

## 科研案例教学法在《计算材料学》课程教学中的应用

井群\*, 崔秀花, 吉旭, 姜轶

新疆大学物理科学与技术学院, 乌鲁木齐 830017

**摘要:** 计算材料学课程是材料科学与工程等专业的必修课程, 针对计算材料学课程特点和教学现状, 结合课题组的非线性光学研究方向, 以“材料的本征属性——能带结构”为例, 简述在《计算材料学》课程中应用科研案例教学法, 激发学生的学习兴趣, 培养学生自主学习能力, 提升教学效果, 为学生进一步掌握专业技能和提高实践技能打下坚实的基础。

**关键词:** 科研案例教学; 计算材料学; 能带结构

**中图分类号:** G64; O6

## Application of Research Case-Based Teaching Method in the Computational Materials Science Course

Qun Jing\*, Xiuhua Cui, Xu Ji, Yi Jiang

School of Physical Science and Technology, Xinjiang University, Urumqi 830017, China.

**Abstract:** Computational Materials Science is a compulsory course for majors such as Materials Science and Engineering. Considering the characteristics and current teaching landscape of this course and leveraging the research focus of our group on nonlinear optics, this paper takes the “intrinsic properties of materials - band structure” as an example to illustrate the application of the research case-based teaching methodology in the Computational Materials Science curriculum. This approach aims to stimulate students' learning interest, cultivate their autonomous learning abilities, enhance teaching effectiveness, and lay a solid foundation for students to master professional skills and improve practical capabilities.

**Key Words:** Research case-based teaching, Computational materials science, Band structure

新材料的研发与人类社会、国家经济命脉及战略全局息息相关。进入二十一世纪以来, 美国、日本等国家相继提出基因组计划, 基于国家战略考虑, 我国紧跟其后提出我国的基因组计划、“中国制造2025”等重大战略规划。基因组计划中最重要一环就是数据科学大量应用于材料领域, 即科研人员通过实验结果数据库、高通量计算和人工智能等技术, 加速新材料的理性设计和高效预测筛选。在此背景下, 计算材料学应运而生并迅速发展成为一门新的学科——该学科依托高性能计算设备平台和高效高可靠性计算软件, 系统研究材料的组分、结构、性能与演化进程, 旨在分析材料的实验现象、预测新型功能材料的物理化学性质、加速新材料研发进程<sup>[1]</sup>。近年来, 随着高性能计算

收稿: 2025-06-20; 录用: 2025-08-28; 网络发表: 2025-09-04

\*通讯作者, Email: qunjing@xju.edu.cn

基金资助: 新疆大学金课建设项目《计算材料学》(XJU2022JK13); 新疆大学研究生精品示范课《计算材料学和材料设计》(XJDX2023YJPK05); 新疆大学2024年《计算材料学与材料设计》专业学位研究生教学案例库建设项目(XJDX2024YALK16); 新疆大学本科教育教学改革研究项目《教育数字化时代背景下计算材料学课程建设的思考与探索》(XJU-2024JG17)和大学生创新训练计划项目(202210755097, S202210755108, 202310755096, 202310755098)

设备和高效高可靠性计算软件的快速发展, 计算材料学方法在光电功能材料、催化、清洁能源等领域得到了广泛应用发展。《计算材料学》课程也成为高校材料科学与工程、物理学、化学与化工等专业的专业必修课程或者专业选修课程。该课程涉及数学、物理、化学、材料、计算机等多学科知识体系<sup>[2]</sup>, 教学内容涉及大量的抽象概念、数学理论推导运算、计算机编程代码等, 学生普遍面临理解困难。传统的课堂讲授模式, 往往会让学生感觉枯燥无味、跟不上教学进度甚至放弃学习等现象。如何让学生在短时间内高效掌握“计算材料学”基本原理与方法, 并应用于后续的学习、实践和创新研究, 已成为“计算材料学教学研究”课程改革的重要命题。

案例教学法于20世纪初首创于美国哈佛商学院商业管理教育, 该校为美国乃至全球培养了大批杰出企业家。其后该教学法逐步推广至法学、医学等强实践专业领域, 被公认为是一种成功的教育范式, 获得美国以外全球高校的认可与推广<sup>[3]</sup>。20世纪90年代引入中国, 初期主要应用于法学、医学及管理学等学科, 近二十年开始在理工科课程领域被广泛应用。无论是理论课如高等数学<sup>[4]</sup>、传热学<sup>[5]</sup>、化工原理<sup>[6]</sup>、水力学与泵<sup>[7]</sup>、工程伦理<sup>[8]</sup>, 还是理论实践结合的综合类课程, 如半导体照明技术<sup>[9]</sup>、水工建筑物<sup>[10]</sup>、机电工程<sup>[11]</sup>、气象学<sup>[12]</sup>、工程热力学<sup>[13]</sup>、测试技术<sup>[14]</sup>, 案例教学法均因其积极调动学生自主学习等特点被广泛应用且取得良好的教学效果, 其优势明显。科研案例教学法作为案例法的进阶形态, 立足课程特点和教学现状, 遴选课题组或国内外同行已发表的科研成果, 经系统开发设计转化为课堂教学案例、通过真实科研情景的沉浸式学习, 使学生达成理论知识内化与实践能力构建的统一, 为进一步学习高阶理论和技能打下坚实基础。因此在计算材料学课程中采用科研案例教学法, 是一项有意的尝试, 有利于增强学生的学习效果, 提高学生的学习效率, 促进课程改革<sup>[15]</sup>。

## 1 “计算材料学”课程教学研究现状

计算材料学是一门高度交叉融合的跨专业课程, 其教学内容涉及大量物理化学领域的抽象概念、数学领域的微积分方程迭代求解以及可实现的计算机编程技能等。然而传统的教学模式, 自基础知识直线型展开, 容易陷入“教师逻辑严密、学生兴趣索然”的“困境”, 很难持久吸引学生的注意力, 导致学生学习吃力、积极性下降, 甚至放弃学习, 最终难以达到预期教学效果。另一方面, 计算材料学的前期学习基础需要固体物理甚至量子力学等先修知识作为支撑, 但由于种种原因, 部分学校或者相关专业并未开设量子力学等课程, 这使得缺乏相关基础的学生在学习量子化学、密度泛函理论等内容时感到“不知所云”, 进而学习兴趣减退。总而言之, 无论从哪个角度讲, 在计算材料学课程中引入科研案例教学法都是十分必要的。

## 2 科研案例教学法应用的价值与意义

在具体的教学实践过程中, 我们尝试将课题组和同行的前沿科研成果作为科研案例并引入到“计算材料学”的课程教学中。该方法的实施具有以下重要价值和显著意义。激发学习动力, 深化理论理解: 通过引入前沿科研案例, 有效激发学生对理论课程的兴趣, 化解抽象概念的晦涩性, 引导其理解并掌握基础概念在实际材料计算研究中的应用, 为后续专业技能与实践能力的提升奠定坚实基础。培养核心能力, 赋能终身发展: 借助典型且针对性强的科研案例, 在引导学生进行独立思考的过程中, 系统培养其自主学习能力、实践操作能力、创新思维能力以及分析解决复杂问题的能力, 从而强化其终身学习能力的根基。反哺教师发展, 促进科教融合: 科研案例的遴选、编写与教学实践过程, 驱动教师对科研成果进行教学化凝练, 持续积累优质教学案例资源, 有效实现了科研与教学的相互促进与协同发展。推动课程改革, 优化教学体系: 科研案例教学法在“计算材料学”课程中的深度应用, 有力推动了课程内容的更新迭代与教学模式的创新, 对深化和完善该课程的改革建设具有积极作用。

### 3 科研案例法在“计算材料学”课程中应用的可行性

计算材料学根据研究对象的尺度采用不同研究方法,包含密度泛函理论(DFT)、量子化学计算、分子动力学、蒙特卡洛方法、相场法和有限元方法等,可计算内容涵盖电子结构、力学、热学、光学、电磁学等多个领域。

能带结构是表征材料本征物理性质的一个核心物理量,其可揭示材料的带隙大小、导电性、载流子有效质量、电子态密度以及能带波函数的轨道特征等信息。自20世纪30年代DFT创立以来,该方法已成为材料能带结构理论研究的主流工具。然而,基于局域密度近似(LDA)和广义梯度近似(GGA)的交换关联泛函,一直存在显著低估材料的带隙问题。为克服困难,研究者在精确表达交换关联泛函等方面做出很多努力<sup>[16]</sup>。在web of science平台以“first-principles”和“band structure”为主题关键词检索到的相关文献就达45800篇<sup>[17-20]</sup>。在CNKI数据库中,以“能带结构”和“第一性原理”为主题关键词检索到的文献超过1900余篇<sup>[16,21,22]</sup>。这充分表明,能带结构作为描述材料结构-性能关系的关键物理量,其研究基础非常丰富。因此,在计算材料学课程教学中引入能带结构的科研案例具有充分的可行性。基础性:能带结构是学生必须掌握的核心基本概念,理解并学会分析能带结构图是本课程的基本教学要求。代表性:它集中体现了第一性原理计算的核心思想和典型应用,是连接理论、计算与实际材料性质的理想桥梁。研究活跃性:该领域研究历史悠久且持续活跃,积累了海量案例资源,便于筛选出典型、前沿的教学案例。

然而在实际教学过程中,受限于课时总量,以及部分院校量子力学、固体物理等先修课程开设不足或深度不够,学生常对相关概念理解不清,分析能带图的能力薄弱。针对上述情况,本文以“材料的本征属性——能带结构”作为具体科研案例,引导学生探究不同泛函对能带结构计算结果差异的影响,理解其物理根源与局限性。进一步引入轨道耦合效应(SOC效应)对能带结构的影响。通过此案例教学,激发学生的学习兴趣,促使学生深入思考能带结构及相关计算方法的物理内涵,有效提升学生分析问题、解决问题的能力,强化其科研素养,实现教学与科研实践的有机统一与相互促进。

### 4 科研案例教学法的实施流程

案例教学法是一种由教师引导的启发式教学范式,其实施流程为:教师精心选择与本课程高度契合的科研案例,将学生引导进入特定真实的科研情景,实现理论和实践有机融合;学生通过独立探究或小组协作等方式分析案例、解决问题并进行成果呈现;教师最终进行点评与总结。该科研教学案例旨在使学生能够接触学科前沿,深化理论认知,促进理论与实践的统一,有效达成专业人才培养目标。

#### 4.1 确立教学目标

教学目标是案例教学的导向核心。明确教学目标,即界定科研案例拟解决的核心教学问题,明晰学生通过学习应掌握的知识点、提升的能力维度及达成的学习成效。这是保障教学任务顺利完成、提升教学质量的根本前提。

#### 4.2 收集科研案例

案例是教学内容的载体。教师需广泛收集课题组及同行发表的高质量文献资料,从中筛选适合于“计算材料学”课程教学的科研案例。所选科研案例应具备真实性(源于公开发表的科研实践)、典型性格和教学适用性。

#### 4.3 选择和完成科研案例

基于既定教学目标和核心教学内容,教师需对筛选出的文献进行深度加工。在多篇文献中精心选择、概括、组织、设计和撰写教学案例。科研案例的内容和设计:一是要紧扣教学大纲知识点,并自然的将知识点融入到案例呈现过程中;二是要满足案例的基本要求(真实性、客观性、典型性和时效性)的同时,还要满足综合性,即系统展示相关知识点及其联系;三是兼具考虑学生的兴趣,在兴趣学习中掌握知识,锻炼基本科研思维能力;四是最后完成的案例可以是文字、图表、动画和多

媒体等某种形式，或多种形式的组合，核心目标就是使案例具有启发性和引导性，能够循序渐进的引导学生主动积极思考、分析并解决案例中的各种问题，从而潜移默化地掌握基本概念、操作方法和核心知识及研究方法。

#### 4.4 课堂呈现和讨论

教师对课堂内容精心设计，把握案例呈现的时机，营造积极思考氛围，预留充足时间供学生独立思考 and 充分讨论，确保人人有发言机会。教师善于从多角度多方位多层次引导和启发学生对科研案例进行分析和讨论，碰撞思维火花，共同探寻问题解决方案，深刻体验理论应用于实践、实践反哺理论的过程。同时讨论过程中教师因发挥主导作用，避免跑题和冷场，平衡观点避免一边倒，始终引导围绕中心议题展开，旨在丰富学生见识，拓宽学生视野，激发创新思维、提升分析能力。

#### 4.5 科研案例总结

科研案例总结课堂教学中最后一个环节，教师对学生讨论中的多元观点进行精要点评，系统总结案例所蕴含的核心理论概念与知识点，建立知识图谱。同时教师需对本轮科研案例教学的实施过程、内容设计、实际效果等进行有效性反思，不断完善科研案例本身内容及案例教学法的掌握和运用。及时有效的反思和总结，是对案例本身理论价值的提炼，是对知识脉络的梳理、是对学生掌握知识、提升能力的推动，是教师自我成长的推手，总之，反思和总结是承上启下的作用，是整个科研案例教学环节重要一环。

#### 4.6 教学效果评价

采用多维评教方式评估教学成效，如通过课程考试，与传统教学方式的历史成绩进行比较和定量分析进行比较；也可采用课前课后问卷深入了解学生学习体验与收获进行评估；还可通过追踪学生申请相关大学生创新训练计划项目、发表科研论文成果等能力产出，综合评估其知识迁移能力、科研素养提升及创新能力发展情况，全面分析学生学习效果与教师教学效果。

## 5 计算材料学科科研案例实践

### 5.1 “计算材料学”课程科研案例教学实践流程

依据上述科研案例实施步骤，在计算材料学课程中，针对讲授能带结构内容时，以“材料的本征属性能带结构介绍——以 $\text{Pb}_3\text{O}_2\text{Br}$ 材料为例”为具体科研案例，展示其教学实践流程，具体流程图如图1所示。

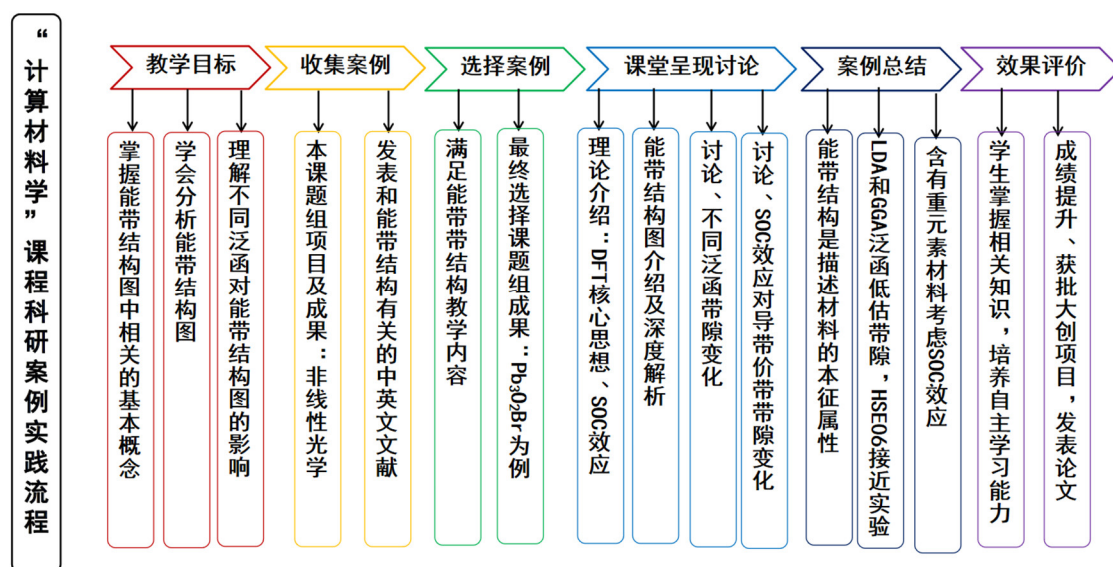


图1 “计算材料学”课程科研案例实践流程图

## 5.2 基于 $\text{Pb}_3\text{O}_2\text{Br}$ 案例的能带结构教学

密度泛函理论(DFT)将复杂体系的多体问题转化为单体问题, 因其较高的计算精度和较快的计算速度, 在材料模拟、化学反应、新材料高通量设计筛选领域发挥着越来越重要的作用。对于一个复杂体系, 考虑单电子近似和绝热近似, 薛定谔方程可以写成Kohn-Sham方程的形式:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + V_{\text{H}}(\mathbf{r}) + V_{\text{XC}}(\mathbf{r})\right]\varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\varphi_i(\mathbf{r}) \quad (1)$$

其中, 第一项代表电子的动能, 第二项代表电子与所有原子核之间的势能, 第三项称为Hartree势能, 代表所考虑的电子与体系中所有电子所产生的总电荷密度之间的库仑相互作用, 第四项称为交换关联泛函。为了给出交换关联泛函的具体形式, 人们对不同体系做了大量研究工作。目前主要的交换关联泛函有: 局域密度近似泛函(LDA)、广义梯度近似泛函(GGA)、杂化泛函(Hybrid Functional, 有些教科书也称之为混合泛函)等。在实际使用过程中, LDA通常会高估结合能、低估晶格常数、低估半导体/绝缘体的带隙和介电常数。由于考虑了对电子密度梯度的修正, GGA的泛函可以得到较好的晶体结合能、键长、键角等数值, 然而仍然会低估带隙。混合泛函中加入了部分Hartree-Fock的精确交换, 例如著名的HSE06泛函表达形式为:

$$E_{\text{XC}}^{\text{HSE}} = aE_{\text{X}}^{\text{HF,SR}}(\omega) + (1-a)E_{\text{X}}^{\text{HF,SR}}(\omega) + E_{\text{X}}^{\text{PBE,LR}}(\omega) + E_{\text{c}}^{\text{PBE}} \quad (2)$$

其中, 当 $\omega = 0$ 时就是所谓的PBE0混合泛函, 而当 $\omega \rightarrow 0$ 的时候和PBE泛函一样。

为了充分展示不同泛函对材料能带结构的影响, 在授课过程中采用VASP软件计算并分析了 $\text{Pb}_3\text{O}_2\text{Br}$ 的能带结构(如图2所示)。如图2所示, 无论是采用PBE泛函还是HSE泛函,  $\text{Pb}_3\text{O}_2\text{Br}$ 的能带结构显示出较高的一致性, 其中导带底部位于高对称点Z, 而价带顶部则靠近高对称点Y。然而, 两种泛函在带隙数值上存在显著差异, HSE泛函预测的带隙宽度为3.21 eV, 较PBE泛函预测的2.25 eV要大很多。尽管目前尚未有实验数据直接报道 $\text{Pb}_3\text{O}_2\text{Br}$ 的带隙值, 我们认为HSE泛函计算得到的带隙值可能更接近实验值。这一推测基于HSE泛函在描述电子关联效应方面的优势, 特别是在处理强关联材料时, HSE泛函通常能提供更为准确的带隙预测, 但是HSE泛函的计算成本要远高于PBE泛函。

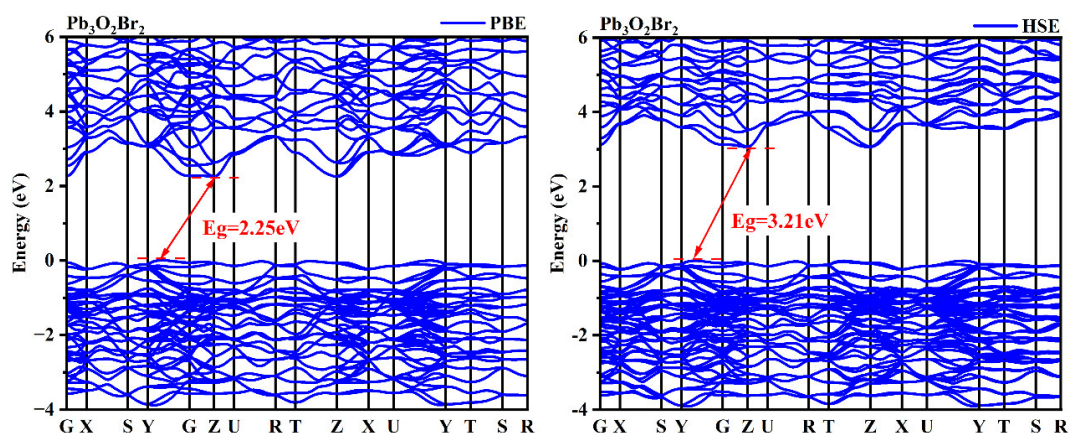


图2  $\text{Pb}_3\text{O}_2\text{Br}$ 在使用PBE泛函(图左)和HSE泛函(图右)的能带结构

值得一提的是, 一些容易被忽略的本征物理量(例如自旋轨道耦合效应)也会对计算结果产生影响。有研究者通过半经典方法导出了自旋轨道耦合哈密顿量<sup>[23]</sup>:

$$H_{\text{soc}} = \frac{Z^4 e^2 \hbar^2}{4\pi m_e^2 c^2 \varepsilon_0 a_0^3 n^3 l(l+1)(2l+1)} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (3)$$

一般而言, 重元素具有比较明显的自旋轨道耦合效应。然而, 长期以来在使用计算材料学方法研究非线性光学材料的电子结构和光学效应过程中, 自旋轨道耦合效应确被忽视了。为了在教学过程中, 充分说明这类本征物理量对能带结构的影响, 展示考虑自旋轨道耦合效应和不考虑自

旋轨道耦合效应得到的能带结构。如图3所示,在考虑自旋轨道耦合效应后, $\text{Pb}_3\text{O}_2\text{Br}_2$ 的带隙数值从原始的2.25 eV降低到2.09 eV,而高对称点保持不变。为了分析能带结构的变化,我们进行了数据处理并得到了图4。从图4中可以看出,在价带顶部考虑SOC前后的结果变化不大,而在导带底部考虑SOC效应后,能带发生了向下平移。正是由于导带底部的这种平移,导致考虑SOC效应后的带隙数值减小。

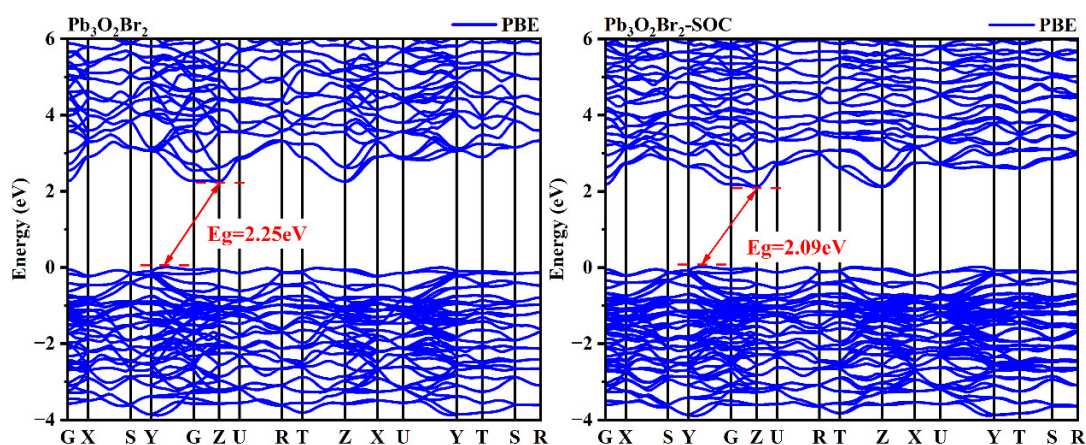


图3  $\text{Pb}_3\text{O}_2\text{Br}_2$ 在不考虑SOC效应(左图)和考虑SOC效应(右图)时的能带结构

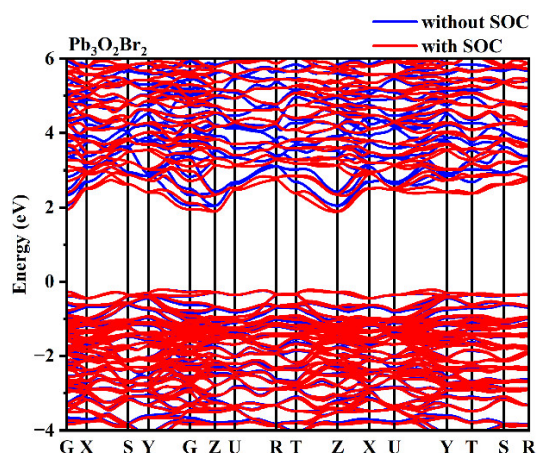


图4  $\text{Pb}_3\text{O}_2\text{Br}_2$ 在不考虑SOC效应(蓝线)和考虑SOC效应(红线)时的能带结构

### 5.3 教学安排

基于相关教学内容的内在逻辑,上述科研案例在具体教学实践中的安排如下:

关于不同泛函对能带结构的影响,通过案例导入和分析,展示相关数据,引导学生讨论影响能带结构计算结果的因素,总结不同泛函对计算结果的影响规律;随后在完成泛函影响学习的基础上,再次运用案例教学法引入考虑自旋轨道耦合后的能带结构图,引导学生分析能带结构图并总结考虑自旋轨道耦合效应后能带结构的变化;随后安排配套实验教学环节,要求学生自主进行计算操作,获得指定材料的能带结构,分析计算数据,并与课堂讨论结果进行对比验证,完成实验报告。在教学安排的实验课程中,特别要学生总结不同泛函计算所耗费的计算时间和计算资源,为接下来后期讲授机器学习方法做铺垫,实现知识的自然迁移与衔接。

### 5.4 教学效果

自2018年新疆大学开设“计算材料学”课程以来,本教师团队持续致力于教学改革探索。2022

年,团队在本科生“计算材料学”和研究生“计算材料与材料设计”课程中全面引入科研案例教学法。经过三年的教学实践和跟踪分析,教学方法在提升学生学习主动性、深化知识理解与应用、强化实践能力及培养科研素养方面取得了一些成效,具体体现在以下几个方面:

(1) 科研案例法的引入有效激发学生的学习热情和主动性。具体表现为学生课后主动找任课老师讨论案例、计算方法及相关科研问题的频次增多,从改革前的平均每学期约10人次,增至改革后每学期约30人次(2022–2023-2)和40人次左右(2023–2024-2)。课堂互动活跃增多,基于雨课堂的师生互动次数(包括弹幕、投稿、习题应答、随机点名等)在引入案例教学法后呈现爆发式增长,2022–2023-2学期较改革前学期(2021–2022-2)增长51.7%,2023–2024-2学期更是大幅增长166.8%。将课程所学计算方法主动应用于的大学生创新训计划(简称“大创”)项目的同学比例提高。主动咨询材料建模、计算模型、输入参数文件等具体问题以支撑其大创项目学生数量由改革前的零星个案,增长至改革后每学期稳定的10人左右。具体数据具体见表1。其典型示例有21级研究生帕丽旦·吾甫尔在合金材料的研究过程中,成功运用分子动力学模拟方法研究了合金材料的稳定性问题<sup>[24]</sup>。

表1 引入科研案例教学法前后学生主动互动及实践情况对比

互动与实践行为	改革前		改革后		变化趋势
	2021–2022-2	2022–2023-2	2022–2023-2	2023–2024-2	
课后主动找教师讨论人次	约10	约30	约30	约40	显著增加(3–4倍)
为“大创”项目咨询人次	零星(≤3)	8	8	12	显著增加(主流化)
课堂上实践专注度观察	一般	高	高	非常高	显著提升
雨课堂师生互动次数	1041	1579	1579	2777	爆发增长

(2) 科研案例法的引入深化知识理解与应用能力。通过引入精心设计的能带结构分析案例,学生对抽象概念如费米能级、带隙、能带色散的理解更加准确和深入。相较改革前,大多数学生能够独立解读给定材料的能带结构图,并据此准确判断材料的导电类型(金属、半导体、绝缘体)、估算载流子有效质量等关键物理性质,实现了知识从理解到应用的转化。课堂练习和案例讨论课表现显示,学生对核心概念的辨析和实际应用能力较改革前有显著提高,课堂平均分(反映课堂参与和即时理解)和总评成绩稳步提升,见表2和图5。

(3) 科研案例法的引入科研创新能力培养成效显著。在课程所学知识及科研案例教学培养的能力支撑下,学生团队在教师指导下,先后成功获批3项国家级大学生创新创业训练计划项目。更值得关注的是,学生成功发表1篇SCI收录科研论文<sup>[25]</sup>,该成果直接源于课程项目实践和案例方法的深化应用,有力印证了科研案例教学法对学生科研素养和创新能力的实质性推动作用。

表2 引入科研案例教学法前后,学生总评成绩及到课率和师生互动数据比较

学期	改革前(基准1)		改革后	
	2021–2022-2	2022–2023-2	2022–2023-2	2023–2024-2
最高分	91	91	91	96 (+5)
最低分	60	60	60	65 (+5)
平均分	74.6	74.6	76.0 (+1.4)	85.9 (+11.3)
整体到课率	99.6%	99.6%	99.6%	99.50%
课堂平均分	88.7	88.7	92.6 (+3.9)	91.2 (+2.5)
师生互动次数	1041	1041	1579 (+51.7%)	2777 (+166.8%)
总评成绩构成	雨(10%) + 期末(90%)		雨(10%) + 案(30%) + 期末(60%)	

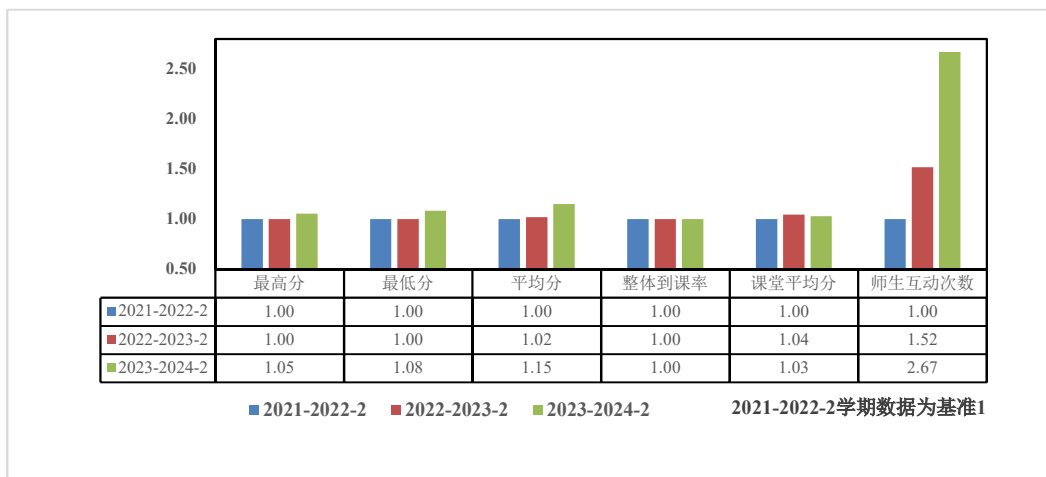


图5 引入科研案例教学法前后，学生成绩及雨课堂到课率、平均分及互动率比较

## 5.5 教学反思

在科研案例教学法的实施过程中，我们也进行了深入反思。案例选择与设计是关键：案例需紧密结合前沿科研且难度适中，既能激发兴趣，又确保学生“跳一跳够得着”，实践也表明，初期案例偏难，部分学生参与度受影响，后期调整后效果有所改善。精细化课堂互动与引导是挑战：案例教学法有效激发了课堂互动频次(见表1和表2)，如何在有限的课堂内高效引导讨论、提升互动质量(而非仅数量)成为新探索和优化的课题。最后深化学生反思环节是重点：除教师对案例自身和教学过程的反思之外，引导学生对科研案例核心问题进行的深度反思至关重要，如针对不同泛函和SOC效应参数选择造成带隙计算结果的差异性，应积极引导思考。在运用DFT计算材料带隙时，如何根据材料目标，在计算精度和效率之间做出权衡？这种反思能促进学生清晰认识不同参数的适用性，提升解决实际问题的能力。

## 6 结语

在“计算材料学”课程中引入科研案例教学法，一有效弥补了传统教学模式的不足。该方法实现了科研成果服务于教学，激发学生学习兴趣，提高学生自主学习能力，为学生深入掌握专业技能、提升实践能力奠定了坚实基础。同时，该模式也促进了教师教学水平与综合素质的协同发展。从本质上看，科研案例教学法有力推动了教学与科研的深度融合与相互促进，实现了科教协同育人的良性循环。

当然，教学有其内在规律，但并无固定不变的模式。科研案例教学法并非适用于所有课堂情境的通用方案。未来改革的持续方向在于：根据课程内容的具体需求，合理运用包括案例法在内的多元化教学方法与手段，核心目标始终是激发学生内在学习动力，系统培养其分析问题、解决复杂问题的实践能力与创新意识。这亦是“计算材料学”课程教学改革不懈追求的长远目标。

## 参 考 文 献

- [1] 江建军, 缪灵, 张宝. 计算材料学: 设计实践方法. 北京: 高等教育出版社, 2022.
- [2] 许真铭, 刘庆生, 陈江安. 大学化学, **2024**, 39 (1), 332.
- [3] 米伟哲. 实验室研究与探索, **2010**, 29 (3), 145.
- [4] 栾秀春, 高璞珍, 王晓莺, 王俊玲. 高等工程教育研究, **2021**, No. 3, 169.
- [5] 张敬奎, 张佳凯, 范毅, 蔡靖雍. 教育理论与实践, **2024**, 44 (36), 57.

- [6] 吴志国, 贾原媛, 郝庆兰. 黑龙江教育(理论与实践), **2023**, No. 8, 78.
- [7] 初文华, 张健, 邹晓荣, 李玉伟. 教育教学论坛, **2019**, No. 45, 164.
- [8] 陈玉娇, 徐曼, 沈睿. 吉林省教育学院学报, **2019**, 7 (35), 103.
- [9] 邱选兵, 齐美山, 魏计林, 王青狮, 李传亮. 大学教育, **2014**, No. 18, 135.
- [10] 李晓庆, 高强, 袁俊平. 中国电力教育, **2013**, No. 29, 54.
- [11] 谢志江, 孙红岩, 蒋和生, 张济生. 高等工程教育研究, **2003**, No. 5, 75.
- [12] 智海, 龚建福. 内江科技, **2015**, 36 (11), 41.
- [13] 徐青, 凌长明. 中国电力教育, **2014**, No. 23, 39.
- [14] 陈永会. 大学教育, 2014, No12: 118.
- [15] 陈显飞, 张文涛, 杜海英. 大学化学, **2025**, *40* (3), 52.
- [16] 蒋鸿, 张旻焯. 中国科学: 化学, **2020**, *50* (10), 1344.
- [17] Ayuela, A.; Chico, L.; Jaskólski, W. *Phys. Rev. B* **2008**, *77*, 085435.
- [18] Farjam, M.; Rafii-Tabar, H. *Phys. Rev. B* **2009**, *80*, 167401.
- [19] Arif, M.; Liu, X.; Jia, H.; Yang, Z.; Hou, X.; Pan, S. *Small*, **2025**, *21* (23), 2500633.
- [20] Zhang, T.; Liang, F.; Li, C.; Ye, N.; Hu, Z. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 18275.
- [21] 申笠蒙, 李玺, 张博. 材料导报, **2025**, *39* (12), 55.
- [22] 雷霖. 山西电子技术, **2024**, No. 6, 94.
- [23] 曾谨言. 量子力学教程. 北京, 高等教育出版社, 2005.
- [24] Hopur, P.; Chen, W.; Zhou, Y.; Zhou, J.; Wang, T. *Metals* **2023**, *13* (7), 1181.
- [25] Deng, C.; Wang, J.; Hu, M.; Cui, X.; Duan, H.; Li, P.; Lee, A. M. *Nanmaterials* **2023**, *13* (23), 3037.