

理论与计算化学教学中的课程思政

侯华, 王宝山*

武汉大学化学与分子科学学院, 武汉 430072

摘要: 理论与计算化学是本科生和研究生通选的专业课。以课程知识点为线索, 深度挖掘了课程在价值塑造、能力培养、坚定信念、家国情怀四个方面的思政元素。通过分享课程思政案例与教学素材, 提出思政内容的科学化和学科交叉融合思路, 强调学术文献、学位论文在思政教育中的重要作用, 为在计算化学相关课程中实现主动思政与三全育人目标提供参考。

关键词: 课程思政; 理论与计算化学; 学科交叉; 教学设计

中图分类号: G64; O6

Course Ideology and Politics Education in Theoretical and Computational Chemistry

Hua Hou, Baoshan Wang *

College of Chemistry and Molecular Sciences, Wuhan University, Wuhan 430072, China.

Abstract: Theoretical and Computational Chemistry is one of the elective general courses for both undergraduate and graduate students. Taking the course knowledge points as a clue, it delves deep into the ideological and political elements of the course in terms of shaping values, cultivating abilities, fostering strong beliefs, and nurturing patriotism. By sharing ideological and political case studies and teaching materials, it proposes a scientific approach to integrating ideological and political content with interdisciplinary studies, emphasizing the important role of academic literature and dissertations in ideological and political education. It provides a reference for achieving proactive ideological and political education and the goal of holistic education in courses related to computational chemistry.

Key Words: Course ideology and politics; Theoretical and computational chemistry; Interdisciplinarity; Teaching design

高等教育是传承科学技术并推动现代文明创新发展的重要手段, 高校则承担着为国家输送具备各种专业技能的高水平人才的重任。课堂教学是传统授业、解惑教育的主要渠道, 通过形式多样的教学方法, 学生得以系统学习分门别类的专业知识, 站在学科领域前沿, 为社会进步贡献自己的力量。但是, 对师者而言, 传道教育是人才培养的第一位, 因为教育的根本立足点是育人。实践证明, 仅依靠单一的思想政理论课, 无法形成育人合力, 亟需发挥广大教师在课程教学中的德育教育本领, 挖掘专业课程的德育资源, 完善育人机制^[1]。

收稿: 2023-09-13; 录用: 2023-10-24; 网络发表: 2023-11-15

*通讯作者, Email: baoshan@whu.edu.cn

基金资助: 武汉大学研究生“课程思政”示范课程

课程思政是近年来国家倡导的一种新型教学理念^[2]。与传统的思政课程不同，课程思政采取较为潜隐的形式渗透于专业课的教学过程当中，学生于潜移默化中接受主流价值观念的熏陶。二者统一于思想政治教育的理论与实践，形成协同效应，不仅可以丰富深化专业课的教学内容，而且能够让学生将思政内容与实际生活联系起来，充分调动学生的学习积极性，真正实现高等教育的“育人”目标^[3]。基于理科化学类专业课的特点，我国各高校大力推动以课程思政为目标的课堂教学改革，相继提出了新时代背景下普通化学、无机化学、有机化学、分析化学、物理化学、结构化学、化工原理等课程的思政策略与改革措施^[4-11]，优化各门专业课程和教学方式所蕴含的思想政治教育资源，融入课堂教学的各个环节，实现思想政治教育与知识体系教育的有机统一。

随着化学科学向原子、分子层次的纵深发展，基于量子力学的理论与计算化学已成为化学科学的重要分支，被称为“计算机实验”的分子模拟方法在化学、材料、生命科学等领域发挥着越来越重要的作用。“理论与计算化学”是我校面向大学生开设的专业选修课，也是硕士研究生的学科通开课，旨在通过分子模拟计算的通识教学，训练学生采用计算化学理论思维解决化学实际问题的能力，培养理论与实验兼备并重的复合型化学专业人才。与传统实验为主的专业课程相比，以复杂量子力学理论为主的计算化学课程知识过于抽象，理论性很强，研究领域所涉及的专业理论知识与思政内容区别较大。因此，对学生而言学习难度较高，对教师而言融入思政元素不易。山东大学在分子模拟实验教学中设计了思政案例，并成功用于拔尖计划特色课程中^[12]。华北电力大学报道了在计算化学实验中的课程思政案例^[13]。经过多年的教学实践，我们梳理出理论与计算化学课程所蕴含的思想政治教育元素，完善了该专业课程所承载的思想政治教育功能。本文将重点从价值塑造、能力培养、坚定信念、家国情怀四个方面，分享课程知识模块对应的思政元素设计与教学实践。

1 课程知识模块

“理论与计算化学”课程兼顾理论化学基础和计算化学方法，课堂教授内容共包括6个知识模块。

1.1 理论与计算化学基础

介绍理论与计算化学的基本概念与应用实例、学习方法与研究思路、理论背景与原理、势能面、分子动力学模拟等知识，明确基于原子、分子层次研究化学问题的逻辑特点与技术路线。

1.2 近似理论与计算化学模型

介绍半经验理论计算模型、Hartree-Fock方法与自洽场求解原理、波函数分析方法、分子结构与性质计算方法等知识，掌握计算化学研究的基本思路。

1.3 高级量子化学计算方法

介绍电子相关理论与post-Hartree-Fock方法(包括组态相互作用、微扰、耦合簇、多参考态自洽场等)、组合模型化学方法等，掌握定性、定量模拟化学反应机理的研究方法。

1.4 密度泛函理论

介绍密度泛函理论的基本思想与原理、Kohn-Sham方程以及各种近似泛函模型等，明确各种泛函的优缺点与适用范围。

1.5 分子动力学模拟方法

介绍经典力学与量子力学的区别与联系、各种力场模型、相空间与统计系综理论、分子动力学与Monte-Carlo模拟方法、QM/MM杂化方法等，掌握宏观物质结构及可测理化参数的计算模拟技术与应用技巧。

1.6 计算化学软件

介绍常用的专业计算化学软件、功能特长以及解题设计思路等，掌握问题导向的计算方法选择与计算资源评价原则。

2 课程思政元素

2.1 价值塑造

2.1.1 知识点：量子力学与分子力学的区别与联系

思政元素：关于事物两面性的辩证思维；交叉融合的创新方法。

实现形式：对比牛顿的苹果(经典力学, MM)与薛定谔的猫(量子力学, QM), 分析物质的波粒二象性特征, 形成多尺度、多维度解析物质特性的辩证思维; 结合2013年诺贝尔化学奖, 讨论经典力学与量子力学相结合形成的杂化思想, 阐述即使相互矛盾或对立的事物也可以融合, 实现交叉创新。

教学素材：牛顿运动方程描述经典粒子的运动状态, 在任意 t 时刻具有明确的位置 x 和动量 $p = m \partial x / \partial t$:

$$-\frac{\partial E}{\partial x} = m \frac{\partial^2 x}{\partial t^2}$$

而量子力学方程的解则满足不确定性原理, 位置 x 和动量 p 存在不等关系, 即^[14]:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

分子力学与量子力学的不相容给基于原子、分子的化学研究带来了困难, 特别是针对生命科学中复杂的酶催化反应。Karplus、Levitt、Washel提出了QM/MM杂化方法, 反应活性中心采用QM方法, 其余(包括溶剂)设为反应环境采用MM方法, QM与MM之间则用静电场巧妙联系起来。QM/MM方法为模拟计算生命现象的微观机制奠定了理论基础, 开创了计算结构生物学时代, 三位作者因此获得2013年诺贝尔化学奖。基于牛顿运动方程的分子力学和基于薛定谔方程的量子力学的发展过程充分体现了事物的对立统一, 既反映了物质波的客观本质, 也是唯物主义辩证法的具体体现, 更是交叉融合实现创新的典型范例。

2.1.2 知识点：耦合簇理论

思政元素：“人弃我取，人取我予”；创变通达，人舍你取，“垃圾”可能变“珍宝”；垃圾是放错位置的财富，天生我材必有用，是金子总会发光的。著名教育家陶行知所言：“在你的教鞭下有瓦特，在你的冷眼里有牛顿，在你的讥笑中有爱迪生。”

实现形式：以耦合簇理论的创始人Hermann Kummel的论文为线索^[15], 讲述耦合簇理论从核物理领域走向计算化学领域的传奇历程。

教学素材：耦合簇(Coupled-cluster)方法是目前最为成熟的从头算方法之一, 广泛用于中等尺寸分子的精确计算, 包括结构、性质、光谱、激发态等。耦合簇是1960年由两位核物理学家Fritz Coester和Hermann Kummel提出的方法, 用于计算原子核的结构。由于渐进收敛问题, 他们认为该方法没有应用价值而随之放弃。直到1966年, Jiri Cizek发表了一系列采用耦合簇方法研究分子结构的论文, 并把抽印本打包邮寄给Kummel。此时, Kummel等人才知道耦合簇方法在化学领域里大放异彩。据Kummel回忆, 他从来不看化学杂志, 很惊奇也很佩服Cizek作为一个化学家, 竟然会翻阅核物理的杂志。耦合簇方法从被废弃的理论到计算化学“黄金标准”的蜕变, 其价值显然来自于前辈科学家的智慧以及对学科交叉的高度敏感性。

2.1.3 知识点：物质波理论；Schrödinger方程

思政元素：追本求真，不盲从，不信谣、不传谣，谣言止于智者；实事求是，没有调查就没有发言权；培养学生不盲从、独立思考的精神。

实现形式：研读de Broglie的博士论文, 学习物质波的真实含义, 破解关于de Broglie为纨绔子弟、论文只有两页纸等谣言; 研读Schrödinger的经典论文, 明确Schrödinger方程的来龙去脉, 消除关于Schrodinger方程的种种误解。

教学素材：量子力学是科学史上最成功的理论之一, 但因与经典力学直观相悖且过于抽象, 迄今仍流传着关于量子力学相关理论的大量错误传说甚至谣言。其中最著名的应属de Broglie提出的物

质波理论和Schrödinger方程。谣传de Broglie的博士论文只有一页纸多点，且在其伯爵父亲和导师Paul Langevin帮助下才获得了博士学位。实际上，de Broglie的博士论文“Recherches sur la Theorie des Quanta (量子理论的研究)”发表在1925年的*Annalen der Physik*期刊(第10卷，22–128页)，法语原版有121页，英文翻译版也有81页。查阅该论文可知，正文共7章节：相波(即物质波)；Maupertuis & Fermat原理；轨迹的量子稳定性条件；双电荷体系运动的量子化；光量子；X和 γ 射线衍射；量子统计力学。显然，没有接受过系统专业的物理学教育，根本不可能读懂de Broglie的博士论文。爱因斯坦曾评价该论文掀开了“庞大面纱的一角”，其对于量子力学理论的重要性不言而喻。

Schrödinger方程是量子力学中最为重要的方程式，也是计算化学方法的理论基础。关于Schrödinger的传言更多，而Schrödinger方程的来历更是谣言四起，至今仍有各种Schrödinger方程所谓的推导及证明。Schrödinger提出的波动方程最早发表在1926年德语杂志*Annalen der Physik*上，可能由于语言问题鲜有解读，但同年Schrödinger在著名*Physical Review*杂志(第28卷，1049–1070页)上发表了“An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules (原子与分子力学的波动理论)”英文论文，共分9个部分，全面详细阐述了Schrödinger方程的来历、解释、应用、局限等，非常值得研读，各种误会将迎刃而解。

2.2 价值塑造

2.2.1 知识点：计算化学的目标是领悟(insights)，不是数(numbers)

思政元素：科学研究需要知其然，更要知其所以然；坚持以人为本的科学发展观。

实现形式：以科学计算领域著名科学家、教育家Richard Hamming、David Young、林家翘等人的观点为基础，讲述计算化学中“Garbage in, garbage out”的经验教训，明确学习理论与计算化学的根本目的与原则，培养钻研精神。

教学素材：根据Paul Dirac的说法，用数学公式描述整个化学和大部分物理的基本定理都已明确，困难仅在于方程过于复杂而无法求解。正如David Young所述^[6]，随着计算机技术的飞速发展，计算化学软件越来越用户友好，很多进行理论与计算化学研究的人还没有掌握做计算的基本知识，但都能顺利得到计算结果，甚至也不用搞懂数据是怎么算出来的。可惜的是，这些数据只是垃圾，即在计算化学领域非常有名的论断：“Garbage in, garbage out”，《牛津高阶英汉双解词典》注释为：“(计算机运算中)错进，错出(若输入错误数据，则输出亦为错误数据)。”林家翘先生是研究天体运动的理论物理学家，在一次演讲时针对听众的提问“现在我们有了先进的计算技术，凭它可以轻而易举地解决一切难题？”他回答到：“这种看法是片面的，甚至是要不得的！单凭先进的、高速运行的计算机，不可能解决任何问题。如果你对问题不进行科学的处理，那么必然的结果是garbage in, garbage out!”进行理论计算之前，首先需要对所研究的物理问题进行深入细致的考察和文献调研，洞察问题的内在本质和症结所在；然后抓住主要因素，建立能够正确反映事物本质的数学模型，并对其中的参数进行标定；最后进行数值模拟，归纳整理，对比验证，循环往复多次，才能得到有价值的信息而非数字垃圾。Richard Hamming也曾就科学计算提出重要观点：“即使用了错误的方法解决正确的问题，也胜过用正确的方法解决错误的问题。”显然，计算的目的是为了获得深层次的认知，而非简单的数字。

2.2.2 知识点：半经验理论计算方法

思政元素：学术之路上的直觉与视野；科学不能投机取巧，追求真理是科学研究的唯一目标。

实现形式：以著名物理学家Freeman Dyson和Enrico-Fermi引出的“Fit-an-elephant”的故事为切入点，讨论经验参数对理论计算结果的重要影响，明确计算化学的科学实质。

教学素材：2004年物理学家Freeman Dyson在*Nature*杂志上发表了一篇题为“A meeting with Enrico Fermi—How one intuitive physicist rescued a team from fruitless research”的文章^[7]，讲述了科学家的直觉和视野如何挽救毫无建树的科学的故事。Dyson等人模拟计算了介子-质子散射，理论预测结果与Fermi的实验测量结果完美吻合。当Dyson将稿件给Fermi审阅时，Fermi却不置可否，

并告诉Dyson: “在理论物理领域只有两种计算, 一是计算过程有清晰的物理图像; 二是计算有精确且自洽的数学公式, 而你的计算均没有。” Dyson不服气, 并争辩说计算数据与实验结果完全一致。Fermi则问他的计算模型里有几个经验参数, Dyson说只有4个, Fermi则说: “我记得我的朋友von Neumann曾说过, 4个参数就可以模拟一头大象了, 再多1个参数的话, 大象都能抖鼻子活了!” 这个故事警示开展计算模拟研究必须时刻注意事物的科学本质, 即使理论与实验完美吻合, 也要谨慎对待所使用的经验参数, 以防止计算掩盖真相。科学研究追求的永远是真相, 而不是所谓的解释, 更不能投机取巧。

迄今为止, 几乎所有的计算化学方法均采用了不同程度的近似, 特别是半经验计算方法和密度泛函模型, 动辄包含数十个经验参数。因此, 需谨慎分析近似计算带来的不确定性结果, 抽丝剥茧, 直至发现所研究问题的真相。

2.3 坚定信念

2.3.1 知识点: 量子力学理论基础

思政元素: 坚守初心, 持之以恒, 坚持就是胜利。理论与实验无界限, 从事理论研究无门槛, 什么时候投入都不晚。

实现形式: 以量子力学理论发展过程中做出重大贡献的代表科学家(如Schrödinger、Dirac、Mulliken、Pauling、London、Pople、Kohn等)为例, 讲述他们从实验转向理论研究并获得成功的故事, 强化学生坚守初心、扎根科研、坚持不懈的信念, 激发学生的科学热情和斗志。

教学素材: Schrödinger的博士论文题目为“On the Conduction of Electricity on the Surface of Insulators in Moist Air”, 其博士毕业10余年后才开始从事量子力学研究; Dirac则毕业于电气工程和数学专业, 博士转行研究量子力学; 分子轨道理论的创始人Robert Mulliken在大学时攻读有机化学, 博士和博士后期间从事同位素分离实验研究, 数年后才通过阅读Walter Heitler和Fritz London关于化学键的经典论文从事量子化学研究。但是Mulliken在高中时即对物理充满兴趣, 并撰写了关于电子如何运动的论文, 直至1960年获得Lewis奖章且将退休时仍以电子在分子中如何运动为题做演讲, 一生以电子为伴。1921年Fritz London的博士论文研究符号逻辑, 与其在1927年的量子化学计算论文相去甚远。1998年诺贝尔化学奖获得者John Pople和W. Kohn是数学专业而非化学专业。Linus Pauling为化学工程专业本科毕业, 虽然博士为物理化学专业, 但一直从事X射线研究。

2.3.2 知识点: 自洽场方法

思政元素: 山重水复疑无路, 柳暗花明又一村; 看似无解的难题, 只要不断完善提高自己, 终究能在逆境中找到新出路。

实现形式: 以单电子近似、中心场近似、Hartree-Fock自洽场方法求解Schrödinger方程为例, 讲述通过“大胆假设, 小心求证”的逻辑推理与循环优化、实现完美自洽的过程, 借以强化学生积极面对困难、敢于尝试、勇于突破的信心。

教学素材: 自洽场(Self-consistent field, SCF)方法是计算化学中最为智慧的理论之一。面对分子体系的多电子Schrödinger方程, 在无法直接求解的情形下, 采用单电子近似, 将电子-电子相互作用简化为任一电子均处于其余电子和原子核所形成的势能场中, 但势能场并不存在固定的函数表达式, 简化后的Schrödinger方程有形无实, 无法求解。因此, SCF方法采用“初始猜测”, 即先给Schrödinger方程猜一个解, 代入即可反算依次求得各电子所属势能场的表达式, 然后再求解Schrödinger方程, 获得新解并与初猜对比, 若不收敛则用新解替换初猜, 循环迭代, 直至获得收敛的波函数、能量、梯度等。由此可见, SCF方法巧妙回避了无解的困境, 走出了一条切实可行的算法之路。

2.4 家国情怀

2.4.1 知识点: 组合化学计算模型

思政元素: 众人拾柴火焰高, 团结就是力量, 集体与团队意识。

实现形式: 将一系列较低水平理论计算方法, 按一定规律组合起来, 可获得高水平理论计算的

结果,克服了计算化学中精度与效率的固有矛盾,借以强化学生的团队合作、协同攻关的研究精神。

教学素材:依靠目前的计算资源,获得达到化学精度(例如:反应热、活化能等相对能量的误差在 $\pm 4 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 以内)的计算结果并非易事,这是因为采用高水平理论计算方法所需的计算量随分子体系的尺寸增加迅速增加,而低水平理论方法的计算量虽小但误差较大。因此,精度和效率的固有矛盾是计算化学仍未解决的难题。组合模型化学(Composite model chemistry)则是一种巧妙的计算设计,包括CBS、Gaussian- n 、Weizmann- n 等系列。例如,Gaussian-4理论计算分子总能量的组合模型如下^[18]:

$$E = E[\text{MP4/6-31G}(d)] + E(+)+ E(2df,p) + E(\text{CC}) + E(\text{G3LargeXP}) + E(\text{HF}) + E(\text{SO}) + E(\text{HLC})$$

其中:

$$E(+)= E[\text{MP4/6-31+G}(d)] - E[\text{MP4/6-31G}(d)]$$

$$E(2df,p)= E[\text{MP4/6-31G}(2df,p)] - E[\text{MP4/6-31G}(d)]$$

$$E(\text{CC})= E[\text{CCSD(T)/6-31G}(d)] - E[\text{MP4/6-31G}(d)]$$

$$E(\text{G3LargeXP})= E[\text{MP2(full)/G3LargeXP}] - E[\text{MP2/6-31G}(2df,p)] - E[\text{MP2/6-31+G}(d)] + E[\text{MP2/6-31G}(d)]$$

$$E(\text{HF})= E(\text{HF/limit}) - E(\text{HF/G3LargeXP})$$

$$E(\text{HLC})= -An_{\alpha} - B(n_{\alpha} - n_{\beta})$$

可以看出,虽然诸如MP4/6-31G(d)、MP2/6-31+G(d)、CCSD(T)/6-31G(d)等低水平方法的精度较差,组合后Gaussian-4理论计算的454个能量(包括生成焓、电离能、电子亲合势、质子亲合势、氢键)与实验值的平均绝对偏差仅为 $3.5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$,达到了计算化学所期待的化学精度。

2.4.2 知识点:配位场理论;势能面;Schrödinger方程精确解

思政元素:理论与计算化学中的中国元素,继承与发扬老一辈科学家的学术成就和钻研精神,增强民族自豪感,提升民族自信。

实现形式:通过阅读文献,发现我国老一辈理论化学家的学术成就以及对学科领域发展的重大贡献;研读他们的学位论文,体会老一辈年轻时期的风采。

教学素材:虽然经典力学、量子力学未生在中国,但在理论与计算化学领域出现了众多中国元素,老一辈科学家的学术水平和学术贡献毋庸置疑,例如:

(1) 唐敖庆先生与“物质结构学术讨论班”:创造性地发展和完善了配位场理论,对配位场理论进行了系统化、标准化改进,引入群论、李代数等新方法,提高了配位场理论计算精度,为配位化学、稀土化学、工业催化剂的研究和激光材料的设计提供了理论依据;创建了分子轨道图形理论的中国学派(Chinese School of Chemical Graph Theory),提出了“本征多项式的计算”“分子轨道系数计算”和“对称性约化”Tang-Jiang三定理,深化了对物质拓扑结构的理论化学认识。

(2) 孙承谔先生:参与研究了H₃体系势能面计算工作,所建立的势能面是“化学动力学发展史上第一个相当准确的计算结果”;为确立过渡态理论做出了重要贡献,与Eyring、Gershinowitz合作的论文被列为美国化学会物理化学领域的百年成就之一^[19]。

(3) 王守竞先生:提出了新的变分函数精确计算H₂分子的电子结构,改进了Heitler和London的量子力学计算结果;采用矩阵力学求解不对称陀螺的转动波动方程,得到被称为“王氏公式”的量子能级计算公式。

(4) 邓从豪先生:提出了原子分子Schrödinger方程的超球坐标解法,能够实现快速收敛,优于常用的变分法或微扰法;提出了描述双原子分子的邓氏势能函数,在分子光谱与分子反应动力学研究领域影响深远。

3 教学方法

课程思政离不开课程教学,但传统教学方法需要做适当改革才能更好地融合思政教育。因此,在确保专业教学内容的前提下,针对计算化学中思政内容的特点,特别关注两点新教学方法,达到

了不错的教学效果。

3.1 提高思政元素的科学化

专业教学中的课程思政不是简单的政治教育,空洞说教只能适得其反。为了提高学生的接受度,在引入每一个思政元素时,阐明为什么(Why)、为了谁(Who)、怎么办(How)三个现实问题。本着实事求是的原则,基于理科学生的特质,布置学生查阅思政内容的相关学术文献,阅读分析文献,分组讨论后开展课堂演讲,各抒己见的同时达成共识。这种“从文献中来、到文献中去”的教学方法显著提高了学生的接受度,将思政元素科学化,将思政教育落到实处。

3.2 加强思政与学科交叉的融合力度

本科教学班的学生来自各个年级,虽然同为化学专业,但是他们对化学各个分支学科的兴趣不尽相同;硕士研究生教学班涵盖了所有传统分支学科,还有化学生物学等新兴学科。引导不同专业的学生展开交流,发挥兴趣与专业的协同效应,在交叉融合中发现创新点。培养学生的大局观,开拓学术视野,引导从“小团队”到“大集体”的思想观念转变,每一名参与其中的学生都能切身感受到思政所带来的头脑风暴,从而变“被动思政”为“主动思政”。

4 结语

作为本科生和研究生共同选修的专业课,理论与计算化学课程除了包含丰富的专业知识外,还蕴含着丰富的思政元素。就课程本身而言,仍需进一步细化课程知识体系的知识点,深度挖掘各知识点对应的思政元素,形成系统化、科学化、工程化的思政案例。就学生而言,将思政与专业充分渗透融合,在专业学习中体会思政,在课程思政中深化专业,相辅相成,实现“知行合一”。就教师而言,积极承担“传道授业解惑”的职责,在专业课程教学中起到价值引领作用,主动为实现“三全育人”目标贡献力量。

参 考 文 献

- [1] 范森, 朱元海. 大学化学, **2017**, *32* (7), 72.
- [2] 习近平. 全国高校思想政治工作会议上的讲话. [2023-11-15]. http://www.xinhuanet.com/politics/2016-12/08/c_1120083340.htm
- [3] 张树永. 中国大学教学, **2015**, *3* (1), 55.
- [4] 夏晓红. 大学化学, **2021**, *36* (3), 2009030.
- [5] 刘天府. 大学化学, **2020**, *35* (8), 44.
- [6] 要红昌, 李一珂, 武杰, 李中军. 大学化学, **2020**, *35* (8), 54.
- [7] 刘刚, 张恒, 马莹, 宋其圣, 苑世领, 孙国翠. 大学化学, **2020**, *35* (7), 53.
- [8] 甘峰, 朱芳. 大学化学, **2021**, *36* (3), 2012009.
- [9] 张树永. 大学化学, **2019**, *34* (11), 4.
- [10] 黄钦, 王飒飒, 米艳, 胡飞龙. 广州化工, **2020**, *48* (18), 179.
- [11] 刘锡建, 王远强, 陆杰. 广东化工, **2020**, *47* (18), 176.
- [12] 张恒, 刘刚, 马莹, 宋其圣, 印志磊, 苑世领. 大学化学, **2019**, *34* (11), 82.
- [13] 李巍, 王欣, 丁迅雷. 教育教学论坛, **2021**, *51* (1), 129.
- [14] 周公度, 段连运. 结构化学基础. 第5版. 北京: 北京大学出版社, 2017: 7.
- [15] Kummel, H. *Theor. Chim. Acta* **1991**, *80*, 81.
- [16] Young, D. C. *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*; John Wiley & Sons, Inc.: New York, NY, USA, 2001; pp. 1–2.
- [17] Dyson, F. *Nature* **2004**, *427*, 297.
- [18] Curtiss, L. A.; Redfern, P. C.; Raghavachari, K. *J. Chem. Phys.* **2007**, *126*, 084108.
- [19] Eyring, H.; Gershinowitz, H.; Sun, C. E. *J. Chem. Phys.* **1935**, *3*, 786.