问题式教学法在结构化学教学中的应用：一维势箱中的粒子

张冬菊*, 马玉臣*

山东大学化学与化工学院, 济南 250100

摘要: 一维势箱中的粒子是结构化学课程中的重要内容, 包含的知识点多、涉及面广、综合性强, 采用“问题式教学法”围绕薛定谔方程的求解和结果讨论进行问题设计, 以提出问题为切入点, 引导学生通过分析问题和解决问题实现众多知识点的有机关联, 加深对量子力学基本原理的认识和理解, 取得了较好的教学效果。

关键词: 结构化学; 问题式教学法; 一维势箱

中图分类号: G64; O6

Application of Problem-Based Learning in Teaching of Structural Chemistry: A Particle in a One-Dimensional Potential Box

Dongju Zhang *, Yuchen Ma *

School of Chemistry and Chemical Engineering, Shandong University, Jinan 250100, China.

Abstract: In the course of structural chemistry, “a particle in a one-dimensional box” is an important content, because it contains many concepts, involves a wide range of knowledge, and is highly comprehensive. Based on the “problem-based learning”, a series of problems were designed on solving the Schrödinger equation and the result discussion. Starting from asking the questions, students are guided to organically connect the knowledge points by analyzing and solving problems, and to get an in-depth understanding of the basic principles of quantum mechanics. A good teaching effect has been achieved.

Key Words: Structural chemistry; Problem-based learning; One-dimensional potential well

1 前言

结构化学是化学类各本科专业的必修课, 它是连接基础化学和高等化学的桥梁, 课程理论性强、知识点多、内容抽象, 且涉及较多的数学、物理知识, 通常是学生认为难度较大的一门课程^[1-4]。针对课程特点, 改进传统教学方式, 以启发式教学为主导, 采用灵活多样的教学方法, 是提高教学质量的重要策略。

问题式教学法(Problem-based learning, PBL)^[5]是常用的教学模式之一, 它以提出问题、分析问题、解决问题为线索, 是融合学习与思考为一体、激励学生主动参与学习的一种开放式、互动式教学方法, 已被应用到多学科的教学^[6]。在结构化学的教学中, 恰当使用问题式教学法, 通过设计课堂问题, 改变“以讲为主, 以讲居先”的格局, 充分调动学生的学习兴趣, 引导学生积极思考、举一反三, 有助于培养学生分析问题和解决问题的能力, 是加深学生对物质结构基本原理的认识和理解的重要手段。

收稿: 2021-06-15; 录用: 2021-07-20; 网络发表: 2021-09-16

*通讯作者, Emails: zhangdj@sdu.edu.cn (张冬菊); myc@sdu.edu.cn (马玉臣)

基金资助: 国家自然科学基金(21773139, 21833004)

本文以“一维势箱中的粒子”^[7]为例,探讨基于问题式教学法的教学设计和实施。一维势箱中的粒子是结构化学课程教学中用量子力学方法处理的第一个模型体系,也是用量子力学方法讨论微观基本粒子运动规律的一个最简单例子。该模型体系有重要实用价值,可以近似处理直链共轭烯烃体系的 π 电子运动。更为重要的是,通过对模型体系的求解,可以使学生弄清量子力学方法处理微观基本粒子的基本思路;通过对结果的分析 and 讨论,可以使学生加深对量子力学基本概念的理解;通过对比微观基本粒子和宏观物体运动规律的区别与联系,可以培养学生科学的辩证思维方式和分析问题、解决问题的能力。

本节用到较多的数学知识,包括一阶线性常系数齐次微分方程的求解、指数函数与三角函数的变换、 e 的指数函数积分和微分、三角函数的积分和微分等,以讲授为主的传统教学方式容易导致学生产生畏难情绪。另一方面,内容知识点较多,包括薛定谔方程求解的基本思路、微观基本粒子运动的基本规律、力学量的测量、平均值的计算等,适宜于用问题教学法开展理论教学。

2 问题设计

作者基于多年教学实践,根据教学内容特点,改革传统教学方式,对该节内容设计了问题式教学方法,以提出问题、分析问题和解决问题为主线,以学生为主导,循序渐进设计以下8个主要问题,组织学生主动参与学习。

2.1 一维势箱中粒子的薛定谔方程求解的基本思路

一维势箱中粒子的薛定谔方程是一个二阶线性齐次常微分方程,其求解过程涉及积分、微分运算。提出该问题的目的在于,引导学生区分主次,理清求解的基本思路,重点强调求解结果,即粒子的能量((1)式)和两个指数函数形式的复数解((2)和(3)式),引导学生思考量子数 n 为什么不能取零,为什么舍去负数。对于方程的具体数学处理过程,不做教学要求,放在课程拓展内容,以满足数学基础较好的学生的学习需求。

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \quad n=1, 2 \quad (1)$$

$$\psi_1(x) = e^{\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}x} \quad (2)$$

$$\psi_2(x) = e^{\frac{-i\sqrt{2mE}}{\hbar}x} \quad (3)$$

2.2 一维势箱中粒子波函数的复数解、实数解及通解之间的变换关系

学生通常对波函数三种解的形式及其之间的变换关系感到疑惑和费解,设计该问题的目的主要是引导学生理解三种解的来源及其之间变换的逻辑关系:常微分方程的直接积分求解结果为两个复数特解;借助(4)式所示的欧拉变换和状态叠加原理,将复数形式的特解变换为三角函数形式的特解,如(5)、(6)式所示;根据积分微分方程的特点得到(7)式所示的波函数通解。通过对该问题的讨论,一方面有助于启发学生理解薛定谔方程直接求解的过程,另一方面加深学生对状态叠加原理的理解。

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta \quad (4)$$

$$\psi^c(x) = \cos \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x \quad (5)$$

$$\psi^s(x) = \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x \quad (6)$$

$$\psi(x) = A \cos \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x + B \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x \quad (7)$$

2.3 一维势箱波函数归一化常数的求解

通常学生对归一化常数只取正值表示疑问,设计该问题的目的是让学生明确波函数本身没有物

理意义, 波函数模的平方表示粒子出现的几率密度, 正负号相反的两个波函数对应的波函数模的平方是相同的, 表示同一个状态, 因此, 其归一化因子只取正值, 如(8)–(11)式所示。

$$\psi(x) = B \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (8)$$

$$\int_0^a |\psi|^2 dx = \int_0^a B^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = 1 \quad (9)$$

$$B^2 = \frac{2}{a} \quad (10)$$

$$B = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (11)$$

2.4 一维势箱中粒子的薛定谔方程求解结果的特点

箱中粒子的薛定谔方程是哈密顿算符关于能量的本征值方程, 设计该问题旨在引导学生注意, 方程求解的结果存在如下特点:

(1) 本征值方程求解, 同时得到体系波函数和粒子能量, 与普通的代数方程不同, 告知学生这是边界条件限制的结果, 是本征值方程的特点。

(2) 得到的波函数和能量均是一组解, 不是单一解, 通过分析求解过程, 使学生认识到这是积分微分方程的特点所致。

$$\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$$

$$E_1, E_2, \dots, E_n$$

(3) 本征函数与本征能量之间一一对应, 各状态的能量均不相等, 得出“非简并态”的概念。

2.5 关于波函数和波函数模的平方的讨论

(1) 让学生动手计算 ψ 值随 x 值的变化, 并作图, 强调波函数值有正负, 引出波函数“节点”的概念, 并得出状态的节点数为 $n-1$ 个。

(2) 引导学生理解, 波函数即是普通的数学函数, 当用于描述具有波动性的微观粒子时, 普通的数学函数就冠名为“波函数”, 它描述粒子的运动状态又称“态函数”, 当用于描述原子中单个电子的运动时, 波函数又称为原子轨道, 当用于描述分子中单个电子的运动时, 波函数就称为分子轨道。把“函数–波函数–态函数–原子轨道–分子轨道”等概念有机串联在一起。

(3) 波函数的模的平方图像: ψ^2 均为正值, 表示粒子出现在某点出现的几率密度, 粒子在箱内出现的几率为1, 强调归一化概念。

(4) 启发学生思考: 一维势箱中的粒子有无运动轨迹? “轨道”的含义是什么? 强调将波函数称为“轨道”, 是对微观粒子运动状态的一种形象化描述, 与宏观物体的轨道(运动轨迹)概念截然不同, 微观粒子的运动满足统计规律, 无运动轨迹。

(5) 波函数的正交归一性。让学生通过计算(12)和(13)式所示积分, 明确箱中粒子波函数的正交归一性((14)式)。

$$\psi_k(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{k\pi x}{a}, \quad E_k = \frac{k^2 h^2}{8ma^2} \quad (12)$$

$$\psi_l(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{l\pi x}{a}, \quad E_l = \frac{l^2 h^2}{8ma^2} \quad (13)$$

$$\int_0^a \psi_k^* \psi_l dx = \delta_{kl} = \begin{cases} 1 & k=l \\ 0 & k \neq l \end{cases} \quad (14)$$

另外, 引导学生思考, 能否不做上述积分计算直接得到波函数正交归一性? 为什么? 引导学生回顾厄米算符的重要性质, 属于不同本征值的本征函数是相互正交的。这样不需计算即可直接得到箱中波函数正交归一化的性质。

2.6 关于体系能量的讨论

设计如下问题：

(1) 能量量子化：箱中粒子的能量是不连续的，能级与 n 有关，引出基态($n = 1$)和激发态($n > 1$)的概念，并且体系的基态能量不为零，与宏观物体明显不同。启发学生思考，为什么会有能量量子化的结果？引导学生思考边界条件的限制，是粒子的运动“受到束缚”所致，讲清“束缚态”的概念，使学生明白微观粒子处在束缚态，才会有量子化现象，特别强调“能量量子化”不是微观粒子的基本属性。由此进一步启发学生联想原子和分子中的电子，电子与原子核电性相反，存在库伦引力，电子受到原子核的束缚，在核外附近运动，类似于箱中粒子的运动，因此电子的能级也会出现量子化现象。

(2) 能级差：通过计算相邻两能级的能级差((15)式)，使学生认识到，能级差随粒子质量和箱子长度的增大而减小，宏观物体能级将连续变化，进而启发学生理解宏观物体与微观基本粒子运动规律的内在关联，教育学生用唯物辩证法的基本思想理解微观粒子与宏观物体运动规律的辩证统一，认识量变质变规律。

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{(n+1)^2 h^2}{8ma^2} - \frac{n^2 h^2}{8ma^2} = \frac{(2n+1)h^2}{8ma^2} \quad (15)$$

2.7 关于几个重要物理量的测量问题

在求解得到一维势箱中粒子的波函数之后，启发学生考虑几个重要物理量的测量问题，包括粒子在箱中的位置、动量、动量平方、能量等。通过计算使学生认识 $\psi_n(x)$ 既不是坐标算符 x 的本征态、也不是动量算符 $\hat{p}_x$ 的本征态，因此，粒子的位置和沿 x 方向的动量均不具有确定值，无法准确测量，可通过计算平均值公式求其平均值。 $\psi_n(x)$ 是 $\hat{H}$ 和 $\hat{p}_x^2$ 的本征函数，粒子的能量和动量平方有确定值，即能量和动量大小有确定值。

特别是关于粒子的能量，已通过薛定谔方程求解得到，这里启发学生思考，是否可用其他方法得到体系的能量？一方面引导学生思考，定态薛定谔方程表明状态函数是能量算符(哈密顿算符,(16)式)的本征函数，因此可从哈密顿算符本征值的角度得到体系能量，如(17)和(18)式所示：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (16)$$

$$\hat{H}\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \right) = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \psi_n(x) \quad (17)$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \quad (18)$$

另一方面，在得到粒子动量平方的表达式之后((19)式)，通过能量与动量之间的关系((20)式)，得到粒子的能量：

$$p_x^2 = \frac{n^2 h^2}{4a^2} \quad (19)$$

$$E = T + V = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p_x^2}{2m} \quad (20)$$

这样，用三种不同的方法得到了体系的能量。

通过对这些力学量测量问题的思考，有助于加深学生对量子力学基本假定的理解。

2.8 一维势箱模型在化学中的应用

将一维势箱模型应用于准一维直链共轭体系，以最简单的直链共轭烯烃(丁二烯)为例，引导学生考虑如何计算体系 π 电子的总能量？引导学生考虑两种 π 键模型，定域 π 键和离域 π 键，分别计算体系4个 π 电子的总能量，进而引入离域能的概念，使学生认识到离域 π 键使体系得到额外的稳定化能，进而深刻理解直链共轭烯烃单双键键长趋于平均化的现象。值得注意的是，要向学生强调，用一维

势箱模型描述的 π 电子能量,是非常粗略的近似,其结果仅有定性意义,一维势箱粒子的波函数与真实直链共轭烯烃的 π 电子波函数(分子轨道)从函数形式上有本质差异。

3 结语

问题式教学法是国内外广泛认可的主动学习式教学模式,对于一维势箱中的粒子,教学内容丰富、综合性强,涉及的知识面广、问题繁多复杂,采用问题教学法进行课堂教学是一种有益的教学改革尝试。围绕本征值方程求解及对波函数和能量的讨论,设计一系列关键教学问题,引导学生探索性分析问题和解决问题,深刻理解一维势箱粒子薛定谔方程求解的基本思路,加深对量子力学基本假定、平均值、微观基本粒子运动规律的认识。通过“课堂提问与讨论”“问卷调查”“单元测试”“拓展实践”等多环节评估,我们发现,问题式教学法在“一维势箱中的粒子”的应用,较好地做到了众多知识点的有机融合,实现了知识目标、能力目标和素质目标有机统一,取得了较好的教学效果。

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: 15–20.
- [2] 李炳瑞. 结构化学. 第3版. 北京: 高等教育出版社, 2017: 25–29.
- [3] 孙宏伟. 结构化学. 北京: 高等教育出版社, 2016: 13–17.
- [4] 郭用猷, 张冬菊, 刘艳华. 物质结构基本原理. 第3版. 北京: 高等教育出版社, 2015: 13–16.
- [5] 高晓雁. 中国高等教育, **2008**, 24, 43.
- [6] 郑敏燕. 大学化学, **2017**, 32 (8), 20.
- [7] Levine Ira, N. *Quantum Chemistry*, 7th ed.; Prentice-Hall, Inc.: New Jersey, USA, 2013; pp. 21–28.