

《化工计算》教学标准

制定人：陈仪

课程名称：化工计算

学时：36 学分：2

先修课程：无机化学 分析化学 仪器分析

适用专业：石油化工技术

开课学期：第四学期

一、课程性质与任务

随着计算机科学与技术的高速发展及其与传统化学、化工学科的不断交叉、渗透与整合，现代计算机技术正在化学、化工专业的科研、生产、教学中起到日益重要的作用。计算机在化学、化工专业的应用已不仅局限于传统的办公、图形处理等范围。在化学品开发、反应机理研究、设备设计、过程控制、工艺优化、辅助教学等领域，计算化学和计算化学工程的重要作用日益凸显。对于化学、化工专业的学生和科研人员，熟练应用计算机解决学习、科研、工作中面临的各种问题已成为必备的基本技能。

本门课程以实际分析检测中的应用例子为对象，在叙述和分析中将实验设计与数据处理、化学化工计算通过学习，使学生应用计算机解决分析化学、仪器分析领域一些常见问题的能力在实践中得到培养和提高，并对化工常用软件有较好的了解和掌握，是化工类专业的专业选修课程。

二、课程教学的基本要求

通过本课程的学习，使学生初步掌握利用相关软件和 internet 网络进行分析计算的能力、提升实验数据处理的能力，并能初步运用AI软件，提高数据处理效率与流程图绘制能力。

三、课程教学内容

第一章 Office软件在化学化工中的应用（14学时）

1、Word在化学化工中的应用（4学时）

2、Excel在化学化工中的应用（6学时）

3、PowerPoint在化学化工中的应用（4学时）

第二章 数据处理软件Origin（8学时）

1、基础操作与数据导入

2、基础图表绘制与美化

3、数据处理与分析

4、高级图表与多层绘图

第三章 绘制实验流程图软件draw.io (6学时)

1、软件基础与界面介绍

2、流程图元素创建与编辑

3、连接关系与样式设置

4、自动布局与高级功能

5、AI赋能流程图制作 (DeepSeek提示词)

第四章 化学结构绘图软件ChemDraw (4学时)

1、软件介绍与基础操作

2、高级结构绘制技巧

3、反应式与机理绘制

4、结构分析与属性计算

5、谱图绘制与数据整理

第五章 综合应用 (4学时)

四、课程考核

该课程为考查课。

总评成绩=平时成绩 (含作业和考勤) +期末成绩

其中:

平时成绩 (含作业和考勤) 占 40%

期末成绩 占 60%