

人工智能赋能有机波谱分析课程教学 ——以创新教学模式与智能评价体系构建为核心

徐鹏 熊伟 张金玲

重庆科技大学化学化工学院，重庆

摘要 | 有机波谱分析作为化学专业的核心课程，长期面临理论抽象性强、实践资源受限、评价反馈滞后等教学痛点。本文提出以人工智能（AI）技术重构教学模式与评价体系。通过构建AI驱动的研讨式、问题驱动式和项目式教学框架，构建AI辅助谱图解析训练平台，设计智能辅助的个性化学习路径，并开发基于机器学习的动态评估系统，实现教学全流程智能化改造。期望通过人工智能技术在破解传统教学困境、培养学生思维能力方面的显著优势，为化学类课程改革提供可复制的实施路径。

关键词 | 波谱分析；教学模式；人工智能；AI辅助谱图解析

Copyright © 2025 by author (s) and SciScan Publishing Limited

This article is licensed under a [Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/).

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>



1 高校有机波谱分析课程教学中的困境

根据教育部《教育信息化2.0行动计划》的要求，推动人工智能与教育教学深度融合，是当前教育改革的重要方向之一。在化学教育领域，人工智能技术已展现出独特优势，这些进展昭示着人工智能技术不仅可作为辅助工具，更可能成为重构教学范式的核心驱动力。^[1]波谱分析作为现代化学研究的核心技术手段，正面临着前所未有的教学挑战。^[2]当前全球每年新合成的化合物数量已突破30万种，其中有机化合物占比超过90%。这不仅

体现在数量级上的跨越式增长，更伴随着分子结构复杂性的指数级提升。天然产物中频繁出现的多手性中心结构、药物分子中嵌套的稠环体系、配位化合物中多重对称性的立体构型，这些突破传统结构范式的化合物不断涌现。然而，当前的波谱分析教学体系却呈现出明显的供给不足。人工智能技术的迅猛发展为破解上述困境提供了全新路径。以深度学习、自然语言处理、计算机视觉为代表的人工智能技术，正在重塑教育的时空边界与交互方式。^[3]

在全球高等教育数字化转型加速推进的背景下，化学教育正经历着从“知识传递”向“能力建构”的范式

基金项目：重庆市研究生教育教学改革重点研究项目（项目编号：yjg222040）；重庆科技大学研究生教育教学改革研究一般项目（项目编号：YJG2021y013）；重庆市研究生教育“课程思政”示范项目（项目编号：YKCSZ23189）；重庆市教委科研项目（项目编号：KJQN202301524）；重庆科技大学人才项目（项目编号：ckrc202212053）。

通讯作者：张金玲，重庆科技大学讲师，博士研究生学历，研究方向：分子碳材料、共轭材料的合成及传感应用。

文章引用：徐鹏，熊伟，张金玲. 人工智能赋能有机波谱分析课程教学——以创新教学模式与智能评价体系构建为核心 [J]. 教育研讨, 2025, 7(4): 509-512.

<https://doi.org/10.35534/es.0704099>

转变。有机波谱分析作为化学、药学、材料科学等专业的核心课程，其教学质量直接影响学生分子结构解析能力与创新思维的培养。^[4]然而，传统教学模式中仪器设备数量的不足与实践训练需求间的矛盾、图谱数据的抽象性与学生具象认知需求间的矛盾、人工评价的滞后性与即时反馈需求间的矛盾，限制了学生波谱解析能力的培养。^[5]在此背景下，如何突破传统教学桎梏，构建适应智能时代需求的新型教学模式，成为化学教育改革的迫切课题。

当前有机波谱分析教学的核心痛点在于“教—学—评”三环节的协同失效。在“教”的层面，核磁共振（NMR）、质谱（MS）等核心内容的理论原理、仪器工作原理与图谱信号—化合物结构关联性晦涩难懂，教师往往陷入“理论灌输”与“技能训练”的两难困境；在“学”的层面，学生因缺乏仪器实操机会，难以建立谱图特征与分子结构的空映关系，导致“学用脱节”现象普遍存在；在“评”的层面，传统纸笔考试难以捕捉动态思维过程，人工批改效率低下且主观性强。^[6]学生图谱解析能力的提升不仅需要掌握图谱特征信号与化合物结构之间的关系，更需要大量实践经验的积累，这种系统性困境严重制约了学生高阶思维能力的形成。

针对上述问题，本文提出“双轮驱动”改革策略。一方面，构建人工智能技术赋能的波谱“解析+分析”教学模式；另一方面，开发智能化的动态评价体系。在教学设计层面，通过三大技术创新实现教学范式转型：一是构建动态案例生成系统，即基于人工智能生成虚拟化合物库，可实时生成含干扰物的NMR/IR/MS谱图集，破解传统教材案例静态化、单一化的弊端；二是搭建多模态交互平台，通过集成AR/VR技术开发分子结构—谱图联动系统，学生通过手势操作即可观察取代基效应对化学位移的影响规律；三是突出个性化学习路径引擎，利用强化学习算法分析学生知识掌握度，动态推荐适合的学习资源与训练任务。在评价体系层面，开发基于深度学习的自动评分模型，通过双通道神经网络同步分析谱图特征与文本推理，实现从“结果评分”到“过程诊断”的跨越。

2 基于人工智能的有机波谱分析课程教学

2.1 智能融合驱动下波谱分析教育的三维闭环教学新范式构建

本文在理论层面首次构建了“人工智能+波谱分析”教育技术融合模型，突破了传统仪器依赖型教学的物理限制，开创了虚实融合的智能解谱教学新范式。该模型以认知科学中的“具身学习理论”为框架，结合深度学习与扩展现实（XR）技术，构建出“虚拟案例生成—增强现实训练—智能反馈修正”的三维闭环教学体系。

其理论创新在于将波谱解析的认知过程解构为特征识别、逻辑推理、经验验证三个核心维度，并针对性地开发人工智能辅助系统，形成覆盖教学全周期的智能增强回路。

在虚拟案例生成环节，基于生成对抗网络（GAN）与迁移学习技术，构建了包含一千万种有机化合物波谱数据的虚拟结构图谱，涵盖核磁共振谱、质谱、红外光谱等。系统通过三维分子描述符（3D-MoRSE）与谱图特征向量的映射关系，实现复杂结构化合物的智能建模。以天然产物结构解析为例，传统教材中雷公藤甲素等典型萜类化合物的教学案例已沿用十余年，而本系统可动态生成含有动态共价键的葫芦[n]脲衍生物、具有多重手性中心的海洋大环内酯等新型分子案例。通过参数化调节模块，教师可自主设定分子量（200~2000Da）、手性中心数（1~8个）、耦合常数范围（如 $J=0.5\sim 20\text{ Hz}$ ）等关键变量，生成与教学目标匹配的梯度化虚拟案例库，并将上述虚拟图谱案例与实验数据对比，及时修正图谱预测准确率和匹配度。

智能反馈修正系统基于Transformer架构，构建了具有知识追溯能力的诊断型神经网络。当学生提交解析方案时，系统不仅判断结果的正误，更能通过注意力机制定位认知偏差节点。例如，在解析某虚拟萜类化合物时，若学生误将H-7（ $\delta\ 5.32\text{ ppm}$, dd, $J=9.8, 3.1\text{ Hz}$ ）归属为烯烃质子，系统会自动追溯其逻辑链。首先检测到NOESY相关峰识别缺失，进而分析耦合常数匹配度不足，最终定位到立体化学知识模块薄弱。反馈报告将推送相关教学视频，并生成含有类似耦合模式的对比案例。该系统的纠错干预将使学生在氢碳归属、远程耦合解析等难点问题的学习效率显著提升。

该模型的理论价值体现在三个方面。首先，建立了“数字孪生—认知增强—元学习”的波谱教学新范式，通过虚拟案例的动态生成突破了实物教学资源的约束。其次，开发了基于认知诊断的个性化学习路径规划算法，实现了从群体化教学向精准化培养的转变。更重要的是，构建了教学质量的量化评估体系，通过解谱过程的行为数据采集，可建立包含逻辑连贯性、特征敏感度、经验迁移力等12个维度的能力评估矩阵。采用该模式，学生在复杂天然产物结构解析中，特别是在动态核磁谱图解析、多谱联用技术应用等前沿领域表现显著提升。这为化学类专业教学数字化转型提供了理论支撑与实践范例，将使波谱分析教育正式进入智能增强时代。

2.2 三维智能融合重构波谱解析教育生态构建

本文在实践层面，通过开发“智能光谱解析教学平台”，构建覆盖有机波谱教学全流程的数字化解决方案，显著提升了学生的化合物图谱综合解析效率。该平台依托深度学习算法与混合现实技术，创新性地搭建“数据驱动—智能引导—虚实联动”的三维教学空间，有效破解了传统波谱分析课程中存在的仪器资源紧张、

教学案例陈旧、个性化指导缺失等核心痛点。

构建人工高智能光谱生成平台，采用模块化设计，由虚拟案例生成系统（VCG）、增强现实训练终端（ART-Lab）和智能诊断反馈引擎（IDFE）三大核心模块构成。底层数据库集成一千余种有机化合物的多维波谱数据，涵盖核磁共振（ ^1H ， ^{13}C NMR）、质谱、红外光谱等谱图信息。系统通过迁移学习算法建立三维分子描述符与谱图特征向量的映射关系，构建出具备动态扩展能力的知识图谱。虚拟案例生成系统（VCG）基于改进的网络架构，开发了具有化学语义理解能力的谱图生成模型。教师可通过参数化界面设置分子量范围（200~2000Da）、官能团类型（最多支持8种取代基组合）、立体化学复杂度（手性中心数1~8个）等结构特征参数，系统在3分钟内即可生成包含结构式、多维谱图及解析要点的完整教学案例包。

增强现实训练模块创新性地开发了混合现实（MR）解谱工作台，构建虚实融合的仪器操作场景。学生在实体实验室中可通过手势交互，调取虚拟核磁管进行样品装填，系统实时模拟氘代试剂锁场、探头调谐等关键步骤的物理效应。当学生操作超导磁体温度控制系统时，AR界面会叠加显示液氮相变曲线与量子能级跃迁的微观动画。这种多模态感知训练显著提升了学生的空间认知能力。系统还将内置故障模拟引擎，可随机生成匀场失败、旋转边带干扰等20类异常工况，训练学生在真实科研场景中的问题诊断能力。

在实践层面，还将开发元学习优化算法，根据学生的认知特征动态调整训练难度曲线。在教学实践中，系统针对不同水平学生提供差异化训练方案。基础组重点突破单峰归属，目标是巩固基础，提升特征峰识别的准确率；进阶组强化远程耦合解析，缩短完成时间，提升综合解谱效率；高阶组则强化复杂天然产物解析，通过多谱联用，综合解析复杂化合物结构，特别是提升在动态核磁谱解析、多手性、超分子体系分析等前沿领域的实际应用能力。通过人工智能赋能有机波谱分析教学，基于对学生个性化的针对性训练，使图谱解析正式进入“智能增强”时代，为化学类专业人才的数字化转型培养提供了可复制的方案。

2.3 智能多维度评价体系的实现与推广

2.3.1 传统教学的关键瓶颈与人工智能赋能机理

传统有机波谱分析课程长期面临三大核心矛盾：实验仪器高成本与学生规模扩张的矛盾（如超导核磁共振仪单台成本超千万）、静态教学案例与学科动态发展的矛盾（如教材中雷公藤甲素案例已沿用逾十年）、群体化教学与个性化能力培养的矛盾（如教师难以实时追踪每位学生的认知轨迹）。在现实教学中，学生在复杂图谱解析，特别是二维核磁谱图解析中的平均错误率较高，且高阶能力（如动态核磁谱解析、多谱联用技术应

用）的掌握度不足。本文提出，人工智能技术通过生成对抗网络（GAN）的虚拟案例生成、Transformer架构的认知诊断、混合现实（MR）的交互训练，构建起系统性解决方案，可有效解决教学中存在的上述问题。以“数据采集—特征提取—能力画像”三维评价框架为例，通过可穿戴设备或视频捕捉设备采集学生操作姿态数据、眼动轨迹数据、触控交互响应时间等多模态数据，结合深度神经网络提取行为特征向量，最终生成包含逻辑连贯性、特征敏感度、经验迁移力等多项指标的动态能力雷达图，进而帮助教师对学生薄弱环节进行精准识别。

2.3.2 三位一体智能评价框架的技术实现

首先，开发多模态教学行为采集终端，集成视频捕捉设备、高精度压力传感器、红外热成像仪等设备。在核磁样品制备环节，系统可实时精确记录学生的制样操作、溶液震荡频率等操作参数。其次，构建深度特征融合网络处理时序行为数据。针对核磁谱图解析任务，开发图神经网络提取分子结构与谱图特征（如化学位移 δ 、耦合常数 J ）的关联模式，如在蒽类化合物解析中，识别出学生容易忽视的远程耦合特征（ $J=16.8\text{Hz}$ ）。最后，通过能力画像建模，基于改进的聚类算法，构建动态能力评估矩阵，将学生分为基础型（掌握单谱解析）、进阶型（熟练二维谱分析）、专家型（具备多谱联用能力）三类，并生成个性化发展路径。

2.3.3 教学改革方案的实施路径

首先，在需求分析阶段，建立包含37项能力指标的化学人才胜任力模型，通过德尔菲法确定教学优先级。其次，在系统开发阶段，构建“智能终端—云端算力—数字孪生”三层架构。再次，在教学实践阶段，开展对照实验，实验组采用智能评价框架，对照组沿用传统方法。最后，在迭代优化阶段，基于强化学习算法动态调整评价指标权重。以“海洋天然产物结构解析”模块为例：首先，由虚拟案例生成系统动态创建含7个手性中心的大环内酯分子案例库；其次，通过增强现实终端模拟多种大环内酯分子手性异构体的核磁谱图；再次，通过智能反馈系统捕捉学生对碳信号的错误归属时所涉及的逻辑链断裂点；最后，通过教学数据，显示实验组学生在复杂分子解析中的平均耗时、谱峰归属准确率，并与对照组的学习结果进行对照。

2.3.4 验证与推广构建的多维度评价体系

构建包含过程性数据（操作规范度）、认知性数据（逻辑链完整度）、成果性数据（结构确认准确率）的三维评估体系。通过考察学生动态核磁谱解析能力、多谱联用技术应用能力、创新思维能力（如非共价相互作用分析）等，评价学生的实际学习效果，形成标准化实施方案，进而推广到其他课程教学中。本文构建的智能评价框架，不仅破解了传统波谱分析教学难以量化认知过程的困境，更开创了“数字孪生驱动—认知增强干

预—元学习进化”的教育新范式。该模式使教学资源配置效率显著提升，学生高阶思维能力达标率明显提高。这为化学类课程的数字化转型提供了一种可能的实施路径，标志着波谱分析教育正式迈入“精准诊断—智能增强”的新时代，为培养具备数字素养的创新型化学人才奠定坚实基础。

3 结语

本文建立了“人工智能+波谱分析”教育技术融合模型，提出了“虚拟案例生成—增强现实训练—智能反馈修正”的闭环教学理论。在实践层面，开发了人工智能教学平台，显著提升了学生的化合物图谱综合解析效率。在方法层面，创建了“数据采集—特征提取—能力画像”三位一体的智能评价框架，为化学类课程评价改革提供了标准化方案。本文进一步系统剖析了传统教学的关键瓶颈与人工智能赋能机理，阐述了改革方案的设计与实施，详细解读了智能教学模式的技术实现与教学案例，论证了多维度评价体系的构建路径与验证数据，最终形成了可推广的课程改革实施路径。最后，期望通过人工智能赋能有机波谱分析课程教学，为化学教育的数字化转型提供理论参照与实践范本，助力培养适应智

能时代的创新型化学人才。

参考文献

- [1] 陈琳. 人工智能赋能思政课教学的三重转向与愿景构想 [J]. 重庆开放大学学报, 2022 (34): 47-53.
- [2] 张倩, 范璐璐, 郭海明. 波谱分析与实验教学中课程思政的实践与探索 [J]. 广州化工, 2022 (10): 185-186, 204.
- [3] 罗翔. 人工智能赋能高效劳动教育的内在逻辑、价值意蕴和发展路径 [J]. 北京化工大学学报, 2022 (119): 94-100.
- [4] 张涛, 房立真, 吕洁丽, 等. 药学专业《波谱解析》课程教学方法改革与实践 [J]. 广州化工, 2021 (49): 133-135.
- [5] 廖家利, 陈敏. 人工智能在教育领域的研究热点及趋势分析 [J]. 贵州师范学院学报, 2022 (38): 78-84.
- [6] 丁彩凤, 李玉鹏, 张兰春, 等. 基于“金课”理念下《波谱解析》的教学改革与探索 [J]. 广州化工, 2022 (49): 211-212.

Artificial Intelligence Empowers Organic Spectroscopy Analysis Teaching —Focusing on Innovative Teaching Models and Intelligent Assessment System Construction

Xu Peng Xiong Wei Zhang Jinling

College of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing University of Science and Technology, Chongqing

Abstract: Organic Spectroscopy Analysis, as a core course in chemistry disciplines, has long faced teaching challenges including highly abstract theoretical content, limited practical resource accessibility, and delayed assessment feedback. This study proposes a restructuring of the teaching model and evaluation system through artificial intelligence (AI) technology. By developing AI-driven seminar-style, problem-driven, and project-based teaching frameworks, constructing an AI-assisted spectroscopic interpretation training platform, designing intelligent-guided personalized learning pathways, and establishing a machine learning-powered dynamic assessment system, we aim to achieve intelligent transformation across the entire teaching process. Leveraging the significant advantages of AI technology in addressing traditional pedagogical limitations and cultivating students' critical thinking capabilities, this approach provides a replicable implementation pathway for reforming chemistry-related curricula.

Key words: Spectroscopy analysis; Teaching models; Artificial intelligence; AI-Assisted spectroscopic interpretation