

结构化学可视化教学提升学生理解力的思考与实践

杨丽君*

西华师范大学化学化工学院, 四川 南充 637002

摘要: 结构化学课程是学生从微观角度理解分子的电子结构和空间结构以及化学反应本质的重要途径。本文通过使用GaussView软件, 对原子和分子轨道的对称性、电子排布及其能量特性进行了直观动态的分析, 并深入探讨了分子轨道对称守恒原理。这些方法不仅有效降低了抽象概念的理解难度, 还进一步丰富了课程内容, 显著提升了教学效果。

关键词: 结构化学; 教学改革; 分子轨道; 电子排布; 反应机理

中图分类号: O64; O6

Thoughts and Practices on Enhancing Students' Comprehension through Visualized Instruction of Structural Chemistry

Lijun Yang *

College of Chemistry and Chemical Engineering, China West Normal University, Nanchong 637002, Sichuan Province, China.

Abstract: Structural chemistry provides students with an essential framework for understanding molecular electronic structures, spatial configurations, and the fundamental nature of chemical reactions at the microscopic level. This study employs GaussView software to conduct dynamic visual analyses of atomic and molecular orbital symmetry, electron configurations, and energy characteristics. The methodology enables thorough investigation of the molecular orbital symmetry conservation principle. These pedagogical strategies not only successfully reduce the cognitive barriers posed by abstract concepts but also substantially enrich course content while demonstrating notable improvements in instructional effectiveness.

Key Words: Structural chemistry; Teaching reform; Molecular orbital; Electron configuration; Reaction mechanism

结构化学在原子、分子水平上讨论物质的性质与其电子结构和空间构型之间的关系。由于复杂的数学推理、抽象的概念、与宏观世界认知的矛盾, 以及高深的物理模型, 结构化学被认为是化学领域中最难掌握的课程之一。随着科学技术的不断进步, 结构化学的教学方法从传统的粉笔黑板授课模式逐步演进为现代信息技术的应用, 显著提升了学生的学习兴趣和教学质量。与此同时, 结构化学教材的种类也日益丰富, 部分教材附带详细的习题解析并经过多次修订和完善^[1,2]。目前, 关于结构化学课程教学的研究较为丰富, 主要集中于以下三个方面: (1) 探讨并引入多样化的教学方法, 例如导入模式等, 以期进一步提升教学质量, 并促进理论知识在实际中的应用^[3-5]。(2) 计算工具, 例如Python编程环境^[6]、Jupyter交互式平台^[7]、虚拟现实(VRML)技术^[8]和SymPy符号计算库^[9]等, 能

收稿: 2024-11-11; 录用: 2025-01-20; 网络发表: 2025-04-18

*通讯作者, Email: ljyang@cwnu.edu.cn

基金资助: 西华师范大学教改项目(403911)

够有效提升学生对结构化学的理解，并增强教学过程中的参与度和互动性。(3) 通过将结构化学与计算化学相结合^[9]来开发结构化学教学资源^[10-12]，以帮助学生更好地理解相关概念，提升其思维能力，并鼓励学生运用计算化学方法和结构化学理论解决科研实践中的实际问题^[13]。Gaussian是一个在国际上被广泛使用的商业化量子化学计算软件。其配套的GaussView软件能够便捷地完成分子结构的构建、Gaussian计算任务的设置以及计算结果的可视化等操作。这两款软件具有相对直观的操作界面，因此在结构化学研究及实验教学中得到了广泛应用^[12,14]。基于上述研究基础，我们运用Gaussian和GaussView软件，结合原子轨道和分子轨道理论，开发了相应的教学资源，并通过“学习通”平台进行资源推送及教学反馈的收集^[15]。通过理论与实践的紧密结合，有效解决了结构化学教学内容抽象的问题，显著增强了学生的学习动力。

1 结构化学内容体系及教学难点

尽管不同结构化学教材的具体教学内容有所差异，但总体上均涵盖了如图1所示的核心内容。教材的整体编排遵循由浅入深、由简至繁的原则^[16]。首先介绍量子力学的基本概念，然后利用这些基础知识解决单电子原子体系的问题，包括建立和求解薛定谔方程及其结果分析。随后，逐步过渡到多电子原子体系，讲解求解过程中所采用的近似方法，并将这些方法应用于分子体系的研究。对于分子体系的探讨，通常从最简单的 H_2^+ 开始，逐渐扩展到同核和异核双原子分子，直至多原子分子。多原子分子部分涉及休克尔分子轨道理论、杂化轨道理论以及分子轨道对称守恒原理等内容。此外，小分子的对称性不仅与其旋光性、偶极矩等物理性质密切相关，还与晶体结构的对称性有着直接联系。因此，结构化学的知识体系围绕电子结构和空间结构展开，逻辑严密，有助于学生循序渐进地理解和掌握相关知识。

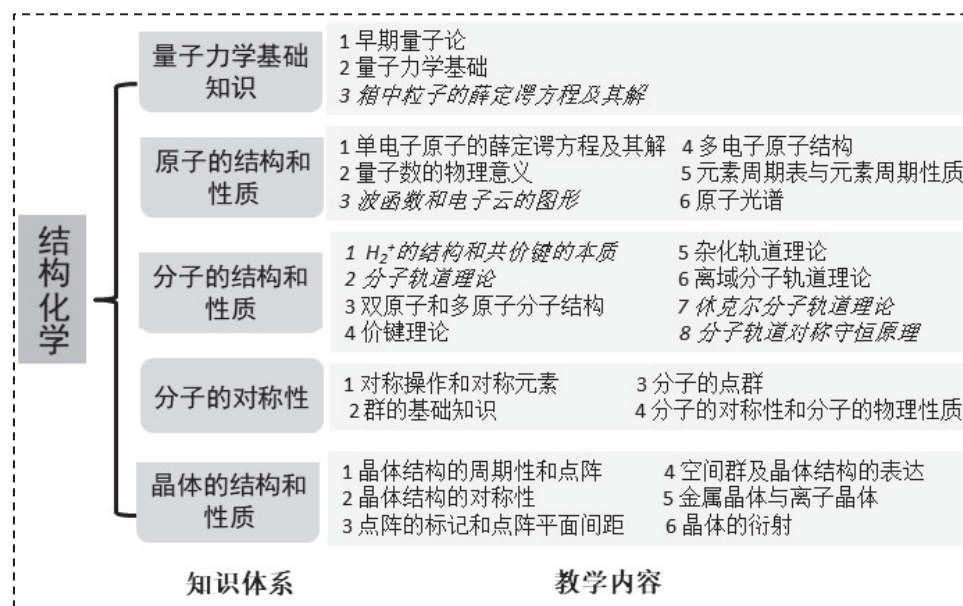


图1 结构化学教学框架内容

在上述框架内容中，各部分的教学重难点较为清晰。例如，在量子力学基础知识部分，将量子力学基础应用于一维和三维势箱是该章节的教学难点，学生对于模型及其结果的理解存在困难。为解决这一问题，可以结合丁二烯和花菁染料的计算来突破理解瓶颈。此外，在“原子、分子的结构和性质”及“分子的对称性”部分，分子及轨道的形状与对称性匹配是较难想象的，可以通过VMD、GaussView等软件的可视化功能辅助理解。基于上述对结构化学教学研究和课程体系的分析，本文选

择以“轨道”这一贯穿结构化学教学过程的元素为主线，紧扣结构化学课程的教学内容，通过可视化软件在课堂上分析原子轨道形状及电子排布、分子轨道形状及电子排布、电子跃迁以及分子轨道对称守恒原理，具体涉及的内容对应图1中前三部分内斜体所示的教学内容。实践表明，可视化软件辅助结构化学教学能帮助学生理解抽象知识，提高学生的学习兴趣。

2 教学资源开发及实践过程

2.1 学情摸底，提出想法

在课程开始之初，我们通过“超星学习通”平台向学生提供了教学名师的优质资源。然而，实际观看或下载这些资源的学生数量极少。通过与学生的交流发现，网络视频教学缺乏互动性，时间过长容易导致视觉疲劳，以及学生课业负担较重是主要原因。鉴于此，仅靠提供网络资源的方式难以有效提升学生学习结构化学的效果，因此教师对课堂教学的掌控显得尤为重要。为了更好地了解学生学习结构化学的情况，我们通过学习通平台采用问卷形式对学生进行了调查，并对结果进行了分析，具体如图2所示。

如图2(A)所示，94%的同学对结构化学学习感兴趣，但大部分同学认为结构化学的学习有难度。对于复杂抽象的知识点，49%的同学更倾向于选择多媒体动画教学方式(图2B)。而对于结构化学的教学方式，76%的同学认为结合结构化学应用实例更能吸引自己，仅24%的同学认为观看视频能吸引自己(图2C)。可见，在结构化学中融入案例研究，能提高学生的学习兴趣和学习效果。然而，结构化学本身教学内容繁多，且我校结构化学课程未开设相应的计算模拟实验课，学生没有计算化学相关的基础，因此只能在结构化学课堂中选择较重要且易于操作的案例。基于上述情况，结合我校学生实际，在不增加学业负担的前提下，以培养学生学习兴趣、带领学生进入理论化学研究领域为主要目的，选择“轨道”为主线，贯通原子、分子及轨道对称守恒原理进行教学实践研究。

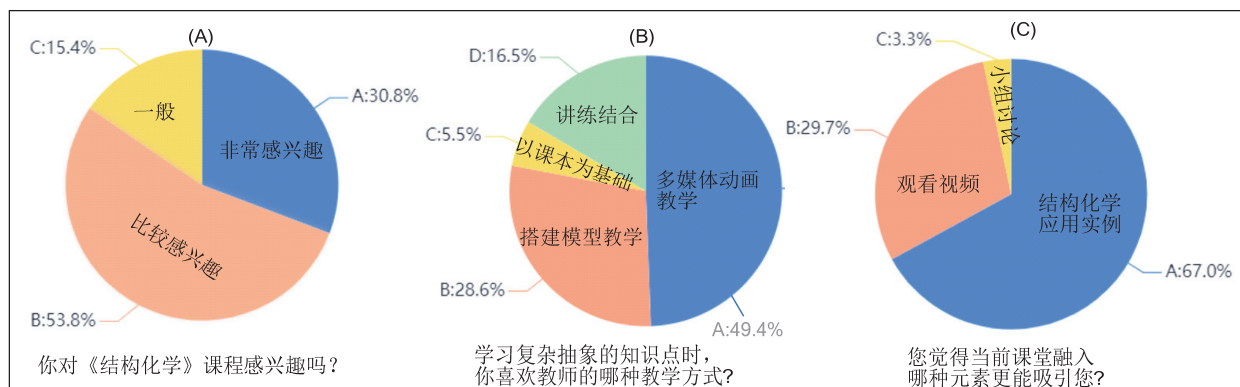


图2 学生对结构化学课程的认识

2.2 课堂演示，引发兴趣

2.2.1 原子轨道能级及电子排布

完成无机化学课程学习后，学生能够初步了解 s 、 p 、 d 等轨道的形态特征，但对这些轨道的三维结构仍缺乏直观的认识。本文以氧原子为例，展示了如何在课堂上呈现原子轨道的三维结构。学生对氧原子的电子构型 $1s^2 2s^2 2p^4$ 较为熟悉，基态氧原子有2个自旋平行的 $2p$ 电子，故采用限制性开壳层方法，在ROB3LYP/STO-3G理论水平下进行计算。将计算得到的检查点文件(.chk文件)转换为.fchk文件备用。课堂演示时，通过GaussView软件直接读取.fchk文件，在右键菜单中选择Tools→MOs→Visualize，选择轨道序号并点击update，即可查看各原子轨道图形。氧原子的原子轨道能级及其电子分布情况如图3(A)所示。

可见, 在该水平下, O原子的核外电子排布是 $1s^2 2s^2 2p_z^2 2p_x^1 2p_y^1$ 。从原子轨道能级的排布可以看出, $2p_x$ 与 $2p_y$ 的能级简并且高于 $2p_z$ 的能级, 这与学生已有认知“ $2p_z$ 、 $2p_x$ 、 $2p_y$ 三个轨道能级简并”存在矛盾。教师可以引导学生思考, 并观察同一水平下计算的氮原子的轨道能级, 发现三个自旋相同的电子分别占据了三个简并的 p 轨道。这有助于学生认识到氧原子中三个 $2p$ 轨道的能级并非完全简并, 而是受到电子间相互作用的影响。图3(B)–3(E)展示了GaussView软件中四个价轨道的三维图像, 学生能够直观地了解轨道的形状、节点平面、延伸方向以及最大值等特征, 进而理解轨道的正负值及其对称性, 为后续学习原子轨道按照对称性匹配原则重叠形成分子轨道打下坚实的基础。同样地, 也可以指导学生自行探索 $3d$ 轨道的空间形态及节点平面等特性。此外, 还可以利用Multiwfn软件^[17,18]生成原子轨道的能级及图形, 或者将数据保存为cube文件格式, 在VMD软件中进行观察。教学时, 教师可上传至学习通平台供学生查阅。详细的软件操作流程见网址^[19]。

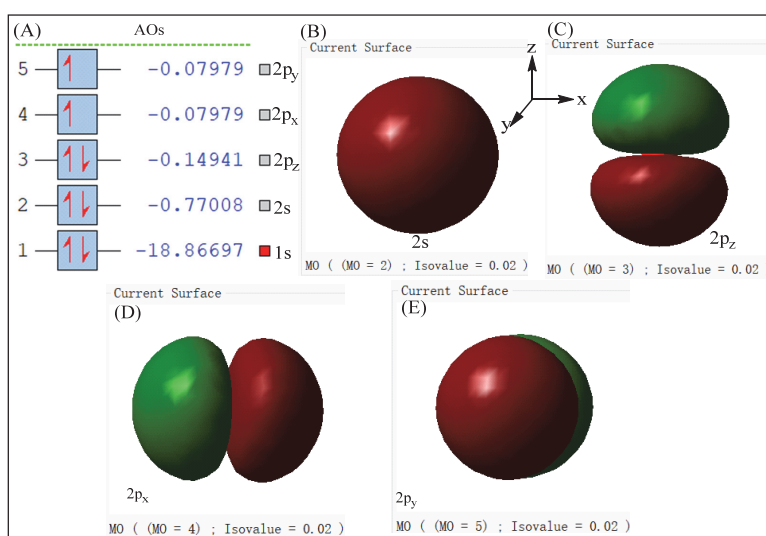


图3 氧原子的原子轨道能级及轨道三维图形

2.2.2 分子轨道和电子自旋状态分析

H_2^+ 仅含有一个电子, 教材用两个 $1s$ 原子轨道作为 H_2^+ 的变分函数, 是学生理解分子轨道理论的最简单的例子。大多数教材均提供了图4所示的E-R能量曲线。为得到该曲线, 先使用Gaussian 09运行生成对称破缺的.chk文件。随后读取chk文件, 对两个原子核间的距离进行刚性扫描并保存.log文件。上课时, 使用GaussView打开刚性扫描的.log文件, 点击右键菜单栏的Results→Scan获得图4所示的解离曲线。引导学生对比分析 H_2^+ 与 H_2 的能量曲线。可见, H_2 的能量曲线下降更为显著, 其平衡核间距(0.76 Å) (1 Å = 0.1 nm)更小(实验测定值为0.74 Å), 表明键合强度更大。进一步基于分子轨道和电子排布分析原因: H_2^+ 只有一个电子进入成键分子轨道, 而 H_2 的成键轨道则包含两个自旋配对的电子。当 H_2 解离为两个氢原子时, 每个氢原子将携带一个自旋方向相反的电子; 相比之下, H_2^+ 解离后只有一个电子分布在两个氢原子之间。上述对比分析有助于学生深入理解成键轨道、键级与平衡核间距之间的关系等关键概念。

O_2 分子共含16个电子。学生通常误认为基态 O_2 中的所有电子都是成对的, 尽管分子轨道理论对此进行了详尽的解析, 但由于其抽象性, 学生往往只能达到记忆层面的理解, 难以深入掌握。鉴于此, 通过简单的理论计算可以有效辅助学生的理解。在学生掌握了光谱项及自旋多重度的概念之后, 他们能够推断出电子全部配对的体系自旋多重度为1, 而含有两个自旋平行电子的体系自旋多重度为3。因此, 计算方法及过程与前面类似, 在ROB3LYP/STO-3G水平上计算电子全部成对(自旋多重

度 = 1)和存在两个自旋平行电子(自旋多重度 = 3)的 O_2 轨道能级分布及其电子总能量。图5(A)显示,当自旋多重度为1时,两个氧原子上的自旋密度为零,表明不存在未配对的自旋电子,此时电子的总能量较高。而在图5(B)中,当自旋多重度为3时,每个氧原子上的自旋密度均为0.99,意味着各自有一个自旋平行的电子,占据了两个简并的 π^* 反键轨道(第8和第9号分子轨道)。第6和第7号轨道为 π 成键轨道,同样处于简并状态,这与教科书中的分子轨道能级图相吻合。当自旋多重度为3时,电子的总能量较低,因此高自旋状态是氧分子的基态。

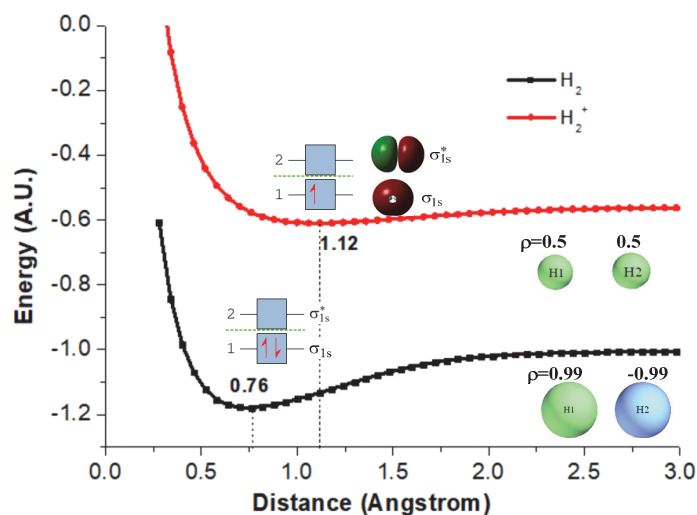


图4 H_2^+ 和 H_2 的E-R曲线、轨道能级示意图及自旋密度图(Isosurface value = 0.02)

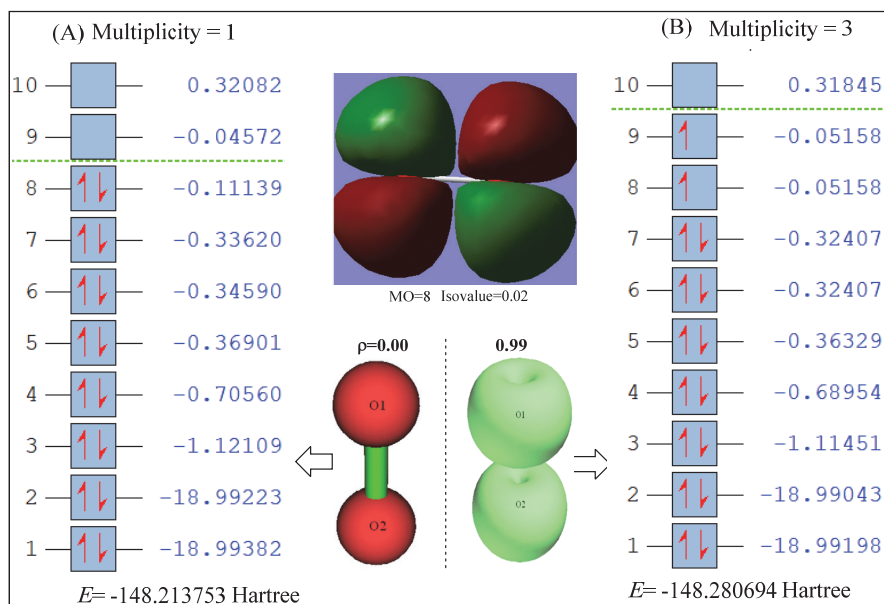


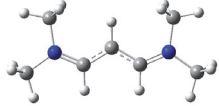
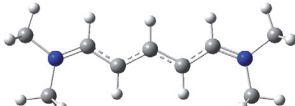
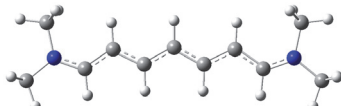
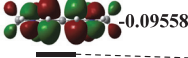
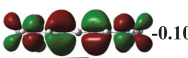
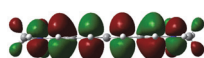
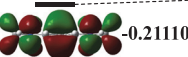
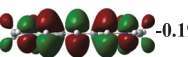

图5 基态和激发态 O_2 中的分子轨道能级、电子排布及自旋密度

2.2.3 最长吸收波长与共轲多烯

非共轲分子的电子光谱最长吸收波长随共轲双键数目的增加而红移,分析前线轨道能级会发现,随共轲双键数目的增加,形成了能量更高的HOMO和能量更低的LUMO,因此造成分子带隙减小,吸收光谱红移。学生对此也较难理解,可以花菁染料为例进行计算说明。花菁染料的结构源自北京

大学出版社出版的《结构化学基础》一书中的第一章【例1.3.2】。其结构通式为： $\text{Me}_2\text{N}-(\text{CH}=\text{CH})_r\text{CH}=\text{N}^+\text{Me}_2$ 。此例题通过一维势箱模型探讨实际体系的特性，例如随着粒子活动空间的增加，能级间距减少，导致光谱红移现象。考虑到泛函中HF成分对激发能的影响，采用PBE0泛函和6-311G(*d,p*)基组进行模拟，选用水作为溶剂，并应用了em=gd3bj色散校正方法，对 $r = 1, 2, 3$ 的染料分子进行了结构优化。在确认优化后的结构不存在虚频之后，我们将计算参数设置为td=(nstates=30)PBEPBE/6-311G(*d,p*) SCRF em=gd3bj，以此为基础执行含时密度泛函理论计算。完成计算后，利用GaussView软件打开生成的.log文件，点击右键选择Results→UV-Vis，可以查看到该分子的UV-Vis吸收模拟光谱及其最长吸收波长。使用GaussView打开fchk文件，点击右键选择Tools→MOs，可查看HOMO和LUMO轨道的形状及能级。表1展示了具体的计算结果。从表1中可以看出，当 r 值增加时，HOMO能级升高而LUMO能级降低，能隙减少。因此，随着粒子的活动范围扩大，能级间的差距逐渐缩小，最大吸收光波长相应地增长。

表1 花菁染料 $\text{Me}_2\text{N}-(\text{CH}=\text{CH})_r\text{CH}=\text{N}^+\text{Me}_2$ 的吸收光谱

r	1	2	3
结构			
LUMO	 -0.09558	 -0.10947	 -0.11726
HOMO	 -0.21110	 -0.19445	 -0.18443
$\Delta E/\text{a.u.}$	0.11552	0.08498	0.06717
$\lambda_{\text{max}}(\text{计算值})/\text{nm}$	282	354	423
$\lambda_{\text{max}}(\text{实验值})/\text{nm}$	309	409	511

2.2.4 化学反应过程模拟

基态丁二烯顺旋闭环和基态己三烯对旋闭环是学生较为熟知的有机化学反应类型，借助Gaussian及GaussView软件，可以从分子结构的变化上直观地看到这一过程。在B3LYP/6-31G(*d*)水平上进行了过渡态优化和IRC计算及反应物和产物的优化。通过GaussView软件打开丁二烯的.fchk文件，在显示窗口中点击右键，从菜单栏中选择Tools→MOs→Visualize，选择HOMO轨道序号并点击update查看轨道图形。引导学生观察图6(A)所示的基态丁二烯的HOMO。分析其对称性发现，丁二烯两端的碳原子(C1和C7)的轨道位相相反，表现出 C_2 对称性。通过GaussView软件打开IRC的.log文件，点击右键菜单栏中Results→IRC/Path，指导学生依据分子轨道对称守恒原理分析，在丁二烯闭环过程中，分子应始终保持 C_2 对称性，如图6(C)所示。因此，两端的氢原子将进行顺旋闭环以保持 C_2 对称性，顺旋过程中两端碳原子的二面角变化如图6(B)所示，此时两者的二面角变化曲线完全重合。详细过程见网址^[20]。而基态己三烯的HOMO(图7A)具有镜面对称性。依据分子轨道对称守恒原理，在己三烯成环的过程中，分子应当维持 C_s 对称性，如图7(C)所示。因此，两端的氢原子采取对旋的方式闭合成环。对旋过程中两端碳原子的二面角变化如图7(B)所示，呈现相反趋势。详细过程见网址^[21]。

通过学习上述动态分析，学生基于分子轨道对称性，掌握了对旋与顺旋过程的本质，并深刻理解了分子轨道对称守恒原理。此外，学生通过课后的实际操作，进一步深化了理解，并在实践中应用这些理论知识。

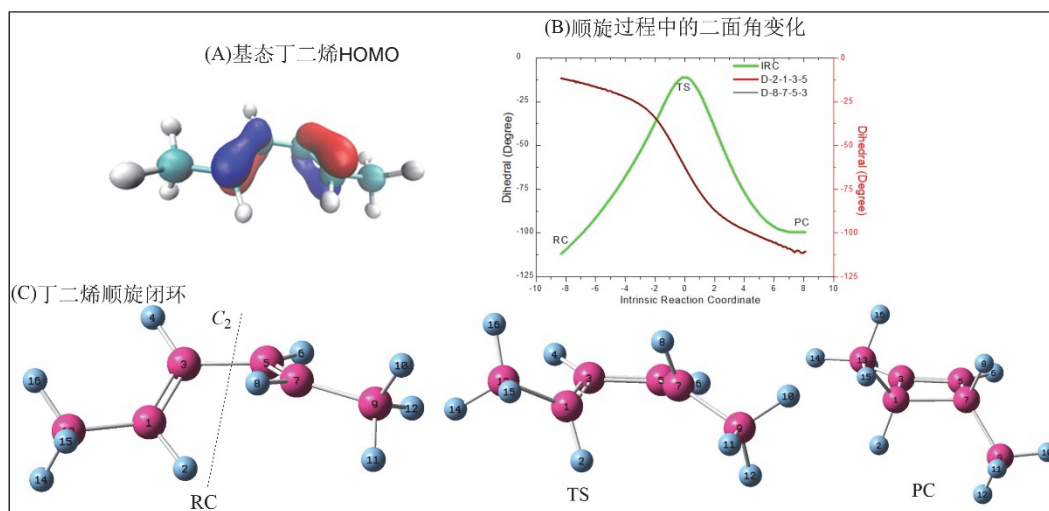


图6 丁二烯顺旋闭环过程中的对称性和关键结构

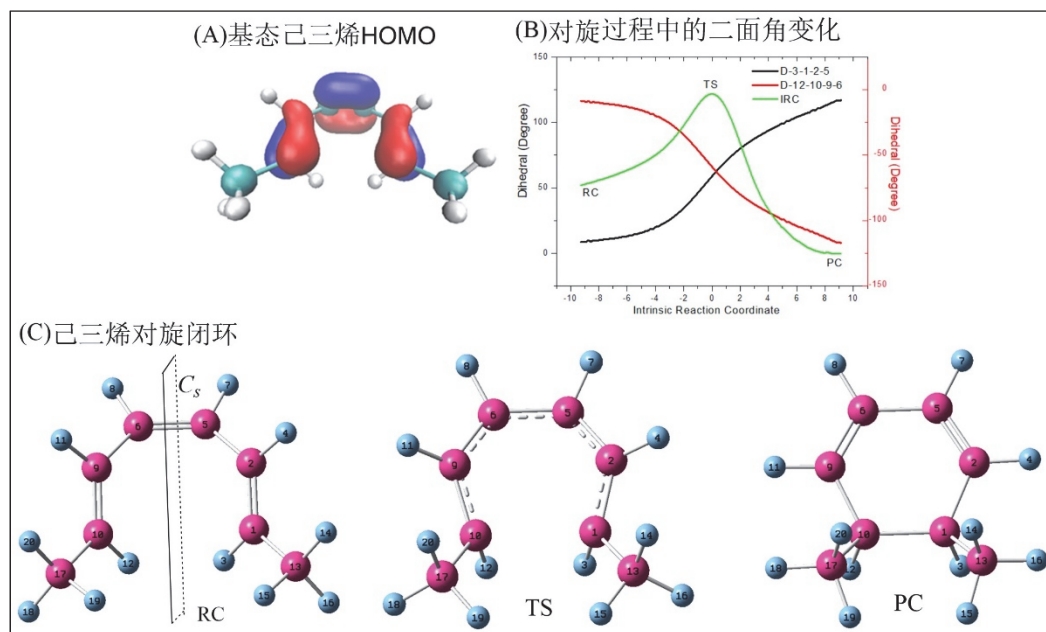


图7 己三烯对旋闭环过程中的对称性和关键结构

2.3 自主探索, 拓展延伸

大多数学生尚未接触过这些软件, 但部分同学对计算化学表现出浓厚的兴趣。针对这部分同学, 可以提供个性化的指导, 鼓励他们自主探索。如果学生对密度泛函理论和基组等计算原理不熟悉, 可以通过类比实验条件来解释这些概念, 帮助学生理解不同基组和计算方法对结果的影响。对于共轭多烯的吸收光谱, 计算值与实验值之间存在差异, 可以引导学生探讨产生这种差异的原因, 并尝试使用含有不同Hartree-Fock成分的泛函(如B3LYP、M062X)进行计算, 分析其结果。此外, 还可以鼓励学生将计算化学应用于有机反应机理的研究, 以深化他们对这一领域的理解。

3 教学效果与学生反馈

通过课堂教学观察、学习通平台发布调查问卷及与学生进行课后交流的方式, 我们调查了可视

化教学模式的教学效果及存在的不足。课堂观察发现,当教师采用计算化学软件辅助教学时,学生注意力明显集中,也表现出极大的兴趣。与学生沟通后发现,他们对能够通过自己的操作可视化轨道三维图形及观察分子动态结构变化非常感兴趣。然而,本科阶段的学生对计算化学领域接触较少,因此较多同学认为GaussView等软件操作复杂,不易上手。此外,从调查问卷来看,93%以上的同学认为GaussView等软件对结构化学的教和学有促进作用,可以提高学习积极性和自主学习能力。85%以上的同学认为自己以后会继续使用与化学研究相关的GaussView等软件。这说明,将GaussView等软件应用于结构化学课堂,将轨道等抽象概念可视化,可以显著提高学生的学习兴趣和积极性,也能培养学生对化学微观结构和反应机理的探索和创新意识。

4 结语

通过原子和分子轨道的可视化与分析及模拟化学反应过程等方面的讲解,展示了轨道及电子排布、反应过程中分子从反应物到过渡态再到产物结构的动态变化过程。这种直观可视化及课后可自己复现的教学模式,帮助学生将抽象的化学概念和理论转化为实际应用,能明显提高教学效果和学生的实际应用能力,提升学生的学习兴趣。结合计算化学的研究热点,引导学有余力的学生进行实验设计和数据分析,实现学生自主学习和探究性学习,从而进一步加深学生对结构化学的理解,并提高学生的实践能力和创新能力。

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] 李炳瑞. 结构化学. 第4版. 北京: 高等教育出版社, 2020.
- [3] 李海蓓,周美娟,戚明颖,李世琦,苏家傲,乔丽娜. 化学教育(中英文), **2024**, *45* (12), 10.
- [4] 冯瑾,李宝凤,毛新龙,毕思玮. 大学化学, **2023**, *38* (2), 28.
- [5] 罗琼,徐志广,许旋,王干全,彭彬. 大学化学. **2025**, in press. doi: 10.12461/PKU.DXHX202407016.
- [6] 王延忻,王宏娟,石玉仁,杨云霞. 大学化学, **2024**, *39* (3), 108.
- [7] 张浩,阚子规,林子涵,钱雨晨,司承运,钱海. 大学化学, **2023**, *38* (1), 287.
- [8] 孙宏伟,陈兰. 大学化学, **2019**, *34* (7), 100.
- [9] 徐香兰,王翔. 大学化学, **2018**, *33* (2), 22.
- [10] 孟祥军,石瑾,王秀阁. 化学教育(中英文), **2021**, *42* (10), 29.
- [11] 孙宏伟,陈兰. 大学化学, **2021**, *36* (01), 2008056.
- [12] 李海蓓,戚明颖,宋萃,庄静静. 化学教育(中英文), **2023**, *44* (4), 36.
- [13] 张春芳,张翠妙,李江涛,韩琳玉,顾芳,王海军. 大学化学, **2019**, *34* (6), 81.
- [14] 尤梓涵,李玉楠,姚琪琛,杨谦,蔡开聪,郑轩. 化学教育(中英文), **2023**, *44* (4), 89.
- [15] 周彩华,邓玲娟,陈佑宁,张君才. 大学化学, **2022**, *37* (4), 2110097.
- [16] 孙宏伟,万坚. 大学化学, **2023**, *38* (6), 182.
- [17] Lu, T. J. *Chem. Phys.* **2024**, *161* (8), 082503.
- [18] Lu, T.; Chen, F. *J. Comput. Chem.* **2012**, *33* (5), 580.
- [19] O-atom orbital. [2015-04-17]. <https://www.bilibili.com/video/BV1jfkxYmEQv/>
- [20] Butadiene-cyc. [2015-04-17]. <https://www.bilibili.com/video/BV1X76EYyEj3/>
- [21] Hexadine-cyc. [2015-04-17]. <https://www.bilibili.com/video/BV1G76EY1EjS/>