

浙江省高等教育课堂教学改革研究项目

申 请 书

项目名称：基于本研贯通的《高等物理化学》课程改革对策

申 请 人：刘迎春

申请学校：浙江大学

通讯地址：浙江大学化学系

联系电话：15869043996

电子邮箱：liuyingch@zju.edu.cn

浙 江 省 教 育 厅

二〇一三年制

一、简表

项目 简况	项目名称	基于本研贯通的《高等物理化学》课程改革对策				
	项目类别	A、基础课 B、√专业课 C、实验课 D、其他				
	起止年月	2016.10-2018.10				
项目 申 请 人	姓名	刘迎春	性别	女	出生年月	1969 年 2 月
	专业技术职务/行政职务	副教授		最终学位/授予国家	博士/中国	
	所在学校	学校名称	浙江大学		邮政编码	310027
		通讯地址	浙江大学化学系			
	主要教学工作简历	时间	课程名称	授课对象	学时	所在单位
		2014年-至今	统计力学与分子模拟	化学专业本科、化学求是科学班	48	浙江大学化学系
		2016-至今	高等物理化学	本科生，研究生	48	浙江大学化学系
		2012年-至今	普通化学	工、农、医类本科	240	浙江大学化学系
		2014年-至今	中级化学实验(II)	化学专业本科	960	浙江大学化学系
		2009年-至今	大学物理化学实验	工、农、医类本科	96	浙江大学化学系
		2013年-至今	大学分析化学实验	工、农、医类本科	160	
	主要教学改革和科学研究工作简历	时间	项目名称			获奖情况
		2014 年	浙江大学国家级化工类虚拟仿真实验中建设			在研
2014 年		化学系教学改革项目（主持）：以培养学生科学素养为导向中级化学实验的思考与实践			在研	
2009.1-2011.12		国家自然科学基金面上项目（主持）“纳米孔材料中扩散控制的化学反应研究”			优	
2006-2008 年		国家自然科学基金面上项目（主持）：“纳米孔材料中的复杂体系：传递性质、结构性质及其相互关系”			优	
2009-2011 年		浙江省自然科学基金（主持）：碳纳米管-多肽或蛋白质药物体系输运行为的研究			结题	
2017-2020 年		国家自然科学基金面上项目（主持）：“表界面反应与扩散耦合的多尺度研究”			在研	

项目参与人 (可无)	姓名	性别	出生日期	职称	工作单位	分工	签章
	王琦	男	1964.9.1	教授	浙江大学化学系 (指导教师)	项目实施	
	Stefan Franzen	男	1962.	教授	北卡罗莱纳州立 大学	项目实施	
	彭笑刚	男		教授	浙江大学化学系	项目 指导	

二、立项依据：（项目的意义、现状分析）

意义：

根据教育部“基础学科拔尖学生培养计划（珠峰计划）”的精神，在基础学科中对具有较强潜力并有志于深入学习的优秀学生，按照“高、精、尖”的培养模式，实施课程精、深、通的研究型教学。

浙江大学化学专业实施科学思想、科学能力训练等方面本科全程培养的教育计划，目的是为了培养造就基础宽厚，知识、能力、素质俱佳，在基础学科领域具有国际一流水平的高水平拔尖创新人才和未来科学家。

化学是一门以实验为基础而发展起来的学科，研究的主要内容是通过物质的转化以产生新的物质。由于分子间化学转化的微观性和抽象性等特点，在传统的化学教学中，教师多用比喻、实物分子模型等方法对分子进行展示和讲解。这种教学方法虽然可以使学生学到一些化学知识，但对化学知识的理解主要停留在记忆层次上，对化学知识抽象原理的进一步深入理解存在困难。随着计算化学的迅速发展，不断地有许多新的理论方法和软件得到开发。通过计算化学的模拟研究，不仅能从分子及量子水平解释实验现象中无法解释的问题，还可以通过计算化学对实验中的一些性质或现象总结出一定的规律，进而对化学实验起到指导及预测作用。这不但可以避免科研工作者进行盲目的科学研究，也在很大程度上节省时间、人力和财力，提高科研效率，也使化学学科发展的更加成熟和完善。

为了弥补传统化学教学的不足，将计算化学与化学教学相结合的教育方式，将对化学课程的发展、化学教学的改革及学生创新能力的培养起到推动作用。近几年，随着教学体制的改革，我国已不断地将计算化学教学纳入化学课程中。对于传统的化学教学手段，难以生动地表现出抽象的化学概念。采用计算化学模拟及相关的可视化软件分析，则可将这些抽象的概念表达的更具体，使化学变化的本质与过程更形象地展现在学生眼前，从而打破了化学反应的“黑匣子”传统观念。在国际上已有不少高校将计算化学作为一门独立的学科纳入化学课程体系中。在我国一些大学中，计算化学也相继走进化学课堂，如北京化工大学。由于计算化学的高效、形象化和易于理解等特点，在化学教学中，人们主要是采用计算化学的各种软件并进行一些简单的计算练习来辅助教学。这不仅可以激发学生学习化学的兴趣，还可以加强学生对化学知识的理解。

本研贯通的专业加深课程是我系进行教学改革的重要举措，面向优秀的本科生和研究生共同开设，学分打通，也就是本科生的学分到了研究生阶段仍会统计，提高了学生的学业效率。基于“实施课程精、深、通的研究型教学”，我们围绕“基础性、实践性、对比性和探索性（4P）特征”，将计算化学渗入物理化学课程，开设“高等物理化学”专业加深课程，实施课堂教学改革。该课程由课堂讲授和计算实习两部分组成，通过课内外结合，实行本研贯通，对优秀本科生和研究生的“高等物理化学”课堂教学进行探索与实践，着力培养学生的自主学习、钻研问题、探究创新、团队合作的兴趣和能力，对浙江大学化学专业人才培养将起到重要的作用。

现状：

国外许多著名高校对计算化学课程都表现出了高度重视。世界排名前几位的大学更是早早抓住这个先机，于2000年左右相继开设了相关课程，如麻省理工开设了《Introduction to Modeling and Simulation》，剑桥大学开设了《Introduction to Materials Modeling》，牛津大学开设了《Introduction to Modelling in Materials Science》，加州理工开设了《Atomic-Level Simulations of Materials and Molecules》，斯坦福大学开设了《Advanced Techniques for Molecular Simulations》，普林斯顿大学开设了《Molecular Simulation Methods》。这些课程通过十余年的建设，为欧美国家培养了一大批分子模拟专业人才，极大地推动了西方科学技术的发展。

随着“分子模拟热”的升温，国内的一些科研院所也在近几年开设了分子模拟课程，如华东理工开设了《分子模拟基础》，中国科学院《分子模拟的原理及应用》，北京大学《理论与计算化学：分子模拟的原理及应用》，上海交大《计算材料学—电子、原子及分子尺度模拟与计算》，中国科学院理论物理研究所《分子建模与模拟导论》，南开大学《分子模拟》，武汉大学《分子模拟实验》，西安交大《流体的分子模拟研究》，天津大学《蛋白质分子结构与分子模拟》《生物过程的分子模拟》，华中师大《分子模拟与药物筛选》。在这些课程中，有些单位如中科院将量化模拟和分子模拟结合在一起进行讲授，内容难度更大，因此作为研究生课程开设；有些单位将分子模拟技术和相关专业结合起来，着重在某些方面的应用，以专业选修课形式开设，如天津大学和华中师大；有的直接以专业基础课开设，如北京大学；而其它单位则以选修课形式开设如南开大学。

浙江大学化学系于2014年对化学本科求是班开设《计算化学与实验》专业加深选修课程。经过三年的教学计划实施，在课堂教学中，从以下四方面作了初步探索，并取得了较理想的教学效果：

1. “课堂内基础理论拓展，实习课开设得精细”的模式

如“苯甲酸苯甲醛苯甲醇红外光谱密度泛函研究”，课内注重基础理论，介绍振动光谱计算的原理、多种优化方法的探索。选择学生已测定过苯甲酸红外光谱的例子，从理论角

度计算红外光谱，并与实验数据和文献数据对比，学生会进而思索实验方案的有效性并改进。

2. “方案自主与创新，激发学生兴趣，注重对学生能力的培养”的模式

如“流体结构性质和动力学性质分子动力学模拟”，自主选择感兴趣的体系，探索参数设置不同的影响；自主探究轨迹分析方法，完善设计方案。

3. “以分组的方式探究多种方法优化构型、多种过渡态搜索方案，进行团队合作，学会举一反三”的模式

以分组的方式探究多种方法优化构型（如负载金属的石墨烯），讨论多种过渡态搜索方案（肉桂醛加氢反应），进行团队合作，学会举一反三。

4. 拥有一支爱岗敬业、具有团结协作精神的多元化师资队伍。本课程由包括了来自美国北卡罗莱纳州立大学化学系的 Stefan Franzen 教授、法国国家科学院的董玮教授和本校教师共同完成，使学生在自己的校园就能体会到原滋原味的多元思维方式，学生视野得到有效拓展。

存在的问题：

《高等物理化学》课程不同于传统的基础课，更不同于纯粹的计算机课程。传统的基础课侧重于对普适规律的学习，计算机课程侧重于计算机操作和程序设计，而高等物理化学是以力学规律和统计规律为基础，增加实践比重并与理论并重，增加实例演练，在计算机程序下实现对原子或分子的研究(实践)，是理论与计算机技术的结合，但同时需要对比已知的实验结果，并能够探索未知现象。总结前期实践经验，经过分析发现本课程目前存在如下问题：

(1) 《高等物理化学》作为专业加深课程，对于有一定学术潜力、有志深造的本科生是缺失的。

(2) 《高等物理化学》的核心是以量子化学和统计力学为主的传统理论，及相关的数学、物理和化学知识。根据实际情况，学生往往对这部分内容感到枯燥和难以接受，因此如何根据学生背景在课堂上系统、有选择、有侧重的介绍这些知识，使之形成相应的理论框架是高等物理化学课程面临的一个主要问题，即“基础性”问题。

(2) 高等物理化学是以计算机为手段进行的模拟，因此需要娴熟的计算机操作技巧和软件使用技巧。但实际授课中由于课时、设备、场地、授课对象基础参差不齐等原因，给学生亲自动手实践的机会较少，这会造成他们对某些知识的掌握似是而非，不能理解具体含义。因此如何使学生在较短的课堂时间内掌握使用MD软件的技巧，是高等物理化学及实验课程面临的又一个问题，即“实践性”问题。

(3) 高等物理化学最重要的目的就是通过计算机手段来探索新的结构、预测新的性质、发

现新的现象，因此需要在课堂上通过实例对学生进行启发。如何让他们根据自己的专业和兴趣进行充分想象、发挥，并能利用所学的知识解决一些问题，是本课程面临的最主要挑战，即“探索性”问题。

(4) 为了保证高等物理化学的准确性，必须先将已知性质和分子模拟结果相对比，才能进一步模拟探索未知性质，否则任何结果都不可信。通常的教学过程中，这一思想的贯彻并不充分。因此，如何让学生在学的过程中强化这一思想，是该课程的另一个问题，即“对比性”问题。“高等物理化学”已经初步形成了该课程“基础性、实践性、对比性和探索性”的4大特性(4 Properties)

三、项目实施方案及实施计划

1. 具体改革内容、改革目标和拟解决的关键问题

改革内容：

- [1]. **本研贯通模式。**为了给具有一定学术潜力、有志深造的本科生提供充分的专业加深课程的选修机会，将本科生和研究生的选课系统打通，实行本研同堂授课，考评统一，学分互认。
- [2]. **增加实践环节，与理论并重。**针对该课程所特有的基础性、实践性、对比性和探索性等四大特性(“4P”，4 Properties)，应重点从课程设计和课堂方法上进行研究，具体内容如下：
 - **基础性——注重基础理论讲授。**高等物理化学的基础是量子力学和统计力学，必须全面、系统的掌握这些知识才能真正的理解分子模拟过程。在授课过程中将按照选课情况，根据大部分学生的物理、数学基础，对这些理论进行筛选和重组，有选择、有侧重的讲授知识点，同时引入一些模拟实例和国外教学录像增加他们对这些内容的兴趣，使之形成系统的理论框架。该措施的实施还将有益于学生对其他相关科目的学习和理解。
 - **实践性——重视计算机技术实践操作。**计算化学的手段是计算机技术，要求学生具有熟练的计算机操作能力。因此，在进行计算实习部分授课时，应加入适当的上机操作课，使学生能够直接、亲身体会到计算化学的美妙和神奇。计算实习课的内容上除了讲授基本的分子构建、编辑、操作，分子动力学模拟，性质计算等，同时还考虑讲授一些Linux、并行基本知识，以利于他们在课程认识上的进一步提高。
 - **对比性——强调与实验结果的对比。**分子模拟的特殊性是在预测新结构、新性质前必须先验证力场的正确性，否则得到的结果无法令人信服。因此在授课过程中将向学生重点强调这一问题，并将这个观点贯穿整个课程始终。具体的措施为当首次向学生介绍力场概念时，就向他们灌输这一思想，并在随后的课堂上利用对比或故意漏掉的方式；

或通过上机课中设计题目，让他们自己动手对比的方式加深印象。

- 探索性—启发利用分子模拟手段进行的探索。分子模拟的主要目的是能够利用这项技术预测新结构和新性质。因此在学习本课程后，如何根据具体情况灵活运用、合理构思、构建恰当模型进行计算成为本课程的主要任务。教学中应通过增加模拟实例和事先精心设计课堂思路的方法来启发学生进行积极、主动思考，注意把握学生心态，投石问路、欲擒故纵，利用分子模拟课程的图片优势、动画优势和直接操控化优势，培养学生的联想力和创造力。

[3]. **师生互动。**以光谱实验和动力学实验为依托，采用实例教学，教师带领学生实战演练，使学生体会到实战的有效性。

[4]. **构建在线课堂。**将课堂教学录像，利用网络平台制成视频课程，分享到学生的网络平台，为保证教学质量和提高学生积极性提供条件。

[5].

改革目标：

本教学改革项目将对本研贯通的“高等物理化学”的课堂教学进行科学的改革，拟探索和实践本硕同堂的“基础性、实践性、对比性和探索性等四大特性”的课堂教学，从课程设计和课堂方法上提出解决对策，使得专业加深课程的开设从“从理论到实践”、“基础到前沿”、从“单打独干到团队合作”、从“从单一学科到多学科交叉”、从“传授知识到培养实践能力”的转变。将把研究成果推广到其他专业加深课程，促进计算化学技术在大学校园的普及，对大学科研人员紧跟学术前沿、把握热点潮流、促进学科交叉等科研活动产生积极影响。

拟解决的关键问题：

- 有代表性实例的演练；
- 计算工作站的组建；
- “高等物理化学”课程向课堂外延伸；
- 师资力量的保障。

2. 实施方案、实施方法、具体实施计划（含年度进展情况）及可行性分析

实施方案：

1. 课程负责人和主讲教师组织教师注重基础理论讲授。按照选课情况，根据大部分学生的物理、数学基础，对这些理论进行筛选和重组，有选择、有侧重的讲授知识点，同时引入一些模拟实例和国外教学录像增加他们对这些内容的兴趣，使之形成系统的理论框架。该措施的实施还将有益于学生对其他相关科目的学习和理解。
2. 在进行课程授课时，完成相应理论知识讲授后，适时进行上机操作课，使学生能够

直接、亲身体会到分子模拟的美妙和神奇。上机实践课的内容上除了讲授基本的分子构建、编辑、操作，分子动力学模拟，性质计算等，同时还考虑讲授一些 Linux、并行基本知识，以利于他们在课程认识上的进一步提高。

3. 选择学生已做过的有代表性的实验结果，与计算结果对比，强调先验证力场的正确性思想。课堂上利用对比或故意漏掉的方式；或通过上机课中设计题目，让他们自己动手对比的方式加深印象。
4. 师生互动，共同演练。教学中应通过增加模拟实例和事先精心设计课堂思路的方法来启发学生进行积极、主动思考，注意把握学生心态，投石问路、欲擒故纵，利用计算机模拟技术，凸显高等物理化学课程的图片优势、动画优势和直接操控化优势，培养学生的联想力和创造力。将学生科研训练的课题引入课堂，培养学生探索意识。
5. “高等物理化学”梯队化师资的构建。师资团队包括青年千人 2 人，教授、副教授 2 人。同时还聘请外籍师资切入教学环节。
6. 利用新媒体技术手段，制作视频课程，分享到学生网络平台，学生能随时随地观看在线课程，提高教学质量。

实施方法：

1. 结合科研、结合学科进展，丰富教学内容，培养学生创新意识和能力；
2. 理论与实践并重，培养学生实践能力；
3. 课堂实施自主与探究结合；
3. 实践项目多人一题与一人一题结合，实行个性化的培养；
4. 结合实验项目，组建学生合作团队，课堂内和课堂外结合，得到创新实践训练

具体实施计划：

1. 2016 年 10 月-2017 年 9 月：

在低年级本科生和研究生中开设“高等物理化学”专业加深课程，进行“基础性”、“实践性”、“对比性”和“探索性”的课堂教学探索与实践。

2. 2017 年 9 月-2018 年 10 月：

总结实施效果，完善方案。在本研贯通专业加深课程中全面铺开和实施。完成总结报告；发表教学论文 1~2 篇。

可行性分析：

本项目的可行性体现在以下三方面：

1. 领导的重视

从学校到化学系到教学委员会，都非常重视“高等物理化学”课程建设和课堂教学建设。

教学委员会主任彭笑刚教授参与本课程的改革。

2. 制度的保障

每年有专用学生培养的经费支撑和支持，有科学而合理的教学体系和培养计划，鼓励 and 倡导学生“自主学习和创新能力”提高。注重“高等物理化学”课程教师能力的提升，保证教学质量。

3. 前期工作作为实施的基础保障

[1]. 经过三年的本科课程“计算化学与实验”教学计划实施，已经初步形成了该课程“基础性、实践性、对比性和探索性等四大特性，在课堂教学中，并取得了教理想的教学效果：“课堂内基础理论拓展，实习课开设得精细”的模式、“方案自主与创新，激发学生的兴趣，注重对学生能力的培养”的模式、“以分组的方式探究多种方法优化构型、多种过渡态搜索方案，进行团队合作，学会举一反三”的模式、拥有一支爱岗敬业、具有团结协作精神的多元化师资队伍。

[2]. 2014 年浙江大学青年教师教学竞赛一等奖

[3]. 编写了《高等物理化学计算实习》讲义

[4]. 发表了 2 篇教学论文，其中一篇发表在权威英文教育期刊 Chem. Educator 上

- Green Improvement for Measuring the Heat of Combustion in Undergraduate Experiments, *Chem. Educator* 2016, 21, 1-5 通讯作者
- 2. 数字电流表作为指零仪测定电解质溶液电导。实验研究与探索，2017 年。（已录用，期刊，通讯作者）

[5]. 2014 年浙江大学化学系教改项目的“以培养学生科学素养为导向的中级化学实验的思考与实践”

3. 预期成果

- 激发学生兴趣，为培养基础宽厚，知识、能力、素质俱佳的人才提供经验
- 积累课程资料（音像、教材、实例等）
- 发表相关教学论文

四、教学改革基础

1. 与本项目有关的教学改革工作积累和已取得的教学改革工作成绩

[1]. 经过三年的本科课程“统计力学与分子模拟”、“计算化学与实验”教学计划实施，已经初步形成了该课程“基础性、实践性、对比性和探索性等四大特性，在课堂教学中，并取得了教理想的教学效果：“课堂内基础理论拓展，实习课开设得精细”的模式、“方案自主与创新，激发学生的兴趣，注重对学生能力的培养”的模式、

“以分组的方式探究多种方法优化构型、多种过渡态搜索方案，进行团队合作，学会举一反三”的模式、拥有一支爱岗敬业、具有团结协作精神的多元化师资队伍。

[2]. 2014 年浙江大学青年教师教学竞赛一等奖

[3]. 编写了《高等物理化学计算实习》讲义

[4]. 发表了 2 篇教学论文，其中一篇发表在权威英文教育期刊 Chem. Educator 上

- Green Improvement for Measuring the Heat of Combustion in Undergraduate Experiments, Chem. Educator 2016, 21, 1-5 通讯作者

- 2. 数字电流表作为指零仪测定电解质溶液电导。实验研究与探索，2017 年。（已录用，期刊，通讯作者）

[5]. 2014 年浙江大学化学系教改项目的“以培养学生科学素养为导向的中级化学实验的思考与实践”

2. 学校已具备的教学改革基础和环境，学校对项目的支持情况（含有关政策、经费及其使用管理机制、保障条件等，可附有关文件），尚缺少的条件和拟解决的途径

浙江大学高度重视本科教学改革，并为教师教学改革提供了良好地相关环境。学校制订了《浙江大学本科教学工作奖励暂行办法》（浙大发教〔2006〕48 号）、《浙江大学专业技术职务评聘工作实施办法》（浙大发人〔2012〕25 号）、《浙江大学加强高水平教育教学工作办法》（浙大发本〔2010〕126 号）等系列文件，鼓励广大教师积极申报及实施本科教学改革，在教师晋升、聘岗中，明确规定，对投身教学改革取得成果的教师给予政策奖励。

学校有专门管理部门，组织教师申报、管理教学改革项目。近年来，学校已设立了校级教学改革项目，如专业综合改革、通识核心课程、大类课程及教学方法改革等，为教师申报省级教学改革项目奠定了很好的基础。

浙江大学化学系非常重视本研贯通“高等物理化学”课程建设和课堂教学建设。2016 年化学系教学委员会将《高等物理化学》作为 6 学分选修课纳入本科生和研究生培养计划。化学系和物理化学课程组定期组织教师申报化学系教学改革项目。每年有专用于学生培养和课程建设的经费支撑和支持，有科学而合理的教学体系和培养计划，鼓励和创导拔尖学生“自主学习和创新能力”提高。

以上是该项目申报和实施的有力保障。

五、经费预算

支出科目（含配套经费）	金额（元）	计算根据及理由
合计	2.0 万	
1. 资料费	0.5 万	资料费、教材、复印费
2. 调研差旅费	0.4 万	参加调研、教学会议
3. 材料费	0.4 万	药品等耗材、研讨室专用材料
4. 版面费、邮电费	0.4 万	教学论文出版用版面费、邮电费
5. 办公用品费	0.3 万	教学研究用办公用品费

六、专家组名单及评审意见

姓名	职称	专业	所在单位	签字
顾建民	教授	高等教育学	教育学院	顾建民
王 勤	教授	工程热物理	能源学院	王勤
吴秀明	教授	汉语言文学	人文学院	吴秀明
潘再平	教授	电气工程及其自动化	电气学院	潘再平
方向明	教授	医学	医学院	方向明
何贵兵	教授	应用心理学	心理系	何贵兵
陈纪忠	教授	化学工程	化工学院	陈纪忠

评审意见：

该项目将基础理论与实战相结合，激发学生学习兴趣，本研贯通，有新意，有一定的教改效果，可行性好。

建议从以下两方面改进：

1. 增加师生的互动。
2. 增加新媒体等技术手段。

特向浙江省教育厅推荐，给予该项目立项。

负责人（签字）

2016年 10 月 11 日

七、申请人所在学校意见

同意推荐。

（ 公 章 ）

学 校 领 导 签 字

年 月 日

八、教育厅审核意见

(盖 章)

年 月 日