

双一流建设背景下化学系本科量子力学课程模块建设

苏培峰^{1,2,*}, 吕鑫^{1,2}

¹厦门大学化学化工学院, 福建 厦门 361005

²福建省理论与计算化学重点实验室, 福建 厦门 361005

摘要: 针对目前化学专业本科涉及量子力学内容的教学现状, 整合结构化学和大学普通物理相关教学内容, 厦门大学结构化学课程组开设了化学专业本科量子力学模块课程。本文对该新课程的教学内容与教学方式进行了探讨, 并对该课程的未来发展进行了展望。

关键词: 结构化学; 量子力学; 教学方法

中图分类号: G64; O64

Development of Undergraduate Quantum Mechanics Module in Chemistry Department under the “Double First Class” Initiative

Peifeng Su^{1,2,*}, Xin Lu^{1,2}

¹ College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005, Fujian Province, China.

² Fujian Provincial Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Xiamen 361005, Fujian Province, China.

Abstract: Addressing the current status of teaching quantum mechanics in undergraduate chemistry programs, the structural chemistry course group at Xiamen University has developed an undergraduate quantum mechanics module by integrating the disciplines of structural chemistry and general university physics. This paper explores the teaching content and methods of this new course and provides a future outlook for its development.

Key Words: Structure chemistry; Quantum mechanics; Teaching methods

量子力学是研究微观粒子运动规律的物理学分支学科, 已经深入而广泛地渗透到现代科学研究和人类日常生活^[1]。作为现代物理学的基础与支柱, 量子力学是化学的重要基础之一, 各种基于量子力学的现代研究方法、技术与测量工具成为不可或缺的化学研究手段。

传统化学系本科教学体系中, 量子力学内容并不是单一课程模块, 而是在结构化学课程中作为前若干章节、大学普通物理单个章节讲授。随着化学往定量化、精确化发展趋势的逐步加强, 对化学系本科生掌握量子力学的程度要求越来越高, 这样的课程设置面临着越来越大的改革压力。课程是人才培养的核心要素, 双一流学科建设视角下本科课程建设应当适应现代学科交叉发展趋势, 培养方案以及教学内容组织形式必须与时俱进。在化学系本科课程建设中, 贯彻“少即是多”, 摒弃单纯知识记忆和灌输, 强调系统思维和模型化思考能力变得愈加重要。本文总结了近年来厦门大学结构化学课程组整合大学普通物理和结构化学相关内容, 开设化学专业本科量子力学课程模块中的经验和心得, 希望成为多学科交叉融合教学的典范, 为双一流课程建设提供新的思路和参考。

收稿: 2024-01-30; 录用: 2024-02-28; 网络发表: 2024-03-28

*通讯作者, Email: supi@xmu.edu.cn

基金资助: 基础学科拔尖学生培养计划研究课题(20222107); 福建省本科高校教育教学改革研究项目(FBJG20220159)

1 现有化学系量子力学课程内容和讲授的简况及存在的局限

量子力学内容较为抽象, 要求学生有较好的数理基础, 学生难懂、教师难教一直是个老大难的问题。在我国现在的化学本科教学体系中, 与量子力学有关的内容集中在结构化学课程中。结构化学在本科一年级无机化学物质结构章节的基础上, 引入量子力学基础知识、原子结构和性质、双原子分子结构和性质等内容^[2,3]。多年的教学实践发现, 和大一无机化学相比, 在结构化学的教学中, 学生学到了更多的知识点, 然而知识体系并没有系统性提升。其主要的缺点如下。

1.1 课程开设时间偏后

在我国大学化学系的本科教学中, 结构化学大部分开设于大三年级, 此时意味着学生基本思维方式已经基本定型, 结构化学往往作为无机、有机化学等课程的经验理论总结, 利用量子力学基本概念和模型方法来理解有机化学、物理化学等课程内容, 并指导后续的科研学习已经变得不可能。学生考虑化学问题往往以高中、大一化学的形象思维作为基本的思考方式, 逻辑与模型思维能力没有得到充分培养。在进入实验室进行科研工作后, 各种问题浮现。很多化学专业学生往往还是无法从更深层次思考化学本质问题。

1.2 教学内容零散, 课程内容组织严重缺失系统思维

知识点之间联系不够, 缺少一个明确的主线, 逻辑连贯性较差。例如, 在介绍量子力学基本假设和无限深势阱后, 马上进入类氢原子体系和多电子原子体系的学习, 这些内容之间缺乏逻辑关联性^[2,3]; 量子力学基本假设第一条波函数假设并没有得到很好的贯彻, 学生经常将原子轨道波函数与分子轨道波函数混为一谈; 对描述化学体系电子结构的波函数没有明晰的概念, 不理解因为全同性原理所采用的反对称化形式电子波函数引起的电子排布变化, 从而继续机械性的记忆洪特规则来判断最稳定的电子排布方式。

1.3 教学内容冗余, 相关课程内容重复度高

教学内容和无机化学、大学普通物理课程的量子物理部分高度重叠。例如, 经典物理学的失败、玻尔原子模型、波粒二象性、类氢原子体系和多电子原子体系分别在高中化学选修、无机化学、结构化学和大学普通物理中出现; 简单体系薛定谔方程求解及其简单应用(以无限深势阱为代表)在结构化学和大学普通物理中出现; 化学键理论相关知识点在无机化学、有机化学和结构化学中出现。这些知识点简单冗余重复, 不仅浪费课时, 而且不利于提高学生的学习积极性。

2 化学本科量子力学课程模块的主要目的和内容

课程组以系统思维来引导和加强与前后序及平行课程间的联动, 明确化学系本科学生学习量子力学基础课程的目的是: 理解需要利用量子力学才能正确描述分子体系电子结构, 掌握以量子力学处理简单微观体系的方法; 从量子力学角度理解化学键, 以模型思维理解化学键理论。从而以该模块内容学得的能力指导后续化学模块的学习。具体举措如下。

2.1 教学内容重新整合和去冗余化

定态薛定谔方程指出了哈密顿算符、波函数和能量之间的关系, 这是理解分子体系电子结构的核心, 也是本课程教学内容的核心。课程组以锻炼学生严密逻辑思维和模型化思考为出发点, 整合结构化学和普通物理相关教学内容和课时, 参考国外化学系本科量子力学课程大纲和国内化学系研究生量子化学课程的设置, 以哈密顿算符和电子波函数的理解为基本要求和主线, 从化学学生实际需求出发, 不强调严谨的数学推导和严密的量子力学框架, 确定基本内容如下。

第一章: 量子力学基本概念与薛定谔方程。

本章内容以波函数和算符基本概念为主, 为避免学生陷入单纯的记忆, 不强调量子力学五大公设的逐一严密叙述。公设将在后续章节结合各个具体实例讲授。

第二章: 量子力学中的算符性质。

介绍量子力学算符表达形式, 并着重讲述哈密顿算符。以此引入定态薛定谔方程及其解的性质。

第三章：量子力学的简单体系(势阱、谐振子、刚性转子)。

原子分子体系中粒子的运动都被限制在有限的空间范围内，或者说粒子处于束缚态。束缚态微观粒子薛定谔方程的解(能量和波函数)是量子化的。本章介绍束缚态微观粒子平动(无限深势阱)、振动(谐振子)和转动。无限深势阱模型是理解束缚态粒子特点的最简单模型，也是学生最为熟悉的理解电子离域的模型。谐振子和刚性转子在传统结构化学内容中没有介绍，但它们是物理学中重要的模型。许多在平衡点附近振动的物理问题都可简化为线性谐振运动，例如分子振动、晶格振动、原子核表面振动以及辐射场的振动等，往往都可以分解成若干彼此独立的一维简谐振动。谐振子对理解双原子分子势能面、分子中化学键的振动以及红外光谱有重要的帮助。刚性转子是分析原子体系中电子的角动量、理解原子的核外电子排布的重要模型，是原子光谱谱项推导的重要理论基础。

第四章：类氢原子。

类氢原子体系定态薛定谔方程的解已经在高中化学和大学一年级普通化学中介绍，学生已经很熟悉，但大部分学生只能机械记忆四个量子数及其物理意义而不知其所以然。在这一章学习中，在不引入复杂数学手段的前提下，引导学生理解类氢原子的球形库伦场哈密顿算符如何描述，如何通过变换转化成第三章我们熟悉的平动、转动和振动哈密顿算符，从而求解得到类氢原子的解。学生应当学会遇到这样较为复杂的体系，如何化简分解为常见物理模型而得到求解。

第五章：多电子体系基本概念(自旋、全同粒子、反对称化波函数)。

本章内容是从单粒子体系向多粒子体系的重要理论基础。由全同粒子性质介绍引出反对称化电子波函数，为泡利不相容原理给出合理的理论依据。这部分内容最为抽象，传统教学内容没有涉及，但这些基本概念对理解核外电子排布的规则有重要帮助。传统课程体系从类氢原子到多电子原子之间有巨大的鸿沟，研究类氢原子和多电子原子的方法完全不同，但学生往往无法理解原因何在。这可以归结为两个方面的原因：一方面是没有讲透中心势场近似，另一方面更重要的是没有说清楚引入反对称化波函数对求解多电子体系薛定谔方程所带来的变化，也无法理解描述多电子原子电子组态的波函数意义。

第六章：变分法。

第七章：多电子原子。

第八章：双原子分子与化学键。

第六至八章的内容与传统结构化学类似。变分法是主要的量子力学近似方法。从多粒子体系哈密顿算符的复杂性引导学生理解引入变分法的必要性。教学中强调从哈密顿算符与波函数的关系理解线性变分法，从哈密顿算符的角度理解中心势场近似，从中心势场近似理解多电子原子波函数。原子谱项推导将适当压缩。部分传统课程双原子分子与化学键部分的讲授中经常是杂化轨道、价键理论和分子轨道理论混在一起讲，并且将杂化轨道和价键理论等同或者并列，容易引起学生的混乱(关于这部分内容，本文作者将另文阐述)。在新课程中，我们从线性变分法与反对称化波函数相结合的角度介绍分子轨道理论方法，并选择分子轨道理论方法讨论分子成键，而将价键理论部分结合最新进展作为补充材料给学有余力且感兴趣的学生课外自习。

第九章：量子与计算化学简介。

量子化学简介初步构建量子化学和量子力学之间的桥梁，配合计算化学实验，介绍量子化学基本研究方法和应用范围，充分满足低年级学生旺盛的求知欲，结合课外资料，鼓励学生利用量子化学方法研究简单分子体系。

模块课程知识框架与教学路线如图1所示。除了量子力学基本概念和算符介绍外，主要分为三大部分。第一部分着重培养模型思维，以简化模型哈密顿算符认识运动的量子化；第二部分着重强调系统思维，由粒子全同性导出对多粒子体系波函数的要求；第三部分着重于综合思维的建立，面对无法精确求解的多粒子体系，从算符与波函数的关系入手，构造近似哈密顿求解复杂体系的能量和波函数。

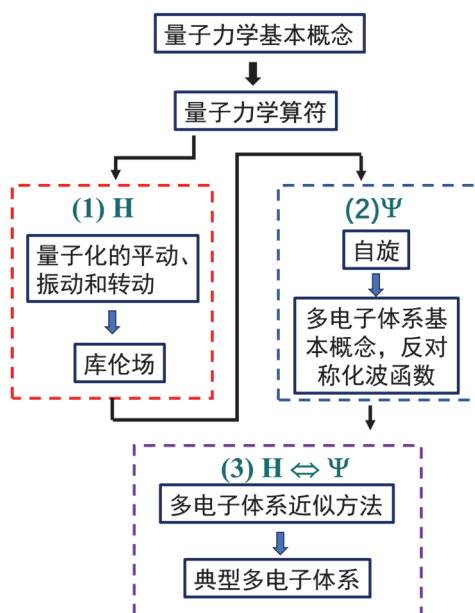


图1 量子力学模块知识框架与教学路线

上述内容32学时，在大二上半学期完成。先修课是高数和线性代数。内容结合自大学普通物理的原子物理和量子物理部分，以及结构化学的量子力学基础、类氢原子、多电子原子和双原子分子部分。因此修习此课程模块的学生相应免修传统体系大学普通物理和结构化学相应内容。有机化学和物理化学的讲授平行或略晚于此模块，学生可以及时利用量子力学模块的内容用于理解和掌握相关课程。与普通结构化学课程内容相比，增加的内容有：谐振子、刚性转子、量子力学中的算符、全同粒子、量子化学初步介绍。这些内容结合原有内容提供了完整的知识链条和逻辑体系，从量子力学简单体系到双原子分子，势能算符愈加复杂，使得哈密顿算符可以描述更复杂的体系，在这过程中培养学生系统化思维和模型化思考能力。

和普通结构化学内容相比，削减(少讲)的内容以及对应的举措有：

1) 科学史的内容，包括传统物理学的失败、旧量子论以及量子力学的发展过程，课堂上将不再讲授，这部分内容作为学生课外学习，适当布置作业达到检查的目的。

2) 休克尔分子轨道理论、群论、分子点群、多原子分子、配位场和晶体场等，这部分内容作将在后续“化学成键与对称性”课程模块讲授。

2.2 教学方式的改革

2.2.1 基本教学不以知识点的罗列为重点，有详有略

除了如上所述的部分，对于与大一化学有一定重叠的部分(以类氢原子、原子轨道图像为例)，课堂讲授以回顾和点拨为主；原子谱项推导是结构化学教学的难点，以往同学们只机械记忆规则，课程将这部分内容作为角动量性质的延伸，告诉学生原子谱项推导的由来，明白这些规则背后的原因。对于算符、全同粒子等对推导和概念理解要求较高的内容，则以适当板书推导结合师生讨论为主。

2.2.2 强调数学的重要性但又不唯数学

从化学本科学习的角度讲，量子力学原理的认识与理解并不需要高深的数学知识，但如果只以简单的例子和科学发展历史来讲述就会过于科普和宽泛，学生笑笑过去后所得甚少；另一方面，讲授过程也要防止满堂推导，必须顾及数学基础不太好的学生，防止其从一开始就对课程丧失信心。课堂实例讲授的难度以学生掌握的微积分和线性代数为准。在量子力学简单体系求解会遇到二阶线性常微分方程的级数解法、Hermite微分方程与Hermite多项式、连带Laguerre多项式和连带Laguerre函数等，课堂不讲授，作业不布置，考试不要求。

2.2.3 重点强调模型化思维在化学研究中的作用

一方面，强调物理模型在哈密顿量构建中的重要作用。从一维无限深势阱、谐振子、类氢原子、多电子原子到分子，各种量子力学体系处理方式的不同可以归结为上述体系哈密顿量构成的不同。从而理解不同的物理模型可以构建出不同的哈密顿量，这些哈密顿量都是对实际体系不同程度的近似，从而可以解出相应的薛定谔方程，这些解可以提供基于该近似下对所研究体系的合理描述。近似越少，哈密顿量越精确，薛定谔方程的求解越繁复，对体系的描述就越合理。

另一方面，没有近似就没有方法，引导学生利用简单模型来理解化学本质，比如无限深势阱模型就可以理解电子离域所带来的稳定化能，利用简单分子轨道模型处理 H_2^- 阴离子来理解分子体系电子亲和能与电子结构之间的关系。在教学中让学生明白，化学键就是化学家建立的理解原子或者基团间相互作用的一种模型。化学键概念不是一成不变的，它也在化学键前沿研究中不断更新。

3 总结与展望

量子力学课程模块在教学过程中力图详略得当、主线鲜明、力戒知识点的简单堆砌，以锻炼学生严密逻辑思维和模型化思考为重点。经过厦门大学结构化学课程组多个学期的教学实践，该新课程教学获得初步成功，大部分学生反馈良好。然而也发现了学生分化较为严重、部分学生学习效果不佳的情况。该课程在以后的教学中还需结合化学系学生的特点，在平常作业题和考题中融入量子力学在化学中的应用实例；考虑到部分学生数理基础较差的现实，在知识架构与思维能力培养方面还需要斟酌，优化算符部分的教学，降低公式推导的比重，提升学生的整体学习兴趣。

参 考 文 献

- [1] 曾谨言. 量子力学卷1. 第5版. 北京: 科学出版社, 2019.
- [2] 周公度, 段连运. 结构化学基础. 第4版. 北京: 北京大学出版社, 2008.
- [3] 林梦海, 吕鑫, 谢兆雄. 结构化学. 第4版. 北京: 科学出版社, 2019.