

面向化学“101计划”结构化学实践与应用课程建设的探索

石文, 韦张文, 潘梅*, 苏成勇*

中山大学化学学院, 生物无机与合成化学教育部重点实验室, 广东省高等学校功能分子工程基础研究卓越中心, 中山大学绿色化学与分子工程研究院, Lehn功能材料研究所, 广州 510006

摘要: 针对化学“101计划”课程建设和培养目标的更高要求, 为使学生更好地理解、掌握结构化学理论课程的重要知识点, 并能够应用基本原理和理论分析、解决实际化学问题, 我们在原结构化学模型实习课程的基础上, 新开设了结构化学实践与应用课程, 并进行了系统的课程设计和建设。我们将传统的课堂教学与信息化实践教学相结合, 启发学生在实践与应用中深入地理解并熟练地掌握专业基础知识。通过构建教研共同体课堂, 激发学生学习兴趣和探索科学问题的热情, 激励学生树立勇担国家科技创新之大任的志向。通过构建以学习者为中心的参与式教学模式, 培养学生自主学习的能力。

关键词: 化学“101计划”; 结构化学; 实践与应用; 课程建设

中图分类号: G64; O6

Explorations on the Course Construction of Structural Chemistry Practice and Application Targeting the Chemistry “101 Plan”

Wen Shi, Zhangwen Wei, Mei Pan*, Chengyong Su*

MOE Laboratory of Bioinorganic and Synthetic Chemistry, Lehn Institute of Functional Materials, Guangdong Basic Research Center of Excellence for Functional Molecular Engineering, Institute of Green Chemistry and Molecular Engineering, School of Chemistry, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510006, China.

Abstract: In response to the elevated requirements of the Chemistry “101 Plan” curriculum and training objectives, a new course titled “Practice and Application of Structural Chemistry” has been developed. This course builds upon the previous “Structural Chemistry Modeling Practices” course and aims to help students better understand and master key concepts in Structural Chemistry, as well as apply fundamental principles to solve practical chemical problems. The course integrates traditional classroom teaching with digital and practical instructional methods to enhance students’ comprehension and proficiency in core knowledge. By establishing a teaching and research community, the course stimulates students’ interest and enthusiasm for scientific exploration and encourages them to aspire to contribute to national scientific and technological innovation. The learner-centered participatory teaching model is employed to foster students’ ability to learn independently.

Key Words: Chemistry “101 Plan”; Structural chemistry; Practice and application; Course construction

1 结构化学实践与应用课程简介

结构化学^[1]是运用现代量子力学基本原理, 从微观层级揭示原子、分子、固体的结构、运动规律

收稿: 2024-09-06; 录用: 2024-09-11; 网络发表: 2024-09-23

*通讯作者, Emails: panm@mail.sysu.edu.cn (潘梅); cecscy@mail.sysu.edu.cn (苏成勇)

基金资助: 高等教育质量保障专项(化学“101计划”专项); 国家重点研发计划(2021YFA1500401); 自然科学基金(22171291, 92261114, 21821003); 广东省一流本科课程; 中山大学本科质量工程建设项目

及物质结构与其物理、化学性质内在关联的科学。该课程中所涉及的理论知识不但是化学科学各分支领域的重要基础，还被广泛地运用到材料、生命、环境等科学^[2]。因此，在化学类本科课程教学中，结构化学课程意义重大，并成为中山大学化学学院各本科专业的一门重要基础理论课程。然而，结构化学课程的内容本身具有很强的理论性和抽象性，要求学生具备较好的化学、物理和数学基础知识，同时具备严谨的思维、严密的推理能力和优秀的空间想象力。因此，这为该课程的讲授和学习都带来了极大挑战，也为如何启发学生将课程的理论知识在日后应用于解决实际化学问题提出了挑战^[3]。

教育部在2023年4月启动了包括化学学科在内的基础学科系列“101计划”，旨在以高等教育强国建设为目标，全方位提高人才自主培养质量，为新时代培养基础学科拔尖创新人才。在此要求下，为了使学生更好地掌握结构化学课程的重要理论知识，逐步形成由浅入深、由表及里、由现象到本质的认识升华，并培养学生能够应用理论知识分析、理解和解决化学问题的核心能力。我们基于结构化学知识体系特点，在原来结构化学模型课程的基础上，为化学类本科二年级学生新开设结构化学实践与应用课程，系统地进行该课程的设计和建设，尝试运用直观建模和抽象理解、定性认识和定量计算、传统教学和信息化教学相结合的教学方法，努力探索高校化学课程高质量育人新范式。

2 结构化学实践与应用课程内容设计思路

结构化学实践与应用课程的核心目标是使学生进一步深化对结构化学课程的重要理论知识的理解，并在此基础上，使学生熟练掌握运用这些知识及相关的技能，如现代量子化学计算软件、分子结构模型等，理解、解决实际化学问题，进而帮助学生培养严谨的科学态度、精益求精的治学精神和夯实基础科学知识。该课程总计18学时，每次讲授2个学时，共安排9次实习。每次实习内容均与结构化学课程相关章节对应。实习次序、名称及主要教学内容见表1。

表1 结构化学实践与应用课程实习次序、名称和主要教学内容

次序	实习名称	主要教学内容
1	原子的结构和性质	掌握使用GaussView软件建立原子结构模型；掌握使用Gaussian软件进行原子电子结构计算的基本设置，并计算单电子原子和多电子原子的轨道图形
2	双原子分子的结构化学	掌握运用Gaussian软件探究双原子分子的解离行为，计算双原子轨道图形、能级和静电势图
3	分子的对称性	掌握使用球棍模型搭建分子结构，并指认它们的对称元素和对称性
4	共轭分子的结构化学	掌握使用Gaussian软件计算共轭分子电环化反应的反应热并探究线性共轭烯烃分子的轨道能级和能隙的演化
5	多原子分子和配合物	基于VSEPR理论，使用球棍模型搭建多种典型的多原子分子；学习使用Materials Studio的Forcite模块和Dmol ³ 模块模拟分子结构和芳香体系的 π 轨道
6	晶体结构	通过使用模型搭建出相应的点阵格子和晶体模型，直观地理解和掌握点阵和平移对称性的相关内容。掌握六大晶族，七大晶系，14种布拉维格子；掌握金刚石、六方石墨和三方石墨3种典型的碳单质的晶体结构
7	晶体结构解析和模拟	掌握用Olex2和Shelx软件进行简单的晶体结构解析；掌握用Materials Studio软件模拟简单的晶体结构
8	金属晶体结构和绘图软件	通过使用模型搭建出相应的金属晶体堆积模式，直观地理解和掌握最常见的5种金属晶体结构。掌握立方最密堆积和六方最密堆积；掌握A ₂ 、A ₄ 、简单立方密堆积；理解八面体和四面体空隙，掌握空间利用率的计算；学习用Diamond软件绘制分子和晶体结构
9	离子晶体	通过使用模型搭建出相应的离子晶体晶胞，直观地理解和掌握离子晶体结构相关的基本概念。掌握NaCl等常见典型离子晶体结构，理解填隙模型的概念；理解配位多面体及其连接方式

3 结构化学实践与应用课程的创新性

结构化学课程涉及众多理论知识和分子或晶体立体构型的知识，仅凭图片、视频、教师展示，往往不够直观，学生深入理解和掌握需要依靠想象和领悟。据了解，包括我们在内的部分学校此前或正在开设有传统的结构化学模型实习课或在理论课上附带少量的模型实习和量子计算软件实习，但大多不够系统和前沿。我们的结构化学实践与应用课程在此基础上，联合使用信息化教学方式，教授学生使用目前学科前沿中所应用的多种计算模拟软件、晶体解析软件、化学结构绘图软件。“授人以鱼不如授人以渔”，掌握了这些软件，学生可以自行模拟、创造、绘制自己感兴趣的或需要加强学习原子或分子轨道以及分子或晶体结构。而且计算模拟、晶体解析、科研绘图也均是从事科研的必备技能，掌握这些技能，使结构化学的基础知识和科研训练紧密结合，使基础课程接地气，也使学生多掌握了一门在未来深造或工作中可能会用到的专业技能，从而有效提升学生主动学习的积极性，提高学生的动手能力。该课程的课堂教学和部分实习内容见图1。

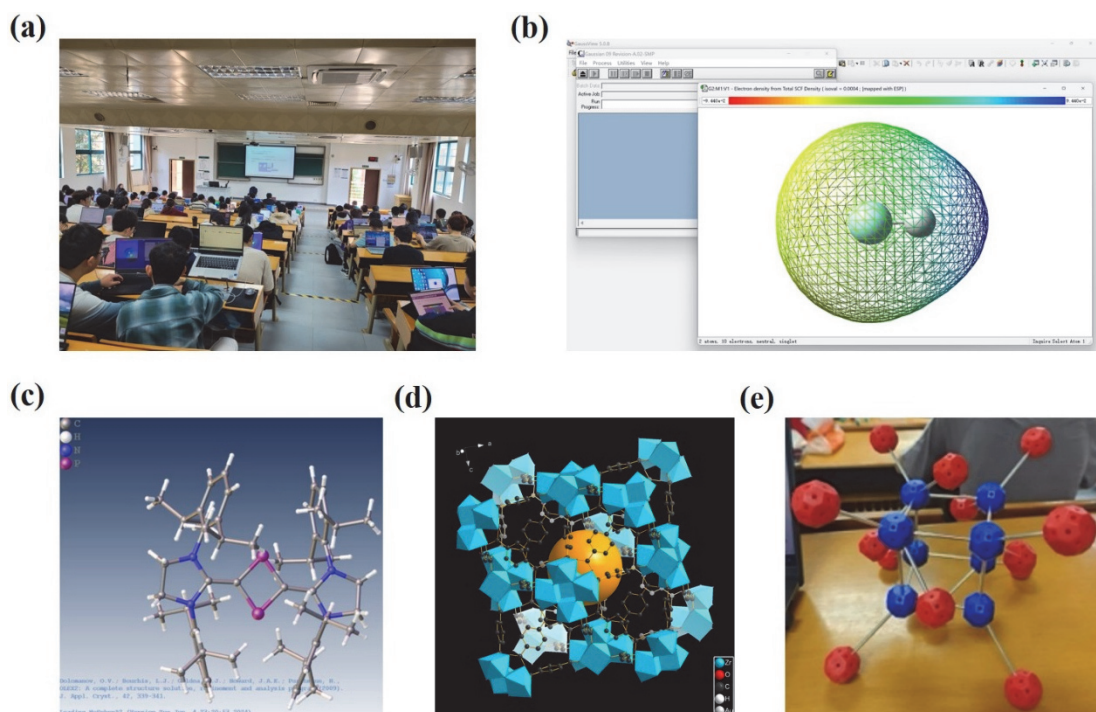


图1 结构化学实践与应用课程的课堂教学和部分实习内容

(a) 课程课堂教学图; (b) 实习1、2和4使用Gaussian软件计算分子电子结构; (c) 实习7晶体结构解析;
(d) 实习8晶体结构绘图; (e) 实习9搭建CaF₂结构模型

4 结构化学实践与应用课程的特色

4.1 在实践与应用中夯实专业基础知识

结构化学课程的最基本任务是阐明原子结合形成分子的成因，认清原子的类型和键连方式是如何影响分子的几何结构，并理解相应派生出的物理、化学性质和功能。因此，课程中所包含的众多原理背景、概念发展和逻辑推理使得该课程具有很强的理论性和抽象性^[4]。我们新开设的结构化学实践与应用课程基于理论课所学的知识要点，以实习的方式反向促进学生更加生动、直观地理解理论课基础知识，并应用于解决简单的实际化学问题，从而获得更好的教学效果。

例如，在进行实习4共轭分子的结构化学教学时，我们紧密结合结构化学课程相关部分的重点，如Hückel分子轨道理论和分子轨道对称守恒原理，教授学生利用Gaussian程序，采用密度泛函理论计

算,探索线性共轭烯烃分子的前线分子轨道能级和能隙的变化,并计算反,反-2,4-己二烯电环化反应的反应热;通过共轭分子电子结构的量子化学计算,使学生更直观、深刻地理解分子轨道能级和能隙随共轭长度的演化是 π 电子离域效应的直接体现;通过前线分子轨道和反应热的理论计算,使学生更深入地认识分子轨道的对称性对化学反应进行的难易程度及产物构象的决定性作用。此次实习的安排,不仅有助于学生们克服在学习Hückel分子轨道法处理 π 共轭分子过程中对数学推导的畏难心理,培养学生的学习和兴趣,而且有利于学生将理解教科书上的基本理论与解决实际化学问题建立联系。

在实习8和实习9中,金属晶体的堆积模式以及由此衍生出的离子晶体及其填隙模型,都需要学生准确地理解三维空间中原子的堆积方式,以及产生的空隙形状、数量、位置等信息。让学生使用球棍模型亲手搭建出相应的晶体结构,有助于学生更直观、生动、准确地理解和掌握这些空间信息。这样的实习,不仅将课本上抽象的、平面的、难以理解的三维空间知识以真正立体的方式展现在学生面前,而且锻炼了学生的动手能力,在搭建具有挑战性的复杂结构的过程中也激发了学生的求知欲和创造力。

4.2 教学与科研紧密结合,面向前沿科学研究

“师者,所以传道授业解惑也。”教学与科研并重,是新时代高校高质量内涵式发展的有力保证,也是高校实现全方位育才育人的“双动力”。因此,这就需要高校教师既需承担“传道授业”的教学任务,又需担当“解惑”的科研工作。这样,教师在科研积累的过程中,才可以为现有的知识体系不断地注入源头活水,从而开阔学生视野,深化对相关基础知识的认识,培养有研究潜力的学生从事科研工作,实现教研融通。

在实习2双原子分子的结构化学中,在教授学生使用密度泛函方法,运用Gaussian软件探究氯气分子的解离行为和Born-Oppenheimer势能面时,同时为学生介绍与此相关的前沿进展。我们介绍了Born-Oppenheimer近似的局限性,即非平衡态化学过程(如电荷转移过程、激发态动力学过程等)中,电子运动与原子核的运动相互耦合,多个电子态势能面非常接近,致使分子在不同的电子态势能面之间相互转换,即非绝热过程。因此,对这些问题的理解必须跳出该近似框架才能获得合理的解释。在实习4共轭分子的结构化学中,我们以前沿领域 π 功能电子材料为切入点,简要介绍其在光、电、热、磁等方面所表现出的独特功能,及其在显示照明、电子皮肤、有机光伏、软体机器人等领域的应用前景。在实习中,前沿科学问题的介绍和基础知识的教学紧密结合,启发了学生们大胆质疑、勇于打破现有知识束缚、创造新知识的科学精神。

在实习8晶体结构的解析、模拟和绘图中,我们选取最新发表的有机化学中卡宾稳定的二磷化二碳分子的晶体结构作为实习案例^[5],讲授了整个晶体结构确定流程,包括样品的准备和挑选、单晶仪的操作和流程以及晶体数据的后处理和完整解析步骤。将课堂上所学习到的不对称单元、空间群、晶胞信息、X射线单晶衍射等内容在一线科研中的应用展现在学生们面前,并学习了实用的科研技能。这样的讲授和操作,使基础理论知识从空中楼阁落地成为根基深厚的科研大厦,激发了学生的学习兴趣 and 热情。在晶体结构绘图中,选取经典的金属有机框架材料UiO-66作为案例^[6],讲解这一经典超分子框架配合物的多孔结构,并教授实用的科研绘图技能,使学生可以学会如何准确、生动地绘制和展示一个化学结构。这一实用技能对未来他们撰写论文、走上讲台都非常实用。

“知之者不如好之者,好之者不如乐之者。”因此,在结构化学实践与应用课程的教学过程中,将课本基础知识与科研前沿进展密切结合,不仅是要培养热爱学习现有知识的“好之者”,更要培养勇于突破现有知识束缚,创造新知识的“乐之者”。

4.3 构建师生互动式教学模式

1998年诺贝尔化学奖授予量子化学家Kohn和Pople,颁奖公报指出:“量子化学已经发展成为广大化学家使用的工具,将化学带入一个与实验和理论可以相互配合探讨分子体系性质的新时代,化学不再是纯实验科学了”。2013年诺贝尔化学奖再次授予理论化学家Karplus、Levitt和Warshel,在颁

奖公报中说到“如今对化学家来说，电脑同试管一样重要”；“通过模拟，化学家能获得比传统实验更快速、更精准的预测结果^[7]”。迄今，基于量子化学理论发展的量子化学计算方法，已被广泛应用于化学、材料、生物等学科。因此，使学生在掌握结构化学理论知识的同时，初步学习基本量子化学计算程序的操作与应用，不仅有助于深化对抽象理论的具象化理解，还能够显著激发学生的学习、探索兴趣。

我们在实习1、2和4中教授学生使用在Windows操作系统下的GaussView软件，绘制分子结构，并使用Gaussian软件，采用Hartree-Fock理论、密度泛函理论和后Hartree-Fock方法，对双原子分子和多原子分子进行几何结构优化、电子结构计算、前线轨道图绘制、静电势分布图绘制和解离行为的探索。在这几次实习课上，我们引入以学习者为中心的师生互动式课堂教学模式，以作为对传统讲授式教学的补充，旨在秉承“授人以鱼，不如授人以渔”的教学理念，从而提升学生的学习积极性和参与度，激发学生自主学习知识的兴趣和主动思考相关前沿科学问题的热情，提高素质化教学效果。在课前，教师先行让学生按照讲义预习上机操作内容和步骤；在课上，随机抽取若干学生在讲台上进行部分环节的演示，从而达到台上学生演示讲授、台下学生学习操作、教师提问点评的互动效果。通过这种教学模式，我们发现学生可以更容易地掌握量子化学计算的基本操作，更清楚地理解原子轨道、电子态势能面、分子轨道、电荷密度、基组、交换-相关能泛函等理论知识。

在实习9的课堂上，教师在回顾了离子晶体的填隙模型的基本知识后，让学生分组并搭建晶体模型。然后请搭好相应模型的同学上台，展示他们搭建好的精巧的结构模型，并分享该模型的相关结构知识，包括负离子密堆积种类、正离子占据的空隙等，教师现场进行点评和指正。这样的教学方式调动了学生上台展示的积极性，在活跃的气氛中提高了学生对相关结构化学知识的掌握和领悟。

5 结语

配合101计划的化学专业课程建设，我们基于结构化学知识体系特点，新开设了结构化学实践与应用课程，系统地进行了该课程的设计和建设。我们将传统的课堂教学与信息化实践教学相结合，将结构化学经典的球棍模型实习与学科前沿中的多种计算模拟软件、晶体解析软件、化学结构绘图软件的运用进行融合教学，启发学生在具体的实践与应用中夯实结构化学的专业基础知识，了解学科前沿。通过构建教研共同体课堂，激发学生求知求索的热情，培养学生自主学习的能力和习惯，提高科研素养。“路漫漫其修远兮，吾将上下而求索”，我们将继续践行立德树人的初心使命，在不断尝试和探索中，深化结构化学实践与应用课程的建设。

参 考 文 献

- [1] 周公度, 段连运. 结构化学基础. 第5版. 北京: 北京大学出版社, 2017.
- [2] 徐光宪, 王祥云. 物质结构. 第2版. 北京: 科学出版社, 2021.
- [3] 潘梅, 李超捷, 刘媛媛. 大学化学, **2022**, 37 (10), 2108006.
- [4] 路慧哲, 张莉, 段红霞, 马琛. 大学化学, **2018**, 33 (2), 36.
- [5] Li, Z.; Chen, X.; Andrada, D. M.; Frenking, G.; Benkő, Z.; Li, Y.; Harmer, J. R.; Su, C.-Y.; Grützmacher, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 5744.
- [6] Cavka, J. H.; Jakobsen, S.; Olsbye, U.; Guillou, N.; Lamberti, C.; Bordiga, S.; Lillerud, K. P. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 13850.
- [7] 国家自然科学基金委员会, 中国科学院. 中国学科发展战略·理论与计算化学. 北京: 科学出版社, 2021.