

“自旋交叉”科研内容融入晶体场理论本科教学的实践

余凡^{1,*}, 王亮¹, 李宝^{2,*}

¹ 江汉大学化学与环境工程学院, 光电化学材料与器件教育部重点实验室, 武汉 430056

² 华中科技大学化学与化工学院, 武汉 430074

摘要: 介绍将科研内容“自旋交叉”的概念与原理融入课堂教学活动, 以期提升学生在该课程学习中的积极性及核心素养。该教学活动拟将晶体场理论的内容与知识点应用到自旋交叉科学概念中, 结合教师课堂教学及学生自主学习, 进行相关知识技能的教授, 最终提升学生的学习效率与核心素养。

关键词: 晶体场; 自旋交叉; 本科教学; 科学研究; 核心素养

中图分类号: G64; O6

Introduction of Spin Crossover into the Undergraduate Teaching of Crystal Field Theory

Fan Yu^{1,*}, Liang Wang¹, Bao Li^{2,*}

¹ Key Laboratory of Optoelectronic Chemical Materials and Devices of Ministry of Education, School of Chemical and Environmental Engineering, Jiangnan University, Wuhan 430056, P. R. China.

² Chemistry and Chemical Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, P. R. China.

Abstract: In view of the difficult situation for students in the process of learning crystal field theory in inorganic chemistry, one teaching model that combines the scientific content “spin crossover” into the learning activities of classroom teaching has been introduced in order to improve the students’ enthusiasm and core literacy in the course. The implementation of this teaching activity will apply the content and knowledge points of crystal field theory to the concept of spin crossover, combine the classroom teaching of teachers and students’ independent learning, and carry out the teaching of relevant knowledge and skills, and finally improve the learning efficiency and core literacy of students.

Key Words: Crystal field; Spin crossover; Undergraduate teaching; Scientific research; Core literacy

现行教育的主要目的旨在培养具备一定“核心素养”的人才。而所谓“核心素养”是指一个人终身发展和适应社会发展需要的必备品格和关键能力, 也是解决复杂社会问题的能力, 主要包括“人文底蕴、科学精神、学会学习、健康生活、责任担当、实践创新”。因此, 如何在大学课程教学过程中适时融入核心素养教育成为大学教师课程教学改革挑战。

晶体场理论是无机化学课程配位化学理论中非常重要的知识点, 也是该章的难点。该理论以过渡金属配合物的电子构型为出发点, 着眼于第一过渡系金属离子的 3d 轨道在各种对称性配位体静电场中的变化, 可以较为顺利地解释配合物的立体构型、颜色、磁性、热力学稳定性和配合物畸变等

收稿: 2020-04-12; 录用: 2020-05-09; 网络发表: 2020-06-04

*通讯作者, Email: yufan0714@163.com; libao@hust.edu.cn

基金资助: 武汉市市属高校教学研究项目(2019045, 2019008); 武汉市教育科学“十三五”规划课题(2017C166); 湖北省高等学校省级教学研究项目(2018-50); 国家自然科学基金面上项目(21971078)

主要问题^[1,2]。因此,该知识点的学习与理解对学生掌握配合物的相关知识点与性质、理解前期所学分子结构及电子结构排布等具有举足轻重的作用。但由于该知识点综合运用性太强,涉及的知识点众多(如晶体场分裂能、配位原子、强场与弱场、磁性、 $d-d$ 跃迁等),学生学习过程中会遇到很多困难,从而导致学习积极性与效率降低,不利于学生整体核心素养的培养^[3-5]。并且该部分教学内容自学难度较大,一般采用教师直接讲解的方式进行,难以进行新教学模式或方法的尝试。现有教学参考文献也鲜有针对晶体场理论教学方法的报道。

“自旋交叉”配合物是近年来分子基功能配位材料的研究热点之一。该类材料能对外界物理、化学刺激产生传感,中心金属离子发生高、低自旋态的转变,引起材料磁性、颜色等多样物理性能的改变,赋予了该类材料在显色器件、分子开关、分子传感器等领域的潜在应用价值。自旋交叉的基本原理涉及了晶体场理论的基本核心内容,比如高低自旋态、颜色变化、分裂能、 d 电子排布等内容,非常适合引入到晶体场的本科教学过程中^[6,7]。该科研体系的引入能使学生明确所学本科知识并非是“纸上谈兵”,而是能够运用到具体的科学研究当中。科学研究与本科教学的结合不仅会提升学生学习知识的积极性,还能有效拉近学生对科学研究的距离感,提升学生的科学精神及相关核心素养,最终落实立德树人的教育目标。

1 教学设计思路

晶体场理论是大一无机化学授课体系中物质结构基础的核心内容之一,是今后化学专业学生学习后续物理化学和结构化学课程的基础。但是该部分内容抽象且难以理解,为了有效提升学生的学习效率,帮助加深理解及熟练运用该部分知识点,提升综合科学素养,在此特将笔者科研方向——自旋交叉,与晶体场理论的本科教学过程融合,尝试一种全新的授课模式。授课开始首先介绍本人的研究方向,展示相关科学研究成果^[8]及科研项目,并成功引入晶体场理论,提出相关概念及学习思路,并开始讲解 $3d$ 轨道在八面体场的能级分裂现象,再进一步讲解高、低自旋态的不同电子排布,解释磁性、颜色、晶体场稳定化能等概念(图 1)。

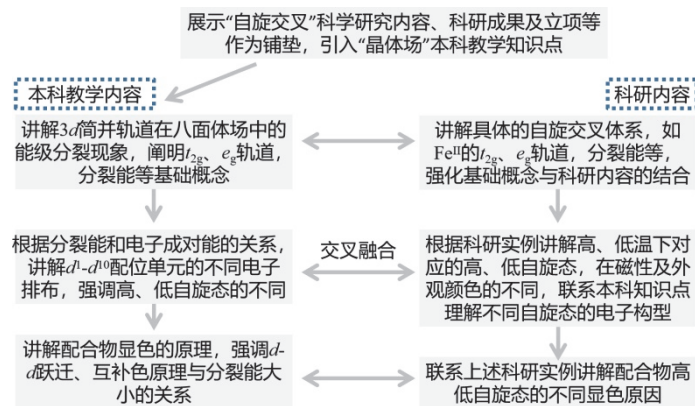


图 1 晶体场本科教学与自旋交叉研究内容相结合的课堂思路

2 教学课堂设计

【课程引入】今天,给同学们介绍科学研究的前沿领域——自旋交叉。自旋交叉涉及第一过渡系具有 $d^4 \sim d^7$ 电子组态的金属离子形成的八面体配合物中,伴随外界刺激因素如温度、压力、光照等,产生电子构型的改变(即高低自旋态的改变),同时伴随着材料颜色、磁学性能的改变(图 2)。这一特性赋予了自旋交叉材料作为分子储存及传感记忆材料的应用前景。而该类自旋交叉材料的储存及传感机理,可以利用我们今天要讲解的知识点——晶体场理论来进行解释。今天学习的知识点正是本科知识点与科学研究内容的结合,也说明了我们在本科阶段所学知识点是有其用武之地的。

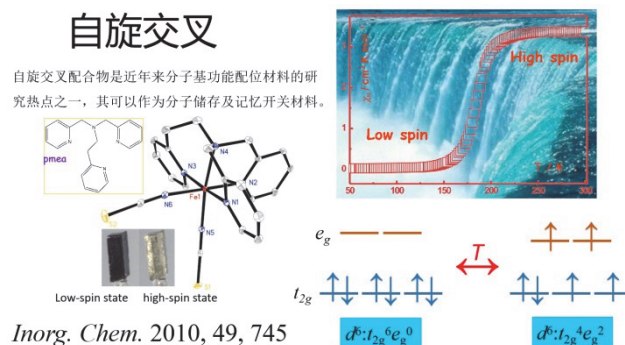


图2 介绍自旋交叉的讲义设计

【设计理念】晶体场理论是配合物的重点知识点，也是本书的难点，学生学习起来比较吃力，难以形象化理解。单纯的学习书本上的知识点对学生来说过于生硬。为了提升学生的理解力及学习积极性，引入具体化的实例能有效提升学习效果。除此之外，所涉及的具体实例为科学研究前沿领域，其与本科知识点的有效结合可以使学生在学习过程中形成形象化的理解，拉近学生与科学研究之间的距离，提升相关科学素养。

【课堂展开】首先我们来学习晶体场理论的基本理论，包括简并的5条d轨道在球形场中能量升高、八面体场中的分裂情况。阐明 t_{2g} 、 e_g 轨道，分裂能等基础概念。提出关键问题——我们所学的这些知识点与自旋交叉领域有什么联系呢？

【课堂展开】讲解图2中配合物 Fe(II) 的晶体结构，判断为二价铁离子并处在八面体配位场中，讲解其电子构型为 $3d^6$ 电子构型，并指明其5条简并轨道的分裂情况。指明自旋交叉体系的 t_{2g} 和 e_g 轨道与课本上讲的 t_{2g} 和 e_g 轨道的一致性。

【设计理念】讲解完教材上的知识点后，将其应用到具体的科研内容当中，理论联系实际。此种教学模式既能进一步巩固所学本科知识点，又能将知识点代入具体科研实例，使学生明白学有所用，学会所用。本科知识点的展开，有利于拉近学生与科学研究之间的距离，使学生领略科研的美丽。

【课堂展开】根据分裂能和电子成对能的关系，讲解 d^1-d^{10} 配位单元的不同电子排布，强调高、低自旋态的不同。指明不同的自旋态所具有的成单电子数、磁性大小。

【课堂展开】根据科研实例讲解高、低温下对应的高、低自旋态，并说明不同的自旋态所对应的不同磁性及外观颜色。通过这种关联讲解，不仅使学生理解所学晶体场理论知识点，还能深入理解自旋交叉与晶体场理论的关系。比如二价铁离子，具有6个d电子，在低温时是低自旋态，具有的电子构型为 $(t_{2g})^6(e_g)^0$ ，不具备成单电子，磁性上对应的数值为零，实例当中出现的磁性数值为 $0.2 \text{ cm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ，这是由于电子自旋态的不纯导致(由于有不纯物导致)；随着温度升高，材料的磁性数值明显增大(图2)，到200 K以上，彻底转变为高自旋态，其电子构型为 $(t_{2g})^4(e_g)^2$ ，具备4个成单电子，磁性数值为 $3.0 \text{ cm}^3 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。充分体现了高自旋态与低自旋态的定义的差别，类似现行“0和1”的储存机理。

【设计理念】本科教材上的高、低自旋态难以理解，引入具体实例讲解可以有效提升学生的理解力及学习积极性，并培养其相关核心素养，包括：在这种本科知识与具体科学研究间的结合，能使明确两者间关系，提升学生相关科学精神；并通过了解自旋交叉领域的发展，提升学生的人文底蕴和科学精神。

【课堂展开】继续讲解配合物显色的原理，强调 $d-d$ 跃迁、互补色原理与分裂能大小的关系。

【课堂展开】联系自旋交叉实例中的颜色变化，阐述配合物高低自旋态的不同显色原因。低温时为低自旋态， e_g 轨道为空轨道，可以接受电子跃迁，显红色；但高温时变为高自旋态， e_g 轨道为半充满状态，难以接受电子跃迁，显淡黄色。

【设计理念】本科生课堂上对配合物颜色的解释难以理解,引入具体科研实例能有效提升学生的学习效果与理解能力。通过本课知识点与科学研究内容结合的教学模式,提升学生的学习积极性,培养学生学会学习的核心素养。

3 总结与展望

由于配合物中的晶体场理论是本章的重点内容,但内容晦涩难懂,学生学习起来难度很大。将此部分本科教学与具体的科学研究热点结合起来,不仅利于提升学生的整体学习效果,而且有利于培养其科学素养。此种教学模式针对本校化学专业学生实施,学生普遍反映对晶体场理论中知识点的学习理解更加形象、具体,并且能有效了解科学研究的基础与本科知识学习间的关联性,提升相关科学素养及精神。后续实施仍可以继续深入,比如可以继续加入光谱化学序列对于二价铁配合物自旋交叉行为、高低自旋态间分裂能及晶体场稳定化能因素的影响,进一步深入地学习晶体场理论知识,加深本科相关知识点的学习。因此,特将针对晶体场理论的新教学模式进行分享,以促进该部分知识点高效教学模式的探索。

参考文献

- [1] 王晖,王毓明. 大学化学, **2018**, 33 (10), 97.
- [2] 刘颖,台睿,刘跃. 化学教育, **2015**, 36 (6), 1.
- [3] 师唯,徐娜,王庆伦,杨光明. 大学化学, **2013**, 28 (1), 30.
- [4] 路英梅. 大学化学, **1998**, No. 6, 51.
- [5] 余平平,安德成,魏锐. 化学教育(中英文), **2020**, 41 (1), 15.
- [6] 袁梅,王新益,张闻,高松. 大学化学, **2012**, 27 (5), 1.
- [7] 余凡,李艾华,朱天容,胡思前. 化学教育(中英文), **2019**, 40 (16), 31.
- [8] Li, B.; Wei, R.; Tao, J.; Huang, R.; Zheng, L. *Inorg. Chem.* **2010**, 49, 745.