

新形势下计算材料学课程教学的改革实践

孟祥颖

东北大学 辽宁沈阳 110819

摘要: 新能源材料研发是我国重要的研究内容之一, 国家急需研发新材料的各类人才, 高校则是我国培养人才的重要场所, 高校材料学专业教学成效直接关系到未来新能源材料研发的成果。本文主要对新形势下计算材料学进行分析, 首先分析计算材料学课程教学改革实践目标, 其次分析计算材料学课程教学实践过程中的问题, 最后根据教学实践过程中存在的问题提出相应的应对措施。

关键词: 计算材料学; 课程教学; 改革实践

Teaching reform Practice of computational material Science under the new situation

Xiangying meng

Northeastern University, Shenyang, Liaoning 110819

Abstract: Research and development of new energy materials are important research contents in our country. Our country is in urgent need of research and development of new materials. Colleges and universities are important places for training talents. The teaching results of material science in colleges and universities are directly related to the research and development of new energy materials in the future. This paper mainly analyzes computational materials science under the new situation, firstly analyzes the practical objectives of the teaching reform of computational materials science, secondly analyzes the problems in the course of teaching practice, and finally puts forward corresponding countermeasures according to the problems existing in the course of teaching practice.

Keywords: Computational materials science; Curriculum teaching; Reform practice

前言

我国各个高校中材料专业的主要课程就是计算材料学课程, 此课程主要教授计算机模拟和设计材料组成、结构以及性质等相关内容。学生通过计算材料学课程的学习, 可充分了解材料计算和模拟的相关知识, 进而利用相关理论知识逐渐掌握如何利用计算模拟的方式进行材料研究。但是由于计算材料学课程的内容中存在很多理论性知识与复杂的公式、算法、理论推导等, 采用传统单一的教学方式无法达到最佳教学效果, 还需对课程教学进行不断的改革实践。

一、新形势下计算材料学课程教学的改革实践目标

新形势下计算材料学课程教学的改革实践的主要目标就是培养出理论知识与计算设计综合能力较强的复合型人才。各个高校可以通过材料专业人才培养在新材料领域各学科方向的地位与知识产权。而为了在更好

的凸显计算材料学课程培养学生的优势, 在进行课程教学改革时需要重点注意以下两点改革目标。

1.1 课程教学目标

在对计算材料学课程教学改革的过程中, 高校可以通过课前、课中以及课后三方面进行教学改革, 从而完成计算材料学课程的相关理论教学以及实践教学目标。例如: 在讲述能源与环境材料微结构特征与系统模型时, 教师需先为学生讲述相关材料的设计理论、模型构建、评价方法, 待学生对这些新能源、环境材料设计计算以及建模的基础知识有所了解后才能带领学生学习建模相关方法以及软件工具^[1]。最后, 教师需引导学生根据之前所学习的相关理论知识进行实际操作, 确保学生可以逐渐掌握能源、环境材料设计计算以及建模的实际应用方式, 从而提高学生的实际操作能力。

1.2 课程教学人才培养目标

计算材料学课程教学改革另一个目标则是培养更优秀的学科人才，为国家新能源材料研发培养更多专业能力强的专业人才。成功培养出材料专业性强的专业人才后，这些人才会充分利用自身所掌握的应用计算材料学理论基础和技术手段发明新型材料以及新技术，将自身价值最大化发挥，为我国整体经济发展做出一定贡献。

二、计算材料学课程教学实践过程存在的问题

计算材料学课程是一门涉及多学科跨领域的专业课程，因此，在进行课程实践的过程中会存在很多问题，本文主要阐述其中两点。

(1) 课程教学方式以及内容选择不合理。计算材料学课程教学时对于学生综合理论基础有很高的要求。从计算材料学课程学习的学生角度来看，国内很多专门研究计算的研究生以及科研人员若想在短时间内完全掌握“计算材料学”课程中的理论知识与实践设计，难度也是非常大，本科学生本身的知识面就存在很大局限性，这就会导致学生在学习该课程知识时困难重重^[2]。计算材料学课程内容主要包括大量的理论概念、复杂的数学公式算法以及理论推导，如果教师在课程教学时只是采用单一的教学方式，则无法有效吸引学生的注意力。学生在单一教学方式下很容易出现课程教学知识点理解不透彻、学习知识的积极性下降、对计算材料学课程知识学习产生抵触心理等现象，这种现象会降低课程教学的整体效果，所以急需进行改革。

(2) 课程重视程度不足。计算材料学近些年新设立的专业性课程，由于设立的时间较短，系统课程体系以及人才培养模式还处于不断完善不断调整的过程。同时由于课程设立的时间较短，很多院校都缺乏对计算材料学课程的重视，而是将此课程设置为选修课程，这就导致材料类专业的学生因此课程知识学习难度较大，选择此课程的学生人数较少，部分学生选择此课程也大部分是因为学分不够才选择，出现了“清理重工”的现象。与此同时，部分院校对于高等数学、物理以及化学等相关的基础课程设置不足。以固体物理学课程为例，很多院校都未开设此课程，学生在接触量子力学理论仅是在计算材料学课程中，但量子力学理论是计算材料学第一性原理计算的基础，所以如果院校中未设置相关课程就会导致学生在学习计算材料学知识时不知所云^[3]。

三、计算材料学课程教学实践问题的应对措施

3.1 制定科学的课程教学内容以及方法

3.1.1 方法

在解决计算材料学课程教学实践中存在问题的改革时，针对教学方法单一问题的应对措施就是创新教学方法，充分利用当今社会的资源优势，采用更加新颖的教学方式进行教学，消除以往教学中存在的影响因素。

例如：采用实例式教学方式，此种教学方式要求学生走进某种个案中感受与体验，通过实际的案例以及情境，学生的学习兴趣会得到很好的提升，同时还可培养学生观察与思考能力，让学生养成一种乐于探索的好习惯。以计算材料学课程中的量子力学基础为例，教师在教学的前期可以为学生详细介绍量子力学的发展史，利用信息化技术为学生创设出量子力学发展历程的详细过程，过程讲解时通过一根主线将量子力学波函数问题融入情境中，确保学生可以一直沿着主线探索复杂的问题，进而使学生可以对于量子力学的意义有所掌握^[4]。

再如：采用混合式教学方式，此种教学方式将教师与学生的职责和角色进行了调整，使得教师在教学时不仅需要重视知识的传授，更要重视学生的主体角色。混合式教学方式，教师是课堂的组织者、引导者，主要的任务就是帮助学生探究问题，吸收教授的知识，学生才是课程教学中的主导者、实践者。以锂离子电池无机固体电解质材料研发为例，实际的课程教学时，教师可先要求学生利用雨课堂、慕课以及乐学平台等线上程序预先学习，教师需在课前通过移动学习平台发布本节课课程的主要学习目标就是研究如何利用材料基因组的思想将计算、数据以及试验有效结合，提高无机固体电解质材料的研发与优化速度^[5]。教师在发布任务的同时还需发布一些辅助性学习资料，学生按照教师发布的任务进行课前学习，可很好的提高学生对课程内容的了解。同时通过课前预先学习学生既可以提前对知识点进行消化与吸收，还可以提前找出课程中难以理解的知识点以及产生的问题，便于学生在课程教学时有针对性的听教师讲解。

3.1.2 内容

计算材料学课程内容层次较多，内容学习时会涉及多个学科与领域的理论与实践知识，且课程内容理论性、前瞻性以及实践性都比较高。因此，计算材料学课程内容在进行设置时应该注意针对性以及方向性，不能将所有内容都融合在一起。本文主要以本科学生作为例子进行阐述，大多数本科学生的知识面都具有一定的局限性。

因此, 课程内容在设置上应该避开以往陈旧式内容设置理念, 而是将该课程的基础理论知识、概念的科普性进行介绍。例如: 在设置计算材料学课程内容时, 各个院校可以在前期将课程的内容分为三大章节, 主要介绍计算材料学概论、物理化学模拟以及原子间相互作用势等较为基础性的理论知识。而在课程中期, 可以将计算材料学应用最广泛的原子模拟方法分成不同章节向学生进行介绍, 介绍时需要注意的是要侧重于基本概念的理解以及应用范围的明确。课程后期是量子力学部分的内容, 针对此部分内容进行设置时, 可以结合密度泛函理论以及第一性原理计算的内容进行教学。

3.2 提高对于“计算材料学”课程的重视

计算材料学课程教学实践改革的开展中, 各个院校对于计算材料学课程的重视程度很关键。各院校在提高对于“计算材料学”课程的重视度时, 可以按照以下几点进行: (1) 需要各院校积极组建计算材料学研讨小组, 小组成员需有专家学者以及教学经验丰富的教师等成员。小组成立的主要目的就是针对原有计算材料学课程的教学大纲以及教学计划等内容进行全面改革。(2) 需要针对计算材料学课程的教学质量进行提升, 在实际教学时要求教师不仅要将该课程的知识内容传授给学生, 还要在教学时注重学生学习兴趣的激发, 提高学生的学习能力以及综合素质。(3) 需要适当调整计算材料学课程在学校课程中的比重, 将计算材料学选修课程的学分以及课时进行重新分配, 加强课程教学内容的重要性, 从而起到调动学生对于学习该课程积极性的作用。

四、结语

在新形势下计算材料学课程教学的改革实践尝试

中, 还是会存在很多问题, 这些问题是阻碍改革进程的主要因素。因此, 我国各个高校应该对改革实践尝试中存在的问题进行分析, 分析出产生这些问题的主要影响因素, 并针对这些因素制定出相应的应对策略, 这样才能提高课程教学的实际效果, 为我国新能源材料研发培养出更多理论能力强、实践能力强的专业性人才。

参考文献:

[1]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.

[2]汤富领,李俊琛,卢学峰,等. 面向工程问题采用项目式教学提升课程获得感——以“计算材料学”和“材料计算与设计”授课为例[J]. 教育教学论坛,2020(44):291-292.

[3]陈逸凡,陆潇晓,鲍亮,等. “计算材料学”课程教学的改革与实践[J]. 黑龙江生态工程职业学院学报,2020,33(1):126-128.

[4]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(3):181-186.

[5]甘祥来,周耐根,杜国平. 《计算材料学》课程的翻转课堂教学改革与实践[J]. 教育现代化,2020,7(102):42-45.

作者简介: 孟祥颖(1976.03-) 性别: 男, 民族: 汉, 籍贯: 沈阳, 学历: 博士, 职称: 教授, 研究方向: 计算物理学。工作单位: 东北大学, 单位地址: 沈阳市和平区文化路3号巷11号, 单位邮编: 110819。