



研究生课程教学大纲

课 程 名 称：	材料基因综合设计实验		
	Integrated Designing Experiment of Materials Gene		
课 程 编 号：	ZX14205M		
开 课 单 位：	材料科学与工程学院	开 课 学 期：	2
课 内 学 时：	48	学 分：	2
适 用 学 科 专业及层次：	材料与化工/硕士生		
授 课 语 言：	中文		
先 修 课 程：	计算材料学、计算材料学实验、材料分子结构与设计		
负 责 人：	鲁效庆	团 队 成 员：	燕友果、朱后禹、韩涛

一、课程简介

《材料基因综合设计实验》是材料与化工工程类硕士材料基因工程方向专业必修课程。课程主要涉及多尺度计算模拟技术在材料基因工程中的设计、分析、筛选等实践应用内容。主要讲授针对不同材料进行适宜计算模拟方法的选择，及其在光电转换材料、制氢储氢材料、油气功能材料、生物纳米材料、催化材料、半导体材料、吸附分离材料、焊接与控制材料及器件中关键材料的设计思路、过程再现、结果分析及性能改进等内容，训练专业硕士研究生用多尺度计算模拟方法解决复杂材料基因工程问题的能力，为从事材料领域研究奠定坚实基础。

二、课程大纲

(一) 课程目标

课程目标	培养目标、基本要求指标点
目标 1: 掌握材料基因工程设计的基础理论知识、计算机模拟的基本原理, 并熟悉不同尺度模拟方法的选用原则。	1(基础知识要求): 能够掌握材料基因工程的基本知识及基本原理。
目标 2: 熟练掌握材料设计的模型构建、方法选择、计算过程、以及结果分析; 根据所得结果分析对目标问题进行可靠行评估; 优化计算模型及分析方法。	2(知识结构要求): 掌握材料设计的模型构建、方法选择、计算过程、以及结果分析整体流程; 将其拓展应用于相关领域。
目标 3: 掌握材料基因设计思想, 培养利用分子多尺度计算模拟方法解决相关工程和技术问题的能力, 提升科技创新素养。	3(能力要求): 具备基于科学原理和分子模型正确表达并解决复杂工程问题的能力。

(二) 课程内容

序号	实验项目名称	主要内容	每组人数	实验学时	实验类型
1	光电转换材料的设计与分析	分子材料设计原理、前线轨道理论、能级、供体-受体、几何优化、频率分析、分子轨道形貌、轨道能级、电荷密度分布、电偶极矩和高阶电多极矩、受光激发强度、激发电子组份及有效性、激发态寿命、连续及分立紫外/可见吸收光谱图、光谱响应区间及光捕获效率、分子内受光激发电子转移路径、转移电量、转移距离、轨道重叠及电子复合、重组能、供-受体间耦合强度等计算转移速率、时间等。	1	6	综合设计型
2	二维气体分离膜材料的设计与分析	二维材料设计原理、分离膜材料选择、孔径设计、单层/多层设计、结构优化、稳定构型、内聚能计算、声子谱、吸附构型、吸附能、吸附高度及吸附类型、最优吸附构型、渗透过渡态、透过能垒、气体分子扩散最小能量路径、电子密度与电子云重合、渗透率、气体选择性、能斯特方程、分离性能、自扩散系数、扩散通量、扩散活化能、吸附密度、径向分布函数、MSD 曲线、温度效应、压强效应等。	1	6	综合设计型
3	催化材料的设计与分析	催化材料设计原理、催化剂晶体表面构建、不同晶面活性位点构建、缺陷与修饰、周期性与团簇结构、晶粒形貌、催化剂暴露面、吸附分子稳定构型、反应中间及产物的吸附构型、顶位/桥位等不同吸附位点的判断、静电势分析、亲核与亲电特性、前线轨道分析、路易斯酸碱位识别、能带与态密度、原子杂化峰、键活化、吉布斯自由能计算、焓值计算、	1	6	综合设计型

		振动/转动/平动分析、反应势能面、反应路径选择性、最优反应路径、速率控制步骤、速率常数、反应活性、反应动力学及热力学等。			
4	储能材料的设计与分析	储能材料基片结构设计简介、基片结构优化、基片结构参数及电荷分布分析、吸附剂单体材料设计合理性、3D 多孔吸附材料构建、3D 结构稳定构型优化；孔隙度、有效孔隙体积、比表面积、孔隙尺寸分布、孔隙最大直径及孔隙限制直径分析；气体分子基片表面选择吸附位、作用方式、吸附构型及吸附能；静电相互作用/氢键作用贡献；不同温度、不同压强条件下气体分子绝对吸附量、超额吸附量、吸附热、等温吸附线拟合、气体分子动态填充过程等。	1	6	综合设计型
5	油田化学剂分子设计及作用机理	油田化学剂分子设计原理，通过改变官能团的类型，构建具有相似拓扑结构的系列咪唑啉类缓蚀剂分子，考察官能团类型不同对缓蚀剂分子在金属（Fe(100)为例）表面上的吸附行为影响，通过分析缓蚀剂吸附膜的密度、空间分布和聚集行为解释其结构特征；进一步分析缓蚀剂分子的吸附能、腐蚀离子在膜内的扩散速度等微观参数，建立缓蚀剂缓蚀性能的理论评价方法。	1	6	综合设计型
6	表界面作用及剥离行为过程分析	介绍表界面吸附剂剥离行为，构建超临界二氧化碳、砂岩表面、烷烃分子（模拟原油）的模拟模型；首先通过平衡态分子动力学模拟获得原油在砂岩表面吸附的稳定构型，并对其吸附结构、吸附稳定性进行分析；然后考察超临界二氧化碳对吸附原油的剥离行为，从动态剥离过程、原油分子和二氧化碳分子的扩散速度、混相过程、吸附油的剥离数量、相互间相	1	6	综合设计型

		互作用能等参数评价超临界二氧化碳剥离吸附原油的能力。通过以上研究揭示超临界二氧化碳剥离原油的微观机制。			
7	碳材料分离机制及应用	介绍多功能碳材料的分离应用，构建具有一定氧化度的氧化石墨烯片、二氧化碳和氮气分子模型，确定其力场类型和相互作用力参数，构建由多层氧化石墨烯构成的层状分离膜模型，考察待分离气体在氧化石墨烯层间的传输分离行为；通过统计跨膜运输的二氧化碳和氮气的分子数，计算两种分离气体的渗透率和二氧化碳/氮气的选择性；分析气体的密度分布、层间扩散速度、气体与分离膜间的相互作用能等参数，揭示多层氧化石墨烯选择性分离二氧化碳的微观机制。	1	6	综合设计型
8	宏观材料静力学分析	有限元简介；常用有限元软件及应用、构成、主要功能；点、线、面的建立；2D 模型建立及网格划分；3D 模型建立及网格划分；材料属性的建立；约束类型及应用；边界条件设置；载荷施加；云图显示及输出；动画观察；剖面观察等。	1	6	综合设计型

三、教学安排及要求

内容	课内学时	教学方式	课外学时	课外环节	课程目标
实验 1	6	理论讲授、实验演示	4	撰写实验报告	目标 1-3
实验 2	6	理论讲授、实验演示	4	撰写实验报告	目标 1-3
实验 3	6	理论讲授、实验演示	4	撰写实验报告	目标 1-3
实验 4	6	理论讲授、实验演示	4	撰写实验报告	目标 1-3
实验 5	6	理论讲授、实验演示	4	撰写实验报告	目标 1-

					3
实验 6	6	理论讲授、实验演示	4	撰写实验报告	目标 1-3
实验 7	6	理论讲授、实验演示	4	撰写实验报告	目标 1-3
实验 8	6	理论讲授、实验演示	4	撰写实验报告	目标 1-3

四、考核内容、方式及评分标准

(一) 考核环节

考核环节		总成绩占比	支撑课程目标
实验预习	1. 预习不同材料尺度计算模拟方法, 掌握基本原理; 2. 了解对应不同材料尺度计算模型、计算方法的选择原理; 3. 了解设计原理及对应的设计软件。	20%	目标 1、2
课堂表现	1. 要求认真聆听理论讲解、积极主动交流、动手设计、深入分析结果。	10%	目标 1
实验操作	1. 掌握不用尺度材料模型构建方法及原理, 完成模型构建并分析构建合理性; 2. 掌握适宜方法遴选原则, 进行计算模拟实施; 3. 掌握计算结果分析方法, 判断所得结果可信度、精确度。多次计算对比分析, 总结计算模拟。	30%	目标 2、3
实验报告	1. 完成完整的实验报告, 包括模型构建、方法选择、计算实施、结果分析、可靠度评估、改进方案, 经验总结等; 2. 主要考核学生综合运用所学知识分析问题、解决问题的能力。	40%	目标 1-3

(二) 评分标准

考核环节	<60	60-75	75-90	90-100
实验预习	没有预习	了解部分原理、方法及软件	掌握基本原理、基本方法及相关软件	熟练掌握基本原理、基本方法及相关软件

课堂表现	全程纪律松散、无主动交流及动手实验	课堂纪律较好,有一定的自主动手操作	较认真听讲、可自主动手操作	认真听讲、积极主动交流、动手设计、深入分析结果
实验操作	无法独立完成	经老师指导,可完成实验操作过程,进行实验结果分析	能够独立完成实验操作过程,进行实验结果分析	能熟练掌握模型构建、方法选择,独立分析且获得正确结果
实验报告	实验报告格式不规范、内容不完整	基本完成实验报告要求内容,结果基本准确	实验报告内容较完整,结果分析较准确、书写较规范	实验报告内容完整,结果分析准确、书写认真规范

(三) 考核环节

考核环节	目标 1	目标 2	目标 3
实验预习	50%	50%	
课堂表现	100%		
实验操作		60%	40%
实验报告	30%	40%	30%

五、教材与参考资料

1. 李莉等.《计算材料学》.哈尔滨工业大学出版社, 2017;
2. 苑世领等.《分子模拟－理论与实验》.化学工业出版社, 2016;
3. 江建军等.《计算材料学》.高等教育出版社出版, 2010;
4. 张跃等,《计算材料学基础》,北京航空航天大学出版社, 2007。

六、其它说明

无。

大纲执笔人：

审核人（学位点负责人）：

分管院长签字：