《计算材料学B》教学大纲

英文名:Computational Materials Science B

一、课程说明

课程编号：060323Z10

总学时数：24.0 （其中讲课学时：24学时）

学分：1.5 （先修课程:）

本大纲适用专业（已默认取出培养方案中开设的专业） 材料科学与工程

教材：

教材名称	ISBN 编号
固体物理与计算材料导论	978-7-5487-4213-5
计算材料学基础	978-7-81077-788-9

教辅（如有）：

课程负责人： 陶辉锦

二、课程简介

计算材料学是材料科学与计算机科学的交叉学科，是利用计算对材料的组成、结构、性能以及服役性能进行计算机模拟与设计的学科，是连接材料学理论和实验的桥梁。本课程任务是让学生掌握计算材料学的基础知识，学习材料研究的新方法。

三、课程目标

序号	课程目标	毕业要求指标点
1	课程目标 1，通过本课程的学习，使学生掌握计算材料学的基础知识，包括原子间相互作用势、分子动力学、蒙特卡洛以及第一原理计算方法等常见的计算材料方法。	毕业要求指标点 2.5：掌握分析研究材料生产复杂工程问题所需的试验操作与数据分析知识。能够运用所学到试验操作知识分析材料组成-结构-性能及其相互关系，并能运用相关的数学、自然科学知识对实验和模型结果进行分析，得到合理有效的参数与结

		论。
2	课程目标 2，能够使用计算材料学常用软件对材料的物理性能进行预测或解释。	毕业要求指标点 2.5：掌握分析研究材料生产复杂工程问题所需的试验操作与数据分析知识。能够运用所学到试验操作知识分析材料组成-结构-性能及其相互关系，并能运用相关的数学、自然科学知识对实验和模型结果进行分析，得到合理有效的参数与结论。 毕业要求指标点 4.2：能够根据所学的专业知识对实验结果做出科学的解释，并能够对实验结果中的问题设计合理的解决方案。
3	课程目标 3，提升从事材料科学研究的基本能力和综合素质。	毕业要求指标点 4.2：能够根据所学的专业知识对实验结果做出科学的解释，并能够对实验结果中的问题设计合理的解决方案。
……	……	……

注：课程目标要求明确认知层次，体现进阶、强化高阶，体现分类目标，如知识、能力、素养，目标需要可测量。

四、教学内容与安排

序号	教学内容	总学时	讲课(含研讨)	实践	教学重点	教学难点	教学方案设计(含教学方法、教学手段、思政元素等)	支撑的课程目标
4.2	蒙特卡洛方法在材料科学中的应用	1	1	0	蒙特卡洛算法适用范围	将材料中的问题转化为蒙特卡洛方法可以解决的实验方案	课堂教学，软件演示	3
5.1	第一原理计算密度泛函理论	2	2	0	基本原理的理解	基本原理理解	课堂教学，PPT 电子课件	1
5.2	能带计算	2	2	0	利用密度泛	针对具体材料如何	课堂教学，	1

	方法				函理论计算能带的过程	实施第一原理计算	PPT 电子课件	
5.3	计算软件介绍	2	2	0	常见计算软件及功能	计算软件的使用方法	课堂教学，软件演示	2
5.4	具体应用举例	2	2	0	利用第一原理软件计算固体能带的基本过程	如何提高计算能带的精确性	课堂教学，软件演示	3
3.5	分子动力学方法在材料科学中的应用	2	2	0	固体物理性能的计算	利用软件建立模型、模拟、分析材料的结构与性能	课堂教学，软件演示	3
4.1	蒙特卡洛基本思路及算法	2	2	0	蒙特卡洛方法的起源，来历及发展	Metropolis 算法基本思想	课堂教学，PPT 电子课件	1
1	计算材料学简介	2	2	0	计算材料学计算方法分类	材料不同层次使用不同的计算方法	课堂教学，PPT 电子课件	1
2.1	原子相互作用势的一般形式	1	1	0	势与结合能、内能等联系	利用势计算材料的性质	课堂教学，PPT 电子课件	1
2.2	经验性对势	1	1	0	对势的应用范围及局限性	势参数的确定方法	课堂教学，PPT 电子课件	1
2.3	多体势	1	1	0	三体势、EAM 势的基本构成	利用ＥＡＭ势计算金属材料的性质	课堂教学，PPT 电子课件	1
3.1	分子动力学基础知识	2	2	0	分子动力学的原理	计算材料过程的理解	课堂教学，PPT 电子课件	1
3.2	基本算法	2	2	0	运动方程求解原理	Verlet 算法求解运动方程	课堂教学，PPT 电子课件	1
3.3	重要模拟技术	1	1	0	参数设定	对于不同材料选取恰当的算法、模拟条件	课堂教学，PPT 电子课件	1
3.4	模拟软件介绍	1	1	0	模拟软件的分类	Materials Explorer 软件使用方法	课堂教学，软件演示	2

五、实践教学内容和基本要求

无

六、考核方式及成绩评定

考核方式	成绩比例（%）	考核/评价细则
平时考核	40	作业、回答问题、考勤
期末考核 1	30	论文（格式排版规范）
期末考核 2	30	论文（内容清晰完整）
……		

课程目标与课程考核环节关系：

序号	课程目标	考核方式				权重系数
		考核方式 1	考核方式 2	考核方式 3	……	
1	课程目标 1	50%	30%	40%		41
2	课程目标 2	30%	40%	30%		33
3	课程目标 3	20%	30%	30%		26
……	……					
总计		100%	100%	100%		100

考核评价标准：

课程目标	考核评价标准				
	0≤X < 60	60≤X < 70	70≤X < 80	80≤X < 90	90≤X≤100
课程目标 1	未掌握计算材料学的基础知识。	基本掌握了计算材料学的基础知识。	较好掌握了计算材料学的基础知识。	很好地掌握了计算材料学的基础知识。	熟练掌握了计算材料学的基础知识。
课程目标 2	不能使用计算材料学常用软件对材料的物理性能进行预测或解释。	基本能使用计算材料学常用软件对材料的物理性能进行预测或解释。	能较好地使用计算材料学常用软件对材料的物理性能进行预测或解释。	能很好地使用计算材料学常用软件对材料的物理性能进行预测或解释。	能熟练地使用计算材料学常用软件对材料的物理性能进行预测或解释。
课程目标	未能	基本提	较好地	很好地提	显著提升

3	提升从事材料科学研究的基本能力和综合素质。	升了从事材料科学研究的基本能力和综合素质。	提升了从事材料科学研究的基本能力和综合素质。	升了从事材料科学研究的基本能力和综合素质。	了从事材料科学研究的基本能力和综合素质。
……	……				

大纲主撰人：　　陶辉锦　　大纲审核人：　　龚深