

•专题•

doi: 10.3866/PKU.DXHX202212034

www.dxhx.pku.edu.cn

《分子模拟》教材建设的探索与实践

张恒, 贾春江, 宋其圣, 苑世领*

山东大学化学与化工学院, 济南 250199

摘要: 教材建设是课程建设的重要一环, 本文重点对山东大学分子模拟实验国家一流课程的教材建设情况进行了介绍。从历史与传承、发展与创新、总结与展望三个方面对山东大学化学学科的教材编写历史、国内外分子模拟相关教材的建设情况、《分子模拟》教材的主要内容和特色之处, 以及下一步的修订计划进行了详细介绍, 以期对相关教材的编写与修订提供启发与借鉴。

关键词: 计算化学; 分子模拟; 教材

中图分类号: G64; O6

Exploration and Practice of Textbook Construction of *Molecular Simulation*

Heng Zhang, Chunjiang Jia, Qisheng Song, Shiling Yuan *

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

Abstract: The construction of textbooks is an important part of the curriculum construction. This paper focuses on the construction of textbooks of the national first-class curriculum of molecular simulation experiment at Shandong University. From the aspects of history and inheritance, development and innovation, summary and prospect, this paper introduces the history of the compilation of chemistry textbooks at Shandong University, the construction of molecular simulation related textbooks at home and abroad, the main contents and features of the *Molecular Simulation* textbook, and the next revision plan in detail. We hope this will provide inspiration and reference for the writing and revision of relevant textbooks.

Key Words: Computational chemistry; Molecular simulation; Textbook

教材作为知识的载体, 是教育活动中不可或缺工具^[1]。一本优秀的教材对于引领学生进入一门学科领域, 奠定学科基础, 并养成良好的学科思维方式、培养创新能力乃至世界观的形成等都起着至关重要的作用^[2]。历史上我国教材的发展大致经历了三个阶段: 新中国成立至文革前以翻译前苏联教材为主, 文革后至80年代末为国家统编教材阶段, 后随着高校扩招教材编写呈现百花齐放的状态^[3]。十四五时期我国高度重视教材编写工作, 山东大学为贯彻党中央、国务院《关于加强和改进新形势下大中小学教材建设的意见》、教育部《普通高等学校教材管理办法》和国家教材委员会《习近平新时代中国特色社会主义思想进课程教材指南》等精神, 并落实全国教材工作会议暨首届全国教材建设奖表彰会议要求, 印发了《山东大学教材建设“十四五”规划》, 山东大学化学学科也开

收稿: 2022-12-11; 录用: 2023-01-28; 网络发表: 2023-02-06

*通讯作者, Email: shilingyuan@sdu.edu.cn

基金资助: 山东省本科教学改革研究项目(M2021336, Z2021039); 山东大学教育教学改革研究项目(2022Y073, 2021S09, 2021Y232, 2019P02); 山东大学实验室建设与管理研究项目(sy20221201); 山东省研究生教育优质课程建设项目(SDYKC21014); 山东大学高质量教材出版项目; 山东大学分子模拟虚拟教研室建设项目

启了新一轮的教材修订和编写工作,本文以山东大学《分子模拟(第二版)》教材^[4]的编写为例,对其建设经验进行介绍,以期今后相关教材建设提供启发和借鉴。

1 历史与传承

1.1 山东大学化学学科教材建设情况

山东大学化学学科最早起源于1926年的省立山东大学应用化学系,历史上历来重视本科教学与人才培养工作,曾先后编著了多部在国内有重要影响和地位的教材(表1)。如尹敬执、申泮文先生等编著的《无机化学简明教程》^[5]《基础无机化学》^[6],印永嘉先生编著的《物理化学简明教程》^[7]等。新世纪之后也涌现了一批经典教材,包括山东大学牵头山东省高校共同编写的系列《基础化学实验》立体化实验教材^[8-10],宋其圣主编的《无机化学》^[11],郝爱友主编的《精编有机化学教程》^[12],郭用猷主编的《物质结构基本原理》^[13],苑世领主编的《分子模拟》^[4,14]等,形成了理论与实验全覆盖、突出简明特色的系列化教材体系,奠定了山东大学在人才培养上的地位和影响。

表1 山东大学编著出版的部分化学基础理论课及实验课教材

教材名称	出版时间	主编	出版社
《无机化学简明教程》	1965年	尹敬执、申泮文	高等教育出版社
《物理化学简明教程》	1965年第一版 1985年第二版 1992年第三版 2007年第四版	印永嘉、奚正楷、张树永等	高等教育出版社
《基础无机化学》	1980年	尹敬执、申泮文	人民教育出版社
《物理化学与胶体化学实验》	1981年第一版 1990年第二版	陈宗淇等	高等教育出版社
《物质结构基本原理》	1984年第一版 2011年第二版 2015年第三版	郭用猷、张冬菊、刘艳华	高等教育出版社
《精编有机化学教程》	2003年第一版 2009年第二版	郝爱友等	山东大学出版社
《基础化学实验I-无机及分析化学实验》	2003年第一版 2007年第二版	崔学桂、张晓丽、胡清萍	化学工业出版社
《基础化学实验II-有机化学实验》	2004年第一版 2007年第二版	李吉海、刘金庭	化学工业出版社
《基础化学实验III-物理化学实验》	2004年第一版 2009年第二版 2020年第三版	顾月姝、宋淑娥	化学工业出版社
《仪器分析实验》	2006年	张晓丽、江崇球、吴波	化学工业出版社
《综合化学实验》	2006年	张树永、贝逸翎、王洪鉴	化学工业出版社
《无机化学》	2008年	宋其圣等	化学工业出版社
《分子模拟》	2016年第一版 2022年第二版	苑世领、张恒、张冬菊	化学工业出版社

1.2 国内外分子模拟相关教材与著作

分子模拟与理论研究和实验研究共同构成了现代化学研究的基本范式,并随着计算机技术的发

展日益得到普及。广义上分子模拟根据其研究对象和手段的不同可分为量子力学模拟(也称量子化学计算,采用量子力学方法对电子结构进行计算)和分子力学模拟(采用牛顿力学对原子核的运动进行计算),诺贝尔化学奖曾先后于1998年和2013年光顾这一领域。目前国内外也有不少教材和专著对其进行介绍,既有综合类教材,亦有专门针对量子化学计算或分子力学计算的教材。但总体上分子模拟作为一个新兴和飞速发展的领域,与其他化学学科相比其教材数量总体偏少。国内教材多以翻译或借鉴国外教材为主,表2列举了国内外部分有一定影响的教材。

表2 国内外出版的分子模拟相关的教材

出版时间	教材名称	编者	出版社	内容特色
1987年 第一版 2017年 第二版	<i>Computer Simulation of Liquids</i>	M. P. Allen and D. J. Tildesley	Oxford University Press	分子模拟领域的第一本专著,对于分子模拟的基本原理和概念有很好的论述,同时配有较多程序示例,对于理解分子动力学算法较有帮助
1996年 第一版 2001年 第二版	<i>Understanding Molecular Simulation</i>	Daan Frenkel and Berend Smit	Elsevier	对分子动力学和蒙特卡洛方法进行了深入介绍,对其实现提供了详细代码,另有汪文川翻译的中文版
1997年 第一版 2001年 第二版	<i>Molecular Modeling-Principles and Application</i>	A. R. Leach	Prentice Hall	分子模拟领域的入门教材,内容全面深入
1998年 第一版 2007年 第二版 2017年 第三版	<i>Introduction to Computational Chemistry</i>	Frank Jensen	John Wiley & Sons	综合类教材,选材较广,偏重量子化学计算,分子力学方法亦有涉及。除理论外,对实际计算中的问题亦有讨论
2002年 第一版 2004年 第二版	<i>Essentials of Computational Chemistry</i>	Christopher J. Cramer	John Wiley & Sons	综合类教材,涉及面较广,亦以量子化学计算为主
2002年 第一版 2010年 第二版	<i>Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide</i>	Tamar Schlick	Springer	对分子模拟在生物体系中的应用进行了详细介绍
2004年 第二版	<i>The Art of Molecular Dynamics Simulation</i>	D. C. Rapaport	Cambridge University Press	针对分子模拟涉及到的技术问题均给出了详细的程序代码,适合作为自编程序参考书

(待续)

(续表2)

出版时间	教材名称	编者	出版社	内容特色
2011年	<i>Introduction to Practice of Molecular Simulation-Molecular Dynamics, Monte Carlo, Brownian Dynamics, Lattice Boltzmann and Dissipative Particle Dynamics</i>	Akira Satoh	Elsevier	有较丰富的程序代码, 适合作为自编程序参考书
2013年 第七版	<i>Quantum Chemistry</i>	Ira N. Levine	Prentice Hall	对量子化学计算相关的理论知识进行了详细深入地介绍
2004年	分子模拟-从算法到应用	汪文川	化学工业出版社	译自 <i>Understanding Molecular Simulation</i>
2007年	分子模拟的理论与实践	陈正隆	化学工业出版社	专著类, 对分子力学方法进行了介绍
2008年	计算化学实验	胡红智、马思渝	北京师范大学出版社	精编了10个量子化学计算实验
2009年	计算化学-从理论化学到分子模拟	陈敏伯	科学出版社	对分子力学方法和相关性质的计算进行了介绍, 需要有较强的数理基础
2010年	分子模拟实验	王宝山、侯华	高等教育出版社	实验为主的教材, 也包含理论介绍, 偏重量子化学计算实验
2010年	软物质的计算机模拟与理论方法	杨小震等	化学工业出版社	专著类, 对聚合物、表面活性剂等胶体化学领域模拟涉及到的理论方法进行了介绍
2016年	蛋白质模拟-原理、发展和应用	王存新等	科学出版社	专著类, 着重对蛋白质模拟相关的理论及应用进行了介绍
2016年 第一版	分子模拟	苑世领等	化学工业出版社	理论与实验并重, 偏重分子力学方法, 其中实验部分有非常详细的操作方法介绍
2022年 第二版				
2018年	高等物理化学实习讲义	刘迎春等	高等教育出版社	选取了12个包含量子化学计算和分子力学计算的计算实例

*部分纯理论性专著未包含

山东大学理论化学所由著名理论化学家、中国科学院院士邓从豪先生于1978年创建, 主要从事计算化学理论和分子模拟方法(包括量子力学和分子力学)的研究, 形成与积累了比较雄厚的科研力量。在教材建设方面曾先后编著了《物质结构基本原理》(郭用猷主编)^[13]和《量子化学》(刘成卜主编)^[15]两部具有重要影响的教材。理论化学所自2003年开始给研究生开设分子模拟课程, 冯大成、蔡政亨、步宇翔等老师曾先后讲授过该课程, 几位教师多年上课积累的课程讲义构成了《分子模拟》教材的雏形, 其中绪论中对分子模拟的总体介绍摘自江元生院士为编者苑世领修改的博士论文原文, 早年讲义的部分章节也得到了蔡政亨教授的逐字斟酌润色。2015年课程团队为了解决结构化学课程长期以来没有对应实验课的局面, 将分子模拟的授课对象进一步扩大到本科生^[16], 同时编写了与之相匹配的实验讲义, 秉承理论与实验相结合的授课模式。2015年首版讲义在研究生及泰山学堂拔尖班学生中进行了小规模试用, 随后进行了部分修订, 次年《分子模拟》教材第一版由化学工业出版社出版, 2022年结合学科发展和教学实践修订出版第二版。

2 发展与创新

2.1 编写理念

结构化学是化学专业的主干核心课程,其内容主要为应用量子力学原理求解微观粒子运动的方程,获得微观粒子的结构、运动规律及结构性质之间的关系。结构化学的学习也是培养学生突破表象、从本质上认识化学问题,并建立化学学科思维方式的最重要的组成部分,是由基础化学(无机、有机、物化、分析)向高等化学(理论化学)过渡的必由之路。但同时又由于结构化学课程涉及深奥的量子力学知识,理论性强、内容抽象,需要较深的物理和数学功底,且其研究对象是微观粒子的运动,与学生熟悉的经典力学有显著差别,其教与学均存在较大难度。基于结构化学课程的重要性、特点和教与学的难度,对于其的教学改革研究值得深入探讨。化学专业传统的课程建设大多提倡理论与实验相结合的方式,通过形象的实验来帮助抽象理论概念的理解,如化学专业四大理论课无机化学、有机化学、物理化学、分析化学等均有对应的实验课,而同样作为主干核心课程的结构化学却长期缺乏相对应的实验课程。

与之形成对比的是近年来分子模拟方法飞速发展,与实验研究相互配合,“理论、实验、模拟”逐渐成为了现代化学研究的基本模式,分子模拟作为分子尺度上的研究方法逐渐受到重视,逐渐成为研究人员必备的基本技能之一。计算化学和分子模拟与结构化学有着密切的联系,可作为化学基础理论教学在分子层面上的重要补充,开展分子模拟实验课程教学改革与创新,将化学发展前沿融入本科实验教学,既是培养化学拔尖创新人才的内在需求,也是完善现有实验教学体系的重要路径。武汉大学在国内曾率先开设了分子模拟实验课程作为结构化学对应的实验课,与四大化学实验一起形成完整的实验教学体系^[17]。参照其成功经验,山东大学于2015年起将分子模拟课程授课对象扩大至本科生,同时由物理化学教研室苑世领联合结构化学教研室张冬菊和化学实验教学中心张恒三位教师组成教材编写团队,由苑世领负责分子力学理论基础、张冬菊负责量子化学理论基础、张恒负责相应的实验编写,并共同承担教学任务。教材在分子模拟讲义的基础上新编了大量实验配合理论方法的讲解,课程也确定了实验为主理论为辅的分子模拟实验教学模式,把传统理论教学中反映分子结构的球棒模型通过计算机以更具形象和立体的方式展示,把理论教学中的反应机理、动力学过程,通过分子模拟软件进行可视化。通过这样的计算机实验帮助学生在抽象理论和形象实验之间架起一座桥梁,让每位学生都能亲自过桥体验,帮助学生理解结构化学理论,领略化学在分子层面上的魅力。

2.2 整体框架

全书采用理论与实验相结合的编写模式以满足教师教学及学生自学需求。内容包括理论基础、上机实验和附录三部分。其中理论基础部分对分子模拟的基本概念和原理进行了详细介绍,如表3,可作为教师和学生学习和参考用书;实验部分精编了12个典型的计算化学实验,如表4,提供了详尽的操作步骤可供学生上机实验使用,实验安排遵循由简单到复杂的原则,内容涵盖化学各二级学科,模拟方法涵盖量子化学方法和分子力学方法,研究的体系也从孤立小分子过渡到多聚体、聚合物、均相溶液、界面、生物膜,即结合了分子模拟相关的最新的科研进展,同时也融入了不少课程思政相关的案例;附录则主要对模拟软件和常见的数据处理方法进行了介绍,包括Materials Studio软件的基本操作、Origin软件中对常见计算化学数据的处理等。

2.3 教材特色

1) 与物理化学、结构化学、计算化学等课程紧密结合。化学专业的学生已经接触到了物理化学中的统计热力学、势能面、过渡态,以及结构化学和量子化学中的基本原理等知识。但是这些知识太过于抽象、理论性太强,学生很难深入理解。而《分子模拟》教材融合理论与实践,恰好能将这些基础知识形象化地展现出来,学生通过计算机实验,在抽象的理论和形象的实验结果之间架起一座桥梁。让每一位学生都能够亲自过桥体验,加深对所学知识的理解。

2) 与当前化学研究的前沿热点紧密相连。在教材内容的筛选上,我们即选择了经典的实验项目,加强基本知识、基本技能的训练,又纳入了化学研究的前沿热点,并且设计了综合性实验和开放实

验,更好地加强学生综合研究能力的培养。特别是引入了当前研究的热点如生物体系、机器学习、三次采油等内容,使学生在学的过程中充分体验分子模拟在科研中的应用。

表3 《分子模拟(第二版)》理论篇主要内容

理论基础	具体内容
1. 绪论	分子模拟基本概念、发展史、软件和资源、学习方法
2. 统计力学基础	统计力学基本原理、粒子动力学
3. 力场	势函数、简正模式、简单体系的分子力场、势能函数的具体形式、常见的力场、联合原子和约化处理、粗粒 力场、多体势、水分子力场、无机材料力场、极化力场、反应力场、力场的选择
4. 能量最小化	势能面、势函数的极小值、非导数求极值法、导数求极值法、一级导数求极值法、二级导数求极值法、方法 的选择和收敛性判据、过渡态结构与反应路径、溶剂化效应、应用实例
5. 模拟中的基本原理	短程相互作用的处理、长程相互作用的处理、模拟过程
6. Monte Carlo模拟	Monte Carlo模拟中的配分函数、Monte Carlo原理、基本Monte Carlo模拟、不同系综中的Monte Carlo模拟、应 用实例
7. 分子动力学模拟	积分运动等式、Verlet预测方法、Gear预测校正方法、分子体系中的积分方法、不同系综中的分子动力学、相 关函数、自由能、均力势、性质计算、应用实例
8. 介观模拟	耗散粒子动力学模拟、介观动力学模拟
9. 定量结构性质关系	定量构效关系、典型结构参数、数学方法、应用实例
10. 量子化学方法	Schrödinger方程、电子相关和后HF方法、密度泛函理论、基函数的选择、半经验分子轨道方法

表4 《分子模拟(第二版)》实践篇主要内容

实验项目	具体内容
1. 分子模型的创建与优化	分子模型的绘制、分子构型优化、复杂分子结构的创建
2. 分子性质的计算和分析	分子轨道、总电子密度、静电势、电荷分布、分子表面
3. 势能面的构建	键解离势能曲线、分子间的弱相互作用势能曲线 ^[18,19] 、分子的构象搜索、化学反应的势能面
4. 化学反应模拟	计算化学反应的自由能、优化搜索过渡态
5. 分子光谱计算	红外和拉曼光谱、紫外可见光谱、X射线衍射光谱
6. 均相体系的分子动力学模拟 ^[20]	单分子及团簇的模拟-丙氨酸二肽、均相体系-水
7. 多相体系的分子动力学模拟	气液界面、固液界面、固气界面
8. Monte Carlo模拟 ^[21]	表面吸附行为: 吸附等温线、吸附构型、吸附动力学
9. 粗粒化和介观模拟	生物膜的粗粒化模拟、表面活性剂的DPD(耗散粒子动力学)模拟、嵌段聚合物的介观模拟
10. 定量构效关系计算	缓蚀剂性质的预测
11. 复杂体系的分子动力学模拟	构型熵的计算、自由能的计算、外场下的分子动力学
12. 反应分子动力学	二氧化硅表面化学吸附的模拟

3) 深度融合课程思政元素。教材充分挖掘了分子模拟中蕴含的丰富育人元素,从课程内容特点和思想政治教育的核心找到二者的结合点,将家国情怀、民族意识、社会责任感、协作精神、科学素养和作风、安全环保意识等人生观价值观,融入教材各个章节,发挥教材育人功能^[22]。例如在“气体吸附行为的模拟”实验中,以我国的页岩气储量及开采现状作为实验背景,对二氧化碳驱替页岩气的微观机制进行模拟计算,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,既能培养学生居安思危、立志报国的精神,同时又能增强学生的专业自豪感和责任意识。在分子光谱的计算实验中,以贴近学生日常生活的防晒霜中的主要成分肉桂酸酯为例,设计实验计算其紫外可见光谱,

学生通过计算即可发现其在紫外光区有明显的吸收峰,自然也就明白其作为防晒剂的原理。在化学反应自由能的计算中,以思考题的形式让学生计算糖、脂肪、蛋白质三种物质的热量,并挑选一种喜爱的零食根据其配料表计算每百克零食的热量,进一步推算需要跑步多少公里才能消耗该热量,以这种形式将计算化学与实际生活中的问题联系起来,并指导生活实践,加深对所学知识的理解。在分子模型的创建一章中以我校晶体材料国家重点实验室生长的“国家的宝贝”KDP(磷酸二氢钾)晶体和我院王瑶教授被英国剑桥晶体结构数据库收录的第一百万个晶体结构为背景,介绍相关背景知识,同时让学生采用两种方法练习晶体结构的构建方法。既补充了相关背景知识,又锻炼了学生的文献检索能力,还能培养学生的爱校情怀。

4) 立体化资源丰富,持续更新。除纸质版教材外,对涉及到的计算分析脚本均以二维码的形式以电子文档呈现,便于读者复制运行。另外教材还有配套的课程网站^[23],除有完整的实验讲义和操作演示外,每年更新的实验内容均同步更新在课程网站上,提供多项选做和拓展实验,供学有余力的学生继续深入地探索;以及结合最新的研究热点甄选分子模拟相关的文献,特别是理论与实验相结合的研究,让学生领略分子模拟如何解决前沿化学问题,同时激发学生的科研兴趣;同时对于分子模拟相关的优秀网络资源进行介绍,包括相关的期刊、课题组、论坛等作为教材的补充,引导学生在课外对分子模拟做更深入的了解。

2.4 应用效果

《分子模拟》教材2016年首次出版,是该领域少有的面向化学专业本科阶段的理论与实验相结合的教材。教材第一版出版以来先后重印六次,销量逾万册,第二版自2022年9月出版以来也已重印两次,自2019年构建课程网站以来访问量超过11万人次,得到了国内众多同行的关注。教材曾荣获山东省高等教育优秀教材,分子模拟实验课程也荣获首批国家一流课程。根据电话或e-mail向主编询问课程建设情况来看,国内使用该教材的高校包括:南京大学、武汉大学、四川大学、北京大学深圳研究生院、中国石油大学等。另据化工出版社统计,购买教材的高校还有天津大学、中北大学、中国海洋大学、西北工业大学、南京工业大学等。

根据读者和学生反馈,普遍认为教材中的具体实验案例对于开展分子模拟相关的实践研究起到了较大帮助。另外从编者在2021年春季学期的分子模拟实验课程中开展的课前学情调查和课后学习情况调查来看,92.0%的选课学生是对分子模拟感兴趣期望学以致用,学习课程后90.9%的学生表示达到了学习预期,95.5%的学生表示对今后发展帮助较大。

3 总结与展望

《分子模拟》教材再版以来,我们根据收到的反馈建议和鼓励,结合教学实践仍在不断对实验内容进行优化,积累相关的课程思政素材,同时追踪分子模拟的最新发展并及时融入教学,以期在下一版本修订中融入这些变化。

同时我们也计划在下一版修订中对教材做进一步的丰富完善,具体包括:1) 在理论介绍部分对于分子模拟程序的具体实现通过代码的形式来呈现,一方面能够使读者对相关问题和处理方式理解更加深入,对于编写相关程序或算法能提供借鉴,另一方面也有助于培养学生的编程思维和能力;2) 在基础实验项目之外进一步增加综合型和前沿型分子模拟实验项目,使实验更加贴近实际科研,提升学生的学习兴趣;3) 另外,在教材编写过程中主要通过独立设课形式开展分子模拟实验教学,针对一些培养方案中没有相关课程或医学药学等化学相关专业不便单独设课的情形,我们也正在设计可以融入物理化学实验或有机化学实验的分子模拟实验,例如结合“氧弹式量热计测定燃烧热实验”我们设计了热力学量的计算实验,结合“表面张力的测定实验”我们设计了分子动力学方法计算丁醇的界面张力实验,结合Diels-Alder反应我们设计了DA反应速率常数的计算^[24]等等,这些实验可以作为基础化学实验的拓展实验融入其中,用以开阔学生的视野;4) 为进一步丰富教材的资源 and 形式,团队也计划启动MOOC视频的录制,以便学生突破时空局限,随时随地学习,或针对薄弱环

节反复学习等。

总之随着学科不断发展,分子模拟教材建设也将长期进行,在实践和发展中不断完善,满足学生学习需求。

参 考 文 献

- [1] 王莉,范勇,张丽荣,徐家宁,宋天佑.中国大学教学,2019, No. 2, 84.
- [2] 朱志昂,阮文娟,郭东升.化学教育,2021, 42 (18), 88.
- [3] 鲍浩波.化学教育,2015, 36 (24), 12.
- [4] 苑世领,张恒,张冬菊.分子模拟.第2版.北京:化学工业出版社,2022.
- [5] 尹敬执,申泮文.无机化学简明教程.北京:高等教育出版社,1965.
- [6] 申泮文,尹敬执.基础无机化学.北京:人民教育出版社,1980.
- [7] 印永嘉,奚正楷,张树永.物理化学简明教程.第4版.北京:高等教育出版社,2007.
- [8] 崔学桂,张晓丽,胡清萍.基础化学实验(I)-无机及分析化学实验.第1版.北京:化学工业出版社,2003.
- [9] 李吉海,刘金庭.基础化学实验(II)-有机化学实验.第1版.北京:化学工业出版社,2004.
- [10] 顾月姝,宋淑娥.基础化学实验(III)-物理化学实验.第1版.北京:化学工业出版社,2004.
- [11] 宋其圣.无机化学.北京:化学工业出版社,2008.
- [12] 郝爱友.精编有机化学教程.济南:山东大学出版社,2003.
- [13] 郭用猷,张冬菊,刘艳华.物质结构基本原理.第3版.北京:高等教育出版社,2015.
- [14] 苑世领,张恒,张冬菊.分子模拟-理论与实验.北京:化学工业出版社,2016.
- [15] 刘成卜.量子化学.北京:科学出版社,2020.
- [16] 张恒,马莹,刘刚,张冬菊,宋其圣,苑世领.大学化学,2019, 34 (9), 26.
- [17] 王宝山,侯华.分子模拟实验.北京:高等教育出版社,2010.
- [18] 张恒,马莹,刘刚,宋其圣,苑世领.大学化学,2017, 32 (5), 44.
- [19] 张恒,贾春江,宋其圣,苑世领.化学教育,2023, doi: 10.13884/j.1003-3807hxjy.2022070143
- [20] 张恒,宋其圣,贾春江,苑世领.大学化学,2023, 38 (5), 172.
- [21] 刘刚,张恒,马莹,宋其圣,苑世领.化学教育,2020, 41 (14), 5.
- [22] 张恒,刘刚,马莹,宋其圣,印志磊,苑世领.大学化学,2019, 34 (11), 82.
- [23] 分子模拟实验. [2023-01-12]. <http://course.sdu.edu.cn/G2S/Template/View.aspx?action=view&courseType=0&courseId=6073>
- [24] 宋淑娥.基础化学实验III-物理化学实验.北京:化学工业出版社,2020: 176-185.