

“薛定谔方程-近似模型-核心概念-简单应用” ——构建原子/分子结构教学内容的逻辑框架与知识点图谱

王文亮^{1,2,*}, 王渭娜², 王素凡¹, 盛天¹, 周涛¹, 魏南¹

¹安徽师范大学化学与材料科学学院, 安徽 芜湖 241000

²陕西师范大学化学化工学院, 西安 710119

摘要: 针对结构化学课程知识点繁多和概念碎片化、学生难以形成学科框架和完整知识体系的困境, 本文提出以“薛定谔方程-近似模型-核心概念-简单应用”为主线, 以一维势箱自由粒子模型、单电子类H体系、多电子原子、 H_2^+ 分子离子、 H_2 分子、多原子分子等“六条分支”来构建学科的逻辑框架与知识点图谱。使碎片化的知识重构关联, 形成完整的知识链, 帮助学生理解重要概念的逻辑关系、产生脉络及相互联系, 并且为学生提供知识迁移的情境, 达到知识理解与运用的目的。

关键词: 原子结构; 分子结构; 概念碎片化; 结构化重构; 知识点图谱

中图分类号: G64; O6

“Schrödinger Equation – Approximate Models – Core Concepts – Simple Applications”: Constructing a Logical Framework and Knowledge Graph of Atom and Molecule Structures

Wenliang Wang^{1,2,*}, Weina Wang², Sufan Wang¹, Tian Sheng¹, Tao Zhou¹, Nan Wei¹

¹ School of Chemistry and Materials Science, Anhui Normal University, Wuhu 241000, Anhui Province, China.

² School of Chemistry and Chemical Engineering, Shaanxi Normal University, Xi'an 710119, China.

Abstract: In response to the challenges of numerous knowledge points and fragmented concepts in the structural chemistry course, as well as the difficulty for students to establish a disciplinary framework and a comprehensive knowledge system, this paper proposed a logical framework and knowledge graph, based on the thematic thread of “Schrödinger equation approximation models – core concepts – simple applications”. This framework includes six branches: particle in box model, single electron hydrogen-like atoms, multi-electron atoms, H_2^+ molecular, H_2 molecules, and multi-atom molecules. By reconstructing fragmented knowledge and forming a complete knowledge chain, this approach aims to help students understand the logical relationships, generation context and interconnections of important concepts, and provides them with a context for knowledge transfer, ultimately facilitating their understanding and application of knowledge.

Key Words: Atomic structure; Molecular structure; Fragmented concepts; structural reconstruction; Knowledge graph

收稿: 2023-12-25; 录用: 2024-02-01; 网络发表: 2024-02-22

*通讯作者, Email: wliwang@snnu.edu.cn

基金资助: 安徽省课程思政(结构化学)和陕西省一流课程(结构化学)资助课题

结构化学课程是化学类本科各专业重要的必修课之一，是一门理论性很强的主干课程，是深入理解化学现象及研究化学问题的基础与阶梯。其中原子结构、分子结构是此课程最重要的教学内容，也是教学中最大的难点。由于这部分内容是在量子力学基础上展开，涉及数理知识多、处理过程繁杂、概念抽象，初学者往往不得要领，被繁杂的数理推导过程所迷惑，常有雾里看花、难学难懂之感。近年来微课、微视频等新型教学形式的出现，使学生们获取知识的手段越来越快捷方便，但同时也使知识信息碎片化，学生们获取的是一大堆碎片化的知识点和抽象的概念，难以形成学科框架和完整的知识链^[1]，难以转化为解决问题的能力。2004年王文亮等人提出框架结构教学法的观点^[2]，其核心思想是：教师在课堂上的讲授不能过于关注细节，讲得太多太细，不能只见树木不见森林，而是引导学生通过树木发现森林、认识森林。课堂讲授应着重阐述知识结构框架及知识点之间的联系、关键内容及重要结论等。在引导学生理清思路后再选择重点或难点等关键内容进行重点讲授，并挖掘显性知识背后隐含的规律。这样的讲授才有利于激发学生的求知欲，达到举一反三的目的，学生自然也就获得了探索知识的主动权，最终转化为创新能力。上轮的教学改革使课时被大幅压缩，采用传统讲授方式根本无法完成教学大纲规定内容，这是当时笔者提出框架结构教学法观点的初衷。实践证明，框架结构教学法的思想是合理可行的。在此基础上，针对目前知识碎片化的趋势，我们前文以“抽取共性-讲透典型-衍生个性，构建晶体结构知识点图谱”为题^[3]，以“共性-典型-个性”为展开主线，构建了晶体结构知识点关联，论述了晶体结构教学中的方法论，目的是试图使碎片化的知识发生关联，形成完整的知识链。本文将针对本科结构化学教学中的原子分子结构部分存在问题，提出以“薛定谔方程-近似模型-核心概念-简单应用”为主线，来构建原子/分子结构教学内容的逻辑框架与知识点的图谱。

1 原子/分子结构教学内容逻辑框架与知识点图谱的建构

只基于知识点的教学不能培养学生的创新能力，而基于思维方式培养的教学才具有创造性，才能发展学生化学学科的核心素养。所以，必须深入知识的背后，理解学科解决问题的思维方式，通过重整碎片化的知识点，来构建学科框架和知识点图谱。本文构建的图谱既不同于一般的思维导图，也不是章节知识点的简单树图。目前一般的思维导图和知识点树图主要关注章节内容的层级结构^[4]及知识点本身^[5]，未能揭示内容的内在逻辑以及由此引出的概念之间的联系，没有起到充分整合碎片化知识点的功能。本文基于目前国内主流结构化学教材中^[6-9]原子、分子教学内容来构建知识点产生的逻辑框架与图谱(图1)，其核心思想是“一条主线”“六条分支”。即以“薛定谔方程-近似模型-核心概念-简单应用”为主线，基于薛定谔方程，关注求解方程过程采用的近似模型，聚焦由此引出的学科核心概念，并延伸到简单应用。除H₂分子外，其他多电子体系均采用轨道近似方案。原子体系薛定谔方程求解基于中心力场近似或自洽场近似模型，分子体系方程求解均采用线性变分法近似。“六条分支”是指分别按一维势箱自由电子模型、类H体系、多电子原子、H₂⁺分子离子、H₂分子、多原子分子等六类体系陈述方程的求解过程、采用的近似方案、引出相关核心概念及简单应用，构成了完整的原子/分子结构教学内容的逻辑框架与知识点图谱。我们认为这种图谱能够帮助学生理解学科知识的逻辑架构，理清重要概念的产生脉络、相互关联、应用前景等。并且为学生提供知识迁移的情境，展现多角度的透视，引发多联想式的思考，引导学生自主完成知识构建，自觉地从多维立体交叉思维代替简单的线性因果联想^[10]。

下面以图1中的分支三代表的多电子原子为例来具体说明图谱的含义。从多电子原子的薛定谔方程(1)出发，基于轨道近似(单电子近似)模型，将多电子方程拆分为单电子薛定谔方程(2)。

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Z}{r_i} + \sum_{i=1}^N \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \right] \Psi = E \Psi \quad (1)$$

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + u_i(\vec{r}_i) \right] \psi(i) = E(i)\psi(i) \quad (2)$$

当采用中心立场模型来表达平均分摊到*i*电子上的那部分排斥作用 $u_i(\vec{r}_i)$ 时, 就得到方程(3)和结果三的一系列表达式, 同时引出屏蔽效应、屏蔽常数、原子轨道等系列概念; 当不借助任何实验参数, 而是假定一个初始函数代入薛定谔方程采用循环迭代法求解方程时, 就得到方程(4)和结果四的表达式, 同时引出库仑积分、交换积分等系列概念。

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{(Z - \sigma_i)}{r_i} \right] \psi_i(i) = E_i\psi_i(i) \quad (3)$$

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + \sum_{j \neq i}^N \int \frac{\psi_j^2(\vec{r}_j) d\tau_j}{r_{ij}} \right] \psi(i) = E(i)\psi(i) \quad (4)$$

由于基于单电子近似得到的电子状态量子数(n, l, m)不能描述原子的状态, 即不能反映电子间的相互作用情况, 必须采用原子状态的量子数来描述, 由此引出原子角量子数 L , 原子自旋量子数 S , 原子总量子数 J 、光谱项 $^{2S+1}L_J$ 和光谱选择定则等核心概念。

同时从图1中看到, 分支三与分支二及分支四密切关联, 如分支三与二中原子轨道的概念、角度函数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ 表达式完全相同; 分支三与四均是基于轨道近似方案求解, 只是前者是原子轨道, 后者为分子轨道而已。另外, 分支三到六均引出库仑积分、交换积分等概念, 但它们的含义与表达式并不相同。在教学中剖析求解薛定谔方程所采用的近似模型、聚焦引出的核心概念及相互关联、延伸到简单应用, 必然有助于培养学生的逻辑思维和化学学科的核心素养。

2 原子/分子结构教学内容的逻辑框架与知识点图谱教学效果

从早期提出框架结构教学法, 到本文构建逻辑框架与知识点图谱, 均是强调在教学中注重凝练学科的逻辑框架以及知识点之间内在关系, 使碎片化的知识点重构, 达到串珠成链、延伸应用的效果。陕西师范大学多年教学实践表明, 这种教学法最大的特点是能够引导学生学习视角的拓宽, 由单纯关注课程知识点本身, 向同时关注知识点来龙去脉及内在关联转变, 激发了学习兴趣, 在一定程度上克服了学习结构化学的畏难情绪, 提高了学习能力, 考试成绩有了明显提升。毕业生中近年来报考理论与计算化学方向的研究生人数明显增多。走上工作岗位的师范生们也反馈, 他们对完成高中化学“物质结构与物性”课程的教学任务也较为顺手。

新版《普通高中化学课程标准》^[11]将“物质结构与性质”模块定为高中化学的选择性必修教材, 并将相关内容由原来的高考选做题调整为必做题。可以看出, 物质结构相关知识已经成为高中化学重要的组成部分, 因此对结构化学的课程教学提出了更高的要求。新课标强调, 化学教学重在发展化学学科思维, 增进化学学科理解, 培养学科核心素养。这更加说明必须改革只基于知识点的教学模式, 逐渐转变为基于思维方式与创造性培养的模式。

3 结语

本文提出以“薛定谔方程-近似模型-核心概念-简单应用”为主线, 以一维势箱自由电子模型、单电子类H体系、多电子原子、 H_2^+ 分子离子、 H_2 分子、多原子分子等“六条分支”来构建学科的逻辑框架与知识点图谱, 使碎片化的知识重构关联, 帮助生理清知识点之间的逻辑关系、重要概念产生脉络及相互联系, 并且为学生提供知识迁移的情境, 展现多角度的透视, 引发多联想式的思考, 达到知识理解与迁移运用的目的。实践证明, 构建知识点图谱教学法最大特点是能够引导学生由单纯关注课程知识点本身, 向同时关注知识点来龙去脉及内在关联转变, 激发了学习兴趣, 值得在教学中推广借鉴。

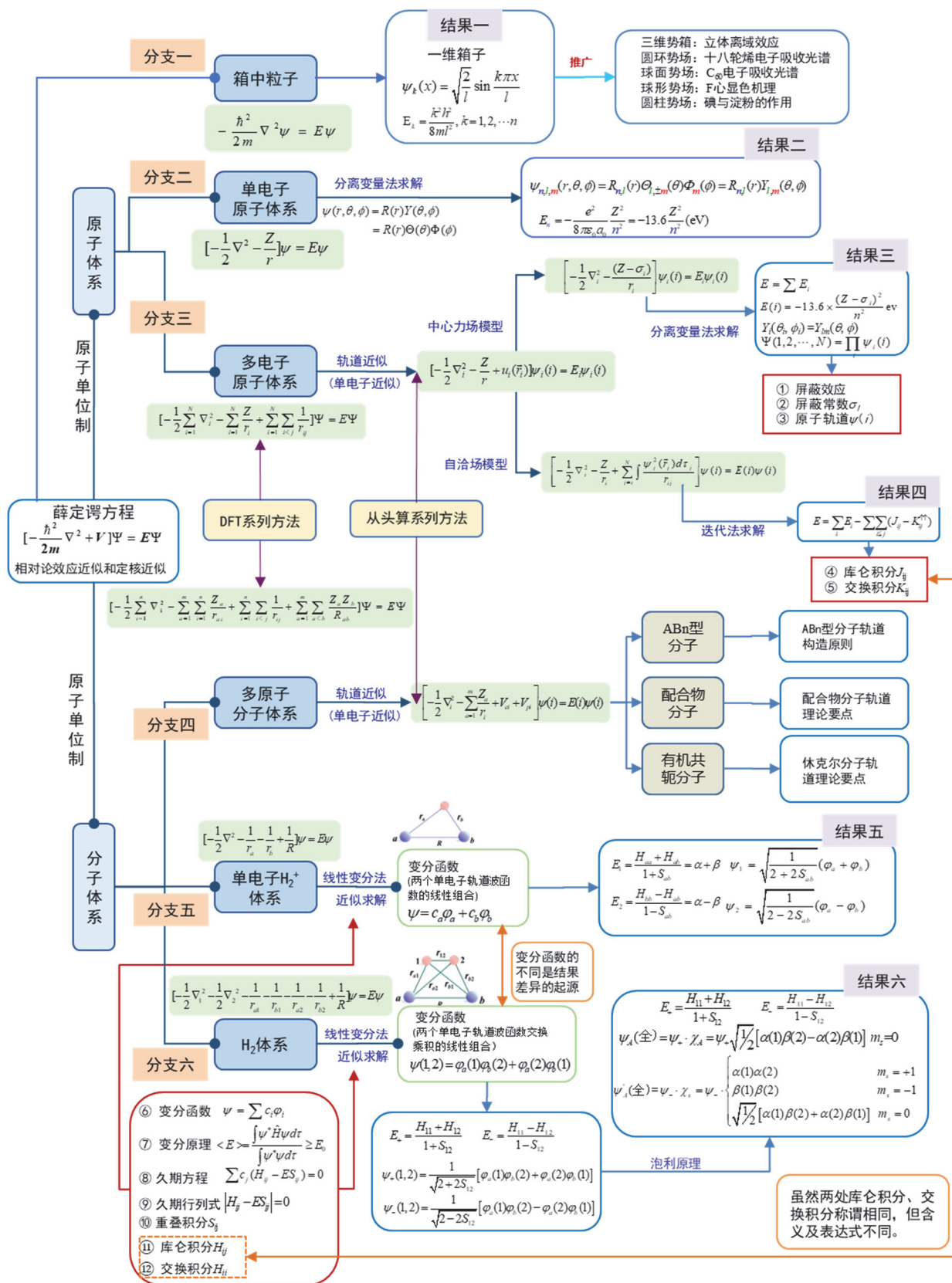


图1 原子/分子结构教学内容逻辑框架与知识点图谱

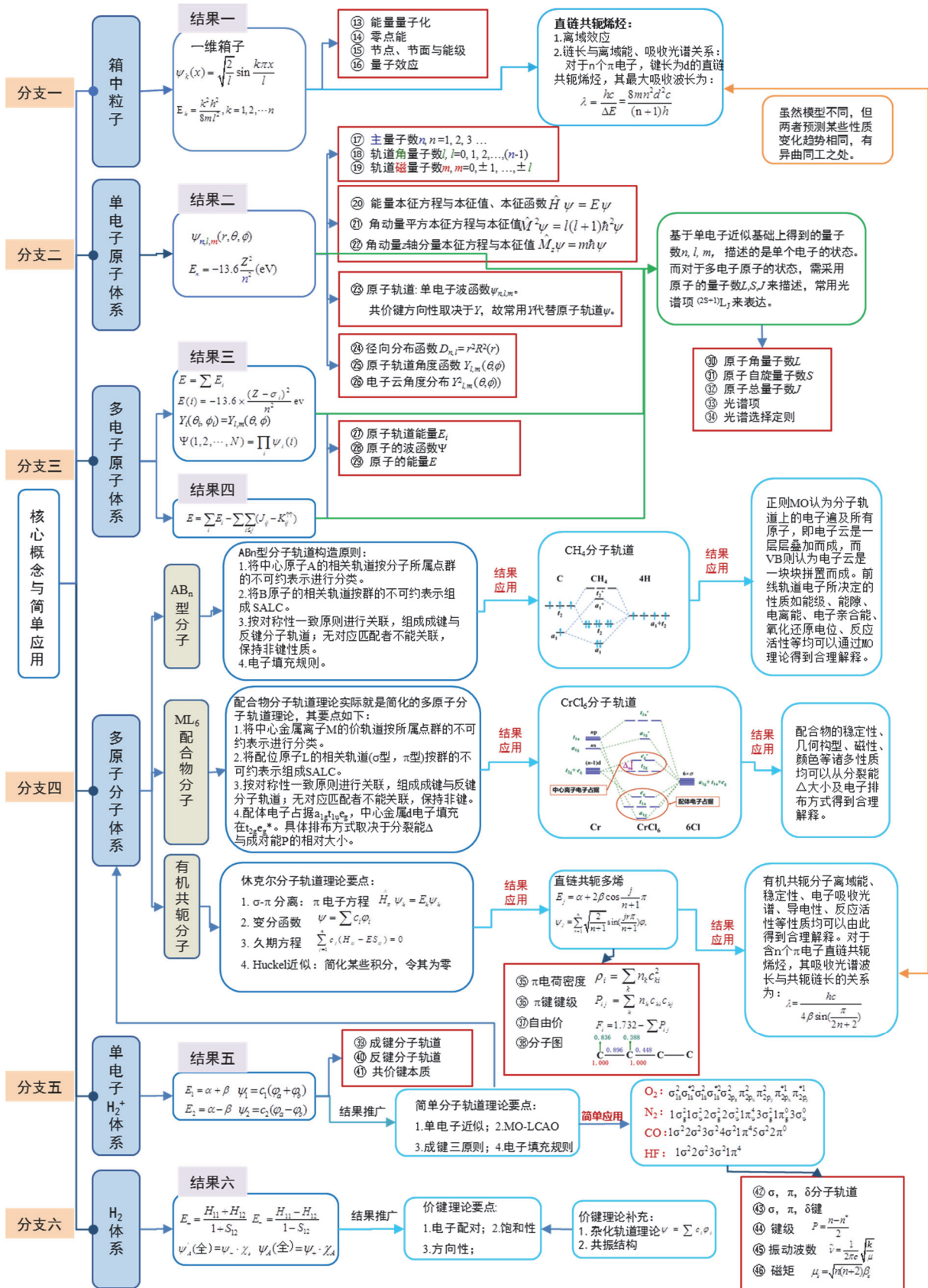


图1 (续)原子/分子结构教学内容逻辑框架与知识点图谱

参 考 文 献

- [1] 王竹立. 碎片与重构: 互联网思维重塑大教育. 北京: 电子工业出版社, 2015.
- [2] 王文亮, 胡满成. 广西师范大学学报(专刊), **2004**, No. 21, 66.
- [3] 王渭娜, 刘峰毅, 王文亮. 大学化学, **2024**, 39 (3), 36.
- [4] Muniz, M. N.; Crickmore, C.; Kirsch, J.; Beck, J. P. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2018**, 19, 767.
- [5] 杨云霞, 郭英娃, 徐敏, 麻晓娜. 化学教育, **2022**, 43 (10), 46.
- [6] 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.
- [7] 李炳瑞. 结构化学(多媒体版). 第4版. 北京: 高等教育出版社, 2020.
- [8] 孙宏伟. 结构化学. 北京: 高等教育出版社, 2016.
- [9] 厦门大学化学系物构组编. 结构化学. 第4版. 北京: 科学出版社, 2019.
- [10] 郑长龙, 陈彬. 化学学科理解系列丛书——物质结构篇. 北京: 高等教育出版社, 2022.
- [11] 中华人民共和国教育部. 普通高中化学课程标准(2020年修订版). 北京: 人民教育出版社, 2020.