



研究生课程教学大纲（模板）

课 程 名 称：	能量储存和转化中的计算科学		
	Computational Science in Energy Storage and Conversion		
课 程 编 号：	ZX14205D		
开 课 单 位：	材料科学与工程学院	开 课 学 期：	3
课 内 学 时：	32	学 分：	2
适 用 学 科 专业及层次：	材料科学与工程/博士		
授 课 语 言：	中文		
先 修 课 程：	材料结构与分子设计、计算材料学		
负 责 人：	鲁效庆	团 队 成 员：	鲁效庆

一、课程简介

《能量储存和转化中的计算科学》是针对材料科学与工程专业的博士研究生设置的一门非核心课。本课程主要涉及计算模拟技术在新能源材料科学与工程中的应用现状和研究方法等内容。

二、课程大纲

（一）课程目标

目标 1：掌握计算模拟在金属离子电池、超级电容器、燃料电池、光/电催化制氢、储氢材料、半导体太阳能电池、染料敏化太阳能电池等能量储存与转化器件中关键电极材料的研究。

目标 2：训练博士研究生用计算机解决复杂能源问题的能力，为从事能源材料的研究奠定基础。

(二) 课程内容

第1章 光电转换材料的计算(8学时)

第1节 量子化学计算理论

从头算方法、密度泛函理论、Hohenberg-Kohn 定理、Kohn-Sham 方程基组、开壳层/闭壳层组态 Hartree-Fock-Roothaan 方程、多体系微扰理论。

第2节 分子轨道理论

前线轨道理论、能级、供体-受体、类氢离子型轨道基组、Slater 型轨道函数基组、Gauss 型轨道函数基组、组态相互作用、分子自洽场的计算。

第3节 Gaussian 计算参量

几何优化、频率分析、单点能计算、分子轨道和轨道能级、电荷密度分布、电偶极矩和高阶电多极矩。

第4节 染料敏化剂分子设计

供体—受体分离的金属中心染料敏化剂电子受光激发分离理念、金属中心—供体—受体分解配对实验、纯有机染料敏化剂分子 D- π -A 结构设计有效的电荷分离体系。

第5节 染料敏化剂分子构型及电子结构分析

分析溶液中染料敏化剂稳定构型的键长、键角及二面角等结构参数、金属中心—配体作用方式、结合能及稳定性、染料敏化剂前线分子轨道 HOMO_s、LUMO_s 组成成分与能级。

第6节 电子激发、吸收光谱及分子内电子转移分析

染料敏化剂受光激发强度、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。

第2章 储能材料的计算(8学时)

第1节 Monte Carlo 方法

随机变量、随机变量的直接抽样方法、密度函数、随机变量的舍选抽样法、宏观量和微观量的关系、统计平均值、玻色-爱因斯坦分布、费米-狄拉克分布。

第2节 Monte Carlo 方法与统计物理

统计平均与归一化、近独立粒子系统的统计分布、正则系综的统计分布、Monte Carlo 方法在统计物理的应用。

第3节 储能材料基片设计及结构优化

基片结构设计原理、基片结构优化至稳定构型、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、计算模拟效率。

第4节 三维多孔模型设计及拓扑结构分析

依据基片结构构建三维(3D)多孔吸附材料、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；多孔吸附材料的孔隙特性评估方法。

第5节 气体分子—多孔吸附材料相互作用

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；对比分析采用优化方法前后吸附位及吸附能的变化。重点讲解量化计算对于单体分子吸附的定量对应关系。

第6节 多孔吸附材料中气体分子吸附行为

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、Langmuir 等温吸附线拟合；气体分子在 3D 材料中的动态填充过程、统计力学方法吸附规律中的应用。

第3章 离子电池、光/电催化制氢中的计算（8 学时）

第1节 固体材料科学计算

平面波方法、紧束缚近似方法、正交化平面波方法、赝势方程、赝势方法。

第2节 固体电子结构理论

Bloch 定理、能带对称性、能态密度、费米能级、前线轨道及能级、电荷差分、红外与拉曼光谱。

第3节 固体材料性质的计算

固体能量、固体表面稳定能、缺陷形成能、几何优化、能态结构、能态密度、布局分析、弹性常数等参数理论计算基础及方法、热力学性质、光学性质计算。

第4节 固体催化剂设计

晶系晶胞、空间群、催化剂晶体表面构建、不同晶面活性位点构建、缺陷与金属修饰、周期性与团簇结构、晶粒形貌、催化剂团簇暴露面。

第5节 表面吸附

离子电池及光/电催化剂表面吸附分子稳定构型、反应中间及产物的吸附构型、吸附结构键长、键角及二面角等几何构型参数、顶位/桥位等不同吸附位点的判断

第6节 反应过程及本质分析

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、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。

第4章 分离膜材料中的计算（8 学时）

第1节 分子动力学

周期性边界条件、非周期性边界条件、波尔兹曼分布、Verlet 算法、速度

Verlet 算法、Leap-frog 算法、预测校正算法、微正则系综、正则系综、等温等压系综、等压等焓系综。。

第 2 节 分子动力学参数

势函数、Lennard-Jones 势、Born-Mayer 势、Morse 势、Johnson 势、嵌入原子势 Embedded atom method、Finnis 和 Sinclair 势、Johnson 的分析型 EAM 势、共价晶体作用势（Stillinger-Weber 势、Abell-Tersoff 势）、有机分子的作用势（MM 力场、AMBER 力场、CHARM 力场、CVFF 力场、时间步长、势函数、截断半径、Ewald 加和。

第 3 节 分离膜材料的设计及优化

分离膜材料选择、孔径设计、单层/多层设计、量化结构优化、稳定构型、内聚能计算、声子谱、热力学及动力学稳定性。

第 4 节 吸附与渗透量化分析

气体分子在分离膜材料表面稳定吸附构型、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。

第 5 节 分离膜材料渗透率与选择性

渗透率、气体选择性、工业标准、能斯特方程、分离性能。

第 6 节 吸附与渗透动力学

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。

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
第一章	4	理论讲授		文献阅读/案例分析/专题调研	目标 1
第一章	4	实验/实训		撰写实验/实训报告	目标 2
第二章	4	理论讲授		文献阅读/案例分析/专题调研	目标 1
第二章	4	实验/实训		撰写实验/实训报告	目标 2
第三章	4	理论讲授		文献阅读/案例分析/专题调研	目标 1
第三章	4	实验/实训		撰写实验/实训报告	目标 2

第四章	4	理论讲授		文献阅读/案例分析/专题调研	目标 1
第四章	4	实验/实训		撰写实验/实训报告	目标 2

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
平时作业	1. 共布置若干道题目，平均每周 1 道题。 2. 成绩采用百分制，根据作业完成准确性、是否按时上交、是否独立完成评分。 3. 考核学生对基本知识的掌握能力，综合运用所学知识分析问题、解决问题的能力，题型主要有分析计算、调研报告、案例分析报告、文献综述等。	20%	目标 1、2
课堂表现	1. 本课程要求每个学生有 2 次课堂报告（专题报告/案例分析报告），每次占比 50%。 2. 成绩采用百分制，主要根据 PPT 准备、讲述表现、综合应用知识分析问题解决问题的能力、创新性等评分。	40%	目标 1
实验/实训	1. 本课程 8 个学时实验，共 2 次实验/实训。 2. 成绩采用百分制，根据实验/实训完成情况评分。 3. 考核学生对知识的综合应用能力。	40%	目标 2

（二）评分标准

考核环节	<60	60-75	75-90	90-100
平时作业	不能按照作业要求完成作业	基本概念不清晰	基本按照作业要求并及时完成，基本概念基本清晰	严格按照作业要求并及时完成，基本概念清晰
课堂表现	无故旷课	无缺勤，上课回答问题基本正确。	无缺勤，上课回答问题正确。	无缺勤，上课回答问题正确，并能对学

				科前沿知识有较深入理解。
实验/实训	报告内容不完整， 未掌握授课内容	报告内容基本完成，但错误较多，未完全掌握授课内容	报告完整，能够较好地掌握各类材料分析技术的原理、仪器结构和基本操作，结果分析正确。	报告完整，能够准确掌握各类材料分析技术的原理、仪器结构和基本操作，结果分析正确全面。

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。
5. 许鑫华等.《计算机在材料科学中的应用》.机械工业出版社，2003。
6. 曾令可等.《计算机在材料科学与工程中的应用》，武汉理工大学出版社，2004。
7. D. 罗伯（著），项金钟等（译）.《计算材料学》.化学工业出版社，2002。

大纲执笔人：

审核人（学位点负责人）：

分管院长签字：