

文章编号:2095-7386(2024)01-0115-05

DOI:10.3969/j.issn.2095-7386.2024.01.016

“新工科”背景下计算材料学课程教学的改革与实践

崔婷婷, 黄锦涛, 闵永刚

(广东工业大学 材料与能源学院, 广州 510006)

摘要:为满足“新工科”建设的要求,对计算材料学课程进行教学改革与实践。通过理论实验的一体化结合、引入面向实际应用的实验设计以及过程化的考核方式来提升教学效果,使学生能够借助计算模拟来分析和解决不同尺度下的材料学问题。改革实践措施提高了学生自主思考、团队协作和创新思维的能力,建立起符合“新工科”建设需要的人才培养模式,可以作为多学科交叉和融合式教学的新范式。

关键词:计算材料学;课程改革;面向实际应用;过程化考核

中图分类号:G 642

文献标识码:A

Teaching reform and practice of Computational Materials Science under the background of New Engineering

CUI Tingting, HUANG Jintao, MIN Yonggang

(School of Materials and Energy, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510006, China)

Abstract: In order to meet the requirements of “New Engineering” construction, the teaching reform and practice of Computational Material Science course are carried out. Through the integration of theoretical experiments, the introduction of experimental design oriented to practical applications, and process-oriented assessment methods improve the teaching effect, so that students can analyze and solve material science problems at different scales with the help of computational simulation. The reform practice measures improve students' ability of independent thinking, teamwork and innovative thinking. Moreover, it establishes a talent cultivation model that meets the needs of the construction of “New Engineering” disciplines, which can be used as a new paradigm for multidisciplinary cross-cutting and integrative teaching.

Key words: Computational Material Science; teaching reform; focusing on practical applications; process-oriented assessment

0 引言

为主动应对新一轮科技革命与产业变革,教育部于 2017 年提出积极推进“新工科”建设,以互联网

和工业智能为核心,注重学科交叉和课程整合,加强自然、工程、人文等多学科的全面整合和相互融合^[1]。计算材料学是一门以数学、计算机、材料学、物理化学和生物学等交叉学科理论体系为支撑的新

收稿日期:2023-11-21.

作者简介:崔婷婷(1988—),女,博士,副教授,E-mail:cuitt@gdut.edu.cn.

通信作者:黄锦涛(1986—),男,博士,副教授,E-mail:jintao.huang@gdut.edu.cn.

基金项目:国家自然科学基金(编号:52001068).

兴学科,利用多种计算方法对材料的组成、结构、性能进行设计与模拟,高效地实现对材料微观机制的理论解释、对极端条件实验过程的模拟和对新材料性能的预测,为材料复杂体系的研究提供了新途径,是沟通材料学理论和实验研究的桥梁^[2,3]。目前,我国已有很多高等院校在不同教育阶段开设了计算材料学系列课程,对学生了解和掌握计算材料学的原理和方法起到了积极作用。

随着计算材料学的发展,与其相关的课程内容和教学过程逐渐显露出了一些局限性。(1)配套基础课程的教学要求程度不深,学生难以顺利衔接。材料类专业多设立于传统的工科背景院校,学校对计算材料学在理论深度上认识不足,在高等数学、固体物理、无机化学和物理化学等课程的教学要求中未考虑到与计算材料学的内容衔接^[4],容易导致学生接纳困难。(2)课程内容设置不合理,讲述的知识相对陈旧且脱离实际。随着计算机运算能力的提升以及基础理论的发展,计算模拟的方法和手段层出不穷,但课程基础理论和概念较多且抽象,占用了大量课时^[5],导致实际应用举例的课时减少,使教师陷入在“讲得深入全面”和“讲得直观易懂”之间作取舍的困局。(3)上机实践不足,“只听不用”难以做到学以致用。计算材料学归根结底是一门能够解决实际科学问题的课程,如果上机实践只是机械地重复案例操作,而没有带着研究题目使用软件和相应的计算方法去寻找解决办法,就会导致学生只学会了表面的概念和操作^[6],但不能将所学知识灵活运用在解决实际问题上。(4)考核形式单一,不利于学生综合能力的培养。传统的试卷考核只能片面地考查学生对理论概念的掌握情况,无法了解学生是否掌握软件的操作和能够针对不同研究目标选取正确的计算方法,不利于学生研究能力和创新能力的培养^[7]。因此,结合“新工科”建设对创新型高素质人才培养的要求,对计算材料学课程进行改革具有非常重要的意义。鉴于此,笔者从教学内容、教学方式和考核方式对计算材料学课程进行了一系列新的探索实践,旨在提高学生自主思考、团队协作和创新思维能力,建立符合“新工科”建设需要的人才培养模式,为多学科交叉和融合式教学提供新范式。

1 课程改革内容

1.1 理论与实验一体化的教学方式

计算材料学中基于电子、原子、分子、连续体等多种尺度的研究对象都有相应的计算方法,每种计

算方法都是基于不同理论的设定和推演,但对于工科院校侧重实际应用的材料类专业而言,使用计算材料学方法解决科学问题才是重点。因此,可以避免使用大量课时去推导各类计算方法的公式,而是将教学重点放在对重要知识点的凝练上,从实际应用案例的介绍中加深对基础理论知识的理解和掌握,即着重阐述基于密度泛函理论的第一性原理计算、分子动力学方法和蒙特卡罗方法的简要概念、适用体系和优缺点,并对计算材料学在新能源、催化、环境科学等领域的具体应用案例进行解析。授课方式方面,在理论与实践相结合的基础上,提高上机实践的课时占比,例如总计 24 课时,其中理论课 8 课时、实验课 16 课时,并运用互动式、引导式和启发式等教学形式,提高学生的课堂参与度。在计算软件上主要使用专门为材料科学领域研究者开发的一款可运行在 PC 机上的模拟软件——Materials Studio^[8],通过具体实例讲授结构建模、几何优化、过渡态搜索等重要内容,让每部分理论内容皆可与上机实践内容相对应,使学生在实践中迅速消化理论知识,避免了空洞抽象的理论推导,提升了学生的学习兴趣,加深了对各种计算方法的理解。

1.2 面向实际应用的实验设计

随着计算方法和技术的不断发展,计算材料学已经成为研究和开发新材料的重要工具。在教学改革中,设计面向实际应用的实验,可以帮助学生将理论知识应用于解决实际问题,从而激发学习兴趣,并培养学生的实践能力和创新思维。一方面,通过设计与前沿材料性质、结构或性能相关的计算模拟实验,学生可以深入理解计算方法的原理和适应范围,从而更好地理解材料的行为和性能。例如,很多学生参加了大学生创新创业训练项目,或在学院里某个课题组参与科研项目,因此,有目的地在计算材料学的教学内容中设计与本学院优势学科方向和课题组研究方向相关的计算实例,使之与学生参与的科研工作形成对接,将非常有助于学生在今后的科研内容中“学以致用”,使用计算材料学的知识和技能解决科研中遇到的问题。另一方面,面向实际应用的实验设计可以帮助学生了解材料科学和工程领域的实际需求和挑战,这将激发学生的兴趣,建立理论知识与现实问题的桥梁,并促使他们思考如何利用计算材料学的方法解决这些问题。例如,学生可以设计案例来优化材料的能源存储性能、催化活性或光电转换效率等,以满足实际应用中的需求。这样的实验设计将使学生更加关注材料科学和工程的实

际应用,培养创新思维和解决实际问题的能力。

在实施面向实际应用的实验设计时,需要考虑以下几个重要因素。首先,要根据学生的知识和技能水平设计实验,既要考虑他们的基础知识,又要给予一定的挑战。其次,实验设计应该具备一定的灵活性,以满足不同学生的需求和兴趣。学生可以根据自己的兴趣和目标选择不同的实验方向和主题,从而更深入地理解计算材料学的应用范围和重要性。此外,实验设计还应注重培养学生的实验思维 and 创新能力,鼓励他们提出新问题、尝试新方法并进行自主探索。

1.3 过程化的考核方式

开设计算材料学课程的重要目的是为了让学生掌握计算材料学的原理和应用,在未来的科研和工作中能学以致用,对考核评价方式也应做新的探索和改革。相比传统的试卷考核只能局限在对书本知识的记忆上,在计算材料学的课程中可尝试采取过程化的考核形式。一方面,将课堂提问、随堂测验、上机操作和数据提取并导出分析都纳入考核范围^[9],另一方面,设置与科研前沿和实际应用密切相

关的题目,使计算材料学的优势得以凸显,并让学生进行灵活运用。学生的上机操作实践是重中之重,设计几个难度由浅至深的计算案例,从完成进度和操作正确性两方面多维度考核学生的掌握程度,而不是根据结课时的一份有标准答案的实验报告作为评判标准,这样可以全方位考查学生在使用软件、构建模型、设置计算参数和提取结果这一系列操作中遇到的问题。鼓励学生组成兴趣小组^[10],每个实验完成后进行讨论交流并由教师加以点评和指导,学生可查找自身是否有操作不当的情况,在下一个计算案例时加以改进。最终的考核结果由这一过程中多个计算模型和结果的返回文件进行综合评判,以全面考核学生的知识掌握情况和实际应用能力。

2 教学实践

基于“理论与实验一体化的教学方式”“面向实际应用的实验设计”和“过程化的考核方式”的计算材料学课程建设,中心思想是“精讲、多练、广考”,教学内容和学时分配见表 1 所示。

表 1 教学内容和学时分配

Table 1 Teaching content and class hours allocation

章节	教学内容	学时
第一章 绪论	计算材料学的概述、理论体系、研究动态与展望等。	2
第二章 密度泛函理论	密度泛函理论的基础定理、理论框架、应用领域和实例等。内容包含 Materials Studio 软件的安装和界面化认识、CASTEP 和 Dmol ³ 模块的参数设置和提交计算,以及根据具体案例进行结构建模、几何优化和能带、态密度、电荷密度等电子性质的计算。	12
第三章 分子动力学	分子动力学的计算框架、系综、势函数和力场等介绍。内容包含 Forcite 模块的认识及使用,根据具体案例进行小分子扩散行为、自由体积和均方位移等计算。	6
第四章 蒙特卡罗方法	蒙特卡罗基本原理、计算框架和应用举例。内容包含 Conformers 模块的认识及使用、分子偶极矩与能量构效关系的计算。	4

2.1 理论知识学习

该门课程注重培养学生多方面的综合能力,包括学习能力、应用能力、研究能力以及创新能力。因此,在理论教学内容上,首先介绍计算材料学的概述、理论体系、研究动态与展望等内容,随后用 6 个课时精讲当前计算材料学领域应用范围最广、研究尺度最宽的三种计算方法——密度泛函理论、分子动力学和蒙特卡罗方法。针对每种计算方法,简要讲解其理论基础,着重介绍该方法的应用领域,针对不同材料体系(如块体材料、二维材料、高分子材

料)、不同研究尺度(如电子尺度、原子尺度)采用不同的计算方法,针对不同性能(如热学性能、电学性能、光学性能)采用不同的计算性质,针对不同性质(如电子结构性质、热/动力学稳定性、扩散性质)采用不同的计算参数,使学生能够建立使用计算材料学进行材料研究的具象思维,为上机实践提供理论知识基础。

2.2 实验教学的开展

上机实践是该门课程的重点,实验是理论知识学习的实际运用,也可以检验理论知识学习的效果,

实现“学以致用”的教学目标。因此,针对理论知识部分的三种计算方法设计了多种不同难易程度的计算案例,例如“构建聚甲基丙烯酸甲酯”和“CO 在 Pd (110)面上的电荷密度差分”等入门操作案例可以引导学生熟悉 Materials Studio 软件的操作界面并建立计算模型,“甲烷在聚(顺式-1,4-丁二烯)(PBD)中的扩散性”可以训练学生进行小分子在材料表面吸附和扩散上的计算。

在熟悉了计算软件的使用方法和基本操作后,设计研究性的实验,下面以“利用 DMol³ 模块的 LST/QST 和 NEB 工具探索化学反应的最小能量路径”为主题,简述实验教学开展的具体实施办法。反应路径的计算是研究反应性的重要组成部分,也是材料专业学生常见的研究内容。计算反应路径最简单的方法是从一个鞍点开始,沿着负梯度的方向连续采取步骤,这种陡降方法形成了最低能量路径(MEP)。Materials Studio 软件的 DMol³ 模块采用微推弹性带(NEB)法进行最小能量路径的计算,NEB 方法引入了一个虚拟的弹簧力,连接路径上相邻的点,以确保路径的连续性和力的投影,从而使系统收敛到 MEP,它的优点是提供了对 MEP 的快速定性检查。NEB 方法已广泛应用于固态物理,最近也被应用于分子研究。以氟化甲基上的氟交换反应 $F^- + CH_3F \rightarrow FCH_3 + F^-$ 作为研究对象,查找一个简单对称的 S_N2 过渡态结构,然后使用 TS Confirmation 工具绘制反应物、中间物和产物之间的能量路径。让学生三人一组,准备相关联的关键词进行文献查阅和交流讨论。上机实践分为以下 6 个步骤。(1)建模并进行几何优化:建立新的任务并命名为 LSTQST,在 3D Atomistic 文件中绘制一个氟化甲基分子,使用 DMol³ 模块进行几何优化 Geometry

Optimization。(2)设定反应物和产物:在几何优化后的氟化甲基分子的 C 原子旁边添加一个 F 原子,使其与 C 原子的距离与氟化甲基分子中的 C—F 键长相等,将此结构作为反应物 reactant. xsd;将反应物复制到一个新的 3D Atomistic 文件中并旋转结构,此结构作为产物 product. xsd。(3)打开菜单栏 Tools 中的 Reaction Preview 对话框,分别选择 reactant. xsd 和 product. xsd 作为反应物和产物,点击 Match... 按钮,手动调整使 reactant 和 product 之间的原子正确匹配。(4)执行 LST/QST 计算:打开 DMol³ Calculation 对话框,在 Set up 选项卡上选择 TS Search 任务,并对 Charge、SCF 及 Orbital Cut off 进行参数选择,然后进行计算。(5)使用 TS Confirmation 执行 NEB 计算:激活 reactant-product. xtd 文件并在 DMol³ Calculation 对话框中选择 TS Confirmation 任务,设定相关的路径质量参数,提交计算,结果将显示所找到的能量更低的过渡态结构。(6)解析数据,并最终形成课题研究报告。

2.3 考核评价方法

过程化的考核方式对理论和实验的学习效果均进行考查,将课堂提问、随堂测验、上机实践和计算案例报告多个项目包含在考核评价范围内,全面考核学生的知识掌握情况和实际应用能力,考核评价方案见表 2 和表 3。需要强调的是,由于计算案例的难度设计是由浅入深的,学生可以循序渐进地掌握材料计算模拟方法,因此在考核指标中不仅考查了学生各个计算案例的完成进度和操作正确性(分数比例各为 40%),还考查了改进程度(分数比例为 20%),即前期计算中的错误是否在后续计算中做了改进,使计算案例可以正确进行。

表 2 课程考核指标表(总分为 100 分)

Table 2 Course assessment indicators (total score:100)

一级考核指标		二级考核指标		三级考核指标	
指标内容	分数比例/%	指标内容	分数比例/%	指标内容	分数比例/%
理论	40	平时	100	课堂提问	50
				随堂测验	50
				完成进度	40
实验	60	上机实践×8	12.5×8	操作正确性	40
				改进程度	20

表 3 上机实践标准表
Table 3 Computer practice standard table

指标	80~100 分	60~79 分	40~59 分	0~39 分
完成进度 (权重 0.4)	100%完成	80%完成	60%完成	补交
操作正确性 (权重 0.4)	设置得当,结果正确	80%以上设置正确, 计算完成	40%以上设置正确, 提交了计算	不能正确操作, 未能提交计算
改进程度 (权重 0.2)	后续实验中改正了 之前全部错误操作	后续实验中改正了 之前部分错误操作	后续实验中的错误操作 影响了部分计算结果	后续实验中未改正 之前的错误操作

3 结语

在“新工科”建设的大背景下,对计算材料学课程进行了基于“理论与实验一体化的教学方式”“面向实际应用的实验设计”和“过程化的考核方式”的改革,在实践的过程中,学生不仅掌握了理论知识和软件使用方法,还能够运用计算材料学的方法解析相应的问题,并完成总结归纳。通过针对核心理论的精炼讲解和循序渐进的设计性实验,学生普遍表现出对这门抽象专业课的兴趣;实践过程不仅有利于实现学以致用,更开拓了学生的视野,使理论与实践相结合的研究能力得到一定程度的提升;考核过程中学生积极完善计算参数,激发了其主观能动性。针对计算材料学课程的教学改革措施将有助于提升材料专业学生解决科研和工程问题的能力,增强了创新意识,符合新时代创新型人才培养的要求。

参考文献:

[1] 林健. 引领高等教育改革的新工科建设[J]. 中国高等教育,2017(13):40-43.
[2] 侯冠一,刘军,张立群. 计算材料学在分子材料领域的研究进展与发展趋势[J]. 高分子学报,2023,54(02):166-185.

[3] 周少兰,李忠盛,丛大龙,等. 计算材料学在钢铁材料研究中的应用[J]. 兵器装备工程学报,2022,43(08):55-61.
[4] 许秀芳. “讲一练二考三”模式建设面向实际应用的计算化学课程[J]. 大学化学,2017,32(2):23-28.
[5] 许秀芳. 多元化的计算化学导论课程建设[J]. 化学教育,2021,42(18):105-108.
[6] 何业增,陈正,徐杰,等. OBE 教育模式下的应用型课程教学改革研究——以计算材料学课程为例[J]. 大学,2023,593(11):145-148.
[7] 聂小娃,郭新闻. 适应新工科建设的“计算化学与应用”教学模式[J]. 化学教育,2023,44(10):45-50.
[8] 许真铭,刘庆生,陈江安. Materials Studio 软件在计算化学和计算材料学课程教学中的应用[J]. 大学化学,2023,38:1-8.
[9] 郁亚娟,郭兴明,陈人杰. 基于混合式教学法的计算材料学系列课程教改实践[J]. 中国材料进展,2021,40(12):1015-1022.
[10] 郭丹,金剑锋,王明涛,等. 新工科背景下计算材料学实验教学改革与实践[J]. 实验室研究与探索,2022,41(03):181-186.