

# 《材料模拟与设计》教学大纲

课程代码: **NANA2002**  
课程名称: **材料模拟与设计**  
英文名称: **Materials Simulation and Design**  
课程性质: **专业选修课**  
学分/学时: **2 学分/36 学时**  
考核方式: **作业报告+期末考试**  
开课学期: **第 6 学期**  
适用专业: **纳米材料与技术**  
先修课程: **量子化学/量子力学**  
后续课程: **毕业设计**  
开课单位: **纳米科学技术学院**  
课程负责人: **李有勇**  
大纲执笔人: **李有勇**  
大纲审核人: **董彬**  
选用教材: **《计算材料学基础》(张跃等编著, 北京航空航天大学出版社, 2007 年) 和补充的自编讲义**

## 一、课程目标

通过本课程的理论教学和上机项目操作, 使学生具备下列能力:

1. 能将材料、物理、计算机、数学和化学等多门学科相结合, 了解材料模拟与理论计算涉及的基本概念和基本原理, 理解不同计算方法的物理背景和基本思想。(支撑毕业要求指标点 1-1)
2. 能掌握计算材料学中最具代表性的几种材料模拟方法的特点和应用范围, 辨识和表述不同的方法处理相对应体系的一般步骤和程序算法流程。(支撑毕业要求指标点 2-1)
3. 能操作 Materials Studio 计算模拟软件, 了解各类内嵌模块的特点和局限性, 根据所研究的体系选择恰当的模块进行建模、计算和分析, 并对该体系的特定性能进行预测。(支撑毕业要求指标点 5-2)

## 二、教学内容

“材料模拟与设计”课程包含 8 次理论教学和 8 次上机项目操作。

### (一) 理论教学内容:

1. “材料模拟与设计的概论”: 发展概况及特点; 典型的几种模拟方法(第一性原理、分子力场、分子动力学方法、Monte Carlo 方法、相场理论、有限元方法)。
2. “量子力学基础”: 量子力学的实验基础; 实物微粒的波粒二象性及不确定原理; 量子力学的基本假设; 定态 Schrodinger 方程应用实例。
3. “量子力学计算方法”: 实际问题用到的三个近似(非相对论近似、Born-Oppenheimer 近似、单电子近似); Kohn-Sham 方法的基本思想; 交换相关泛函的种类; 第一性原理计算的应用举例。
4. “能带理论和能带计算方法”: 半导体能带简述; 晶体的能带; 布洛赫定理; 能带理论的应用及计算方法。
5. “量子力学计算实例讲解 Dmol3 与 Castep”: Materials Studios 运行模式; 基于 DFT 的自洽计算过程; Dmol3 与 Castep 模块的特点及参数设置。
6. “分子力场”: 常用势函数的组成; 分子力场中势函数的类型。
7. “分子动力学方法”: 分子动力学的基本思想; 分子动力学模拟的常用系综; 模拟材料的扩散系数。
8. “Monte Carlo 方法和机器学习”: Monte Carlo 方法的基本思想及特点; Monte Carlo 方法的应用; 常见的机器学习算法和深度学习; 机器学习在计算化学和材料设计中的应用。

## (二) 上机项目操作内容:

1. “结构模型的搭建”: 生成 Projects; 打开并且观察 3D 文档; 绘制苯甲酰胺分子; 处理分子晶体尿素; 建造 Alpha 石英晶体; 建造多甲基异丁烯酸盐; 保存 Project 并结束。
2. “结构模型的搭建”: 绘制卟啉分子; 绘制有机金属结构; 将分子对接到表面; 使用聚合物建模工具建造聚合物。
3. “用第一性原理预测 AIAs 的晶格参数”: 构建 AIAs 晶体结构; 设置 CASTEP 计算任务; 分析计算结果; 与实验数据对比; 可视化电荷密度; 分析态密度和能带结构。
4. “CO 分子在 Pd(110)表面的吸附”: 构建计算模型; 优化体相 Pd; 构建并优化 CO; 构建 Pd(110)表面; 弛豫 Pd(110)表面; 把 CO 分子添加到 1 x 1 Pd(110)表面并优化; 建立和优化 2 x 1 Pd(110)面; 计算化学吸附能和排斥能; 分析态密度。
5. “使用 DMol3 中的离域内坐标对固体进行几何优化”: 建立一个计算 DMol3 任务; 控制工作设置和运行计算任务; 检验计算结果。
6. “用 LST/QST 搜索过渡态”: 建立一个计算模型结构; 几何优化; 定义原子配对; 使用 LST/QST/CG 方法计算过渡态; 精修过渡态。
7. “气体在聚合体中扩散的测量”: 建立初始结构; 建一个无定形的晶胞; 晶胞的弛豫; 分子动力学的运行和分析; 输出数据并计算扩散系数。
8. “聚合物与金属氧化物表面的相互作用”: 构造表面; 优化表面; 增大表面面积并改变周期性; 聚合物建模; 使用分层建模工具将聚合物加到表面上; 运行动力学计算; 计算相互作用能。

## 三、课程成绩

### 1. 考核方式

课程目标	考核内容	考核方式
1. 能将材料、物理、计算机、数学和化学等多门学科相结合,了解材料模拟与理论计算涉及的基本概念和基本原理,理解不同计算方法的物理背景和基本思想。(支撑 1-1 指标点)	对多交叉学科知识的灵活运用能力;对各种理论模拟方法涉及的基本概念的理解能力。	上机项目操作及作业报告,课件学习及期末考试。
2. 能掌握计算材料学中最具代表性的几种材料模拟方法的特点和应用范围,辨识和表述不同的方法处理相对应体系的一般步骤和程序算法流程。(支撑 2-1 指标点)	对第一性原理、分子力学、分子动力学、Monte Carlo 模拟等计算方法的一般步骤的掌握程度;设计各种计算方法处理实际问题的程序算法流程的能力。	上机项目操作及作业报告,课件学习及期末考试。
3. 能操作 Materials Studio 计算模拟软件,了解各类内嵌模块的特点和局限性,根据所研究的体系选择恰当的模块进行建模、计算和分析,并对该体系的特定性能进行预测。(支撑 5-2 指标点)	软件操作的基本技能,如模型的搭建、计算参数的设置和性能的分析等;运用软件中的相应模块解决实际问题的能力。	上机项目操作及作业报告,课件学习及期末考试。

### 2. 成绩评定方法

课程总成绩 = 作业报告成绩 (40%) + 期末考试成绩 (60%)

	作业报告权重	期末考试权重
课程目标 1	0.10	0.44
课程目标 2	0.20	0.40
课程目标 3	0.70	0.16

### 3. 课程目标（支撑毕业要求指标点）达成度评价方法

作业报告考核环节和期末考试考核环节设定的成绩占比分别是 40%和 60%。计算公式可以这么写：  
 课程目标 n 达成度 = (作业报告平均分\*作业报告权重\*40%+期末考试平均分\*期末考试权重\*60%)/(100\*作业报告权重\*40%+100\*期末考试权重\*60%)

### 4. 评分标准

课程目标	90-100 (优秀)	75-89 (良好)	60-74 (及格)	0-59 (不及格)
1. 能将材料、物理、计算机、数学和化学等多门学科的知识融会贯通，充分了解材料模拟与理论计算涉及的基本概念和基本原理，理解不同计算方法的物理背景和基本思想。	能将材料、物理、计算机、数学和化学等多门学科的知识融会贯通，充分了解材料模拟与理论计算涉及的基本概念和基本原理，对不同计算方法的物理背景和基本思想的理解十分透彻。	能将材料、物理、计算机、数学和化学等多门学科的知识进行较好的融合，了解材料模拟与理论计算涉及的基本概念和基本原理，对不同计算方法的物理背景和基本思想的理解较为透彻。	能将材料、物理、计算机、数学和化学等多门学科的知识结合在一起，大致了解材料模拟与理论计算涉及的基本概念和基本原理，对不同计算方法的物理背景和基本思想的理解不太全面。	不能将材料、物理、计算机、数学和化学等多门学科相结合，对材料模拟与理论计算涉及的基本概念和基本原理了解不足，不能理解不同计算方法的物理背景和基本思想。
2. 能掌握计算材料学中最具代表性的几种材料模拟方法的特点和应用范围，辨识和表述不同的方法处理相对应体系的一般步骤和程序算法流程。	能完全掌握第一性原理、分子力场、分子动力学方法、Monte Carlo 方法、相场理论、有限元方法的特点和应用范围，正确辨识和表述不同的方法处理相对应体系的一般步骤和程序算法流程。	能掌握第一性原理、分子力场、分子动力学方法、Monte Carlo 方法、相场理论、有限元方法的特点和应用范围，辨识和表述不同的方法处理相对应体系的一般步骤和程序算法流程。	能简单理解第一性原理、分子力场、分子动力学方法、Monte Carlo 方法、相场理论、有限元方法的特点和应用范围，能大致表述不同的方法处理相对应体系的一般步骤和程序算法流程。	不能理解第一性原理、分子力场、分子动力学方法、Monte Carlo 方法、相场理论、有限元方法的特点和应用范围，不能正确辨识不同的方法处理相对应体系的一般步骤和程序算法流程。
3. 能操作 Materials Studio 计算模拟软件，了解各类内嵌模块的特点和局限性，根据所研究的体系选择恰当的模块进行建模、计算和分析，并对该体系的特定性	能十分熟练地操作 Materials Studio 计算模拟软件，充分了解各类内嵌模块的特点和局限性，能根据所研究的体系正确判断并合理选择恰当的模块进行建模、计算	能较为熟练地操作 Materials Studio 计算模拟软件，了解各类内嵌模块的特点和局限性，能根据所研究的体系判断并选择恰当的模块进行建模、计算和分析，并对该	在教师的协助下能简单操作 Materials Studio 计算模拟软件，大致了解各类内嵌模块的特点和局限性，能根据所研究的体系选择较为恰当的模块进行建模、计算和	不能操作 Materials Studio 计算模拟软件，对各类内嵌模块的特点和局限性不够了解，不能根据所研究的体系选择恰当的模块进行建模、计算、分析和性能预

能进行预测。	和分析，并对该体系的特定性能进行精准预测。	体系的特定性能进行合理预测。	分析，并对该体系的特定性能进行预测基本合理。	测。
--------	-----------------------	----------------	------------------------	----