



研究生课程教学大纲

课 程 名 称：	计算材料学		
	Computational Materials Science		
课 程 编 号：	ZX14210T		
开 课 单 位：	材料科学与工程学院	开 课 学 期：	第一学期
课 内 学 时：	32	学 分：	2
适 用 学 科 专业及层次：	材料科学与工程学术学位硕士生 材料与化工专业学位硕士生		
授 课 语 言：	中文		
先 修 课 程：	《量子力学》、《热力学与统计物理》		
负 责 人：	张军	团 队 成 员：	李振、燕友果、王晓

一、课程简介

本课程是材料科学与工程、材料与化工硕士研究生专业基础课(核心课程)。本课程主要讲授材料科学中电子、原子及分子、连续体介质等多层次的模拟方法和原理，包括量子化学计算、分子力学计算、分子动力学方法、蒙特卡洛方法、耗散粒子动力学、宏观尺度模拟。

通过本课程的学习，使学生能较为系统地掌握多尺度模拟的基本概念和原理，认识多尺度计算模拟方法在材料科学研究中的角色和意义，加深对材料“结构—性能”本构关系的理解，激发并拓宽学生的材料研究理念与思维模式，使其能够合理运用计算模拟方法解决材料科学中的多尺度问题。

二、课程大纲

(一) 课程目标

目标 1：掌握量子化学、分子力学、分子动力学、蒙特卡洛、耗散粒子动力学、宏观尺度计算等多尺度计算模拟方法的基本原理；

目标 2：掌握不同尺度计算模拟方法的区别以及各自的应用领域。

（二）课程内容

第一章 绪论

概述多尺度计算模拟方法及应用领域、计算模拟在材料科学研究中的地位与前景，介绍课程结构、教学方式及要求、考核方式等。

第二章 量子力学简介

本章重点难点：量子力学基本原理的理解

量子力学发展简史，量子力学基本原理与概念，不确定性原理，波函数与薛定谔方程，算符与力学量等。

第三章 量子化学

本章重点难点：求解量子力学方程理论方法、赝势及计算应用

3.1 分子轨道理论

波恩-奥本海默近似，Hartree-Fock 方法，Koopmans 定理，Hartree-Fock 方程的数值求解和基组选择等。

3.2 密度泛函理论

托马斯-费米-狄拉克近似、Hohenberg-Kohn 定理、Kohn-Sham 方程、交换关联能、局域密度近似、广义梯度近似、混合泛函、强关联等的基本概念。

3.3 平面波-赝势方法

正交化平面波，赝势，布里渊区积分，自洽场计算的实现。

第四章 分子力学

本章重点难点：力场的概念与计算应用原理

4.1 分子力学简介

分子力学概念及数值计算原理，分子力学应用简介。

4.2 相互作用形式与分子力场

分子间成键作用、非键作用及各自的数学描述，力场的概念与要素。

4.3 势能面及能量最小化

势能面概念，能量最小化算法（包括最速下降法、共轭梯度法、牛顿-拉森法）。

4.4 多尺度对接 QM/MM 方法

QM/MM 方法的概念与意义，相互作用能的计算，静电 QM/MM 相互作用，QM/MM 边界上的成键作用处理。

第五章 分子动力学方法

本章重点难点：系综理论、分子动力学方法的计算实现

5.1 分子动力学简介

分子动力学基本原理，经典力学与牛顿运动方程求解，分子动力学与分子力学的区别与联系，分子动力学应用领域概述。

5.2 分子动力学的计算实现

截断半径，周期性边界条件，长程库伦校正，系综理论。

5.3 采样方法与数据分析

统计热力学基本原理，各态历经，增强采样方法。

5.4 粗粒化思想与大尺度模拟

粗粒化概念，粗粒化力场，粗粒化优势及存在的问题，粗粒化应用案例。

第六章 蒙特卡洛方法

本章重点难点：蒙特卡洛模拟的一般流程及编程实现

6.1 蒙特卡洛简介

蒙特卡洛方法的基本思想，蒙特卡洛模拟的一般流程，蒙特卡洛方法与分子模拟的关系，巨正则蒙特卡洛方法。

6.2 随机数

随机数的概念，伪随机数，随机数的计算机生成。

6.3 应用实例

利用“投针法”求解圆周率，蒙特卡洛方法求解定积分，伊辛模型；利用蒙特卡洛方法，借助 Excel，求解圆周率、求解高维定积分。

第七章 耗散粒子动力学（DPD）

本章重点难点：耗散粒子动力学与粗粒化分子动力学的区别与联系

7.1 耗散粒子动力学简介

耗散粒子动力学基本原理，耗散粒子动力学中的相互作用形式（保守力、色散力、随机力）。

7.2 耗散粒子动力学方法

e-DPD 方法，Many-body DPD 方法

7.3 耗散粒子动力学力场

耗散粒子动力学力场形式及参数，耗散粒子动力学相互作用参数拟合方法，Flory-Huggins 理论

7.4 耗散粒子动力学的应用

生物膜动态结构，聚合物相行为，耗散粒子动力学模拟的优势与问题。

第八章 宏观尺度模拟方法简介

本章重点难点：宏观尺度模拟方法的数学原理和数值求解

有限差分方法，有限元方法，蒙特卡洛方法，格子玻尔兹曼方法，近场动力学方法。

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	2	理论讲授			目标 2
第二章	2	理论讲授			目标 1
第三章	6	理论讲授	2	作业	目标 1、2
第四章	4	理论讲授			目标 1、2
第五章	6	理论讲授	2	作业	目标 1、2
第六章	6	理论讲授	2	作业	目标 1、2
第七章	4	理论讲授			目标 1、2
第八章	2	理论讲授			目标 1、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
课堂表现	1. 课堂出勤情况。 2. 课堂融入情况，要求认真聆听讲解、积极主动交流。	20%	目标 1、2
平时作业	1. 共布置 3 次大作业。 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，题型主要有调研报告、案例分析报告、文献综述等。	30%	目标 1、2
期末考试	1. 开卷考试，成绩采用百分制，卷面成绩总分 100 分。 2. 主要考核学生对本课程中多尺度模拟方法的基本原理与应用的掌握情况，题型主要有填空题、选择题、简答题等。	50%	目标 1、2

（二）评分标准

考核环节	<60	60-75	75-90	90-100
课堂表现	缺勤 1/3 以上，课堂纪律松散，不参与课堂交流与讨论	缺勤较多，能参与课堂交流与讨论但相对较少	基本按时出勤，能够融入课堂并参与课堂交流与讨论	按时出勤，很好地融入课堂，热烈参与课堂交流与讨论
平时作业	作业格式不规范、内容不完整	基本完成作业要求内容，结果基本准确	作业内容较完整，结果分析较准确、撰写较规范	作业内容完整，结果分析准确、撰写认真规范
期末考试	卷面成绩<60	卷面成绩 60-75	卷面成绩 75-90	卷面成绩>90

五、教材与参考资料

主要参考资料：

1. 单斌，陈征征，陈蓉，材料学的纳米尺度计算模拟：从基本原理到算法实现，华中科技大学出版社，2015
2. 严六明，朱素华，分子动力学模拟的理论与实践，科学出版社，2013

六、其它说明

无

大纲执笔人：张军、李振

审核人（学位点负责人）：

分管院长签字：