

《材料模拟与仿真》课程教学大纲

一、课程概况

课程名称	材料模拟与仿真		课程号	207412009			
课程英文名称	Computational Materials		学时/学分	36/1			
课程性质	选修		适用专业	材料物理、功能材料、新能源材料与器件			
课程负责人	王连文		教学团队				
选用教材及参考书目							
<p>课程简介：介绍常用的材料模拟方法，跨越多个尺度，从电子层次的计算、到原子分子层次的模拟、到有限元方法对材料加工过程的再现，让学生了解计算材料学的起源、用途、局限性，以便在以后的工作学习过程中可以有针对性地选择现代工具应对复杂材料工程问题，寻求多种解决方案，对可能的解决方案进行分析比较，获得最佳解决方案和有效结论。</p>							
课程目标 (Course Objectives, CO)							
知识目标 (CO1)	能够将专业知识和模型方法用于推演、分析、求解新能源领域材料工程问题						
能力目标 (CO2)	能够认识到新能源领域材料工程问题的复杂性，解决问题有多种方案，通过文献研究寻求多种解决方案，对可能的解决方案进行分析比较，获得最佳解决方案和有效结论						
	能够选择与使用恰当的信息资源、工程工具和专业模拟软件，对复杂材料工程问题进行分析、计算与设计						
素质、情感价值观目标 (CO3)	理解诚实公正、诚信守则的工程职业道德和规范，并能在工程实践中自觉遵守						
	能在社会发展的大背景下，认识到自主和终身学习的必要性						
教学方式 (Pedagogical Methods, PM)	<input checked="" type="checkbox"/> PM1 讲授法教学	12 学时 33%	<input type="checkbox"/> PM2 研讨式学习	学时	%		
	<input checked="" type="checkbox"/> PM3 案例教学	24 学时 67%	<input type="checkbox"/> PM4 翻转课堂	学时	%		
	<input type="checkbox"/> PM5 混合式教学	学时	%	<input type="checkbox"/> PM6 体验式学习	学时	%	
考核方式 (Evaluation Methods, EM)	考试课必选	<input type="checkbox"/> EM1 课程作业	%	<input type="checkbox"/> EM2 单元测试	%	<input type="checkbox"/> EM3 课堂辩论	%
		<input type="checkbox"/> EM4 期中考试	%	<input type="checkbox"/> EM5 期末考试	%	<input type="checkbox"/> EM6 撰写论文/实验报告	%

	考查课 必选	<input checked="" type="checkbox"/> EM1 课程作业	60 %	<input type="checkbox"/> EM 2 单元测试	%	<input checked="" type="checkbox"/> EM3 课堂辩论	40%
		<input type="checkbox"/> EM4 期末考试	%	<input type="checkbox"/> EM5 撰写论文/ 实验报告	%		
	自选	<input type="checkbox"/> EM10 课堂互动	%	<input type="checkbox"/> EM11 实验	%	<input type="checkbox"/> EM12 实训	%
		<input type="checkbox"/> EM13 实践	%	<input type="checkbox"/> EM14 期末考试	%		

二、教学大纲的定位说明

(一) 课程教学目标与任务

- 1.了解计算材料学的起源、用途、局限性
- 2.熟悉结构构建软件 vesta，电子结构计算软件 vasp，量子计算基础
- 3.了解分子动力学的基本原理
- 4.熟悉有限元对材料加工过程的再现
- 5.能够按时上课并完成作业

(二) 课程教学目标与毕业要求的关系

课程目标		支撑的毕业要求	支撑强度
知识目标 (CO1)	1-4	1.1、1.3	M
能力目标 (CO2)	2-4	2.3、5.2	M
素质、情感价值观目标 (CO3)	5	8.2、12.1	L

(三) 支撑课程目标的教学内容与方法

案例教学为主，辅以基础知识教学。

(四) 与先修及后续课程之间的逻辑关系和内容衔接

专业应用课程，基本修完专业知识之后、第6学期开设。

(五) 检验课程目标达成度的考核方法和评分标准

通过课堂辩论了解学生课程学习的认真程度，通过课程作业了解学生对课程知识的掌握程度并对课程学习中易出现的错误及时进行帮扶。课堂辩论占40%，课程作业占60%，总评成绩为百分制，60分及格。

三、课程内容与安排

第一章 引言 (4学时)

学习目标:

1.了解计算材料学的起源、用途、局限性

教学重点： 计算材料学的用途

教学难点： 计算材料学的局限性

教学方法： 讲授、案例

第二章 量子计算（18 学时）

学习目标：

2.熟悉结构构建软件 vesta，电子结构计算软件 vasp，量子计算基础

教学重点： 量子计算

教学难点： vasp 应用

教学方法： 讲授、案例

第三章 分子动力学简介（4 学时）

学习目标：

3.了解分子动力学的基本原理

教学重点： 分子动力学应用

教学难点： 分子动力学的局限性

教学方法： 讲授、案例

第四章 有限元（10 学时）

学习目标：

4.熟悉有限元对材料加工过程的再现

教学重点： 有限元应用

教学难点： 有限元对材料加工过程的再现

教学方法： 讲授、案例

制定人：王连文

审定人：王连文

批准人：贺德行

日期：2024.10.10