

基于翻转课堂概念的研究生量子化学教学实践^①

尹 兵， 许文华

西北大学 化学与材料科学学院，西安 710127

摘要：将翻转课堂的概念应用于研究生量子化学课程中。该教学模式以课堂的实际情况出发，以问题为导向，以小组讨论为主要形式，以有效教学为目标，激活了教师和学生的活力，在提高教学效果的同时，课堂交流带给师生更加愉快和轻松的教学体验。

关 键 词：量子化学；翻转课堂；问题导向

中图分类号：G642.0

文献标志码：A

文章编号：1000-5471(2021)03-0201-05

量子化学是西北大学化学与材料科学学院(本文简称“我院”)的一门面向研究生一年级的选修课，已经有数年的教学积累。随着计算模拟和实验的愈加紧密的结合^[1]，选修该课程的学生历年来都维持在30人以上，约占我院该年级总研究生人数的1/3，他们来自物理化学、无机化学、有机化学等多个专业方向，反映了计算化学作为一门交叉学科对各个化学分支的显著影响^[2-4]。教学实践表明，传统的面对面课堂授课方式存在一些问题和局限。首先，学生们的知识差别非常大，选课动机复杂。他们中除了有计算化学方向的研究生，更多的是实验背景较好、但理论基础相对较差的学生。研究方向各异的研究生们常常根据各自导师的要求来选修，更多的是出于被动地遵守导师对这门课的认可，而在主观上对上好这门课缺少准备。这导致课程的大部分内容因为学生缺少相应的背景知识而无法被有效吸收。其次，我院研究生均面对较为繁重的科研任务和较大的毕业压力，无法在课程学习上投入太多精力，这对学好强调思考和理解的量子化学课程是个挑战。学习投入不够必然导致在传统课堂上学生们跟不上课程的进度，一个学期的很多时间里师生之间的教与学是脱节的^[5]，低效率的学习造成师生时间和精力的巨大浪费。

既然由教师引领的传统授课效果不佳，那么是否可以尝试让学生来引领学习过程，教师从讲台退到幕后？这种师生角色的互换促使笔者选择以“翻转课堂”的理念重构量子化学课程。“翻转课堂”的概念起源于20世纪90年代^[6]，Salman Khan于2004年逐步建立的Khan Academy产生了广泛的影响^[7]。在我国，翻转课堂的模式较早应用于中学化学，近些年来，在大学本科教育中的采用也越来越多，如今翻转课堂的实践几乎遍布所有化学的主要学科^[8-14]，不过在研究生教学领域或计算化学类课程中仍然较为少见^[15]。研究生和本科生有着非常不同的学习目标和学习环境，选修课和主干必修课同样有显著差别，这些都是需要我们去创新、探索的方面。

1 翻转课堂的构建

鉴于学生构成的复杂，笔者将量子化学课程新模式的目标设定为“有效教学”(effective learning)，即凝练学习目标，提高师生的时间利用效率。翻转课堂一般是将传统教室内的授课翻转为课下的自学，传统课

① 收稿日期：2020-01-31

基金项目：国家自然科学基金项目(21103137)；陕西省自然科学基金项目(2016JQ2038)。

作者简介：尹 兵，博士，副教授，主要从事计算化学研究。

通信作者：许文华，博士，讲师。

下的练习、反思翻转到课上，给予师生、生生更多交流、反馈和提升的机会。具体教学过程可分为“课堂前自主学习”“课堂中知识内化”和“课堂后总结反思”几个部分^[16]。这样的安排有其合理性，不过在教学实践中发现学生一般无法规律地抽出时间完成“课堂前”的自学和“课堂后”的巩固。基于此客观的学情，如果将教学实施模式设为“三合一”，即所有的活动在课堂上完成，那么随之而来的问题是：课堂压力明显增大，传统授课内容能否全部有效地讲授？

笔者结合自身在量子化学领域的多年研究经历，对该学科进行了分析。作为量子力学在化学中的应用，量子化学是物理、化学、数学和计算机科学等的一门交叉学科。它既包含诸如量子纠缠态等深刻物理思想，也包含例如大规模并行计算、多硬件加速计算等计算机科学前沿知识，更有化学键的分析等经典但其研究仍然活跃的化学问题。结合我院研究生的实际情况，将学生定位为量子化学软件的使用者。为此，课程的核心内容为物理思想（兼顾其他方面），数值计算方法和软件开发对于用户而言是封装的黑匣子。在具体的化学问题上，处于特定研究团队的研究生一般比授课老师更清楚其化学背景。掌握好物理思想将是学生们在科研工作中准确选择量子化学方法，正确分析计算结果的一个关键。研究生们均具有相当的自主学习能力，可在这个基本之上根据自身的科研需求去扩展知识。尽管量子化学作为一门理论学科，具有概念和定律较多的特点，然而从课程定位的这个角度看，课程中的核心概念将大大减少。事实上，课程核心是在各类典型化学问题中深入理解、熟练运用量子力学的公设。基于上述考虑，将传统授的课件浓缩提炼，形成了新的提纲。主要是弱化了公式的推导和扩展，强调了公式的内容。目前的提纲中尚没有包括太多量子化学在各类化学分支中的应用（“干什么”）的内容。实践表明完成现有的大纲可以把时间利用得比较充分，而“干什么”是属于扩展，应当根据学生的反馈，在适当的时候添加一些该方面的内容。该学习提纲的特点是少而精，这是解决不少学生背景差的一个关键。因为“少”，学生将有足够的时间在课堂上提升背景知识；因为“精”，可以启发基础较好的学生去举一反三。这样设计的一个后果是不少传统课堂上会讲授的内容被淡化甚至略去。可以通过将课程放在当下开放学习的大背景下去解决此问题。例如原子振动一章，在强调了谐振子模型的局限之后，教师并没有去涉及任何具体的改进的势能曲线。当然，精确的模拟实验的红外光谱必须考虑非简谐性，这方面的工作在当下主流计算化学期刊上可以读到。在科研工作中对此有需要的学生可通过参加专题讨论班、计算化学软件培训等途径学习到该部分知识。在学习方法上，量子化学课中概念和定律需要练习方能有效吸收。为此围绕提纲设计了习题，这样构成了以问题为导向(problem-based learning, PBL)的课程模式。

学生自主学习的材料包括视频、教材和网络资源。视频来自 YouTube 的 TM Chem 下面的 Quantum Chemistry 课程。该课程内容和教学大纲贴近，难度适宜，发音标准。每个视频的长度在 3~6 min。观看短视频优于教师自己预先讲授之处在于它和教师提供的学习提纲相关却不同。这样学生需要深入理解视频内容以便重组。推荐教材为 Levine I N 所著的《量子化学》。此教材目前已经出版到第 7 版，深受师生们欢迎。课程习题基于此书的课后题，另外参考了 Lowe J P 所著《量子化学》(第 3 版)的课后习题。所采用的资料均上传在班级的 QQ 群中。英文的学习环境对于正在步入研究前沿的研究生是有益的：他们需要积累专业英语的词汇和习惯专业英文的书写。事实上，教师应当鼓励学生依据提纲自由选择学习资料，资料不是目的，只是工具。学生可以携带笔记本电脑等电子设备，针对提纲中的知识点进行搜索，开展网络学习。同时，教师积极向学生介绍图书馆的相关图书、慕课资源等，有意避免给学生提供完整的课件。因为从提纲出发，加入理解后学生自己均可以形成具有自己风格的课件，这个构建的过程是主动学习的一个关键。

另外一个环节是翻转课堂中的互动。采用分组的方式，3~4 人为一组，自由组合。课堂的基本模式是：集体观看短视频→分组讨论→组内试讲→学生课堂讲解→习题解答→教师总结。教师参与每个环节，鼓励学生随时和教师互动。

在慕课、微课和小规模限制在线课程(small private online course, SPOC)等各种新兴方式冲击传统面对面教育模式的背景下，既吸收新兴模式灵活自主的一方面，同时试图发挥传统模式的优势。传统模式的长处为：互动。或许没有任何一种模式可以比在面对面课堂中更高效地交流想法。因此课堂最强调的是讨论。鼓励学生自由发言，培养他们主动交流的习惯。某一个小组在全班同学面前讲述本节课的知识是讨论的一个结晶。新的翻转课堂概括在图 1 中。

2 案例

以量子化学的第8章“量子力学的定理”(Theorems of Quantum Mechanics)为例,具体介绍。课堂时长为100 min。本章将分两次课完成。

课前准备:教师上传视频课件—量子化学_8.1-Dirac_记号.mp4,8.2_厄米算符.mp4,8.3_波函数塌缩.mp4以及大纲PPT-qm.pdf。

课堂中:教师首先介绍背景,在之前具体的模型体系的量子力学的学习过程中积累了很多知识,现在在此基础上学习公理化的量子力学假设(3 min);接着在教室的多媒体上播放视频(10 min),播放完毕后,教师强调Dirac符号并没有引入新的物理,指出厄米算符(Hermitian operator)的矩阵表示和厄米矩阵的定义一致,将量子力学和线性代数做一关联,并回答学生疑问;然后由学生分组讨论和自由重复去听,教师在各组中旁听,随时答疑(18 min),小组内试讲(12 min),自愿或由教师指定某小组在讲台依据大纲进行讲解,各小组成员可依次讲解一部分,其余班级同学随时可以提问(20 min);最后学生独立或通过小组内讨论来完成习题(20 min)。针对本章节的核心知识,练习题如下:

问题1:证明 $\langle m|n\rangle^* = \langle n|m\rangle$ 。

问题2:证明单粒子一维势能算符 $V(x)$ 是厄米算符。

问题3:请问测量处于 $2p_y$ 态的氢原子的轨道角动量的z分量得到的可能的测量值是什么?

这些题目比较基本,确保学生们可以在课堂上能较快完成,然而它们的结论很重要。练习2引导学生去思考之前一维势箱的知识,练习3则和上一章氢原子密切相关。

课堂的最后,点评学生的习题,留给学生总结、沉淀和自由思考的时间。教师可讨论下量子力学测量对当下的意义作为课堂的发散。例如,为什么量子计算机无法使用经典计算机的方式存储信息?

需要说明的是,该案例中的教学活动时间仅仅是计划时间,或者说是预估时间。翻转课堂以学生为中心,课堂时间随学生的进度而流动。具体的课程活动的时间安排是灵活的,教师将密切关注课堂情况,根据学生的实际情况调整。例如,如果每个讨论组都在10 min内完成了小组内试讲,下一部分的全班讲解将自然地随即开始,并非一定要执行完计划的12 min。可以准备文献综述、相关专题等附加材料,视课堂情况加入。

3 翻转课堂的成绩评判和校验

重新考虑了新的翻转课堂模式下成绩评判的问题。根据平衡考量积极互动的过程和有效学习的目标的原则,得到的公式为:总成绩=表现分数+测试分数,具体见表1。该成绩即为最终成绩。个人表现和组表现两项是每堂课累加(表2),将累加后的总分最高者设定为该子项目的满分,将每位学生和讨论组设定的默

认表现分定为及格分,其余学生的分数将据此线性分布。子项目“其他”中包括所列常规子项目之外的对此课堂有贡献的行为,比如指出授课提纲的错误,对课程提出积极建议等。

每堂课的个人表现和组表现的分数的评定依据表2的课堂记录表。对于每个具体的课堂行为都有相应的评分标准,另外每次个人的积极参与均给所在讨论组额外带来50%的分数。

在课程QQ群中不定期地发起问卷调查,及时得到来自学生们的反馈。

图2将最近几年的传统授课和翻转课堂的一些定量信息做对比。总体来看,翻转课堂的效果是正面的,各重要的评价指标均有较明显的提升。

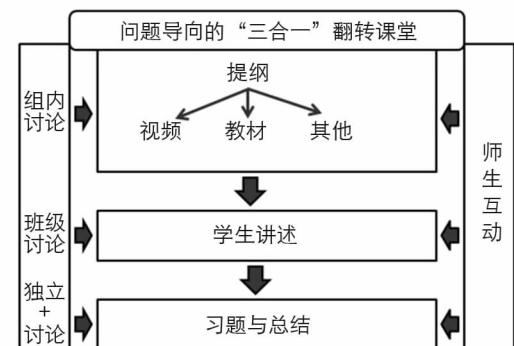


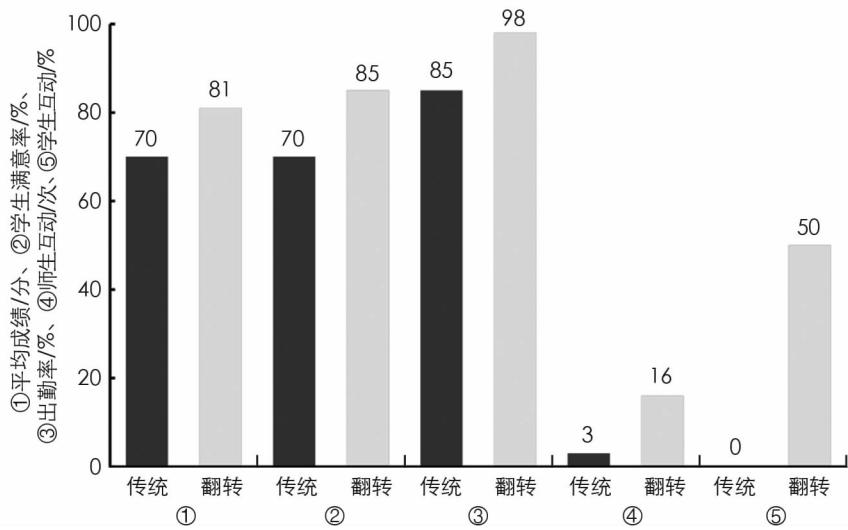
图1 翻转课堂示意

表1 成绩构成概表(教师评定)

| 项 目 | 子项目 | 子项目比例/% |
|------|------|---------|
| 个人表现 | 课件讲解 | 15 |
| | 问题讨论 | 10 |
| | 其 他 | 5 |
| 组表现 | 课件讲解 | 10 |
| | 问题讨论 | 7 |
| | 其 他 | 3 |
| 测 试 | 期末测试 | 50 |

表 2 课堂记录表

| 上课时间: | 授课内容: | 记录人: | |
|-------|----------------------|---------------|----|
| 组别 | 学生 | 活动内容 | 评分 |
| 组 1 | 学生 A 学生 B 学生 C | (此处记录该小组整体活动) | |
| 组 2 | 学生 D 学生 E 学生 F | (此处记录该小组整体活动) | |
| ... | | | |
| ... | | | |
| | | (此处记录班级整体活动等) | |



师生互动指每堂课平均师生互动次数；学生互动指每堂课平均学生互动时间占总课时的比例。

图 2 传统和翻转课堂的对比

4 翻转课堂的思考

尽管图 2 显示翻转课堂成效显著，但是该图表明翻转课堂仍然有不小的提升空间。下一步改进计划包括：①完善提纲内容。调查问卷表明某些内容难度过高，提纲内容不够丰富，应增加些与学生科研有更直接关联的案例，降低部分内容的难度。②优化课堂时间分配。视频学习占据了相当的时长，某些内容的教学无法按计划完成。③改善分组方法，使小组内合作更顺畅。

此外需要将诸多因素综合考虑。例如学校的研究生政策。当下“重科研，轻教学”的风气对很多学校的本科教育已经带来显著的消极影响，而对研究生课堂的伤害或许更大。另外，作为一门选修课，量子化学需要面对其他选修课的竞争。不排除存在某些课程为了增加选课人数刻意降低学习门槛的现象，这种恶性竞争最终将导致整体教学水平的下降。尽管政策研究不在教师的职责范围内，但是“自上而下”的政策对教学的影响非常显著。回归教学本质，工作有分别，初心应一致：服务学生，教学相长。缺乏合理政策支持的教学研究或许容易停留在理论层面，难以释放出应有的效果，从这个角度看，加强和决策人员及其他老师的沟通，积极的反馈将提升课程质量。

在术语上，有人认为基本教学活动均在课堂上完成，已经没有了“课上”和“课下”的区分，不应该称为“翻转课堂”。对此笔者的理解是，翻转课堂并没有唯一严格的定义，它已经从最初的形式(Jonathan Bergman 和 Aaron Sams 的工作)发展为当下的百花齐放。有人总结翻转课堂的 4 个特点为灵活的学习环境、学习型的文化、针对性的内容和专业的指导者^[17]。以提纲和问题为指引，以学生为中心，课堂时间随学生的

进度而流动,从这个角度,笔者的实践是符合翻转课堂的框架的。

5 结 论

介绍了笔者在量子化学中采用翻转课堂的实践和思考。从教学体验和量化的标准来看,新的教学模式更好地实现了“有效教学”的目标,下一步将以优化个别教学内容为切入点,综合学生的反馈,对该课程做进一步完善。

参考文献:

- [1] The Nobel Prize in Chemistry 2013 [EB/OL]. (2013-09-09)[2019-11-21]. <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2013/summary/>.
- [2] 郑瑛.云计算数据中心节能调度算法改进研究[J].西南大学学报(自然科学版),2019,41(12):135-142.
- [3] 王明胜,王玺梁.基于密度泛函理论及实验揭示 pincer 钷催化偶联反应机理[J].西南师范大学学报(自然科学版),2019,44(3):23-28.
- [4] 李佐,廖大麟,王朴,等.高压下 $\gamma\text{-Ca}_3\text{N}_2$ 晶体的结构,电子和光学性质的第一性原理研究[J].西南大学学报(自然科学版),2018,40(2):78-84.
- [5] 张林,温涛,张玲.大学生课堂沉默的助力与动力机制研究[J].西南师范大学学报(自然科学版),2019,44(3):156-162.
- [6] KING A. From Sage on the Stage to Guide on the Side [J]. College Teaching, 1993, 41(1): 30-35.
- [7] 维基百科. Khan Academy [EB/OL]. (2009-12-14)[2019-11-21]. https://en.wikipedia.org/wiki/Khan_Academy/
- [8] 张冬梅,焦瑞清,卢彦,等.以“有效教学”为目标的南京大学生物化学教学实践[J].高校生物学教学研究(电子版),2016,6(4):30-34.
- [9] 陈云,高英,吴庆生.翻转课堂教学模式在普通化学教学中的应用与评价[J].大学化学,2017,32(11):7-11.
- [10] 路慧哲,张莉,段红霞,等.结构化学课程建设的探索与实践[J].大学化学,2018,33(2):36-39.
- [11] 饶立,任彦亮,万坚,等.基于现代信息技术的结构化学一维势箱理论和HMO法“翻转课堂”教学设计[J].大学化学,2018,33(11):34-41.
- [12] 高峻,陈彦逍,李万舜,等.“SPOC+翻转课堂+传统课堂+全过程考核”混合教学模式——以近代化学基础(有机化学)课程教学实践为例[J].大学化学,2018,33(11):47-52.
- [13] 陈素彬,胡振.后MOOC时期高职分析化学混合式教学模式构建[J].化学教育,2019,40(8):67-73.
- [14] 杨凤磊,沈飞,王庆红,等.基于微课的高校无机化学翻转课堂教学效果研究[J].化学教育,2019,40(4):24-29.
- [15] 张晨阳,胡岳华,孙伟.矿物加工计算化学课程建设探索与创新[J].教育教学论坛,2019(15):95-96.
- [16] 马献力,刘汉甫,李芳耀,等.翻转课堂在《物理化学》课程教学中的应用思考[J].教育教学论坛,2017(6):237-239.
- [17] Flipped Learning Network. Definition of Flipped Learning [EB/OL]. (2014-03-12)[2019-12-09]. <https://flippedlearning.org/definition-of-flipped-learning>.

Quantum Chemistry Graduate Course Based on Flipped Classroom Concept

YIN Bing, XU Wen-hua

College of Chemistry and Materials Science, Northwest University, Xi'an 710127, China

Abstract: In this paper, our practices of teaching graduate course quantum chemistry have been summarized in a flipped classroom approach. The new teaching model has been built upon the analysis of the situations of students and belongs to a problem-based learning paradigm. The students perform better after the new teaching activity. Furthermore, the confidence and emotions are improved as well.

Key words: quantum chemistry; flipped classroom; problem-based learning

责任编辑 潘春燕