然听到分子对接、机器学习和虚拟筛选等术语,却不知道输入数据从何而来,也不清楚预测结果如何用于结构判断^[4]。教师若直接展示软件界面,容易出现技术内容压过药物化学原理的情况。例如,在讲解磺胺类药物构效关系时,只让学生生成若干评分,未要求核对氨基苯磺酰胺骨架、取代基电子效应和解离状态,评分便失去解释基础。课程内容还常缺少由浅入深的安排,结构绘制、数据库检索、数据清洗和结果验证被同时布置,基础薄弱的学生容易依赖自动输出。解决衔接问题,需要先确定每项技术对应的课程知识和岗位能力,再设计适量、可核查的操作任务^[5]。

2.2 实践教学场景中的智能工具应用有限

药物化学实验多以已知化合物合成为主,学生按照讲义完成称量、加热、回流、重结晶和熔点测定,实验结果主要以产率和外观评价。此类训练有助于掌握基本操作,却较少涉及路线比较、条件选择和异常诊断。人工智能工具往往停留在课外演示,没有进入实验前准备、实验中决策和实验后分析。以乙酰水杨酸制备为例,学生通常照录水杨酸与乙酸酐的投料比例,对催化剂用量、反应温度、原料纯度和结晶条件如何影响产率缺乏系统判断。若平台不能提供变量设置、风险提示和过程数据,学生很难把预测与真实现象对应起来^[6]。与此同时,部分软件授权费用较高,机房配置不一致,账号管理和网络稳定性也会打断课堂。实践场景建设应优先选择低门槛工具,并准备离线数据和备用任务,避免教学完全受平台运行状况控制。

2.3 学生药物设计与数据分析能力较弱

不少学生能够辨认常见药物结构,却不善于把结构特征转化为可计算指标。面对分子量、脂水分配系数、极性表面积、氢键供受体数和预测毒性等数据时,容易把数值高低直接等同于药物优劣,忽略给药途径、作用靶点和剂量条件。分子对接任务中还会出现受体选择随意、配体质子化状态错误、对接盒位置不合理和只看最低结合能等问题。部分学生将生成式人工智能给出的合成路线原样复制,未核对试剂相容性、官能团保护、反应选择性及文献可行性。数据处理方面,表格命名混乱、单位不统一、异常值不说明也比较常见。课程需要把数据素养拆分为结构标准化、参数读取、结果比较、证据核查和结论表达等具体能力,通过小任务反复训练,而不能把完整药物设计项目一次性交给学生。

2.4 教师人工智能教学素养有待提升

药物化学教师通常具有较强的化学与药学背景,但对算法边界、数据质量和软件参数未必熟悉。部分教师能够操作平台,

却难以解释模型训练数据、适用范围和误差来源,教学中容易把预测值当作确定结论。另一些教师担心技术门槛过高,仍采用课件展示代替学生操作。人工智能教学还要求教师能够筛选数据、设置分层任务、处理账号与设备问题,并识别学生是否过度依赖生成内容,这增加了备课复杂度^[7]。例如,学生提交一条看似完整的抗菌药物合成路线时,教师不仅要检查反应步骤,还要追问来源、关键中间体和危险试剂处置。学校应以课程单元为对象组织培训,让药物化学教师与计算机、药理、制药工程教师共同开发任务,并建立可复用的数据包、操作指引和错误案例库,降低个人摸索成本。

3 应用型药学人才培养下人工智能融入药物化学课程实施的实施路径

3.1 重构课程内容,融入智能药物研发知识

课程重构应从岗位任务反推教学内容,在保留药物结构、构效关系、合成反应和代谢规律的基础上,增加数据检索、性质预测和结果核查。可按结构识别、信息获取、性质解释、路线判断和综合设计五个层级安排任务。讲授局部麻醉药时,教师先让学生绘制普鲁卡因、利多卡因和布比卡因结构,标注芳香疏水区、中间连接链与碱性中心,再通过数据库获取pKa、logP和分子量数据,比较起效速度、作用时间及组织穿透差异。随后要求学生对于一个取代基进行有限改造,利用预测工具观察脂溶性和水溶性变化,并结合结构原理说明是否值得保留。每次人工智能输出都应附带来源、参数和人工判断栏,学生必须指出至少一项不确定因素。这样能够把工具使用嵌入既有章节,避免另起炉灶,也能使知识学习与岗位中的候选物筛选、信息记录和初步决策相衔接。

3.2 依托虚拟仿真,优化药物合成实践教学

虚拟仿真可用于实验前方案推演和高风险环节训练,不应替代真实操作。教师可选择典型药物或关键中间体建立可调参数场景,允许学生改变投料比、温度、时间、溶剂和纯化方式,观察转化率、杂质比例、能耗和安全提示的变化。在对乙酰氨基酚合成教学中,学生先在虚拟环境中比较乙酸酐用量、反应温度及重结晶溶剂比例,再依据模拟结果编写实际实验方案。进入实验室后,各组按照经过论证的条件完成小试,记录反应颜色、析晶时间、产率和熔点,将真实结果与模拟结果逐项比对。若产率偏低,系统可提供原料残留、温度波动和转移损失等可能原因,但学生仍需结合原始记录确定主要因素。教师还可加入错误操作情境,如冷凝水方向接反、加料过快或热过滤不及时,让学生先识别风险再进入实操^[8]。虚实结合能够扩大试错空间,又保持对规范操作和真实物料变化的重视。

3.3 引入分子模拟,强化药物结构分析训练

分子模拟教学应围绕构效关系展开,控制软件复杂度和计算规模。初始阶段可使用结构优化、三维构象和静电势表面观察,帮助学生理解平面结构式不能充分呈现的空间效应。讲授血管紧张素转换酶抑制剂时,可选取卡托普利与依那普利拉作为比较对象,要求学生识别锌离子结合基团、羧基、疏水侧链和手

性中心,并观察不同构象下关键基团的空间位置。随后开展简化分子对接,教师预先处理受体结构并限定活性口袋,学生负责配体准备、参数设置、结果聚类 and 相互作用分析。评价时不以结合能排序作为唯一依据,而要检查氢键、疏水作用、金属配位是否符合已知药理机制。对于不合理姿势,学生需返回检查质子化状态和对接范围。通过结构原理、三维观察和参数核验的往返训练,学生能够形成基于证据解释药物活性的习惯,而不是把模拟图当作装饰性结果。

3.4 运用智能平台,开展药物设计项目实践

项目实践宜选择目标明确、数据公开且难度适中的任务,由三至五名学生组成小组完成。教师可设置某类先导化合物溶解性不足、代谢过快或选择性不佳等问题,要求小组在限定母核和取代位点的条件下提出改造方案。以提高某喹诺酮类候选物水溶性为例,学生先检索同类药物结构与基本性质,确定可调整的侧链位置,再设计三至五个衍生物,使用智能平台预测logP、pKa、溶解度、肠道吸收和潜在毒性。小组不能只提交排名,还需说明筛选阈值、淘汰理由和结构依据,并对最优候选物提出可行的合成思路。教师在中期检查中重点追问数据来源、结构重复、专利风险和预测矛盾,促使学生补证。最终成果包括结构清单、数据表、决策记录和口头答辩。项目规模受到明确限制后,学生能够真正参与比较和取舍,也便于教师评价个人贡献。

3.5 推进校企协同,拓展真实药物研发场景

校企协同应把企业任务转化为教学可承受的微型项目,而不是简单参观。学校可与医药研发、原料药生产、检验检测和医药信息企业共同梳理初级岗位任务,选取不涉及商业秘密的数据用于课堂。例如,企业可提供经过脱敏的杂质谱、反应批记录或候选化合物性质数据,由教师改编为路线诊断、杂质来源判断和候选物筛选任务。企业技术人员负责介绍岗位标准和常见失误,校内教师负责补充理论并控制难度。学生在完成某中间体路线比较时,需要同时考虑原料可得性、反应收率、危险试剂、三废处理和放大稳定性,人工智能用于汇总信息和初步预测,最终方案仍要接受工艺约束检验。课程结束后,可由企业人员参与成果答辩,对记录规范、问题意识和沟通表达提出反馈。真实数据经过适度简化后进入课堂,有助于学生理解实验室最优条件与生产可行方案之间的差异。

3.6 完善教学评价,突出岗位实践能力考查

评价体系应覆盖工具操作、药物化学判断、实验规范、数据质量和团队协作,减少只凭期末试卷判断学习效果。建议将过程性评价与终结性评价结合,过程部分记录数据库检索、结构绘

制、参数设置、实验方案修改和小组讨论,终结部分采用项目报告、实操考核与答辩。每项任务设置可观察指标,如结构是否标准化,数据是否注明来源和单位,预测结果是否经过交叉核对,合成路线是否说明关键反应与安全风险。对于生成式人工智能辅助完成的内容,学生应提交提问记录、修改痕迹和人工核验说明,无法解释的自动生成结论不计入有效成果。教师可利用学习平台统计错误类型,对连续出现的官能团判断、参数读取和路线选择问题安排补充练习。评价结果还应反馈到课程内容调整,例如多数学生在ADMET结果解释中混淆预测概率与实际发生率,下一轮教学就增加误差案例和对照数据。

4 结语

人工智能融入药物化学课程,关键在于改善学生处理结构、数据和研发问题的方式。课程应坚持药物化学原理为主线,以真实任务组织检索、模拟、实验和评价,要求学生说明数据来源、识别模型局限并完成可验证的专业判断。通过教师协作、校企资源引入和过程评价,可逐步形成稳定的实践教学机制,为学生进入药物研发辅助、生产技术和质量管理岗位奠定基础。

【参考文献】

- [1]李林珍,姜飞,毛远湖,等.成果导向教育理念下人工智能赋能的药物化学课程教学探索[J].药学教育,2026,42(3):51-57.
- [2]郭庆祥,鲍亮亮,周华从,等.CNKI AI在药物化学教学中的应用实践[J].高教学刊,2026,12(3):114-117.
- [3]郭森,刘庆超,郭甜甜.新工科背景下天然药物化学课程群优化与教学团队协同建设[J].药学研究,2026,45(3):340-345.
- [4]马敏,王敏,孟宪华,等.知·信·行教学理念驱动天然药物化学课程教学创新与实践探索[J].海峡药学,2024,36(9):64-68.
- [5]何林洪,冯娴婧.人工智能背景下推进天然药物化学学科科研创新型人才培养的探讨[J].化工设计通讯,2025,51(7):70-73.
- [6]韩俊成,李亚丽,夏利宁,等.前沿技术赋能动物药专业药物化学实验课程改革与探索[J].中南农业科技,2026,47(5):226-231.
- [7]张岚,李郅佳,袁子月,等.“科教协同”结合“多学科交叉”体系培养复合型药物化学研究生[J].大学化学,2025,40(1):174-184.
- [8]王存琴,年四辉,张艳华,等.AI赋能“天然药物化学”教学的探索与实践[J].通化师范学院学报,2025,46(10):115-122.

作者简介:

周海山(1991--),汉族,安徽肥西人,博士研究生,药物化学:药物分子设计与合成。