

揭阳职业技术学院

Jieyang Vocational & Technical College

教 案

系（部）：化学工程系

讲授课程：化工计算

任课教师：陈仪

专业班级：石化241

揭阳职业技术学院化学工程系

石油化工技术教研室

课程名称	化工计算	专业班级	石化 241
教材名称	《实用化学化工计算机软件基础》		
授课题目	第一章 office 软件在化学化工中的应用		
授课学时	16 学时		
课 型	理论 () ; 实验 () ; 见习 () ; 实训 (<input checked="" type="checkbox"/>) ; 其它 ()		
教学目标	<p>一、知识目标：掌握 Office 软件（Word、Excel、PowerPoint）在化学化工领域的核心应用概念，理解 Excel 数据处理功能与化工计算原理的内在联系，构建"软件工具-化工问题-解决方案"的系统化知识体系，掌握化学方程式编辑、实验数据统计分析、化工流程图绘制等关键应用技能。</p> <p>二、能力目标：培养运用 Excel 进行化工物料衡算、能量衡算的实际操作能力，提升利用 Word 撰写标准化实验报告和技术文档的技能，增强通过 PowerPoint 可视化呈现化工数据与工艺方案的表达能力，掌握 Office 高级功能（如 Excel 函数、图表生成）解决复杂化工计算问题的综合应用能力。</p> <p>三、思政目标：引导学生树立"工具服务专业"的应用思维，在 Office 软件操作中培养化工数据处理的严谨求实精神，通过案例分析感受信息化工具对化工行业绿色发展的推动作用，增强规范使用办公软件的职业素养与数据安全意识。</p>		
教学重点	掌握 Office 软件（Word、Excel、PowerPoint）在化学化工领域的应用		
教学难点	构建"软件工具-化工问题-解决方案"的系统化知识体系		
教学方法	讲授 () ; 讨论 (<input checked="" type="checkbox"/>) ; 指导 () ; 示教 (<input checked="" type="checkbox"/>) ; 其它 ()		
电子教案	有 (<input checked="" type="checkbox"/>)	Microsoft PowerPoint (<input checked="" type="checkbox"/>) ; Author ware () ; 其它 ()	
	无 ()		
教学资源	多媒体 (<input checked="" type="checkbox"/>) ; 模型 () ; 标本 () ; 实物 () ; 音像 (<input checked="" type="checkbox"/>) ; 其它 ()		
教学过程 时间安排	Word 软件在化学化工中的应用（4 学时） Excel 软件在化学化工中的应用（6 学时） PowerPoint 在化学化工中的应用（4 学时）		
思 考 题	见教材		
作 业	上机练习		

office软件在化学化工中的应用

第一部分 Word在化学化工中的应用（4学时）

一、化学文档基础排版与规范

1. 化工文档结构搭建

。 标准化工报告的组成要素：标题、摘要、目录、引言、实验部分、结果与讨论、结论、参考文献等模块的层级设置（一级标题：章，二级标题：节，三级标题：小节）。

。 化学符号与公式的规范输入：使用“插入-公式”功能输入分子式（如 H_2SO_4 、 CH_3COOH ）、离子式（如 Na^+ 、 OH^- ）及反应方程式（如 $2\text{H}_2+\text{O}_2=2\text{H}_2\text{O}$ ），设置公式编号（如式1-1）并实现自动更新。

。 页码与页眉页脚设置：不同章节页眉显示章节名（如“1. 实验部分”），正文页码从引言开始编号，目录页使用罗马数字。

2. 化工专业格式规范

。 字体与段落设置：正文采用宋体小四号，行距1.5倍，段首缩进2字符；实验数据表格标题居上，图表标题居下，均采用五号宋体。

。 单位与符号标准化：使用“插入-符号”添加希腊字母（如 μ 、 α 、 β ）、特殊符号（如 $^\circ\text{C}$ 、 mol/L 、 kPa ），确保单位大小写正确（如“ mL ”非“ ml ”，“ MPa ”非“ mpa ”）。

二、化学图表与实验数据处理

1. 化学实验图表插入与编辑

。 实验装置图插入：通过“插入-图片”导入ChemDraw绘制的装置图（如蒸馏装置、反应釜示意图），设置环绕方式为“四周型”，调整缩放比例至清晰显示。

。 数据表格设计：创建化工实验数据表格（如反应温度-转化率关系表），设置表头加粗居中，数据列对齐方式（数值右对齐，文字居中），添加表格边框（外框1.5磅，内框0.5磅），合并/拆分单元格处理复杂数据（如多组平行实验结果）。

2. 化学方程式与结构式编辑

- 复杂反应方程式编辑：利用公式编辑器输入可逆反应（ \rightleftharpoons ）、条件标注（如“加热”“催化剂”）及配平系数，例如： $\text{N}_2+3\text{H}_2\rightleftharpoons 2\text{NH}_3$ （高温高压催化剂）

。

- 有机化合物结构式简化输入：通过“插入-形状”绘制简单结构式（如苯环、羟基），或粘贴ChemDraw导出的结构式图片，设置图片透明色以匹配文档背景。

三、长文档管理与自动化工具

1. 目录与交叉引用

- 自动生成目录：基于标题样式（如“标题1”“标题2”）生成目录，设置目录显示层级（如显示至三级标题），更新目录以同步标题修改。

- 图表与公式交叉引用：使用“引用-交叉引用”功能标注“如图1-1所示”“见式2-3”，确保图表/公式编号修改后引用自动更新。

2. 样式与模板应用

- 化工文档样式自定义：创建“实验步骤”“数据记录”“结论分析”等自定义样式，统一字体、行距、缩进格式，通过“样式窗格”快速应用。

- 模板保存与复用：将标准化化工报告另存为“.dotx”模板，包含预设样式、页眉页脚、封面格式，后续新建文档直接调用模板。

四、化学文献引用与协作编辑

1. 参考文献管理

- 引用格式设置：使用“引用-插入引文”选择GB/T 7714-2015格式（如期刊文章：[1]王某某,李某某.化工反应动力学研究[J].化工学报,2023,74(5):1890-1898.），自动生成参考文献列表。

- 批量引用与更新：导入EndNote或NoteExpress生成的文献库，快速插入多篇引文，修改引用顺序后自动调整编号。

2. 多人协作与修订

- 批注与修订功能：开启“修订”模式跟踪修改痕迹，使用“批注”添加实验建议（如“此处需补充反应时间数据”），接受/拒绝修订以整合多版意见。

- 文档对比与合并：通过“审阅-比较”功能对比不同版本实验报告的差异，合并修改内容生成最终版。

第二部分 Excel在化学化工中的应用（6学时）

一、化工数据录入与基础计算

1. 规范化数据表格设计

○ 化工实验数据表结构：创建包含“实验编号、温度(°C)、压力(kPa)、浓度(mol/L)、转化率(%)”等列的表格，设置数据有效性（如温度范围0-300°C，压力非负），避免无效数据录入。

○ 数据格式设置：数值列保留2位小数（如浓度0.12 mol/L），百分比列设置为“百分比”格式（如转化率25.50%），日期列使用“yyyy-mm-dd”格式记录实验时间。

2. 基础函数在化工计算中的应用

○ 算术函数：使用SUM计算多组实验数据总和（如 Σ 转化率），AVERAGE计算平均值（如平均反应速率），MAX/MIN确定极值（如最高反应温度）。

○ 化学计量函数：通过公式计算摩尔质量（如“=21.008+32.06+416”计算H₂SO₄摩尔质量），物质的量（ $n=m/M$ ，如“=A2/B2”，A2为质量，B2为摩尔质量）。

二、化工实验数据统计与分析

1. 描述性统计工具

○ 数据分析插件启用：通过“文件-选项-加载项”启用“分析工具库”，使用“描述统计”生成实验数据的均值、标准差、标准误差、最大值、最小值等统计量（如催化剂活性数据的波动性分析）。

○ 频率分布与直方图：对反应温度数据进行分组（如20-40°C、40-60°C），使用“频率”函数计算各组频数，插入直方图直观展示温度分布规律。

2. 化学实验误差分析

○ 绝对误差与相对误差计算：公式“=|测量值-真实值|”计算绝对误差，“=绝对误差/真实值”计算相对误差（如某样品浓度测量值为0.102 mol/L，真实值0.100 mol/L，相对误差2%）。

○ 标准偏差与变异系数：使用STDEV.S计算样本标准偏差，“=STDEV.S(数据区域)/AVERAGE(数据区域)”计算变异系数，评估实验数据的精密度。

三、化工图表制作与数据可视化

1. 实验结果图表类型选择

。折线图：展示反应时间与转化率的关系（X轴时间，Y轴转化率），添加趋势线（线性、指数或多项式）并显示方程与 R^2 值（如 $y=0.05x+0.12$, $R^2=0.98$ ）。

。柱状图：对比不同催化剂的反应效率（X轴催化剂类型，Y轴产率），设置误差线（基于标准偏差）直观展示数据波动性。

。散点图：分析温度与反应速率的相关性，通过趋势线判断线性关系（如Arrhenius方程拟合）。

2. 图表美化与标注

。化工图表规范：坐标轴添加物理量与单位（如“温度/ $^{\circ}\text{C}$ ”“速率/ $(\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{min}^{-1})$ ”），图表标题简明（如“图1 温度对反应速率的影响”），图例放置于空白区域，数据点添加标签（如具体转化率数值）。

四、高级函数在化工计算中的应用

1. 逻辑与查找函数

。IF函数：判断实验数据是否合格（如“=IF(A2>90%,"合格","需重做)”，A2为转化率）。

。VLOOKUP函数：根据物质名称查找摩尔质量（如“=VLOOKUP("NaOH", 摩尔质量表!A:B,2,0)”返回40.00 g/mol）。

2. 化学工程计算函数

。理想气体状态方程：“=nRT/P”计算体积（n为物质的量， $R=8.314\text{ J/mol}\cdot\text{K}$ ，T为开尔文温度，P为压力）。

。反应转化率计算：“=(初始浓度-平衡浓度)/初始浓度100%”，结合绝对引用（如“=\$B\$2-C2)/\$B\$2*100%”，\$B\$2为初始浓度）。

五、化工数据拟合与回归分析

1. 线性回归与非线性拟合

。线性回归：对浓度-吸光度数据进行线性拟合（Beer定律 $A=\epsilon bc$ ），通过“图表-趋势线-显示公式”获取 ϵ （斜率）和截距，计算相关系数 R^2 评估拟合优度。

。非线性拟合：使用“规划求解”工具拟合反应动力学方程（如一级反应 $\ln(c_0/c)=kt$ ），设置目标单元格（残差平方和最小），调整k值实现最佳拟合。

2. 多变量数据分析

- 。 单因素方差分析 (ANOVA)：通过“数据分析-方差分析：单因素”比较不同反应温度下的产率是否存在显著差异 ($P < 0.05$ 为显著)。

- 。 相关系数矩阵：使用CORREL函数计算温度、压力、浓度之间的相关系数 (如温度与转化率的相关系数 $r = 0.92$ ，表明强正相关)。

第三部分 PowerPoint在化学化工中的应用 (4学时)

一、化工演示文稿结构设计

1. 化工主题演示文稿框架

- 。 标准化工汇报结构：封面 (标题、汇报人、日期)、目录 (研究背景、实验方法、结果分析、结论展望)、过渡页 (每章节标题页)、内容页、结束页 (致谢)。

- 。 版式设计：为“实验装置图”“数据图表”“公式推导”等内容创建专用版式 (如左图右文、上图下文)，统一字体 (标题微软雅黑28号，正文宋体24号)。

2. 化工配色与视觉规范

- 。 配色方案：选择专业化工风格配色 (如深蓝主色+浅灰辅助色，避免高饱和色)，设置主题颜色 (标题文本深蓝，正文文本黑色，强调色用于突出数据) 背景与母版设置：使用浅色渐变背景 (如浅灰到白色)，在幻灯片母版中添加公司LOGO (固定于右上角)、页码 (右下角)，统一所有幻灯片格式。

二、化学图形与实验装置展示

1. 化学结构与反应过程可视化

- 。 结构式绘制：使用“插入-形状”组合基本图形 (矩形、圆形、直线) 绘制简单有机分子 (如乙醇 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$)，或导入ChemDraw生成的高分辨率结构式图片，设置透明背景。

- 。 实验装置动画：为蒸馏装置图添加动画 (如“进入-擦除”显示冷凝管、烧瓶，“路径动画”模拟蒸汽流动方向)，配合解说分步展示装置组成。

2. 流程图与工艺过程呈现

- 。 化工工艺流程绘制：使用“SmartArt-流程图”制作生产工艺步骤 (如“原料预处理→反应→分离→提纯→产品”)，添加箭头标注物料流向，设置每个步骤的形状颜色 (如反应步骤用橙色，分离步骤用蓝色)。

- 。 设备示意图标注：插入反应釜、换热器等设备图片，使用“插入-文本框”添加设备名称 (如“PFR反应器”)、操作参数 (如“温度 250°C ，压力 2MPa ”)。

三、化工数据图表与动态展示

1. 实验数据图表优化

○ 图表简化与突出：将Excel中的转化率折线图复制到PPT，删除冗余网格线，加粗趋势线，放大数据点，添加数据标签（如“85.6%”），标题简化为“温度对转化率的影响”。

○ 多图表对比排版：使用“分栏布局”并排展示不同催化剂的性能柱状图（左图催化剂A，右图催化剂B），统一坐标轴刻度，添加“*”标注显著性差异（ $P < 0.05$ ）。

2. 数据动态演示技巧

○ 图表动画：为柱状图设置“按类别”动画（逐个柱子出现），折线图设置“平滑开始”动画模拟数据变化趋势，配合演讲节奏逐步展示。

○ 数据更新链接：通过“编辑链接”功能保持PPT图表与Excel源数据的关联，修改Excel数据后PPT图表自动更新，避免手动修改错误。

课程名称	化工计算	专业班级	石化 241
教材名称	《实用化学化工计算机软件基础》		
授课题目	第二章 数据处理软件 origin		
授课学时	8 学时		
课 型	理论 ()；实验 ()；见习 ()；实训 (<input checked="" type="checkbox"/>)；其它 ()		
教学目标	<p>一、知识目标：掌握 Origin 软件核心功能（数据导入、图形绘制、曲线拟合、数据分析）及操作原理，理解化工实验数据与 Origin 功能的对应关系，构建"实验数据-Origin 工具-结果可视化"知识框架，明确其在化工数据处理中的应用场景及技术要点。</p> <p>二、能力目标：培养运用 Origin 处理化工实验数据（转化率计算、反应动力学分析）的实操能力，提升数据可视化（标准曲线、工艺流程图）和统计分析（方差分析、显著性检验）技能，增强结合专业需求优化操作流程的创新应用能力。</p> <p>三、思政目标：培养数据处理的科学严谨态度与真实性意识，通过案例理解数据可视化对化工过程优化的价值，树立"工具服务专业、数据支撑决策"的职业理念，增强规范使用专业软件的责任意识与工匠精神。</p>		
教学重点	掌握 Origin 软件核心功能（数据导入、图形绘制、曲线拟合、数据分析）及操作原理		
教学难点	构建"实验数据-Origin工具-结果可视化"知识框架		
教学方法	讲授 ()；讨论 (<input checked="" type="checkbox"/>)；指导 ()；示教 (<input checked="" type="checkbox"/>)；其它 ()		
电子教案	有 (<input checked="" type="checkbox"/>)	Microsoft PowerPoint (<input checked="" type="checkbox"/>)；Author ware ()；其它 ()	
	无 ()		
教学资源	多媒体 (<input checked="" type="checkbox"/>)；模型 ()；标本 ()；实物 ()；音像 (<input checked="" type="checkbox"/>)；其它 ()		
教学过程 时间安排	6 学时		
思 考 题	见教材		
作 业	上机练习		

数据处理软件Origin

一、基础操作与数据导入

1.1 软件界面与基本操作

- 界面布局：项目管理器（Project Explorer）、工作表（Worksheet）、绘图窗口（Graph）、工具栏功能区

- 基本操作：新建/打开项目、工作表数据编辑、列属性设置（数值/文本/日期格式）

- 快捷键使用：Ctrl+C/V（复制粘贴）、Ctrl+Z（撤销）、F5（刷新）

1.2 化工数据导入方法

- 常见数据格式：TXT/CSV/Excel文件导入（重点讲解化工实验数据的分隔符设置）

- 实时数据导入：通过ODBC连接数据库（如化工过程数据库）

- 数据预处理：缺失值处理（插值/删除）、异常值识别（箱线图法）

案例：导入某反应釜温度-时间数据，处理缺失值

二、基础图表绘制与美化

2.1 常用化工图表类型

- 线图：反应动力学曲线（浓度-时间）、温度-转化率曲线

- 散点图：催化剂活性-反应条件关系图

- 柱状图：不同工艺条件下的产品收率对比

- 步骤：选中数据列→Plot菜单→选择图表类型→调整坐标轴范围

2.2 图表美化与格式规范

- 坐标轴设置：标签（如“Temperature (°C)”）、刻度、网格线样式

- 曲线样式：颜色（化工常用色：蓝色-水相、红色-有机相）、线型（实线-实验值、虚线-模拟值）、标记点（圆形-数据点、三角形-异常点）

- 图例与标题：位置优化、字体大小（标题14pt，标签12pt）

案例：绘制某催化反应的转化率-温度曲线并美化

三、数据处理与分析

3.1 数据统计分析

- 描述性统计：均值、标准差、变异系数（化工数据重复性分析）

- 假设检验：t检验（两组实验数据显著性差异）、F检验（方差齐性）

- 操作：Statistics菜单→Descriptive Statistics/One-Sample t-test

3.2 曲线拟合与模型建立

- 线性拟合：Beer-Lambert定律验证（吸光度-浓度）
- 非线性拟合：反应动力学模型（一级/二级反应）、Arrhenius方程（速率常数-温度）
- 拟合评估： R^2 值、残差分析（化工模型适用性判断）

案例：对某一级反应数据进行动力学拟合，计算速率常数

3.3 练习与答疑（10分钟）

四、高级图表与多层绘图

4.1 复合图表创建

- 双Y轴图表：温度（左轴）与转化率（右轴）的关系图
- 多子图布局：4组平行实验数据的对比图（2×2布局）
- 3D图表：化工相图（温度-压力-组成）、表面响应图

4.2 专业图表技巧

- 误差棒：实验数据的误差范围表示（标准偏差/标准误）
- 热图：催化剂活性位点分布、浓度场可视化
- 动态图表：时间序列数据的动画演示（如反应过程浓度变化）

案例：创建某反应过程的双Y轴动态图表

课程名称	化工计算	专业班级	石化 241
教材名称	《实用化学化工计算机软件基础》		
授课题目	第三章 绘制实验流程图软件 draw.io		
授课学时	6 学时		
课 型	理论 ()；实验 ()；见习 ()；实训 (<input checked="" type="checkbox"/>)；其它 ()		
教学目标	<p>一、知识目标：通过本课程的学习，使学生系统掌握绘制实验流程图软件 draw.io 的核心功能模块。</p> <p>二、能力目标：培养学生运用 draw.io 软件绘制化工实验流程图（如反应装置图、工艺流程简图）的实操能力，为化工实验方案呈现与工程实践汇报奠定可视化基础。</p> <p>三、思政目标：1、通过案例分析感受标准化图表对化工信息传递的重要价值，树立"图形服务工程、规范提升效率"的职业理念。2、用 AI 工具如深度求索，赋能流程图制作</p>		
教学重点	掌握绘制实验流程图软件 draw.io 的核心功能模块		
教学难点	培养学生运用 draw.io 软件绘制化工实验流程图的实操能力		
教学方法	讲授 ()；讨论 (<input checked="" type="checkbox"/>)；指导 ()；示教 (<input checked="" type="checkbox"/>)；其它 ()		
电子教案	有 (<input checked="" type="checkbox"/>)	Microsoft PowerPoint (<input checked="" type="checkbox"/>)；Author ware ()；其它 ()	
	无 ()		
教学资源	多媒体 (<input checked="" type="checkbox"/>)；模型 ()；标本 ()；实物 ()；音像 (<input checked="" type="checkbox"/>)；其它 ()		
教学过程 时间安排	6 学时		
思 考 题	见教材		
作 业	上机练习		

绘制实验流程图软件draw.io

一、draw.io软件基础与界面介绍

1、draw.io软件简介与安装：介绍draw.io软件的背景与功能，详细说明安装前的系统要求与准备工作。

- 软件特点与优势：列举draw.io在流程图绘制方面的核心优势，如自动布局、跨平台兼容性等。

- 下载与安装步骤：提供从官方网站下载安装包、运行安装程序及完成设置的完整流程。

- 首次启动与界面布局：引导用户完成首次启动，初步认识软件的整体布局与结构。

2、界面组成与功能区：详细介绍主界面的各个组成部分，包括菜单、工具栏、面板等区域。

- 菜单栏与工具栏：逐一说明菜单栏中各菜单项的功能，以及工具栏中常用工具的作用。

- 图元库与属性面板：解释图元库中各类图形元素的用途，以及属性面板中可调整的参数选项。

- 绘图区域与导航面板：介绍绘图区域的操作方式，以及导航面板在浏览大型图表时的辅助功能。

3、基本操作：涵盖文件管理、视图控制等日常操作，帮助用户快速上手。

- 文件的新建、打开与保存：说明如何创建新文件、打开已有文件及保存当前工作内容。

- 视图控制（缩放、平移）：介绍通过鼠标与快捷键实现视图缩放和平移的具体方法。

- 撤销与重做功能：强调在编辑过程中使用撤销与重做功能的重要性及操作方式。

- 实践练习：创建第一个空白流程图：指导用户动手创建一个空白流程图文件，熟悉基本操作环境。

二、流程图元素创建与编辑

1、流程图基本元素：详细介绍流程图中常用的各类节点及其代表的意义。

- 开始/结束节点：说明开始节点与结束节点在流程图中的符号表示与使用场景。

- 过程节点：介绍过程节点的作用，用于表示流程中的一个具体步骤或操作。

- 判断节点：解释判断节点的用途，通常用于表示条件分支或决策点。

- 输入/输出节点：说明输入输出节点在流程图中的功能，代表数据的输入或输出环节。

2、元素创建方法：提供多种创建流程图元素的方式，满足不同用户的操作习惯。

- 从图元库拖放元素：演示如何从图元库中选择元素并拖放到绘图区域中。

- 使用工具栏创建元素：介绍通过工具栏按钮快速添加常用流程图元素的方法。

- 复制与粘贴元素：说明如何复制现有元素并在图中其他位置粘贴，提高编辑效率。

3、元素编辑技巧：讲解对已创建元素进行调整和美化的实用技巧。

- 调整元素大小与位置：介绍通过拖动控制点调整元素大小，以及移动元素到合适位置的方法。

- 设置元素标签与样式：说明如何为元素添加文字标签，并修改其颜色、边框等样式属性。

- 对齐与分布元素：演示使用对齐工具使多个元素排列整齐，保持流程图的规整美观。

- 实践练习：创建简单实验流程的基本框架：引导用户动手创建一个包含基本元素的实验流程图框架。

三、连接关系与样式设置

1、连接关系创建：详细介绍如何在流程图元素之间建立连接线，表达步骤之间的顺序与关系。

- 使用连接工具创建连线：演示通过连接工具在节点之间绘制连线的具体操作步骤。

- 设置连线方向与路径：说明如何调整连线的方向与弯曲路径，以适应不同的布局需求。

- 添加连接标签：介绍为连线添加文字说明的方法，增强流程图的表达力。

2、样式设置：深入讲解如何对节点和连线进行样式自定义，提升流程图的专业性与美观度。

- 节点样式（颜色、填充、边框）：介绍修改节点填充颜色、边框线条及阴影效果的具体选项。

- 连线样式（线型、颜色、箭头）：说明如何更改连线的类型、颜色及箭头样式，以区分不同关系。

- 文本样式（字体、大小、颜色）：讲解调整节点与连线标签的字体、字号和颜色的方法。

3、样式复用与模板：介绍如何保存常用样式并应用于其他元素，提高设计效率。

- 使用样式面板保存常用样式：演示将自定义样式保存到样式面板，方便后续快速调用。

- 应用预设样式模板：说明如何使用软件内置的样式模板快速统一流程图的外观风格。

- 自定义样式模板：指导用户创建个人常用的样式模板，便于在多个项目中保持一致性。

- 实践练习：完善实验流程图的连接关系与样式：引导用户为之前创建的流程图添加连接线并应用样式设置。

四、自动布局与高级功能

- 自动布局功能：详细介绍draw.io提供的多种自动布局算法及其适用场景。

- 层级布局（Hierarchical）：说明层级布局的特点，适用于具有明显层次结构的流程图。

- 正交布局（Orthogonal）：介绍正交布局的优势，能够生成横平竖直的连线，使图表更整洁。

- 圆形布局（Circular）：演示圆形布局的适用情况，常用于展示循环或环状关系。

- 树形布局（Tree）：讲解树形布局的应用，适合表现树状或分支结构的数据。

- 布局参数调整：说明如何根据具体需求对自动布局的结果进行微调与优化。
 - 间距与边距设置：介绍调整元素之间间距和图表边距的方法，改善整体布局的紧凑度。
 - 方向与对齐方式：演示修改布局方向（如从上到下、从左到右）及对齐方式的操作。
 - 自定义布局规则：讲解通过设置规则约束布局行为，满足特定的排版要求。
- 高级功能：介绍draw.io中一些进阶功能，帮助用户更高效地管理复杂图表。
 - 子图与分组功能：说明如何将相关元素组合为子图或分组，便于整体移动和管理。
 - 图层管理：介绍使用图层功能分层管理图表元素，提高编辑的灵活性与条理性。
 - 注释与标记工具：演示添加文字注释、图形标记等辅助元素，增强图表的说明性。
- 实践练习：使用自动布局优化复杂实验流程图：指导用户对复杂流程图应用自动布局并进行调整优化。

五、AI赋能draw.io进行流程图制作

1、编写提示词（四要素）

- 角色：告诉AI你是化工流程图专家
- 任务：明确要生成什么流程（如“原子吸收测锌”）
- 格式：要求列表、每步一句话、标注符号类型
- 细节：是否需要分支、颜色、阶段划分

2、获取AI输出

- 将提示词输入DeepSeek，得到步骤列表。AI可能输出类似：
 - 样品前处理 - 矩形
 - 配制标准系列 - 矩形
 - 仪器预热 - 矩形
 - 测定标准吸光度 - 矩形

- 吸光度合格? - 菱形（是→计算，否→加标回收）
- 计算浓度 - 矩形
- 结束 - 圆角矩形

3、人工修正与补充

- 补充遗漏的“开始”和“结束”圆角矩形
- 检查符号是否正确（如“计算”不能用菱形）
- 补充分支条件标签（“是/否”）
- 合并过于细碎的步骤，拆分过于粗略的步骤

4、在draw.io中绘图

- 按修正后的列表拖放图形
- 使用对齐工具保持整洁
- 添加标题和阶段颜色（准备蓝、测定绿、处理橙）
- 导出PNG

课程名称	化工计算	专业班级	石化 241
教材名称	《实用化学化工计算机软件基础》		
授课题目	第四章 化学结构绘图软件 ChemDraw		
授课学时	6 学时		
课 型	理论 ()；实验 ()；见习 ()；实训 (<input checked="" type="checkbox"/>)；其它 ()		
教学目标	<p>一、知识目标：掌握化学结构绘图软件 ChemDraw 的核心功能模块（如化学键绘制、原子符号编辑、结构模板调用、立体化学表示）及操作原理，</p> <p>二、能力目标：培养和提升学生运用 ChemDraw 软件绘制复杂有机化合物结构（如环状化合物、立体异构体、反应机理图）的实操能力</p> <p>三、思政目标：注重引导学生在 ChemDraw 操作中培养化学结构绘制的严谨性与规范性意识。</p>		
教学重点	掌握化学结构绘图软件 ChemDraw 的核心功能模块		
教学难点	培养和提升学生运用 ChemDraw 软件绘制复杂有机化合物结构		
教学方法	讲授 ()；讨论 (<input checked="" type="checkbox"/>)；指导 ()；示教 (<input checked="" type="checkbox"/>)；其它 ()		
电子教案	有 (<input checked="" type="checkbox"/>)	Microsoft PowerPoint (<input checked="" type="checkbox"/>)；Author ware ()；其它 ()	
	无 ()		
教学资源	多媒体 (<input checked="" type="checkbox"/>)；模型 ()；标本 ()；实物 ()；音像 (<input checked="" type="checkbox"/>)；其它 ()		
教学过程 时间安排	6 学时		
思 考 题	见教材		
作 业	上机练习		

ChemDraw化学结构绘图软件

一、软件介绍与基础操作

1.1 软件界面介绍

- 菜单栏功能概述：详细介绍File（文件）菜单的新建、打开、保存与导出功能；Edit（编辑）菜单的复制、粘贴、撤销与重做操作；View（视图）菜单的缩放、旋转与显示选项设置；Object（对象）菜单的对象选择、组合与对齐方式；Structure（结构）菜单的结构优化与转换工具；Analysis（分析）菜单的分子属性计算与谱图模拟功能等。
- 工具栏详解：选择工具用于选取和移动分子中的原子与键；绘图工具包括链工具、环工具与片段工具，用于快速构建分子骨架；文本工具用于添加原子符号、电荷标注与注释信息；箭头工具提供反应箭头、电子转移箭头等多种箭头类型，便于绘制反应机理。
- 状态栏与属性面板的使用：状态栏实时显示当前操作提示与坐标信息，属性面板则用于调整所选原子、键或对象的详细参数，如颜色、线型、字体大小等。

1.2 基本绘图操作

- 绘制碳链：使用Chain工具通过点击和拖拽快速构建直链或支链碳骨架，支持自动补充氢原子。
- 原子与键的编辑：通过右键菜单或属性面板添加杂原子（如氧、氮、硫），调整键长、键角与键型（单键、双键、三键），并可对键进行旋转与拉伸操作。
- 文本标注：学习如何添加原子符号（如C、H、O）、形式电荷（正负电荷）与孤对电子的标注，掌握字体、大小与位置的调整方法。

1.3 实践任务

绘制以下分子结构：

1. 乙烷 (Ethane)：绘制包含两个碳原子的直链烷烃结构，展示单键连接与氢原子自动补充。
2. 乙醇 (Ethanol)：构建一个羟基连接的乙烷结构，注意氧原子的杂化与键型设置。
3. 乙酸 (Acetic acid)：绘制包含羧基的乙酸分子，演示双键与极性键的表示方法。

4. 苯 (Benzene): 使用环工具快速绘制苯环, 并添加共振结构符号以表示芳香性。

二、高级结构绘制技巧

2.1 立体化学表示

- 楔形键的使用: 详细说明实楔形键 (表示键朝向观察者) 与虚楔形键 (表示键远离观察者) 在立体结构中的区别与应用场景。
- 手性中心的表示方法: 学习如何标注R/S构型, 包括原子序数优先级比较与立体取向的图形表示。
- 环状化合物的立体结构绘制: 演示环己烷椅式构象的绘制步骤, 以及取代基的轴向与平伏键位置标注。

2.2 复杂结构绘制

- 多环化合物的绘制技巧: 介绍桥环、螺环与稠环的绘制方法, 包括环的连接、共用原子处理与结构优化。
- 生物分子结构: 氨基酸、核苷酸的绘制: 展示氨基酸的氨基、羧基与侧链的绘制, 以及核苷酸的碱基、糖环与磷酸基团的组合技巧。
- 聚合物结构的表示方法: 学习如何绘制聚合物重复单元, 使用括号与下标表示聚合度, 并添加端基与连接键。

2.3 实践任务

绘制以下立体结构:

1. (R)-乳酸 ((R)-Lactic acid): 构建含手性碳的乳酸分子, 标注R构型并正确使用楔形键表示立体化学。
2. 葡萄糖 (Glucose) 的 Haworth 投影式: 绘制吡喃环形式的葡萄糖结构, 展示羟基的 α/β 异构体表示方法。
3. 胆固醇 (Cholesterol) 的结构: 绘制复杂的甾体骨架, 包括多个环的连接、角甲基与羟基的立体取向标注。

三、反应式与机理绘制

3.1 反应式编辑

- 反应箭头的使用: 介绍平衡箭头 (表示可逆反应)、反应箭头 (表示单向反应) 与共振箭头 (表示电子离域) 的插入与调整方法。
- 反应条件的标注: 学习在箭头上方或下方添加温度、溶剂、催化剂等反应条件文本, 并设置字体格式与位置。

- 多步反应的排版技巧：演示如何对齐多个反应步骤，使用编号或字母标识，并调整箭头长度与布局以保持整洁。

3.2 反应机理绘制

- 电子转移箭头的绘制：说明单箭头（表示单电子转移）与双箭头（表示电子对转移）在机理中的区别，以及弯曲箭头的绘制技巧。
- 中间体与过渡态的表示方法：学习绘制带电荷的中间体（如碳正离子、碳负离子）以及用方括号表示的过渡态结构。
- 常见反应机理示例：亲核取代、消除反应：通过具体例子展示SN2反应中的亲核进攻与离去，以及E2反应中 β -消除的箭头表示。

3.3 实践任务

绘制以下反应机理：

1. SN2反应：溴乙烷与氢氧化钠的反应：展示氢氧根亲核进攻碳原子、溴离去与产物乙醇的形成过程。
2. E2反应：2-溴丁烷的消除反应：绘制碱夺取 β -氢、双键形成与溴离子离去的协同机理。
3. 亲电加成：乙烯与溴的加成反应：演示溴分子极化、环状溴鎓离子形成与溴负离子反式加成的步骤。

四、结构分析与属性计算

4.1 结构优化工具

- 使用 *Clean Up Structure* 功能优化分子结构：自动调整键长、键角至标准值，改善结构布局与美观度。
- 调整键长、键角与扭转角：手动微调特定参数，以适应特殊结构需求或立体化学表示。
- 立体结构的3D预览与调整：通过3D视图旋转分子，检查立体构型，并可手动调整原子坐标以获得最佳视角。

4.2 属性计算功能

- 分子量、分子式的自动计算：选择分子后，软件自动显示精确分子量与分子式（包括同位素信息）。
- 物理化学性质预测：沸点、熔点、溶解度：基于内置算法估算化合物的基础物性参数，辅助实验设计。
- 光谱数据预测：IR、NMR谱图模拟：生成模拟红外光谱（显示特征吸收峰）与核磁共振谱（预测化学位移与裂分模式）。

4.3 实践任务

1. 优化阿司匹林 (Aspirin) 的分子结构: 对乙酰水杨酸进行结构清理, 调整羧基与酯基的键长与角度。
2. 计算咖啡因 (Caffeine) 的物理化学性质: 获取咖啡因的分子量、熔点预测值与水溶性估算结果。
3. 模拟苯的NMR谱图: 生成苯的¹H NMR模拟谱图, 展示单峰化学位移 (约7.2 ppm) 与峰形特征。

五、谱图绘制与数据整合

5.1 谱图绘制工具

- NMR谱图绘制: 学习添加化学位移坐标、标注峰位与积分值, 调整峰形 (如单峰、双峰、多重峰) 与线宽。
- IR谱图绘制: 绘制波长或波数坐标轴, 标注特征吸收峰 (如O-H伸缩、C=O伸缩) 并添加注释文本。
- 质谱图绘制: 设置质荷比 (m/z) 坐标, 标注分子离子峰与碎片离子峰, 调整相对丰度柱状图高度。

5.2 数据整合技巧

- 实验数据与谱图的关联方法: 将实测数据导入软件, 与模拟谱图叠加对比, 并添加差异分析注释。
- 谱图与分子结构的同步显示: 在同一个文档窗口中并排显示分子结构与其对应谱图, 便于直观关联。
- 多谱图的排版与对比分析: 将NMR、IR、质谱等多种谱图排列在同一版面, 添加标题与图例以进行综合解析。

5.3 实践任务

1. 绘制乙酸乙酯的¹H NMR谱图: 标注甲基单峰 (约2.0 ppm)、亚甲基四重峰 (约4.1 ppm) 与甲基三重峰 (约1.2 ppm)。
2. 绘制乙醇的IR谱图: 标注O-H宽峰 (约3300 cm⁻¹)、C-H伸缩峰 (约2900 cm⁻¹) 与C-O伸缩峰 (约1100 cm⁻¹)。
3. 整合苯甲酸的NMR与IR数据: 在同一个报告中展示苯甲酸的结构、NMR谱图 (芳香区与羧基质子信号) 与IR谱图 (羧基特征峰), 并添加简要解析说明。