

优化理论计算化学课程体系助推拔尖人才培养

彭谦^{1,*}, 姚鹏飞^{1,2}, 王梓聪¹, 许秀芳¹, 孙宏伟¹

¹南开大学化学学院, 天津 300071

²百色学院, 广西 百色 533000

摘要: 鉴于理论计算化学在化学及相关学科发展方面的重要作用, 南开大学化学教研团队在实施“基础学科拔尖学生培养试验计划”中, 提出以“计算化学导论”导引课程为中心, 构建集理论、实践、前沿三位一体的化学拔尖人才培养模式, 通过优化理论计算化学课程体系来助推拔尖人才培养。通过四年的教学实践, 对培养模式、课程设置以及相关学科的交叉融合等方面进行探索和改进。基于学生反馈的调研数据, 表明课程体系对拔尖人才培养具有重要推动作用。

关键词: 拔尖人才培养; 理论计算化学; 导引课程; 学生数据调研

中图分类号: G64; O6

Promote the Training of Top Talents by Optimizing the Theoretical Computational Chemistry Curriculum System

Qian Peng^{1,*}, Pengfei Yao^{1,2}, Zicong Wang¹, Xiufang Xu¹, Hongwei Sun¹

¹ College of Chemistry, Nankai University, Tianjin 300071, China.

² Baise University, Baise 533000, Guangxi Zhuang Autonomous Region, China.

Abstract: Recognizing the significant role of theoretical computational chemistry in advancing chemistry and related fields, the chemistry teaching team in Nankai University has developed a training model as part of the “Pilot Plan for Cultivating Top Students in Basic Disciplines”. This model centers around an “Introduction to Computational Chemistry” course, integrating theory, practice, and cutting-edge research to enhance the cultivation of top talents. Over four years of teaching practice, the team has explored and refined aspects of training modes, curriculum design, and interdisciplinary integration. Student feedback data indicates that this optimized curriculum system significantly fosters the development of outstanding talent in the field.

Key Words: Top-notch talent training; Theoretical computational chemistry; Guidance course; Student survey data

近年来, 中央多次指出基础学科人才培养的重要性^[1], 为培养基础学科领域未来学术领军人才, 构建中国特色、世界水平的基础学科拔尖人才培养体系, 本文针对基础学科化学拔尖人才成长的规律, 以学科基础“理论计算化学”为视角, 基于中央精神^[2], 通过452份南开大学化学学院学生一线调研数据对拔尖创新人才课程体系与培养模式进行了系统性的探索。

收稿: 2024-08-10; 录用: 2024-09-06; 网络发表: 2025-02-28

*通讯作者, Email: qpeng@nankai.edu.cn

基金资助: 2022年度基础学科拔尖人才培养计划2.0研究课题(20222037); 南开大学教学改革项目(NKJG2023043, NKJG2024100)

1 理论计算化学的相关背景

随着量子化学、理论化学和计算机科学的迅速发展, 计算化学从20世纪后期开始快速崛起, 并日益成为化学家们前沿研究的强有力手段^[3]。化学学科发展已经从偏重实验研究转变为依赖“实验、计算、理论”三方面协同推动、共同支撑的学科^[4]。基于计算化学及其所搭建的各种模拟平台, 充分发挥理论计算解释实验现象和预测新化学的作用, 一定程度上具备了支撑化学领域各个方向的研究能力。可大大节约研究成本, 缩短研究周期, 使主要依赖“试错”的化学实验, 提升理性认识, 逐步呈现数字化趋势, 进而推动领域变革式发展。因此, 理论计算化学在推动化学及相关学科发展方面发挥着不可替代的作用, 是产生前沿创新的重要方向。

当代理论化学肩负的使命是不仅为理论学科培养后备拔尖人才, 而且为从事化学及相关学科的更广泛学生群体, 特别是拔尖学生的内心埋下“理性思维”的火种。而聚焦于理论计算化学教学方面的改进和提升, 对于推动化学拔尖人才培养的作用不言而喻。作为培养拔尖人才的重要基地, 国内主要高校均开设了量子化学或理论计算相关的课程^[5-7], 为化学拔尖人才培养做出了巨大贡献。然而, 大多数课程一般从量子化学和相应理论算法展开讲授, 对学生的基础要求高, 课程主要面向高年级本科生, 对于初次接触该类课程的学生而言, 是“跨越式”的挑战。而低年级本科生处于公共课和基础化学学习中, 如果在基础知识和技能的积累过程中, 适当加以引导, 将有助于学生更加顺畅地步入理论化学相关的课程。因此, 开设以导论和化学机制问题为核心, 面向低年级本科拔尖学生的理论化学课程非常有必要, 这对培养具有厚实理论化学基础的拔尖人才培养, 探索“全过程”培养模式与实践具有重要的意义!

2 以“导引课”为中心的拔尖人才培养新模式

本科拔尖人才多数在高中期间参加过学科竞赛, 接触过本科四大化学, 但是对理论计算化学这个高度理性学科缺乏认识。作为重要的基础性学科, 理论计算化学不仅可以支撑化学学科各个领域如合成化学、催化化学、能源化学、材料化学、生物化学等, 而且对学生理性思维训练尤为见长, 可为培养新时代拔尖人才夯实理论基础。

理论计算化学相关的理论课程(如结构化学、量子化学)内容较为“晦涩难懂”^[8], 不仅要求学生有扎实的数学、物理、化学以及计算机等相关课程的基础知识储备作为前提, 同时也要求任课教师具有过硬的教学能力和深厚的教学底蕴。鉴于此, 南开大学化学学院理论化学教学团队尝试构建以“导引”为中心, 集合夯实理论化学基础、重视计算化学实践、瞄准化学机制前沿三位一体的高等教育培养新体系, 即先对学生加以引导, 使学生能够更加顺畅地进入到“理论学习阶段”, 同时尝试打破固有学科界限, 创新教学内容和形式, 因材施教, 加强学生的“兴趣”培养, 探索以启发思考、解决问题为核心的培养方式, 引导前沿课程的学习和启迪未来的“科研之路”(图1)。具体从以下两个方面进行实践。

1) 为了克服理论计算化学相关课程“学生难学, 教师难教”的问题, 同时又要尝试打破固有学科界限, 理论计算化学“导引课”的开设和课程设计就显得至关重要。南开大学自2021年开设“计算化学导论”课程以来^[9], 结合“理论化学”教学团队教师们在化学理论与机制领域所擅长的研究方向, 每年改进课程, 以理论化学核心公式为框架, 略去相对深奥的公式推导过程, 增加以理论化学发展历程和各个学科化学机制前沿的教学内容。

2) 以“计算化学导论”为中心, 打造多层次的系列理论计算化学课程体系(图2)。针对不同年级的拔尖学生开设课程, 并在课程内容上打破学科界限, 将理论计算化学与其他学科的知识相融合, 学以致用, 从而有效培养复合型拔尖人才。整套教学课程体系“由浅入深, 由理论到实践, 由基础到前沿”循序渐进, 无缝衔接, 潜移默化, 水到渠成。

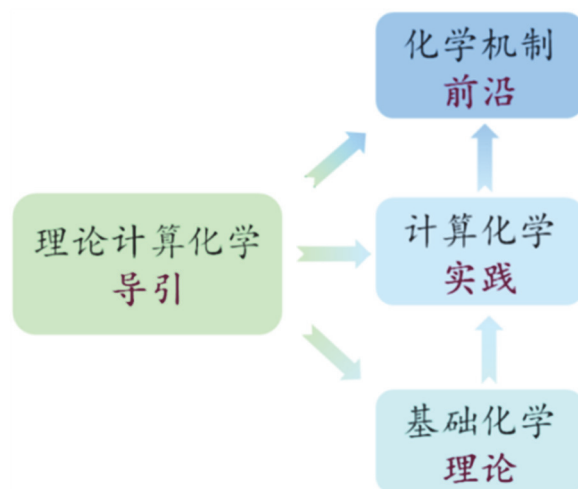


图1 以“导引”为中心，集合理论、实践、前沿三位一体的培养体系



图2 以“计算化学导论”为中心导引课的多层次的系列理论计算化学课程设置

“计算化学导论”课程的理论化学发展历程和典型的多学科化学机制前沿内容，有助于为学生埋下“兴趣的种子”。再通过结构化学、量子化学等理论课程的学习，打牢理论基础。然后学习应用计算化学、计算化学实验等实践技术课程，融合理论知识与实践操作。这样，“兴趣的种子”可在基础知识与实践环境中汲取养分，“发芽成长”！最后，学生根据自己的兴趣选修计算材料学、计算化学生物学等前沿交叉课程，以期在适合自己的领域“开花结果”。

通过“计算化学导论”四年的教学实践探索，我们针对最新一届学生设计了问卷调研，以考察该导引课培养成效，发放问卷154份，收回反馈124份，回收率81%。问卷内容涵盖了课程思政、课程整体评价、课程改进以及感兴趣领域等多个方面，具体问卷见补充材料S1。

如表1所示，A：98.2%的学生对导论课程给予了良好以上的评价，其中优秀评价学生占比达74%；

B: 98.6%的学生满意“课程思政”元素的挖掘和融入；C: 96.3%的学生通过课程认识到量化理论基础推动化学发展的重要性。这表明最近一届学生通过“计算化学导论”课程的学习，不仅在科学思维上有收获，而且对引导理论化学基础的学习有重要帮助，因此较好地完成了人才培养的课程目标，教学创新效果较好，肯定了南开大学理论化学教学团队各位教师的努力付出。

表1 对计算化学导论课程内容的正面反馈(%)

A	B	C	D	E	F	G
98.2	98.6	96.3	88.9	83.3	88.9	98.2

A 对“计算化学导论”课程的整体评价；B “课程思政”元素的挖掘和有机融入；C 当前量子化学计算在化学领域的重要性；D 对量子化学和计算化学涉及到的主要软件及其操作的了解情况；E 是否同意增加量子力学、量子化学、量子计算的发展史的相关内容；F 是否赞成融入“量子计算算法和硬件新进展及其对化学领域的应用”相关内容；G 是否赞成融入“以机器学习和大数据为基础的智能化化学前沿新进展”相关内容

同时我们也需要看到，D: 88.9%的学生通过导论课学习计算模拟实践也取得了较好的成效，但也说明有少部分学生对理论计算技能学习持保守态度。另外，E: 83.3%的学生认可增加理论化学领域的发展历程内容，而F: 88.9%的学生认可融入前沿的量子计算领域的算法和应用，不足90%的认可度，可能说明喜好偏文史的E和偏理论F的学生存在一定分化。有意思的是，在导引课加入当前热门的智能化学领域G达到了98.2%的认可度，说明学生对数字技术相关的战略性新兴产业领域保持非常高的关注度。

鉴于上述的E和F认可度相对不高，可能出现兴趣分化趋势，我们进一步设置了学生兴趣的调研选项，其分布情况如图3所示。基于引导课的学习，超过一半的学生对“反应机制研究”领域表现出了浓厚的兴趣，这与南开大学当前合成化学的学科布局有较好的一致性。超过1/4的学生偏好于“计算方法开发”领域，这可能与南开大学本科生有较好的“数理”基础，具有从事“理论计算化学”领域交叉方向研究的潜力有关。此外，少部分学生对“新材料开发”和“分子动力学模拟”领域也表现出了浓厚的兴趣，这一定程度上体现了我们导引课程介绍的重要作用，也展现了理论计算化学与多学科的交叉融合对培养拔尖人才的重要意义。

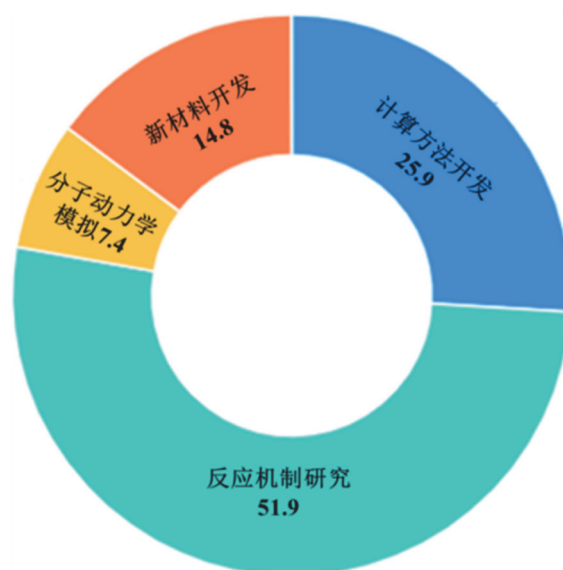


图3 基于计算化学导论课程的专业兴趣分布情况(%)

学生对上述4个领域兴趣呈现差异的比例,这有可能已经埋下了“兴趣的种子”,以期对今后的“科研之路”有帮助。体现了该导论课对学生“兴趣”的培养取得了一定的成效,为下一步实施“因材施教”提供了较好的基础。如可为“前沿课程”阶段的选修课培养做好铺垫,为后续课程改革和创制提供参考依据。

3 多层次课程体系设置

(1) 在课程体系设置上,坚持由浅入深、由理论到实践、从基础到前沿的路线。从计算化学导论到结构化学、量子化学,再到应用计算化学、计算化学实验,再到化学软件开发、计算材料科学等,形成由前沿交叉概论到精深专业领域、由理论到实践的多层次的课程体系。而且课程只限制最低开放年级,并允许多个年级的学生根据自己的基础和兴趣选择,见表2。

表2 近三年南开大学开设的理论计算化学相关课程

序号	课程名	(最低)开放年级	上课学期
1	计算化学导论	一	春季
2	结构化学	二	全学年
3	计算机化学基础	二	春季
4	量子化学与分子力学	二	春季
5	量子化学	三	秋季
6	应用计算化学	三	秋季
7	计算化学实验	三	秋季
8	化学软件开发	四	春季
9	计算材料学	四	秋季
10	化学信息与模拟	四	秋季
11	计算化学生物学	四	春季

我们在导论衔接课程中,也取得了较好的教学效果,可以从具有代表性的结构化学、量子化学、应用计算化学、计算化学实验4门课程的问卷调研中体现。设计问卷内容涵盖了基础知识、能力、学以致用以及对课程的总体评价等方面的4个问题,共计298人次参与,结果如表3所示,具体问卷见补充材料S2。

表3 课程效果调研的正面反馈(%)

课程名称	A	B	C	D
结构化学	98.0	96.0	99.0	96.0
量子化学	86.3	90.0	96.3	92.5
应用计算化学	92.9	91.7	97.6	95.2
计算化学实验	97.1	91.2	97.1	100

A 整体评价; B 基础知识; C 思维能力; D 学以致用

调研数据表明衔接课程整体评价优秀(A),学生十分认可课程对基础知识(B)、思维能力(C)、学以致用(D)三个方面的培养,尤其是国家精品课程“结构化学”^[10],在所有调研方面均得到了96.0%以上的正面评价。这充分体现以“计算化学导论”为中心的多层次理论计算化学课程体系可以较好地培养拔尖人才,而该模式在南开化学学院实践过程中取得了阶段性成效。

4 拔尖人才培养实践中的不足和改进

4.1 培养课程内容的优化

课程之间知识交叠部分还有待进一步优化。例如“量子力学基础”内容在结构化学和量子化学课程都有涉及，需要协调课程之间的侧重点，以避免重复讲授导致的课时浪费。另外，在大数据、人工智能、区块链等数字技术创新驱动下，以数据生成存储和转化利用为基础支撑的“新质生产力”^[1]加速推进，数字经济日益成为影响世界的重要因素。为了顺应数字时代趋势，与理论计算化学密切相关的“AI化学”相关课程的开设显得尤为重要^[2]。同时我们的调研结果(表1, G)也体现了学生对“AI化学”的迫切需求。目前我们理论计算课程体系尚未开设该类课程，需要进一步努力完善。

改进措施如下：

(1) 依托南开大学化学伯苓班实施的“拔尖计划”^[6]和线上教学课程建设平台，更新“理论计算化学”课程体系资源库，进一步优化课程知识体系，以达到“瘦身或健身增效”的目的。

(2) 在“计算化学导论”课程中适度融入“AI化学”简介等内容，同时在高年级的“前沿课程”阶段可考虑增设专门的“AI化学”相关的课程，既契合“国家发展战略层面”的引导，又可以深入挖掘其中的“思政元素”，更好地回答习近平总书记提出的“新时代教育三问”^[3]。

4.2 理论计算化学与其他化学课程的交叉融通

打破学科界限，将理论计算化学融入其他基础化学课和相关非化学类课程，尚有很大的提升空间。其挑战性在于对其他课程的教师的理论化学基础有一定要求，可能额外增加教师的工作。

改进措施如下：

(1) 培训教师掌握一定的理论计算化学的知识，克服教师长期专注于自己领域的惯性，有助于从各个二级学科开始培养拔尖人才；挖掘各二级学科课程中的理论化学成分，并设置相关内容课题资源库，以协助教师有效融入理论计算化学。

(2) 以化学伯苓班为重点，同时辐射数学、物理等其他学科拔尖人才培养，考虑不同学科的“打通互选”的可能性，吸纳不同学科的优秀教师以“科学问题为导向”进行针对性授课，有望更优化拔尖人才的培养。

5 结语

综上所述，南开大学对在“理论计算化学”相关课程的内容、教学方法和培养模式方面进行了系列的探索与实践，并取得了初步成效。以“计算化学导论”课程为中心，打造多层次的系列理论计算化学课程，针对各年级的拔尖学生开设课程，并在课程内容上打破学科界限，以科学问题为导向，融合理论计算化学与其他化学学科，学以致用，从而有效培养复合型拔尖人才。南开大学化学拔尖人才培养模式探索与实践，不仅提高了南开大学化学本科人才的培养质量，也保证了化学学科与当前数字时代发展与时俱进，同时还可能对推动全国理论化学类课程体系建设和人才培养的教学改革，具有一定借鉴和示范作用。

补充材料：可通过链接<https://www.dxhx.pku.edu.cn>免费下载。

参 考 文 献

- [1] 新华社. 习近平主持召开中央全面深化改革委员会第二十四次会议强调：加快建设世界一流企业 加强基础学科人才培养. [2025-02-25]. https://www.gov.cn/xinwen/2022-02/28/content_5676110.htm
- [2] 新华社. 中共中央办公厅印发《关于在全党大兴调查研究的工作方案》. [2025-02-25]. https://www.gov.cn/zhengce/2023-03/19/content_5747463.htm
- [3] 秦宁, 闵清, 李博, 马密霞, 邵开元, 胡文祥. 交叉科学快报, 2018, 2 (4), 111.
- [4] 砥砺奋进的5年：中国化学在转型中焕发新活力——基金委化学部五年发展成果扫描. 中国科学报. 2017-09-25 (6).

- [5] 李维红, 张奇涵, 李娜, 王颖霞, 裴坚. 大学化学, **2019**, *34* (10), 1.
- [6] 姜久兴, 巢晖, 郭燕, 李淑君, 林莉莉, 朱芳. 大学化学, **2019**, *34* (10), 50.
- [7] 王佰全. 大学化学, **2019**, *34* (10), 18.
- [8] 孙宏伟, 陈兰. 大学化学, **2018**, *33* (6), 18.
- [9] 许秀芳. 化学教育, **2021**, *42* (18), 105.
- [10] 南开大学结构化学精品课程网站. [2025-02-25]. <https://struchem.nankai.edu.cn>
- [11] 环球网. 习近平主持召开新时代推动东北全面振兴座谈会强调 牢牢把握东北的重要使命 奋力谱写东北全面振兴新篇章. [2025-02-25]. <https://3w.huanqiu.com/a/34f321/4ETNTsetdGj?p=1&agt=10>
- [12] Hong, X.; Yang, Q.; Liao, K. B.; Pei, J. F.; Chen, M.; Mo, F. Y.; Lu, H.; Zhang, W. B.; Zhou, H. S.; Chen, J. X.; *et al. Sci. China Chem.* **2024**, *67* (8), 2461.
- [13] 新华社. 习近平: 高举中国特色社会主义伟大旗帜 为全面建设社会主义现代化国家而团结奋斗——在中国共产党第二十次全国代表大会上的报告. [2025-02-25]. https://www.gov.cn/xinwen/2022-10/25/content_5721685.htm