

材料科研创新需要改变旧的教学模式

●文/常希望 陈宁 曹文彬(北京科技大学)

中国是世界第一制造业大国,但核心材料自给率不足14%。材料科研创新模式落后,是导致我国核心材料生产能力落后的原因之一。

从世界范围来看,美国于2011年提出材料基因组计划(简称MGI),其技术核心是以高通量的计算、实验数据结合理论分析,来实现对材料的分析,通过理论模拟和计算完成先进材料的“按需设计”,大大加速了新材料的开发和应用进程。MGI代表了一种全新的研究模式,是我国研究模式转型的方向。事实上,中国科技部首批与材料相关的MGI项目,已于2016年10月正式在北京启动。

在传统材料科研模式的转型过程中,除了国家政策和资金支持以外,人才是第一位的。为了适应新模式的转变,我们的教学模式也需要根据新材料研究模式的特点,从教学内容和形式上都做出根本性的转型和创新。在此背景下,北京科技大学无机非金属系在材料科学的计算机教学中也在尝试相关的教学模式,推进研究型教学示范课程建设。

MGI研究模式中暗含的“理论与实践融合,理论先行”等内涵,以及高通量计算、大数据处理等技术手段,为我们的研究型教学改革提供了方向指引和技术支撑。

我们对课程教学内容进行了重新规划,除了以知识教育为依托,更注重促进和引导学生理解和学习材料研究基本方法,并为其开展相关研究提供相应的工具支持。在教学过程中,重点引入了以第一性原理为核心的计算模拟程序教学。在材料研究领域,计算机模拟很多时候比实验更快、更省,并且计算机模拟可以预测一些当前实验水平难以达到的情况,而在众多的模拟方法中,第一性原理计算是最受研究人员青睐的一种,它可以合理地预测指定材料的几何结构、电子结构、热力学性质和光学性质等材料的物理性质。

新课程体系中具体教学内容主要包括10个方

面:典型无机非金属晶体结构的搭建和基本性质分析、XRD衍射谱的处理和精修分析、缺陷和晶界结构的模拟和优化、晶体合成方法的理论模拟、典型无机非金属晶体弹性常数的计算、典型无机非金属晶体的声子计算和热力学性质分析、典型材料的电子结构计算和分析、晶体材料的电子导电性质研究、晶体材料的光学性质研究和典型问题的综合分析研究时间。

第一性原理外加上上述应用程序,掌握了这些,学生们就能自主开展相关的材料分析和预测新材料的合成。

传统教学模式一般是老师讲课—学生听讲—上机操作,多年的实践证明,这种方式缺乏直观感受,缺乏互动和思考,效果较差。为此,我们在新课程建设中强化了互动性,不再是填鸭式的灌输知识,而是借助新的软件平台,让学生们带着问题自己在课堂上实操。教授们一边教授知识一边带着大家一起搭模型、做材料分析,互动性大大加强。

以第一性原理为核心的计算模拟程序等平台和技术手段的搭建,使得学生们只需一台电脑、几款软件,即可随时随地投入到对材料科学的研究中去。更充分的实践,可帮助他们体验研究材料基本原理和性能分析的过程,为其将来开展真正的材料学研究积累经验。

这种研究型教学示范课程,把学习、研究、实践有机地结合了起来。在我们学校推广的第一批实践性教学改革课程的示范课堂上,学生们反响热烈,不仅自主设立一些材料科学的基础规律题目,上课出勤率也高,平时投入时间也在增加,主动参与性大大增强。学生们已开始提出自己感兴趣的课题思路,有的课题甚至是根据目前国家急需的关键材料提出的,并且他们还积极参与撰写能在国际期刊上发表的论文。**科技**