

•教学研究与管理•

doi: 10.3866/PKU.DXHX201711013

www.dxhx.pku.edu.cn

用竞赛方式促进计算化学课程教学

樊桂兰, 许秀芳*

南开大学化学学院, 天津 300071

摘要: 结合举办“魅力计算·演绎分子”南开大学化学学院计算化学知识技能大赛的教学实践, 从竞赛目标、竞赛流程、评分标准、培训内容、考核方式和实施效果等几个方面, 阐述了采用竞赛方式丰富计算化学教学内容的一些经验和方法, 积累了计算化学课程教学改革的经验。

关键词: 计算化学; 教学改革; 教学方法; 竞赛

中图分类号: G64; O6

Improving the Teaching of Computational Chemistry Course with Competition

FAN Guilan, XU Xiufang*

College of Chemistry, Nankai University, Tianjin 300071, P. R.China.

Abstract: On the basis of computational chemistry competition named “captivating chemistry, deducing molecules” held in College of Chemistry, Nankai University, we introduce some practices and methods on how to improve the teaching of computational chemistry course from the viewpoints of the competition aim, the competition procedure, the evaluation standard, the training content, the examination mode and the implementation effect.

Key Words: Computational chemistry; Teaching innovation; Teaching mode; Competition

计算化学(computational chemistry)是理论化学的一个重要分支, 同时也是当代化学的新兴领域。计算化学的主要目标是利用有效的数学近似以及电脑程序, 计算分子的性质(例如总能量、偶极矩、四极矩、振动频率、反应活性等), 还可以利用计算机程序做分子动力学模拟, 从而在分子水平上对实验化学的结果给出合理的解释, 并对化学分子的性质和化学反应的活性、选择性和产物分布进行预测, 从而为优化合成反应条件、研究化学反应机理、解释反应现象提供理论依据。自 19 世纪 20 年代量子力学理论建立以来, 许多科学家曾尝试以各种数值计算方法来深入了解原子与分子的各种化学性质。然而在计算机广泛使用之前, 此类的计算由于其复杂性而只能应用在简单的系统与高度简化的理论模型之中。现今, 随着计算机处理器和运算速度的大幅提升, 计算机逐渐开始成为计算化学领域中一种经济而有效率的工具。1980 年, 计算化学领域的专业期刊 *Journal of Computational Chemistry* 杂志创刊。1998 年计算化学家沃尔特·库恩和约翰·波普尔的“密度泛函理论和量子化学计算方法”和 2013 年计算化学家马丁·卡普拉斯、迈克尔·莱维特及亚利耶·瓦谢尔的“发展复杂化学体系多尺度模型”先后获得诺贝尔化学奖, 标志着计算化学的重要作用愈加为人们所重视。随着计算机软件的不断升级和计算机硬件水平的飞速提高, 计算化学取得了蓬勃的发展, 并与有机化学、无机

收稿: 2017-11-13; 录用: 2017-12-08; 网络发表: 2017-12-14

*通讯作者, Email: xxfang@nankai.edu.cn

基金资助: 南开大学教育教学改革项目

化学、高分子化学、化学生物学、材料化学等学科紧密结合,成为化学诸学科中行之有效的研究手段。

近年来,计算机的普及和计算化学软件操作的日益简便,使得许多学生对计算化学研究产生了浓厚的兴趣。针对这一现象,很多高等院校纷纷开设了计算化学课程^[1-3],并设计了一系列面向高年级本科生的计算化学实验,如“甲醛分子的结构和性质的计算化学研究”“H₂反应势能面的构建”“氢气和氧气生成气态水反应热力学函数的高水平量化计算研究”等^[4-6],这些教学实践对学生了解和掌握计算化学的原理、方法和应用实例起到了积极的作用。笔者也面向南开大学化学专业的本科生开设了“计算化学”课程,并将“讲一练二考三”模式引入到计算化学教学中^[7],在教学内容上重点讲授计算化学的原理、方法以及应用实例,尤其是结合所在学院各优势学科方向以及现有各课题组的研究特色,从理论结合实践的角度讲授计算化学在有机化学、无机化学、物理化学等领域的应用实例和最新的研究进展。另一方面,在教学方式上提高上机实践的比重,使上机实践成为学生掌握课程内容的重要途径,突出计算化学知识和技能的灵活应用。由于计算化学涉及的领域很广,而教师自身的知识和水平有限,难以在教学中做到面面俱到。为解决这一问题,笔者在我校尝试利用竞赛方式丰富计算化学内容,即联系当前热门计算问题,通过培训加比赛的形式,培养学生运用计算机解决化学实验问题的能力,向学生提供深入了解计算化学的机会。让学生在学习知识、提升能力的同时形成自己的科研认知。本文将 2017 年举办的“魅力计算·演绎分子”南开大学化学学院计算化学知识技能大赛为例,对这一教学改革的尝试加以介绍。

1 竞赛目标

“魅力计算·演绎分子”南开大学化学学院计算化学知识技能大赛本着为学生提供更多学习、了解新知识的服务理念,立足于当下化学科研的基本需求,力求推广计算化学应用,为学生带来更切合实际需求的计算化学知识和更接近实际的操作体验。

2 面向对象

选修“计算化学”课程的学生,并面向全体南开大学化学学院在校本科生、研究生,同时欢迎天津市其他高校的学生共同参与。

3 竞赛流程和评分标准

本次竞赛的流程和评分标准如表 1 所示。

表 1 竞赛流程和评分标准

项目	时长	标准	分值	备注
培训	共培训 5 场, 每场 3 课时, 共 15 课时	根据总场次按学生出勤和完成课堂练习的情况给分	10 分	讲座结束统计
笔试	2 课时	笔试包括选择题和简答题两部分。选择题均为单选题, 要求准确无误; 简答题要求表述准确完整, 用词恰当	30 分	笔试内容为培训期间所讲授内容及简单应用, 各部分培训内容分值占总卷面内容的 20%, 并由培训主讲人负责相应部分的阅卷工作
操作	不限具体时长。由培训教师命题, 学生选择题目后在 1 个月时间内自行上机完成	按所选题目要求, 能够运用计算化学类软件完成所选题目内容, 作答结果完整	40 分	培训教师作为评委。其中, 主出题人的给分意见占 70%, 其他评委的给分意见占 30%
PPT 展示	每人 10 分钟	无篇幅限制, 要求思路清晰、表达清楚、结果基本正确	20 分	培训教师作为评委, 现场提问、评分及点评

4 培训内容

计算化学知识和技能的掌握是实践操作的基础。因此,在培训环节“讲什么?怎么讲?”就显得尤为重要。计算化学在化学、生物、材料和环境很多领域都有广泛的应用,常用的计算化学方法包括量子力学方法、分子力学方法、分子动力学方法、分子蒙特卡洛方法、从头算方法、半经验方法和密度泛函方法等,常用的计算化学商品化软件有 Gaussian、VASP、Hyperchem、Material Studio、Amber 等。如此多的内容,培训教师不可能全部都讲,而是需要做到“精讲”。即在培训素材的搜集上,广泛查阅文献资料,力求较为全面地了解计算化学的原理、方法和最新研究进展。在培训内容选择上,根据培训教师自身的科研工作与南开大学化学学院各课题组研究方向相关的计算化学实例作为主线选择和整理教学内容。在课件制作上,借助多媒体技术,制作集图、文、声、像和三维动画为一体的计算化学培训课件。

在培训方式上,力争做到课堂讲授与“启发式、互动式”教学相结合。即在课堂讲授计算化学基础知识和相关计算软件使用方法之外,精选富有启发性的题目,尤其是用计算化学解决有机、无机、催化、超分子等领域实际问题的内容,开展启发式和互动式教学。在每一部分培训内容之后均安排随堂练习,做到“随讲随练”,使练习成为学生掌握培训内容的重要途径,提升学生综合运用计算化学知识解决问题的能力。因此,本次竞赛安排了 5 个部分的培训内容,如表 2 所示。主讲人均为我院计算化学领域不同方向的知名教授,长期工作在计算化学科研一线。主讲人除讲授计算化学的知识和专业技能外,还通过自身的科研经历,指导学生灵活运用所学的计算化学知识和技能解决实验化学中的问题。培训内容涵盖 Gaussian 程序、VASP 程序及相关软件的基本使用方法以及三维结构绘图技巧,并着重讲述如何利用计算化学方法解决物理化学、有机化学和催化化学领域中的的一些实际问题,如化学反应热力学/动力学函数的计算、有机化学反应机理的计算、化学键键能(BDE)的计算、固体表面化学吸附和催化过程的模拟等。

表 2 竞赛培训内容和主讲人

培训内容	主讲人
三维结构绘图	孙宏伟 教授
Gaussian, GaussView 软件的基本使用	尚贞峰 教授
Gaussian 程序在化学中的应用	许秀芳 教授
物理有机化学计算初识	薛小松 研究员
多相催化计算研究初识	王贵昌 教授

5 考核方式

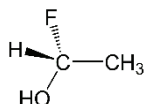
在考核方式上,采用笔试、实践和 PPT 展示相结合的考核方式。笔试环节在课堂讲授和书本知识的基础上,增加运用计算化学知识和技能解决实际问题的部分,如针对某一科学问题,由学生写出如何设计计算方案、选择计算方法、分析计算结果的思路,全面考核学生的素质与能力。在实践环节,在培训期间所讲授内容的基础上,由培训教师分别提出实践题目,具体包括:

题目 1: 采用 M06-2X/6-31+G(d)方法计算 F-CH₃、F-CH₂F、F-CHF₂、F-CF₃ 这四个化合物中的 C-F 键键能,阐述其变化趋势并分析可能的原因。

题目 2: 采用培训课上所述构建晶体及切割晶面的方式,在 Materials Studio 中构建 Cu 晶体并切割获得 Cu(111)、Cu(100)、Cu(110)三种常见的低指数晶面,并转化为 POSCAR 文件。要求:超胞为(3x3)-4layer-1.5 nm, 2 层弛豫。

题目 3: (a) 用 B3LYP/6-31G(d)方法计算乙醇脱水生成乙烯反应的正、逆向反应活化能,并画出势能剖面图。(b) 用 B3LYP/6-31G(d)优化苯分子结构并画出其 HOMO、LUMO 轨道图。(c) 用

PBE1PBE/6-31G(d)方法计算联苯分子的 UV-Vis 光谱。(d) 用 B3LYP/6-31G(d)方法计算下图中分子的红外、拉曼、VCD 光谱。



题目 4: 构建如图 1 所示的杯[4]吡咯分子, 画出其四种构象的 3D 结构。

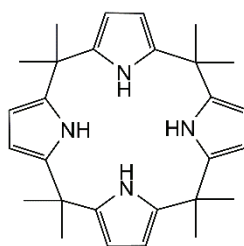


图 1 杯[4]吡咯分子结构示意图

这些题目的内容涉及有机化学、无机化学、物理化学、超分子化学等南开大学化学学院优势学科方向。学生根据自己的知识积累和兴趣爱好自由选择题目。选择题目后在 1 个月时间内自行完成以下内容: (1) 查阅相关文献资料; (2) 利用文献报道的类似结构或者采用计算化学软件构造的体系创建初始构型; (3) 编写和提交输入文件; (4) 使用指定的计算方法和相应程序进行上机计算; (5) 对计算结果进行分析和整理以提取有用的信息; (6) 根据计算结果对初始构型和计算参数等进行修订, 并最终完成科学小论文。在 PPT 展示环节, 让学生根据搜集的资料、上机实践的结果和撰写的科学小论文, 以类似于答辩的方式集中通过 PPT 形式进行展示, 并组织全体学生进行讨论和辩论, 鼓励学生自由发表意见, 对有见地的学生发言给予充分肯定, 形成师生互动和生生互动, 从而鼓励创新思维, 提高教学效果。同时, 由主讲人组成的评委在学生讨论、辩论的基础上对学生的 PPT 内容和展示的过程加以点评, 并从题目完成的完整度、内容结构编排的合理性、专业用语的恰当使用、PPT 格式的美观性以及选手的仪态举止、表达能力、思维框架和展示效果等多个方面进行综合给分。

6 实施效果

本次计算化学知识技能大赛以培训加比赛的形式, 联系当前热门计算问题, 旨在培养学生运用计算机解决化学实验问题的能力, 向学生提供了解计算化学的机会。让大家在学习知识、提升能力的同时形成自己的科研认知。通过宣传, 引起广泛师生的积极响应, 共有 105 名学生参与竞赛, 学历覆盖本、硕、博三个层次, 其中本科生参与度 50%, 硕士生参与度 40%, 博士生参与度 10%。评委老师层层把关, 经过严格的考核评比, 通过综合培训、笔试、上机操作和 PPT 展示四个环节的成绩, 最终评选出大赛的前三名给予一定的荣誉, 并对所有参赛者的积极参与进行了表彰。经总结发现, 参赛选手比较热衷于选做题目 1 和 3, 其他题目的选做率较低。究其原因, 一方面, 以竞赛的方式去了解学习新软件新方法可能时间不是很充分, 比赛虽历时一个半月, 但每个环节都有相应的任务, 参赛者在课余时间能够全程参与并按时完成已是很大的考验, 想要熟练掌握并明白运算原理还须另外多下功夫; 另一方面, 题目 2 所用软件需要硬件支持, 对计算机的性能要求比较高, 题目 4 所设计的培训内容广而杂, 需学生在短时间内熟练运用各类软件去搭建模型也有一定难度, 需要多问多学, 题目设置方面也须再做相应的调整。今后再举办类似的竞赛或活动, 可在以下几个方面做出

改进：① 注重参赛者的意见反馈，与参赛者及时沟通，了解参赛者的疑点难点并给以相应的指导意见；② 中间环节可以增设一次讨论课，尽量让参赛者多发言，了解他们的学习诉求，对培训内容及时做出调整；③ 课时分配上适当增加实践课的比重，对操作方面存在的问题及时做出指导；④ 在本校已有经验的基础之上可以联合当地其他高校甚至外省市的学校单位一起开展相应的活动，希望能够达到像实验技能大赛那样的高校联盟规模，将理论计算化学传播开来。

参 考 文 献

- [1] 李中华, 陈刚. 大学化学, **2008**, 23 (1), 11.
- [2] 李中华, 陈刚, 刘佳雯. 大学化学, **2009**, 24 (3), 5.
- [3] 张琳森. 化学教育, **1984**, 5 (1), 45.
- [4] 王溢磊. 大学化学, **2014**, 29 (5), 66.
- [5] 袁汝明, 傅钢, 韩国彬. 大学化学, **2011**, 26 (3), 47.
- [6] 许秀芳. 大学化学, **2016**, 31 (12), 53.
- [7] 许秀芳. 大学化学, **2017**, 32 (2), 23.