

研究生《理论化学计算》课程教改探索

汪 佩 汪圣尧 杨 懿

(华中农业大学理学院, 湖北 武汉 430070)

摘要: 为适应化学学科发展和化学专业人才培养的新需求, 针对研究生《理论化学计算》课程学生畏难情绪, 学习热情不足的特点, 本文介绍了通过因时制宜、注重培养实际操作能力; 启发式教学, 以学生为主体, 发挥学生主观能动性; 因材施教、优化课程考核方式。该改革方案的实施, 提高了学生的学习热情, 锻炼学生理论计算的能力, 加强其应用计算解决实际问题能力, 提高教学质量。

关键词: 理论计算; 教学改革; 研究生教育

伴随计算机硬件的飞速发展, 超算资源和高性能计算机集群这些硬件资源越发丰富和便宜, 打破了理论化学计算的价格壁垒。并随着理论化学方法和化学计算软件的不断发展以及操作日趋简单化, 不仅理论计算组, 大量的实验研究组也能开展理论化学计算的研究工作。理论化学计算基于密度泛函理论 (Density Functional Theory, DFT) 通过自洽计算能确定材料的几何结构、电子结构、热力学性质和光学性质等材料物性。理论化学计算已成为研究材料各种物理和化学性质非常普遍的手段, 获得了许多突破性的进展, 越来越多地被应用到固体、表面、材料设计、合成、模拟计算、大分子和生物体系等诸多方面的研究中, 并成为化学和材料等领域研究的一个重要基础方法和核心技术, 成为现代化学等领域科研工作者必备工具。从而不仅是化学科学研究更是化学学科的发展, 急需一批懂理论化学计算研究的人才加入。系统的理论化学计算课程, 正成为化学专业高水平研究人才的重要培养内容。

为适应化学学科发展和化学专业人才培养的新需求, 针对研究生新开设的理论化学计算课程, 是一门能让初学者了解理论化学知识, 以及科学前沿研究中涉及到理论化学计算是如何进行, 并熟悉理论化学计算操作的实用型课程。以期培养一批对理论化学计算拥有浓厚兴趣、具有前沿视野和创新能力的科研储备人才。

一、课程分析

本课程是面向理论化学计算初学者入门的实用性教程。通过本课程的学习学生能: 初步掌握模型构建实际操作; 了

解 VASP 程序 (Vienna Ab-initio Simulation Package) 的输入和输出、学会应用 VASP 程序进行结构优化和频率计算, 了解分析态密度 (Density of states) 和差分电荷密度 (Charge Density Difference) 等数据处理与问题分析; 了解如何搜索基元反应的过渡态以及绘制势能曲线, 从而从原子/分子水平理解多相催化反应的微观机理。通过本课程的讲解配合实践演练剖析, 预期打破理论化学计算的科学壁垒, 让做实验的研究生都能看懂理论计算内容, 学会简单的计算。让学生更好地掌握理论计算的使用方法, 促进之后的科研工作。

在本科阶段, 《物理化学》的学习, 尤其是与其紧密关联的《结构化学》的学习, 是化学学生学习的一座难翻越的高山。而学习理论化学计算必定涉及比《结构化学》更难的《量子化学》, 尤其是《量子化学》包含设计线性代数知识的公式推导, 学生对这类学习有强烈的畏难和抵触情绪。此外, 选课研究生的来源差异很大, 有些来自化学专业, 有些来自材料专业以及化工专业等本科专业毕业的研究生, 其化学知识差异大, 尤其是缺乏学习《物理化学》和《结构化学》这些属于学习理论化学计算课程的先导课程, 增加了教师的教学压力, 也增加学生高效学习的难度。第三, 学生仍旧停留在本科阶段学习习惯上, 不以主人翁的态度学习这门课, 难以主动将课堂学习与其所进行的科学研究相连接, 提高其学习质量。使得课堂学习仅仅是学生用于修学分的媒介, 而导致学习主动性不高, 使得教学质量难提高。这些是《理论化学计算》课程教学的困境。

二、课程改革内容

(一) 因时制宜, 注重培养实际操作能力

课程教学应该遵循教育教学规律和人才培养规律, 体现先进教育理念, 学习理论化学必定涉及量子化学, 而学生对这一类学习有强烈畏难和抵触情绪。鉴于此, 本课程着重点在于计算, 也就是教会学生实际操作的能力, 以及实用技巧。

弱化理论学习部分, 仅用 2 学时简单介绍最基础的理论知识, 让学生知道计算结果是怎么通过量子化学理论知识得到的。

课程重点在于计算的实际操作, 而实际操作涉及大量操作流程的记诵, 为避免学生容易忘记上一堂课操作, 我们采用时

间集中的排课方式,这样使得学生能够学一个知识就能记住并了解具体操作,减少上课的复习时间,从而提升教学质量。

应对缺乏《物理化学》和《结构化学》知识的情况,预先给学生下发本课程涉及相应知识点的学习资料,并在课堂教学中抛出相关知识点问题,引导学生分析问题,并讲解这些知识点如何与理论化学计算课程实战操作所得到的数据相关联,引导学生运用普遍化学知识分析计算中遇到的问题,进一步引导学生提出自己的想法,解决计算问题。锻炼学生独立思辨能力。

(二)启发式教学,以学生为主体,发挥学生主观能动性

改变教学方式,不在是传统填鸭式教学,从学生需求出发,让学生提高兴趣,积极参与课堂教学中,从而提升教学质量。这就需要发挥学生的主观能动性。

让学生决定上课内容,树立“主人翁”意识。课堂将学生分成4组,要求学生需要找到一篇课堂内容相关的计算文献,并要求学生根据文献内容所涉及的计算相关部分做成PPT在课堂演讲半节课,内容需包括从发现问题到计算的数据分析到解决问题。这样让学生了解到计算的内容和作用,根据学生讲到的计算知识点,设计上课内容。让学生在文献学习中,扮演主人翁,提高其主动学习的积极性。

精简上课案例,举一反三。教师上课应做到“抓整体、抓关键点”。抓整体是让学生知道每一种计算操作是如何进行的,以及怎样分析数据,从而怎样做来解决理论或实验结果遇到的问题。抓关键点是让学生熟悉流程后,重点培养学生的手动计算能力,精练案例,多重复操作。使学生能学有所获,提高其学习的兴趣。

设置课前开放式题目,培养学生创新能力。在掌握计算软件的基本操作流程以后,具体计算技巧课堂中,每次课前发启发式讨论题目,让学生带着问题去学习。一般地,认真掌握当前课程的计算操作,能独立操作出题目答案。并引发学生对计算数据进行分析讨论,实现科研创新能力的培养。

(三)因材施教,优化课程考核方式

课程上课案例主要采用近5年发表在Science、Nature以及Journal of the American Chemical Society等顶刊杂志上的文献,以科研促教学。课堂中解析文献思路以及文献计算技巧和数据分析,引导学生贯穿到自己的科研课题中,提高学生的学习热情。基于此,建立科研迷底为导向的考核方式,分为2部分:一是课堂结合自己科研方向选择合适的计算演练操作,这与学

生自身研究紧密结合,提高学生发现问题、分析问题的能力,增加了学生学习的乐趣,这部分考核占主导地位。二是将上述所操作过程描述成文字内容,写成课堂论文,锻炼研究生写作能力,提高学生逻辑表达能力,利于研究生未来撰写研究论文或发表论文。这种建立提升研究生科研目的评价、考核机制,不仅能引导学生主动思考,锻炼学生的计算操作能力和表达能力,还能做到课堂学习有的放矢,增加了学生学习的热情,提高教学效果。

三、结语

《理论化学计算》课程作为化学类研究生的关键课程,它是前沿科学研究的重要核心技术。其课堂效率的提高对于学生理论与实践能力的提高至关重要。通过《理论化学计算》课程学习,研究生对理论化学计算的基本操作流程和实践及数据分析都有了更深入的认识。真正实现将课堂教学与科研实践相结合,全方位培养学生理论化学计算的基本实践能力,还提高其分析问题、解决问题的能力,从而提高教学质量。

参考文献:

- [1] 王溢磊,李隽.计算化学实验的课程建设[J].大学化学,2018,33(10):25-32.
 - [2] 袁汝明,傅强,傅钢.研究型计算化学实验改革与实施[J].大学化学,2020,35(09):141-147.
 - [3] 雷祥,蔡苇.《材料物理性能》研究生课程教学方法探究[J].产业与科技论坛,2021,20(01):139-140.
 - [4] 王艳华,栾一刚,孙涛,王忠义.研究生创新与实践培养模式探索——以气粒两相流课程为例[J].教育教学论坛,2020(51):119-120.
 - [5] 李文佐,刘绍丽.基于创新能力培养的研究生量子化学课程建设实践[J].山东化工,2021,50(19):239-240+242.
- [基金项目] 2021年度华中农业大学研究生培养条件建设项目“《理论化学计算》教材建设”,2021年度华中农业大学理学院研究生课程建设项目“《理论化学计算》”

作者简介:汪佩(1989-),女,湖北潜江人,博士,讲师,研究方向:多相催化理论计算。