《量子力学与功能材料初步》教学大纲

英文名:Introduction to Quantum Mechanics and Functional Materials

一、课程说明

课程编号：060520Z10

总学时数：48.0 （其中讲课学时：48学时）

学分：3.0 （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） 材料国际

教材：

教材名称	ISBN 编号
功能材料概论	978-7-1221-2086-1
锂离子电池制造工艺原理与应用	9787122346094
量子力学教程	978-7-04-026278-0

教辅（如有）： 无

课程负责人： 江勇

二、课程简介

了解和初步掌握量子力学基本理论和计算方法，包括单电子体系精确解法，多体体系波函数和密度泛函解法；现代功能材料（如半导体、能源存储/转化、功能陶瓷和磁性材料）基本概念、原理方法、前沿进展和发展趋势；培养学生运用第一性原理思维方法分析和理解材料现象，尤其是原子结构与宏观性能相关性及其物理本质。

三、课程目标

序号	课程目标	毕业要求指标点
1	课程目标 1，通过课程学习让学生掌握量子力学薛定谔方程推导及其波函数和密度泛函求解方法的基本理论与物理意义，	毕业要求 1-1：能系统理解数学、自然科学、计算、工程科学理论基础，并能用于工程问题的表述；

	以及功能材料及其功能设计的基本原理与方法；	
2	课程目标 2，让学生了解不同计算方法之间的联系和区别，及其实际应用；同时了解和掌握现代功能材料的发展方向与趋势；	毕业要求 2-3：能认识到解决材料设计、加工制备和应用的复杂工程问题有多种方案可选择，会通过文献研究寻求可替代的解决方案；
3	课程目标 3，培养学生学会综合运用所学材料科学与工程的基础知识和技能建立恰当的理论模型，并运用恰当的计算方法，揭示材料原子结构与宏观性能相关性及其物理本质的能力，指导新型功能材料的研究、设计与开发。	毕业要求 1-3：能够将相关工程和材料科学与工程专业知识和数学分析方法用于推演、分析材料设计、加工制备及材料应用等工程问题；
……	……	……

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	支撑的课程目标

							等)	
1.1	量子力学诞生的历史背景；Schrodinger 方程；波函数的物理意义；态叠加原理；一维自由粒子；一维势阱中的粒子；隧道效应	6	6	0	Schrodinger 方程的推导思路；波函数的物理意义；态叠加原理及其物理意 一维自由粒子 Schrodinger 方程解及其物理意义；势阱中粒子的 Schrodinger 方程解及其物理意义；量子隧道效应及其现代技术应用	求解 Schrodinger 方程；求解 Schrodinger 方程；运用 Schrodinger 方程解释隧道效应	课堂教学，PPT 电子课件	1
1.2	线性谐振子系统；单电子体系-氢原子；单电子体系-类氢离子	6	6	0	线性谐振子系统系的 Schrodinger 方程解及其结果的物理解释；单电子体系的 Schrodinger 方程解及其结果的物理解释；单电子体系的 Schrodinger 方程解及其结果的物理解释	线性谐振子系统的 Schrodinger 方程解法；单电子体系的 Schrodinger 方程解法；单电子体系的 Schrodinger 方程解法	课堂教学，PPT 电子课件	1、2
1.3	Born-Oppenheimer 近似；平均势场近似；Hartree-Fock 理论；Post Hartree-Fock 理论	5	5	0	Born-Oppenheimer 物理处理近似及其结果的物理解释；平均势场物理处理近似及其结果的物理解释	Hartree-Fock 理论及其应用；Post Hartree-Fock 理论及其应用	课堂教学，PPT 电子课件	1、2
1.4	Thomas-Fermi 模型；Thomas-Fermi-Dirac 模型；Kohn-Sham 方程；交换相关能的局域密度近似；交换相关能的广义梯度近似	4	4	0	多电子体系的波函数描述，密度泛函理论与 Hartree-Fock 理论方法的特点和区别多电子体系的波函数描述	交换相关能	课堂教学，PPT 电子课件	1、2
1.5	算符；矩阵表达；狄拉克符号；粒子的全同性；晶体结构及状态方程；密度泛函理论计算实例；赝势的选择；体弹性常数的计算方法与实例	7	7	0	状态方程及其应用；赝势选择和优化的原则；实例教学采用授课教师自己的计算案例，突出学以致用，聚焦解决国家重大急需和科学前沿问题	算符性质与运算；状态方程优化体结构的建模和计算方法；状态方程体弹性常数的建模和计算方法。	课堂教学，PPT 电子课件	2、3
2.1	功能材料的概念与分	4	4	0	功能材料的概念与分	材料功能设计	课堂	1、

	类；功能设计的原理和方法；功能材料的特点；功能材料制备新方法；功能材料的发展现状 ；无机功能材料的现代合成与制备方法				类；材料功能的显示过程，功能设计原理；金属、无机非金属、高分子功能材料相对传统材料的特点；溶胶—凝胶法，快淬快凝法，水热法电子，生物医用，能源，生态环境等材料的发展现状；溶胶—凝胶法，化学气相沉积，模板合成、水热法	的复杂性；组合化学在无机功能材料方面的应用；水热法的原理	教学，PPT电子课件	2
2.2	半导体材料的发展历程；半导体材料的基本特性；半导体材料的制备方法；半导体材料的应用	4	4	0	能带理论介绍，半导体材料的物理和化学特征；现代半导体工业；应用领域	能带理论，本征和非本征半导体	课堂教学，PPT电子课件	2、3
2.3	锂离子电池材料基本概述；锂离子电池材料的设计和制备；锂离子电池材料的电化学性能评价；光/电催化材料概述；光催化材料的设计和制备；光催化材料的表征和评价；电催化材料的设计和制备；电催化材料的表征和评价	6	6	0	锂离子电池材料设计的基本原则；电极材料的电化学评价体系；电极材料的电化学评价体系；光催化剂的选择和制备；评价手段；光催化剂的选择和制备	正负极材料电位搭配；循环伏安法、恒电流充放电以及倍率；循环伏安法、恒电流充放电以及倍率；应用体系评价 ，光催化材料的能带结构	课堂教学，PPT电子课件	1、2、3
2.4	陶瓷材料与功能陶瓷；绝缘陶瓷；多孔陶瓷；纳米陶瓷	3	3	0	陶瓷材料的发展概况、功能陶瓷的定义、范围和分类；绝缘陶瓷的性能与特征、常用绝缘陶瓷材料及其性能、绝缘陶瓷的应用；表征多孔陶瓷材料特性参数、多孔 陶瓷的制备、多孔陶瓷的形成机理，，多孔陶瓷的应用；纳米陶瓷的制备、纳米陶瓷的结构与性能，纳米陶瓷的	陶瓷的微观结构与绝缘性；表征多孔陶瓷材料特性参数；制备纳米微粒的关键技术，纳米材料界面的结构模型	课堂教学，PPT电子课件	1、2、3

					应用及展望			
2.5	磁性材料的分类；磁性的起源；磁性材料及其应用	3	3	0	铁磁性、亚铁磁、顺磁、反磁、反铁磁材料的定义和区别；软磁、硬磁、矩磁、压磁、旋磁等材料及其应用；设计实例教学采用授课教师自己的研究案例，突出学以致用，聚焦解决国家重大急需和科学前沿问题。	五种磁性材料的区别；压磁和旋磁材料的概念及应用	课堂教学，PPT电子课件	1、2、3

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
作业+课堂测验	40	作业+课堂测验 6 次，每次计 100 分
笔试（第一部分）	30	开卷考试 100 分钟，计 100 分
笔试（第二部分）	30	开卷考试 100 分，计 100 分
……		

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	40%	40%	40%		40
2	课程目标 2	30%	30%	30%		30
3	课程目标 3	30%	30%	30%		30
……	……					
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	未能运用所学基本理论推导薛定谔方程及及其波函数和密度泛函，以及功能材料设计	基本能运用所学基本理论推导薛定谔方程及及其波函数和密度泛函，以及功能材料设计	能运用所学基本理论推导薛定谔方程及及其波函数和密度泛函，以及功能材料设计	能较好运用所学基本理论推导薛定谔方程及及其波函数和密度泛函，以及功能材料设计	基本能运用所学基本理论推导薛定谔方程及及其波函数和密度泛函，以及功能材料设计
课程目标2	未能运用基本知识判断和使用不同计算方法，未能掌握现代功能材料的发展方向与趋势。	基本能运用基本知识判断和使用不同计算方法，未能掌握现代功能材料的发展方向与趋势。	能运用基本知识判断和使用不同计算方法，未能掌握现代功能材料的发展方向与趋势。	能较好运用基本知识判断和使用不同计算方法，未能掌握现代功能材料的发展方向与趋势。	能熟练运用基本知识判断和使用不同计算方法，未能掌握现代功能材料的发展方向与趋势。
课程目标3	不能运用所学知识和技能建立恰当的理论模型，揭示材料原子结构与宏观性能相关性及其物理本质，并初步设计与开发新型功能材料。	能基本运用所学知识和技能建立恰当的理论模型，揭示材料原子结构与宏观性能相关性及其物理本质，并初步设计与开发新型功能材料。	能运用所学知识和技能建立恰当的理论模型，揭示材料原子结构与宏观性能相关性及其物理本质，并初步设计与开发新型功能材料。	能较好的运用所学知识和技能建立恰当的理论模型，揭示材料原子结构与宏观性能相关性及其物理本质，并初步设计与开发新型功能材料。	能熟练运用所学知识和技能建立恰当的理论模型，揭示材料原子结构与宏观性能相关性及其物理本质，并初步设计与开发新型功能材料。
……	……				

大纲主撰人：　　江勇　　大纲审核人：　　王怡人