



中国石油大学(华东)
CHINA UNIVERSITY OF PETROLEUM

研究生课程教学大纲

课程名称：	材料分子结构与设计		
	Materials Structure and Molecular Design		
课程编号：	ZX14203T		
开课单位：	材料科学与工程学院	开课学期：	2
课内学时：	32	学分：	2
适用学科专业及层次：	材料与化工专业学位硕士生		
授课语言：	中文		
先修课程：	计算材料学、固体物理		
负责人：	郭文跃	团队成员：	鲁效庆

一、课程简介

材料分子结构与设计是针对材料科学与工程专业的研究生设置的一门非核心课。其建立在对物质结构与性质关系的深刻理解基础之上，应用理论和实验方法构建出具有特定性质或功能的分子或材料。通过本课程的学习，使学生充分了解光谱方法、理论计算模拟方法认识分子结构信息并了解分子设计的基本原理、方法和应用领域；掌握催化剂分子设计、光电材料设计、高分子材料设计等各种不同领域材料分子结构及设计的基本概念和方法；培养学生利用分子光谱及计算机模拟方法解决相关工程和技术问题的能力，为从事能源材料的研究奠定基础。

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: 掌握分子光谱的类型与产生的基本原理, 掌握不同光谱的选用原则和图谱解析的基本方法。	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; 能灵活运用所学知识综合分析问题。	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: 掌握分子设计的基本原理和方法, 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(专业能力要求): 能够运用科学原理, 掌握较强的解决本领域复杂工程问题的能力; 具备一定的国际视野和跨文化交流能力。

(二) 课程内容

第一章 引言 本章重点难点: 分子光谱的类型。 1 分子光谱的分类 2 光谱仪原理 3 吸收光谱	4 学时
第二章 辐射的吸收和发射 本章重点难点: 电偶极矩的选择定则。 1 含时微扰理论 2 辐射的吸收和发射 3 选择定则 4 线形与线宽	4 学时
第三章 双原子分子的振动和转动光谱 本章重点难点: 双原子分子的振动-转动光谱和选择定则。 1 波恩-奥本海默近似 2 双原子分子作为刚性转子 3 双原子分子作为振动转子 4 非谐性、振动-转动相互作用和离心畸变 5 转动和振动跃迁的选择定则 6 双原子分子的转动光谱	4 学时

7 双原子分子的振动-转动光谱	
8 双原子分子波函数的宇称	
9 同核双原子分子的核交变对称性	
10 同核双原子分子的正态和仲态	
第四章 双原子分子的电子光谱	4 学时
本章重点难点：双原子分子的电子光谱和选择定则。	
1 双原子分子电子谱项的分类及确定	
2 分子转动与电子运动的耦合	
3 选择定则 跃迁的例子	
4 电子光谱的振动结构	
5 电子谱带中振动结构的强度分布	
6 电子光谱的转动结构	
7 转动光谱	
第五章 分子设计基础及模拟方法（计算实验）	4 学时
1 主要介绍分子设计的定义、意义、基本过程	
2 主要讲授典型结构参数、拓扑指数、量子化学参数、动力学参数	
第六章 分子设计中的建模方法（计算实验）	4 学时
1 主要讲授模式识别建模、PLS 建模、逻辑结构分析建模、集合论方法建模、神经网络建模方法、距离几何学建模、计算机结构建模等各种建模方法的基础知识，以及它们的共同特点和各自特色。	
第七章 分子设计具体案例讲解（计算实验）	8 学时
1 本章主要介绍光电材料、催化剂、高分子、超分子、分子器件、半导体材料、合金材料等分子基本结构知识，以及这些分子设计所采用的主要方法、基本思路、模型选取，并对新设计分子材料性能进行分析、评测及部分性能预测。	

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
1.1	1.0	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1
1.2	2.0	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1
1.3	1.0	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1
2.1	1.0	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1
2.2	1.0	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1
2.3	1.0	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1
2.4	1.0	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1
3.1	0.5	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1
3.2	0.3	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1

3.3	0.3	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1
3.4	0.4	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 2
3.5	0.5	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 2
3.6	0.5	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 2
3.7	0.5	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 2
3.8	0.3	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1
3.9	0.3	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 1
3.10	0.2	理论讲授	0.2	案例分析	目标 1
4.1	0.5	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 2
4.2	0.5	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 2
4.3	1.0	案例研讨	0.2	文献阅读	目标 2
4.4	0.5	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 2
4.5	0.5	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 2
4.6	0.5	理论讲授	0.2	文献阅读	目标 2
4.7	0.5	理论讲授	0.2	案例分析	目标 2
5.1	2.0	实验	0.5	撰写实验报告	目标 2、3
5.2	2.0	实验	0.5	撰写实验报告	目标 2、3
6.1	4.0	实验	1.0	撰写实验报告	目标 2、3
7.1	8.0	实验	1.0	撰写实验报告	目标 2、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
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 1-3
课堂表现	1. 成绩采用百分制，课堂提问、互动等评分。	10%	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。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 3. 考核学生对知识的综合应用能力。	40%	目标 3
期末考察	1. 本课程采用课程论文的考查形式进行考核，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。	30%	目标 1-3

(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	旷课	不能回答老师提出的问题	基本能回答老师提出的问题	积极沟通、积极提问、能回答老师提出的问题
实验	不能按照作业要求完成实验报告	基本概念不清晰，解决问题的方案基本不正确、不合理	基本按照实验要求并及时完成，思路基本清晰，解决问题的方案基本正确、基本合理	严格按照实验要求并及时完成，思路清晰，解决问题的方案正确、合理，能提出不同的解决问题方案
期末考查	阅读量不足，不能了解掌握选题所涉及的国内外动态；理论推导欠妥，数据不准确，书写不符合标准	能阅读文献，了解掌握选题所涉及的一些国内外动态；理论推导有一定的完整性，数据准确，分析较合理，书写符合标准	阅读较广泛，基本了解掌握选题所涉及的国内外动态；理论推导较严密完整，数据可靠，分析合理，书写较规范	阅读广泛，较全面了解掌握选题所涉及的国内外动态；理论推导严密完整，数据可信，分析严谨，书写规范

(三) 考核环节

考核环节	目标 1	目标 2	目标 3
平时作业	30%	30%	
课堂表现	10%	10%	
实验	30%	30%	100%
期末考查	30%	30%	
总权重	100%	100%	100%

五、教材与参考资料

(一) 教材

1. 斯万贝里(S. Svanberg).《原子和分子光谱学:基础及实际应用》.科学出版社, 2015。

2. 李莉等.《计算材料学》.哈尔滨工业大学出版社, 2017。

(二) 主要参考资料:

1. 苑世领等.《分子模拟—理论与实验》.化学工业出版社, 2016。

2. 江建军等.《计算材料学》.高等教育出版社出版, 2010。

3. 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

大纲执笔人:

审核人(学位点负责人):

分管院长签字:

教学大纲编写负责人（材料物理系）

课程性质	课程编码	课程名称	学时	课程负责人
专业基础课	6144001	材料现代分析技术	32	郝兰众
	6143001	材料多尺度模拟	32	张 军 ⁶⁸
	6143005	材料基因综合设计实验	48	鲁效庆
专业选修课	7143102	智能防腐材料及技术	32	胡松青
	7143101	材料基因工程	32	张 军 ⁶⁸
	6143002	石油石化防腐蚀工程	32	胡松青
	6143003	材料分子结构与设计	32	郭文跃
	6143004	薄膜技术与薄膜材料	32	薛庆忠(郝兰众)
	6143006	材料合成化学与工艺	32	王兆杰