

•教育专题•

doi: 10.3866/PKU.DXHX201905027

www.dxhx.pku.edu.cn

拔尖计划特色课分子模拟实验中的思政案例设计

张恒, 刘刚, 马莹, 宋其圣, 印志磊*, 苑世领*

山东大学化学与化工学院, 济南 250199

摘要: 为充分发挥课程育人功能, 全面提升化学专业拔尖学生的家国情怀、社会责任、科学素养以及创新意识和综合能力, 我们对分子模拟实验课程中的思政元素进行了广泛挖掘, 本文主要对课程思政的设计理念和具体案例进行了介绍。

关键词: 课程思政; 分子模拟; 计算化学; 拔尖计划

中图分类号: G64; O6

Cases Design for Course Ideology and Politics Education in a “Top-Notch Plan” Special Course: Molecular Simulation Experiment

ZHANG Heng, LIU Gang, MA Ying, SONG Qisheng, YIN Zhilei *, YUAN Shiling *

School of Chemistry and Chemical Engineering, Shandong University, Jinan 250199, P. R. China.

Abstract: In order to give full play to the curriculum education function and comprehensively improve the home country feelings, social responsibility, scientific literacy, innovation consciousness and comprehensive ability of “Top-notch Plan” students in chemistry, we have extensively explored the elements of ideological and political training in the molecular simulation experiment course. The design concept and specific case of the course ideological and politics are introduced.

Key Words: Course ideology and politics; Molecular simulation; Computational chemistry; Top-notch plan

1 引言

山东大学为实施拔尖学生培养试验计划, 于 2010 年初筹建了泰山学堂, 设立了数学、物理、化学、生物、计算机五个专业取向。泰山学堂综合利用国内外优质教育资源, 借鉴世界一流大学的经验, 汲取齐鲁文化精华, 重点在培养模式、教学方法、学生遴选、制度创新等方面进行大胆的探索和实践^[1,2]。

化学作为一门理论研究、实验研究和计算模拟相结合的基础学科, 化学专业拔尖学生本科教学根植于深厚的数理基础之上, 更加重视专业基础、特色专业课教学。分子模拟领域近 20 年来已经两次获得诺贝尔奖, 1998 年的诺贝尔化学奖授予了美国的 Walter Kohn 和 John A. Pople 教授, 以表彰他们在发展量子化学计算方法与电子密度泛函理论方面的开创性贡献; 2013 年的诺贝尔化学奖则授予了美国的 M. Karplus、M. Levitt 和 A. Warshel, 表彰他们在发展多尺度模型以研究复杂化学体系上的贡献。掌握一定的分子模拟理论知识和分子模拟实验技能对化学专业拔尖学生而言十分必要。

收稿: 2019-05-08; 录用: 2019-06-03; 网络发表: 2019-06-06

*通讯作者, Email: shilingyuan@sdu.edu.cn; cherryyin@sdu.edu.cn

基金资助: 山东大学教育教学改革研究项目(2019Y069); 山东省研究生教育质量提升计划(SDYKC18003); “基础学科拔尖学生培养计划”研究课题(20180212); 山东大学研究生教育教学优秀成果培育计划项目

我们于 2015 年开始向本科生开设分子模拟实验课程,首先面向拔尖计划的学生开设,目前已经开设了五个学期,课程建设相关经验我们已在“分子模拟实验课程建设的探索与实践”一文中进行了介绍^[3]。在实验教学中,我们不仅传授分子模拟相关的基本概念、基本理论、基本知识和综合应用,还训练学生自主学习的方法,教授学生化学学习和研究的思维方式和思想路线,更教授学生如何做事如何做人,充分地发挥课程育人功能,全面提升拔尖学生的家国情怀、社会责任、科学素养以及创新意识和综合能力,努力将课程打造成承载“立德树人”使命的“金课”。本文我们将重点对课程中的几个思政案例的设计理念与实施过程进行分享。

2 设计理念

2017 年上海高校深入贯彻落实全国高校思想政治工作会议精神,开始全面推进“课程思政”教育教学改革,构建了以思政理论课为核心、以综合素养课为支撑、以专业教育课程为辐射的“三位一体”思想政治教育课程体系^[4]。2018 年山东大学深入贯彻《高校思想政治工作质量提升工程实施纲要》的精神,开始大力推动以“课程思政”为目标的课堂教学改革,优化课程设置、修订专业教材、完善教学设计、加强教学管理,梳理各门专业课程所蕴含的思想政治教育元素和所承载的思想政治教育功能,融入课堂教学各环节,实现思想政治教育与知识体系教育的有机统一^[5]。分子模拟实验课程的思政案例设计即是在这样的背景下展开的。在案例设计过程中我们重点聚焦在两个方面:引导价值追求——引人以大道,培育科学精神——启人以大智。通过广泛和深入挖掘思政案例,将思政元素与专业教学有机融合在一起。

3 具体案例

案例 1: 共和国的脊梁, 中国量子化学之父——“绪论”教学中的思政设计

教学目标:

【知识学习】

为了让学生能够全面认识和了解分子模拟这一领域,并把握学科将来的发展趋势和研究动态,须在知识层面达到以下要求:

- 1) 掌握分子模拟的基本概念。
- 2) 了解分子模拟的发展历史、标志性事件及成果。
- 3) 了解目前分子模拟的应用现状及在化学研究中的作用。
- 4) 了解分子模拟的未来发展趋势。

【能力培养】

作为一个非常活跃和快速发展的领域,各种分子模拟方法和技术层出不穷,这要求学生拥有独立自主学习和终身学习新知识的能力:

- 1) 培养自主学习计算化学相关知识的能力。
- 2) 养成终身学习的理念。

【素质培养】

从科学研究或生产生活中抽提出可计算的问题,是用分子模拟方法开展研究的关键:

- 1) 科学素养: 培养计算化学思维,能够将科学问题转化为计算问题。
- 2) 人文素养: 通过我国化学家在分子领域的贡献,培养学生正确的人生价值观、家国情怀和责任意识。

教学素材:

唐敖庆先生是我国理论化学学科的奠基人,同时也是我国科学基金事业的创始人和高等教育事业的领军人物之一。早在抗战时期,在北京大学和西南联合大学,唐敖庆就以理论功底深厚、思辨能力强而著称。1946 年,经过推荐和选拔,同朱光亚、李政道等人一起去美国留学。在哥伦比亚大学

学习期间，凭借在西南联大时期打下的数理基础，唐敖庆以顽强的毅力同时修了化学和数学两个系的课程，这也为他以后从事理论化学研究打下了坚实的基础。1949年11月获得博士学位后，他的导师 Halford 教授十分器重他，曾极力挽留：“贵国目前相当落后，你回到那里，继续从事你的科学研究是相当困难的。是不是在美国工作两年，看看再说。”，唐敖庆激动地说：“教授先生，我知道我的祖国现在是满目疮痍，正百废待兴。但一个爱国者是不会嫌他的祖国贫困的，改变祖国贫困落后的面貌，是每个爱国者义不容辞的责任。我的事业在自己的祖国，我的祖国就是中华人民共和国。”

突破重重阻力后，唐敖庆于1950年初回到了祖国，回国前夕唐敖庆给同在美国的一位同窗写信，说自己要回国了，虽然美国各方面条件更好，但是在美国呆的越久对祖国的贡献就越少。40年后唐敖庆回忆起这件往事的时候，两人均已是世界著名科学家了，但是除了对科学的贡献，唐敖庆先生对国家的科学发展和人才培养的贡献显然更大。

回国后，唐敖庆随即投入了科学研究和人才培养工作中，不仅亲自教诲了包括北京大学、吉林大学等校的几十届研究生和本科生，还与卢嘉锡、吴征恺、徐光宪先生等共同举办了具有全国性影响的1953年青岛“物质结构进修班”、1954年北京培训班；其后，1963年在长春又举办了“物质结构学术讨论班”。他谆谆善诱，显著提高了中国化学家队伍的理论水平，为我国化学学科培养了一大批深谙理论的栋梁之材，如孙家钟、江元生、张乾二、邓从豪、刘若庄、沈家骢等院士，以及著名的理论化学家和教育家鄢国森、戴树珊等^[6]。

思政目标：

本素材主要介绍我国理论化学学科奠基人唐敖庆先生突破重重阻扰，回归报效祖国的案例。将唐敖庆先生的案例作为思政元素点与本讲专业知识点融合，将我国理论计算化学的过去与当下相融合，更易让学生有认同感和归属感。在让学生掌握专业知识的同时，培养学生正确的人生价值观、家国情怀和责任意识。

案例2：三位诺贝尔化学奖得主的科研之路——“基本理论及方法”教学中的思政设计

教学目标：

【知识学习】

使学生了解不同理论方法的内涵：

- 1) 了解量子化学方法的原理及基本概念，包括 Hartree-Fock 方程、电子相关模型、密度泛函理论、基组等。
- 2) 了解分子力学方法的基本原理及概念，包括分子力场、模拟流程、系综、边界条件等。

【能力培养】

培养学生能够基于计算化学背景知识对专业问题开展可行性研究，进而综合评判和自主规划的能力。

- 1) 能够正确评价两种计算方法的优势和局限。
- 2) 针对不同的化学问题，能够选择合适的理论方法进行研究。

【素质培养】

- 1) 科学素养：养成从微观角度看待化学问题的思维方式。
- 2) 人文素养：通过三位诺贝尔化学奖得主的科研之路，引导学生树立团队协作意识，重视合作与交流。

教学素材：

2013年诺贝尔化学奖授予了美国科学家 M. Karplus、M. Levitt 和 A. Warshel，表彰他们在“发展多尺度模型以研究复杂化学体系”上的贡献。

Karplus 是分子模拟领域的先驱者及奠基人之一，曾师从著名化学家 L. C. Pauling。20世纪70年代末，Karplus 等人利用自己编写的程序，首次实现了牛胰蛋白酶抑制蛋白的分子动力学模拟。随后

通过一系列原创性研究进一步发展和完善了分子模拟的算法，并开发了广为使用的分子动力学模拟软件 CHARMM 和适合生物分子的 CHARMM 力场。

Levitt 最早接触分子模拟是在 1967 年，他曾在以色列韦兹曼科学研究所工作一年，并在这里遇到了 Warshel，在其指导下开始编写分子模拟程序。不到一个月，他们即成功编制了可用于蛋白质分子模拟的 CFF 程序，并完善了所使用的力场。

1969 年 Warshel 博士毕业后到 Karplus 课题组进行博士后研究。他们的合作从此揭开了分子动力学模拟发展最重要的一幕。Warshel 一直从事原子间相互作用势的经典力学研究，Karplus 则一直从事量子化学方面的研究。Warshel 加入 Karplus 课题组时，带来了分子模拟程序 CFF，他们以 CFF 程序为起点，开始发展各种可用于计算电子相关性质的新方法程序。此方法的原理是利用量子力学方法去处理那些对分子性质至关重要的自由电子，而对于其他的固定电子和原子核则采用经典的势函数进行描述。他们通力合作取长补短，很快发现这一策略获得的计算结果与实验非常吻合，这是世界上首次联合使用量子力学和分子力学方法对小分子化学性质进行的研究。这一开拓性的研究已经具有 QM/MM 方法的雏形。

结束博士后研究之后，Warshel 回到了韦兹曼科学研究所，Levitt 和 Warshel 再次合作，此次他们致力于发展可研究化学反应的通用方法，以期解决在生命体中起重要作用的酶催化化学反应。此时的 Warshel 通过在 Karplus 课题组的训练，已经具有了量子力学方面的基础，因此他们的合作渐渐有了很好的结果。为了能够模拟酶催化反应，他们必须使用 QM/MM 方法。可是量子力学和分子力学毕竟分属于不同的理论，在计算方法及计算精度等方面存在显著差别，因此他们经过几年的艰苦努力，克服了 QM/MM 的各种问题(诸如分子力学和量子力学的界面问题、QM 和 MM 这两种方法的能量耦合问题等)，终于在 1976 年完成了关于酶化学反应的首个 QM/MM 计算模型。此时他们方法的普适性已经非常好，可用于任何分子体系的化学反应，而且不受计算体系大小的限制^[7,8]。

思政目标：

本素材主要介绍了 2013 年诺贝尔化学奖三位得主的科研经历，旨在引导学生除了向书本和老师学习之外，还要重视向同伴学习，重视合作与交流。来自不同背景的人往往知识结构和专业兴趣差异很大，这种多元的碰撞往往能带来意外的收获。在帮助学生理解记忆专业内容的同时，进一步加强思政教育，培养学生团队协作和合作交流意识。

案例 3：孜孜不倦推出“邓势”函数——“双原子分子的解离”教学中的思政设计

教学目标：

【知识学习】

- 1) 掌握双原子分子势能曲线的解析形式。
- 2) 理解双原子分子势函数的物理意义。

【能力培养】

- 1) 熟悉一般的分子模拟软件的计算流程及常用数据处理软件的使用。
- 2) 能够采用计算化学方法构建双原子分子的势能曲线。

【素质培养】

1) 科学素养：了解双原子分子势函数的概念、形式及物理意义，能够从实验数据选择合适的势函数形式拟合出双原子分子势能曲线。

2) 人文素养：从专业前辈或大师的案例中，体会求实创新严谨的科学态度，树立正确的人生观价值、家国情怀，以及自觉承担国家科技发展的责任意识。

教学素材：

在分子光谱与分子反应动力学研究中必须使用势函数。而 Morse 函数是最常用的势函数之一，它最大的优点是具有简单的解析表达式，而且在用于求解振动方程时可得到振动的本征函数。作为双原子分子的势函数，当核间距趋于无穷或趋于平衡态，Morse 函数与光谱数据相符；但核间距趋

于零时, Morse 函数不是趋于无穷而是趋于一个有限值。这种错误的边界条件限制了光谱计算的精度。邓从豪院士是我国最早在分子反应动力学领域开展研究的科学家之一。20 世纪 50 年代, 邓从豪等经过反复研究提出了可从薛定谔方程严格求解的势函数(文献中称其为“邓势”), 该势函数与 Morse 函数一样, 只包含两个参数, 简单易算, 并有以下优点: 当 $r \rightarrow 0$ 时, 势函数与实验结果一致, 趋于 ∞ ; 当它代入薛定谔振动方程时能严格精确求解, 谱项公式与实验结果完全一致。邓从豪也指出了它的不足之处: 从光谱常数来推算分子解离能与实验数据有差距。他意识到函数中应加入一项微扰项校正。

60 年代, 邓从豪参加唐敖庆主持的“物质结构学术讨论班”研究配位场理论。他提出连续群-点群的偶合系数, 主笔撰写了第一篇论文《配位场理论的研究 I 正八面体场中 d^n 组态的理论分析》, 作为研究集体的主要成员, 合作发表了配位场理论研究的系列文章。从这时候开始, 邓从豪养成了早起推导公式的习惯。一次开会, 鄢国森与邓从豪同住一个房间。早上天蒙蒙亮, 鄢国森就看见邓从豪坐在窗前的桌子边。起床后鄢国森问邓从豪在做什么, 他回答说: “这是我的晨练功课。常言说拳不离手, 曲不离口, 戏剧演员早起要吊嗓子、练压腿, 钢琴家一天不练琴, 自己知道, 三天不练琴, 观众都听得出来。我们搞科研、做理论研究就要练推公式。每天早起我就把最近科研课题里的公式推导一遍。早上精神最好的时候, 有时能发现公式推导的其他途径。要是最近没有什么课题公式推导, 我就推导数学公式。”

思政目标:

本素材主要介绍了我校理论计算化学前辈邓从豪院士推导出“邓势”函数的故事, 以此故事引出双原子分子势能函数的形式及物理意义。不但能让学生体会前辈科学家求实创新严谨的科学态度, 尤其是能让学生了解中国科学家在分子模拟发展中做出的贡献, 既可以提高学习分子模拟的兴趣, 还有助于培养学生的科学素养和家国情怀。

案例 4: 中国的页岩气革命——“固体表面吸附行为的模拟”教学中的思政设计

教学目标:

【知识学习】

- 1) 掌握构建二氧化硅纳米孔的建模方法。
- 2) 了解 Monte Carlo 方法的基本原理。

【能力培养】

- 1) 能够熟练进行简单的 Monte Carlo 模拟。
- 2) 能够分析比较不同物质在固体表面的吸附行为。

【素质培养】

1) 科学素养: 以二氧化碳提高页岩气采收率为背景, 通过 Monte Carlo 模拟, 能够理解材料的微观结构与宏观吸附行为之间的联系。

2) 人文素养: 以中国的页岩气革命为引子, 立足国情, 培养学生居安思危、立志报国的精神, 同时增强学生的专业自豪感和责任意识。

教学素材:

页岩气作为新兴的非常规天然气资源, 正在改变着世界能源结构与政治格局。美国是世界上最早研究、开发页岩气的国家, 从 1821 年第一口页岩气井开钻, 经过 20 世纪 70 年代的页岩气勘探开发, 以及 90 年代政策、价格及技术的推动, 使其在 21 世纪初成功地从石油天然气进口国转变为出口国。美国页岩气的成功开发, 极大地提升了页岩气的商业价值, 页岩气自然也成为了全球的能源热点, 德国、巴西、澳大利亚、中国等 30 多个国家纷纷积极开展页岩气技术研究和开发, 在全球范围内掀起了“页岩气革命”。

我国页岩气资源储量非常丰富, 美国 EIA 的调查数据表明, 中国页岩气资源以 31.6 万亿立方米的技术可采量居世界第一。主要分布于四川盆地、塔里木盆地、准噶尔盆地、松辽盆地以及扬子地

区。经过近 20 年的技术、政策、配套及相关产业的发展,我国的页岩气工业化开发初具规模,取得了阶段性成果,但在开发中还面临着一系列的挑战:例如对于页岩气形成与富集机理尚不清楚,页岩气资源不确定性较大;优质页岩气储层精细地震识别与预测精度不够高;高效开发理论与产能评价处于起步阶段;低压、低产井增产重复压裂技术需要攻关等。

我国作为页岩气资源大国,加快发展页岩气,通过技术手段解决页岩气开采中的诸多问题,对改变我国油气资源格局,甚至改变整个能源结构、缓解我国油气资源短缺、保障国家能源安全、促进经济社会发展,都有十分重要的意义,通过研究解释和解决这些难题也是时代赋予化学人的任务和使命。

思政目标:

能源一直是世界各国的战略聚焦点,页岩气作为新兴的非常规天然气,正在改变世界能源结构与政治格局。我国目前已探明的页岩气储量位居世界第一,但是在开采过程中面临着诸多挑战,这还需要化学等相关专业的研究人员进行深入的研究。本实验内容紧紧围绕该主题,通过模拟计算,研究二氧化碳提高页岩气采收率的微观机制,帮助学生理解材料的微观结构与宏观吸附行为之间的联系。该例子既能培养学生居安思危、立志报国的精神,又能增强学生的专业自豪感和责任意识。

4 教学方法

思政素材主要以讲授和讨论为主要教学形式,整个教学过程分为三大部分,依次开展:问题引出与案例导入、师生互动与头脑风暴、分组展示与课堂总结。以案例一为例进行说明,课堂伊始,通过唐敖庆先生的案例,引出知识点,并引导学生学习其优秀品质;然后,师生互动,教师向学生提问,例如大家已知的其他优秀人物、事件或热点等,学生则开展头脑风暴并及时思考和回答,活跃课堂气氛,从而通过这些问题让学生思索自己将来作为一名科技工作者、一个社会人等多重身份,究竟应该具备怎样的品质并该如何达成;接下来,随着知识点的讲授,设计论题,让学生就近分成小组讨论,并展示讨论成果,教师则依据小组的讨论情况并结合专业内容进行总结,从而促使学生加深理解,认识到所学专业的重要性,激发其专业归属感和自信。

5 结语

以上是我们在分子模拟实验教学过程中实施的几个课程思政案例,在实际教学中仍有更多的思政元素和案例值得广泛挖掘。课程思政作为一种新的课程观对教师提出了新的要求,需要不断更新教育理念、掌握现代教学方法、提升育德能力,做到在发挥专业课程本身特色的前提下,将知识传授与价值引领有机融合。

参 考 文 献

- [1] 马莹,张恒,苑世领,胡清萍,宋其圣. 高等理科教育, **2019**, 144 (2), 88.
- [2] 刘刚,张恒,马莹,苑世领,宋其圣. 大学化学, doi: 10.3866/PKU.DXHX201904034.
- [3] 张恒,马莹,刘刚,张冬菊,宋其圣,苑世领. 大学化学, doi: 10.3866/PKU.DXHX201901035.
- [4] 解从霞,李光九,耿延玲,王小燕. 大学化学, doi: 10.3866/PKU.DXHX201812014.
- [5] 展鹏,蒋小飞,王艺铭,兰共德,刘新泳. 大学化学, doi: 10.3866/PKU.DXHX201904016.
- [6] 林梦海. 高山仰止——唐敖庆和他的弟子们. 厦门: 厦门大学出版, 2015.
- [7] 王进安,邵强,朱维良. 科学, **2014**, No. 1, 11.
- [8] 高毅勤. 大学化学, **2014**, 29 (2), 1.