

**编者按：**随着理论与计算化学基础理论的不断发展和计算机技术的飞速进步，计算模拟在化学及其交叉学科中的重要性日益凸显。理论与计算化学方法不仅为揭示物质结构与性能提供了直观的理论模型和清晰的物理图像，还为化学研究注入了新的活力。在本科生和研究生的化学及其交叉学科课程教学中，引入计算模拟方法能够帮助学生从分子层面深入理解化学基本概念与理论，从而提升教学效果。

为进一步推动计算模拟方法在化学教学中的应用，提升课程的高阶性、创新性与挑战度，《大学化学》编辑部组织了“理论与计算化学在化学及其交叉学科教学中的应用”专刊。本期专刊共收录29篇高质量稿件，内容涵盖理论与计算化学在解释化学现象、材料性质及生命机理等领域的教学实践与研究探索。希望通过这些成果分享，为理论与计算化学在化学及其交叉学科教学中的应用提供有益的借鉴与启发，助力化学教育的创新发展。

## “中国教育现代化”理念指导下理论与计算化学课程讲座模式建设

李辉\*，聂嘉，吕中元，钱虎军，朱有亮，白福全，曲泽星，钟荣林

吉林大学化学学院，长春 130012

**摘要：**理论化学致力于深入探究化学反应的本质，而计算化学则因其方法的广泛适用性得到普遍认可。这两个领域的协同作用在促进学科融合方面起着关键的作用。因此，在理论与计算化学课程中也应该思考如何利用这两个领域在推动学科交叉发展中的重要性和独特贡献进行教学。在“中国教育现代化”理念的指导下，作者在研究生理论与计算化学课程中引入了前沿讲座，以期通过聚焦理论与计算化学又涵盖多个领域的讲座进行授课，帮助学生突破思维局限和信息壁垒，构建从具体知识点到广阔知识网络的完整认知框架，从而认识到理论与计算化学与整个“大化学”学科以及其他自然科学学科的密切联系。本文对吉林大学“理论与计算化学”课程顶层设计与具体实施过程进行了阐述，展示了以讲座为核心的“基础理论+专题讲座+实践操作”创新教学模式，力求实现“1+1+1>3”的教学效果。本文希望能为高校理论与计算化学类课程教学提供可借鉴的思路和方案，以更好适应中国教育现代化的发展需求。

**关键词：**理论与计算化学课程；讲座模式；研究生教育；教学改革；中国教育现代化

**中图分类号：**G64；O6

## Developing a Lecture Mode for Theoretical and Computational Chemistry Curriculum under the “Modernization of Chinese Education” Initiative

Hui Li\*, Jia Nie, Zhongyuan Lü, Hujun Qian, Youliang Zhu, Fuquan Bai, Zexing Qu, Ronglin Zhong  
College of Chemistry, Jilin University, Changchun 130012, China.

**Abstract:** Theoretical chemistry delves into the essence of chemical reactions, and computational chemistry is widely recognized for its versatile applicability. Together, they significantly enhance interdisciplinary integration. This paper examines the use of these disciplines to foster interdisciplinary development within educational settings,

收稿：2024-02-01；录用：2024-03-11；网络发表：2024-04-18

\*通讯作者，Email: prof\_hui@jlu.edu.cn

基金资助：吉林大学2024年研究生精品课程建设项目

particularly under the “Modernization of Chinese Education” initiative. It introduces a novel integration of cutting-edge lectures into graduate theoretical and computational chemistry course. This curriculum design seeks to dismantle cognitive barriers and break down information silos of students, fostering a comprehensive cognitive framework that connects specific points to a broader knowledge network, highlighting the integral role of theoretical and computational chemistry within the wider discipline of chemistry and other natural sciences. The paper details the top-level design and practical implementation of the “Theoretical and Computational Chemistry” course at Jilin University, showing an innovative teaching mode centered around “fundamental theory + specialized lectures + practical exercises”, to achieve an educational synergy described by the formula “1+1+1>3”. The study aims to provide referenceable insights and methodologies for enhancing theoretical and computational chemistry course at universities, aligning with the evolving demands of modern Chinese education.

**Key Words:** Theoretical and computational chemistry course; Lecture mode; Graduate education; Educational reform; Modernization of Chinese education

“中国教育现代化2035”提出了推进教育现代化的八大基本理念，其中包括“更加注重以德为先，更加注重全面发展，更加注重面向人人，更加注重终身学习，更加注重因材施教，更加注重知行合一，更加注重融合发展，更加注重共建共享”<sup>[1]</sup>，强调了教育的全面性、多元性以及终身化、个性化，促使教育更加注重综合素质的培养和创新能力的提升。对于化学专业而言，理论与计算化学课程作为核心课程之一，其改革和发展不仅要紧跟科技前沿，还需达到全面育人的目的。在此背景下，本文将探讨如何在“中国教育现代化”理念的指导下，进行理论与计算化学课程类课程讲座模式的设计和 implement，达到提高教学质量、培养高层次创新型人才的目标。

## 1 高校理论与计算化学课程类课程教学现状

### 1.1 高校理论与计算化学课程类课程开设及改革情况概述

近几十年来，理论与计算化学在化学学科的发展中扮演着越来越重要的角色<sup>[2]</sup>。理论化学正不断扩展其领域，从与传统的有机、无机、分析和物理化学密切相关的范畴拓展到药物设计、能源科学、生物学和材料科学等新兴交叉领域<sup>[3]</sup>。值得特别强调的是，计算机技术的飞速进步、人工智能算法的日益成熟以及分子层面数据的迅速增长，共同为理论与计算化学的快速发展提供了坚实的基础<sup>[4,5]</sup>。

回溯至1950年，唐敖庆教授回国并在北京大学化学系任教，率先开设了“化学数学”课程；后任教东北人民大学(现吉林大学)，招收了首届理论化学研究生，系统讲授基础理论化学课程<sup>[6]</sup>。当前，国内外高校普遍开设了面向本科生或研究生的理论与计算化学类课程。例如，在国内，清华大学开设了“计算化学实验”“理论与计算化学”等课程，北京大学开设了“化学中的数学”“理论与计算化学”等课程，中国科学技术大学开设了“统计力学”“理论与计算化学”等课程，复旦大学开设了“计算化学”“量子化学原理及应用”等课程。在国外，美国的一些高校，如哈佛大学、加州大学伯克利分校、北卡罗来纳大学等也同样设置了理论化学类与计算化学类课程。

随着理论化学与计算化学发展的日益演进，作者发现，侧重于基础知识传授和重复上机训练的传统教学模式已不足以满足时代发展的需求<sup>[7,8]</sup>。传统教学模式在课程理念、教学目标、授课方式等方面出现了与高层次创新型人才培养目标<sup>[9]</sup>以及“中国教育现代化”理念<sup>[1]</sup>不匹配的现象。一些问题包括：

(1) 学生在课堂上无法获取与理论化学或计算化学相关的前沿知识、交叉领域动态以及与国家战略相关的发展方向。目前课程中存在教学资源更新不及时、实时研究热点引入较少、教师涉猎领域有限的情况，导致知识迭代相对滞后、涉及领域无法满足大部分学生需求、课程探究方向与国家需求联系不够紧密的情况。这不利于培养学生研究能力、创新能力及跨学科能力的有效提升。

(2) 授课模式单一, 以教师为主体进行授课。教师与学生之间没有互动或互动较少, 不能及时解决学生在学习过程中出现的问题, 容易导致学生产生疲惫厌倦的状态。这不利于激发学生学习与科研兴趣和培养研究生自主思考的能力。

(3) 课程过于注重理论知识的讲解, 忽视软件操作层面的实践教学。据作者通过问卷了解, 来自实验化学研究方向或一些没有计算化学基础的学生迫切希望通过课程掌握一定的软件操作技能, 但在一些理论与计算化学课程设置中把所有课时均用于理论知识的讲授, 轻视了上机实践操作的重要性。这不利于培养学生实践能力和提升其独立解决科学问题的能力。

一线教师逐渐意识到了上述问题, 并积极对相关课程进行改革创新和实践探索。例如, 南开大学许秀芳<sup>[10]</sup>提出了“多元化课程”模式建设, 组织各研究方向的教师授课, 对学生进行多方面培养, 为学生能够用计算化学的方法解决实际问题打下基础。北京航空航天大学尤汀汀等人<sup>[11]</sup>提出基于“成果导向教育”理念(Outcome-Based Education, OBE)的混合教学模式, 多维度构筑教学内容, 培养学生论文撰写能力, 并将思政育人融入了课程中, 达到提升学生科研素质和综合能力的目的。哈尔滨工业大学李中华和陈刚<sup>[12]</sup>提出构建计算化学新课程体系, 以学生为主体进行现代化教学, 改革考试方式, 授课过程中及时收集学生意见, 促进研究型教学的开展和提高。

综上, 针对中国教育现代化背景下高校化学专业理论与计算化学类课程的时代要求和人才培养目标, 高校教育工作者正在积极探索改革方案和实践路径, 在课程体系完善、教学目标制定、考核方式改进等各方面都开拓了新思路。但针对研究生的理论与计算化学课程仍然存在前沿交叉科学知识涵盖不足, 深度思考能力的培养不够扎实以及课程研究性不够显著等问题。

## 1.2 高校理论与计算化学类课程开设讲座模式的必要性

在新技术革命和教育现代化的时代浪潮中, 如何提升冷门学科、基础学科以及交叉学科的教育质量是值得深入思考的问题<sup>[13,14]</sup>。对研究生而言, 学习复杂而深入的跨学科系统知识对培养其应对和解决面临的重大问题和挑战的能力尤为关键。讲座类课程通常邀请学科领军人物为学生授课, 内容一般涉及前沿科技、创新思维、科研方法等方面的高质量内容, 同时可以在课程中引入学科的难点和热点, 为学生提供更为广阔的科研视野、更深层次的学科认识以及跨学科交叉领域的前沿知识。这样使得授课内容更富有挑战性、深度和广度, 适合研究生层次的高阶教学<sup>[15]</sup>。

针对高校化学专业研究生理论与计算化学课程中引入讲座的必要性分析:

(1) 拓宽科研视野: 研究生已具备一定的基础知识, 这意味着课程内容应超越基本理论, 着重于更高层次的应用和探索, 以适应深化学术研究和专业发展的需求。多领域专家授课的讲座式教学恰好符合引导学生聚焦学科的最新进展和热点问题的要求, 避免学生出现视野局限于某个子领域, 思维固化和信息孤岛的困境。同时, 跨领域的讲座可以帮助学生看到不同主题和理论间的相互联系, 洞察各学科间的交叉点, 进而促使他们对复杂概念形成更为整体和融合的理解。旨在达到“中国教育现代化”理念中“融合发展”的目的, 拓宽学生的学科视野、发现科研新思路、提高对理论与计算化学的研究热情, 培养多专多能人才。

(2) 培养深度思维: 主讲人在讲座中结合其丰富的科研经验进行分享, 引导学生逐步深入思考, 使学生能够直观地理解科学问题在研究过程中是如何产生、又是如何被解决的。这不仅具象地展示了科学研究的思路 and 过程, 学生还可以深入学习主讲人思考问题的角度和科研创新的方法, 使学生受到不同学术背景、社会背景和思维方式主讲人的训练和熏陶。讲座结束后的交流讨论也是重要的一环, 学生们有机会与授课专家直接对话, 通过现场一对一的自主提问、深入分析、反复讨论的互动过程, 让学生获得尖端的信息和深刻的洞见。旨在培养学生深度思考的习惯和解决实际问题的能力, 助力学生成为具有探究意识的学术型人才。

(3) 促进学科交叉: 时代对复合型创新人才的需求, 要求高校加速培养交叉学科人才的进程<sup>[16]</sup>。早期化学是一个总论性的综合学科<sup>[17]</sup>, 随着研究的不断拓展, 逐渐产生了以无机化学、有机化学、分析化学、物理化学为核心的二级学科体系, 体系的划分使得系统的化学学科教学难以形成<sup>[18,19]</sup>。

但近年来,随着理论与计算化学方法的发展,促使科研工作者从微观粒子的角度深入探究物质结构和反应机理<sup>[20-22]</sup>。这一转变促进了化学二级学科间的融合,催生了如物理无机化学、物理有机化学和高分子物理化学等交叉学科。这一趋势明确了理论与计算化学在联结化学各分支领域和促进系统化教学方法发展中的重要角色。理论与计算化学不仅在化学领域内发挥了桥梁功能,还在化学与其他一级学科,如物理学、生物学、计算机科学等交叉研究领域显示出其不可替代的作用。因此,可以认识到,理论与计算化学不仅是化学学科内部知识整合的重要工具,也是促进多学科交流和创新的关键因素。理论与计算化学类讲座涉及的知识领域通常可以囊括多个基础学科,因此作者希望通过理论与计算化学讲座模式的教学让学生突破自己所在的小领域而看到整个化学界乃至科学界的紧密联系,形成从点到线再到面的完整科学认知。这使得理论与计算化学类的讲座课程不仅服务于选课学生,还可以更加广泛地面向校内外相关专业、课题组及研究方向的科研人员等。讲座模式的教学使得理论化学充分发挥了其基础学科的优势,进一步促进了学科融合协作,实现了“中国教育现代化”理念提出的“共建共享”与“面向人人”的要求。这一教学模式将有效地促进学生在跨学科思维能力以及对交叉学科合作意识方面的成长。

讲座类课程的设置是高等教育中培养高精尖人才的重要手段,它不仅展现了一所大学深厚的学术氛围,也是当前教育体系发展的需要,更是适应学科发展趋势的必然举措。通过具有拓宽科研视野、培养深度思维、促进学科交叉特点的讲座教学模式,有效促进学术创新,满足不断演变的教育需求,为培养更具综合素养的高层次创新型人才提供有力支持。在中国教育现代化背景下,高校应更加注重讲座类课程的设计和 implement,使之成为高水平办学的有力支持。

## 2 理论化学类讲座课程的探索——以吉林大学“理论与计算化学”课程为例

吉林大学“理论与计算化学”课程作为专业必修课,面向硕士一年级,博士一年级(直博)以及准研究生(已确认推免的本校大四学生)开设,在每学年的第一学期开课,总计48学时。本课程通过向学生讲授理论与计算化学的核心知识,包括量子化学、统计力学和分子模拟理论等,让学生深入了解理论与计算化学的应用范围,学习使用理论与计算化学方法解决复杂问题,帮助学生构建完整的知识体系与学科网络。此外,课程致力于拓宽学生的学科视野,促进学科间的交叉融合,全方位提高学生的学术能力和科研素养。

### 2.1 课程内容的顶层设计

(1) 在课程体系的全新设计上,采用以讲座为核心的“基础理论+专题讲座+实践操作”新模式,实现了这三个方面的有机结合与相互渗透。不仅确保了学生对基础知识的系统性学习,又为学生提供了与专家面对面交流、深度学习、了解领域前沿热点方向的机会。同时,注重训练学生实践能力,避免出现学习内容与科研实践脱节的情况。实现了“中国教育现代化”理念提出的“全面发展”与“知行合一”的要求。课程面向对象为硕博一年级及大四学生,这意味着本课程还承担着连接本科与研究生阶段、实现“承上启下”作用的重要责任。“1+1+1>3”的新模式充分做到了对本科期间基础知识的必要补充和深化拓展,为学生在研究生期间进行科学研究奠定了坚实基础。

(2) 在高水平教师队伍建设上,组建了一支具有多学科背景的杰出专家团队,不仅包含吉林大学化学学院、物理学院、生命科学学院的骨干教师,还集结了来自国内其他985高校和顶尖研究机构的专家,如北京大学、复旦大学、南京大学、中国科学技术大学、厦门大学、东南大学、山东大学、中国科学院大连化学物理研究所等。专家所在领域覆盖了化学、物理学、生物学等基础学科,以及人工智能、电化学、纳米材料等交叉领域。这支拥有丰富经验和多元专业背景的教师团队,确保了学生在学术研究和实际应用层面都能接受全面而深入的指导,为学生的全方位发展提供了坚实的学术支持。

(3) 在讲座内容的系统构建上,考虑到课程受众为硕博一年级不同研究领域的学生,基础知识的讲解不可或缺、学科视野的扩宽也至关重要、科研素质的培养更是十分关键。因此,要求每场讲

座在内容设计上需要包含以下三个方面：相关领域的基础知识讲解(时间占比15%左右)、主讲人结合自身研究方向和实践案例进行前沿问题探究的分享(时间占比60%左右)及与学生互动答疑(时间占比25%左右)。确保学生掌握讲座涉及领域的基础知识和核心概念，帮助学生紧跟科学发展的步伐，及时解决学生思考过程中出现的问题。讲座按专题模式进行开展，每学期安排3–5个专题，力求内容具有连贯性，领域具有代表性，专题具有针对性。每场讲座由各领域的1–2位专家主讲，专题的确定以及主讲人的邀请根据届时理论与计算化学领域的发展进程、实时研究热点及选课学生的研究领域进行动态变化。同时，讲座内容将会以理论化学核心知识之间的相互关联构建逻辑暗线，实现内容系统化的串联，形成完整的知识体系。

## 2.2 课程内容的实践开展

在课程安排上，共分为四个部分：基础知识、专题讲座、实践操作、回顾总结，现以2023–2024学年度上学期教学大纲为例(如表1所示)。第1–4节课为基础知识串讲，共计12学时。将理论与计算化学领域的核心知识分为4节课进行讲授。通过系统讲解回顾电子结构理论、统计力学、光谱学理论、动力学理论与分子模拟等，为学生奠定扎实的知识基础。这样的基础是学习更高级、更复杂知识的必要前提，确保学生能够充分理解和吸收后续讲座课程的内容。

表1 教学大纲

板块	主题	主要内容	
基础知识 12学时	理论与计算化学概述	串讲理论与计算化学涉及的概念、重要性及其与相关学科的联系，回顾发展历程，突显领域进展，探索理论与计算化学同人工智能、材料设计等方面联系	
	电子结构理论	串讲量子力学、电子结构理论等内容，包括分子轨道理论、密度泛函理论。介绍电子结构计算方法和工具，如Hartree-Fock (HF)方法、微扰理论等	
	统计力学与分子模拟	串讲统计力学核心概念，分子运动论及宏观量与微观状态关系等。介绍分子动力学和蒙特卡洛模拟方法，探讨在化学、物理、材料学中的应用	
	光谱学和动力学理论	串讲光谱学基础、动力学原理及其在理论与计算化学中的应用。梳理分子光谱的产生机理、动力学模拟方法等。讨论如何利用量子化学和分子动力学模拟来研究和预测分子的光谱性质	
专题讲座 27学时 12学时	理论方法	波函数理论	回顾波函数理论的发展历程，从单电子近似的HF方法逐步引入后电子相关方法；讲解当前在处理电子激发态、相关能、大分子体系电子结构计算等方面面临的困难和挑战，引导学生思考在研究中的应用
	与计算模拟	密度泛函理论	回顾密度泛函理论(DFT)核心知识点，包括Hohenberg-Kohn定理、Kohn-Sham方程及电子密度概念；比较各类泛函的优缺点、探讨DFT新泛函开发；引导学生讨论DFT的技术进展
	12学时	量子动力学与统计力学	讲解量子动力学和统计力学高阶理论，包括小分子全量子波包动力学理论、高精度势能面的构建、高精度光谱的预测等；分析量子动力学的进展及统计力学在复杂系统中的应用；鼓励学生讨论最新研究动态
		分子动力学模拟	讲解分子动力学模拟的高阶理论；介绍领域的最新进展，分子力场方法的发展、分子动力学数值积分方法、增强采样途径、经典动力学模拟方法及其在材料中的应用；深入讨论模拟的理论、技术和应用
		量子计算及其在化学中的应用	讲解量子计算的核心内容；介绍其在化学领域的潜在应用和挑战，如算法复杂性和数据处理问题；通过提问讨论，加深学生对量子计算在化学应用中的理解

(待续)

(续表1)

板块	主题	主要内容
专题讲座 27学时	理论方法与计算模拟 12学时	密度矩阵重整化群 讲解密度矩阵重整化群的核心概念；介绍密度矩阵重整化群在多电子系统、长程电子关联研究中的应用；分析其在计算效率和系统尺寸限制、拓扑结构等方面的挑战 多尺度理论与模拟 讲解多尺度理论与模拟的基础；介绍粗粒化力场方法、高维势能面降维、熵效应处理方法，分析多尺度模拟的前沿技术和挑战，如软件改进、建模发展等；引导学生思考在研究中的应用和实践
	人工智能(AI)与理论计算 6学时	AI与电化学中的从头算方法 讲解机器学习、深度学习和神经网络等技术的原理，以及数据驱动的学习方法、模型训练与优化等关键概念；探讨电化学领域数据量少、数据质量不一、计算复杂度高等问题；引导学生思考AI技术在研究中的应用
	AI与理论计算 6学时	AI与生物学中的计算 讲解机器学习和深度学习在生物学计算中的应用如大数据生物信息学分析、生物数据挖掘；介绍AI用于生物学计算模拟中的热点方向如药物筛选与设计、生物图像处理等；就AI技术在跨学科合作的研究进行交流 机器学习应用于功能材料设计 讲解如何利用材料数据库进行特征提取和模型训练，实现对材料性能的准确预测和优化设计；介绍机器学习与功能材料设计结合的最新进展；就机器学习在材料设计中的应用分享见解，探讨其在材料研究中的挑战
	理论与计算在材料科学中的应用 9学时	化学反应机理与新型材料设计 回顾微观化学反应的基本概念；探讨非均相催化材料设计理论方法，包括表面活性位点设计、催化剂结构优化等方面的研究，并介绍均相催化研究的新进展；鼓励学生探索研究中基础化学问题及未来前景 储氢材料机理及碳材料的构效关系 讲解储氢材料的基础知识；探讨碳纳米管和石墨烯等碳材料在储氢中的作用，分析提高储氢效率和降低成本的技术挑战如改善吸附容量、提高吸附速率等方面的难题；从“碳中和”问题展开，探讨未来发展趋势 高压材料与模拟 讲解高压材料的基本概念；介绍高压材料模拟的最新进展，介绍如何使用第一原理计算、分子动力学模拟等预测分析材料性质；讨论高压材料模拟的重难点如模拟中的尺度效应、高压下物质相变、非线性响应等 电子激发态与光电材料 讲解激发态的高阶理论；分析光电材料领域的最新研究进展，包括对于光电器件中载流子输运、光谱响应等方面的理论探索；探讨光电器件性能优化、材料稳定性和可持续性方面的挑战，激发学生的思考和创新
实践操作 6学时	分子动力学模拟实践	讲解使用LAMMPS或GROMACS等主流软件的基本操作，包括软件环境的搭建和基本操作；进行案例模拟：蛋白质折叠、纳米材料热性质、溶液扩散
	量子化学计算实践	讲解使用Gaussian或Molpro等主流软件的基本操作，包括基本设置和操作；指导学生构建简单的分子模型，进行基态能量、几何优化和振动频率计算并分析
回顾总结 3学时	回顾、交流、总结	回顾理论与计算化学核心知识、总结专题讲座要点、分享实践经验与心得、学生之间相互交流。强调学生在解决问题能力和独立研究能力方面的成长

第5-13节课为专题讲座，分别为理论方法与计算模拟专题(12课时)、AI与理论计算专题(6课时)、理论与计算在材料科学中的应用(9课时)，3个专题，共计27学时。14场讲座中，有7场讲座基于第一性原理分子动力学(AIMD)方法的研究，重点探讨经典动力学与电子结构结合的方向；4场讲座围绕分子力场的应用，聚焦于经典动力学与统计力学结合的方向；剩余3场讲座则侧重于全局势能面构建，探讨量子动力学与统计力学结合的方向。上述设计以理论化学中的重要方法构建逻辑暗线不仅

增强了教学内容的连贯性和逻辑性,而且通过讲座将理论化学中复杂抽象概念与实际科研进行结合,促进学生更加深刻地理解。讲座涉及方向包括材料科学、计算机科学、凝聚态物理等,涉及基础学科包括物理学、生物学等。每场讲座由课程负责人担任主持人,在讲座开始前介绍主要内容及专家研究方向,帮助学生梳理讲座内容同理论与计算化学的内在联系;在讲座中关注学生动态,把握整体授课进度,处理各类突发状况;在讲座后引导学生积极提问分享、与主讲人交流讨论。每节讲座课程通过“腾讯会议”或“学在吉大”等平台进行直播,有效保障了知识的广泛传播和教学资源的利用效率。在应对突发情况方面,若出现主讲人临时无法到场或其他不可抗力因素,课程设计上安排了预备讲座作为相似主题的替换,以备不时之需,保证任何情况下教学进度都能有序推进。

第14–15节课为学生实践操作课程,分为两个主要模块:分子动力学模拟实践与量子化学计算实践,共计6学时。该部分主要起“抛砖引玉”的作用,目的不在于全面传授所有计算机软件的操作技巧,而是着重讲解关键和重要的计算步骤、常用的分析方法以及软件使用的逻辑框架,并结合经典案例进行教学。对于特定小领域的详细操作和技术细节,鼓励学生在课后以及日常科研活动中,根据个人研究需求,到官方网站或其他社区平台寻找相关资料进行自主学习。这样既保证了课堂的高效性,又锻炼了学生的自学能力。对于研究生期间研究方向为程序开发或自身基础知识较为扎实的学生鼓励其深入探究软件原理,达到可以改进或编写的程度。此部分课程的授课在学校机房进行,每台电脑系统配备MobaXterm、Xshell等终端软件,以及LAMMPS、GROMACS、Gaussian、Molpro等计算软件,依托吉林大学理论化学研究所计算资源为学生在课程期间提供一定额度的计算机时。这一部分的课程通过实践帮助学生加深对理论的理解,培养学生独立学习研究的能力,增强解决实际问题的能力。

第16节课为学期回顾总结,共计3学时,通过核心知识回顾、专题讲座总结,实践课程分享以及学生经验交流等形式“收束全文”,在一学期的课程中起到“画龙点睛”的作用。达到加深学生理解与记忆,促进自我反思的目的,确保学生能够有效地吸收和应用课程内容。同时也促使教师对整个学期的课程安排、教学效果进行审视总结,达到教学相长的效果。这一课程环节对于提升整体教学质量和促进学生全面发展具有重要意义,是必不可少的一个教学部分。

### 2.3 全方位融入“中国教育现代化”理念

将“中国教育现代化”八大理念融入进理论与计算化学课堂,除了上文中已经阐述的方面,作者还有以下几点思考:

(1) 以“中国教育现代化”理念中的“以德为先”为指导,强调德育的重要性,将学科育人的思想充分融入专业知识的教学中,达到“既教文,又育人”的境界<sup>[23–25]</sup>。具体来说,可在教学内容中加入科研伦理、学术诚信等道德教育元素。例如,分析科学历史中的正反案例来讨论道德问题,使学生认识到道德在科学研究中的重要性。同时,各高校可将学校特有的文化底蕴与校史人物融入课堂教学中,以增强教学内容的文化内涵和价值导向。以吉林大学为例,在理论与计算化学课程的授课过程中,教师可以依托唐敖庆、江元生、孙家钟等杰出老一辈理论化学家的事迹和精神,将其爱岗敬业、无私奉献等崇高的精神品质融入课堂教学,让学生深刻领会优秀人物的精神内涵。这有助于学生形成正确的科研伦理观和人生价值观,为未来成为国家需要的负责任的科研人员奠定坚实基础。

(2) 以“中国教育现代化”理念中的“因材施教”为指导,尊重学生专业发展的多层次及多样性,满足不同学生的学习需求和特点。就吉林大学“理论与计算化学”课程而言,选课学生包括硕博一年级以及准研究生,这三类学生的特征既有联系又有区别,均处于本科生向研究生身份转变的过渡时期,对专业知识有一定基础,但科研意识尚处于起步阶段。针对硕士一年级和直博学生,经过本科毕业论文系统的科研训练具备基本的科研素养,因此教学中应侧重于理论知识的实际应用,专业技能的深化以及创新能力的培养。针对准研究生,其大部分还未进行过系统的科研训练,在教学中需要引导其明确未来研究方向,培养科研兴趣。

选课学生中研究领域为理论方向的占比52%，实验方向的占比48%，理论方向具体涉及新型催化材料理性设计、光电催化过程模拟、机器学习构建势能面、分子动力学模拟方法发展、密度泛函理论方法发展等，实验方向具体涉及纳米石墨烯材料设计及应用、储能材料合成及器件制备、有机光电功能材料及应用、电极材料制备及电催化性能研究、新型生物高分子设计合成及性能研究等。在问卷调查中，我们发现理论和实验方向的学生都会关注计算方法在模拟实际问题中的应用，实验与理论结果的对比分析等问题；不同的是理论方向学生对理论模型的深入理解、算法的优化和创新有更大兴趣，实验方向学生对计算化学辅助实验设计，数据分析和解释等有更大兴趣。以讲座模式为核心的“1+1+1”课程设计可以充分考虑到这两类学生的特点和需求，确保课程内容既能满足理论研究的深度，又能为实验研究提供有价值的计算工具和理论方法。

选课学生的本科专业涉及“化学”“应用化学”“化学工程与工艺”“高分子材料与工程”“复合材料与工程”“食品科学与工程”“化学(师范)”等。多样的生源类别，不同的基础水平更要求授课教师根据学生的专业方向和能力水平提供有针对性的教学。我们会提前了解选课学生的研究方向，根据学生已经掌握和未掌握的基础知识及需要达到的理论与计算化学水平，在每学期安排不同专题内容的讲座，提供丰富的自学资源，如在线课程、教材和教学视频，以便学生根据自己的进度和兴趣自主学习。以此适应不同发展方向和基础水平的学生需求。具体的教学实施方案还需要教师在实际教学中不断调整和优化，以实现教学的最佳效果。

在课程考核中也充分考虑“因材施教”的教学方法，进行过程化考核，考核分为三个部分，平时成绩、讲座专题报告以及项目实践考核。通过平时成绩调动学生学习，参与课程的积极性特别是讲座课程中与主讲人之间交流讨论的积极性。讲座专题报告要求每个同学选取讲座中某个创新点融入进自身科研方向中，详细阐述这样结合的意义、初步技术路线及预期解决的科学问题。从而达到通过讲座教学，学生能够在其中找到能与自己科研结合的点并产生新想法的目的。项目实践考核要求每个同学根据自己科研方向选择题目，对实际体系进行计算或模拟，并通过报告的形式详细呈现项目目的、计算过程及结果分析。讲座专题报告的撰写以及项目实践考核可以促进将课堂学习与实际科研工作紧密结合，进一步提升分析和解决问题的能力。考核比重设置为：项目实践考核50%，讲座专题报告30%，平时成绩20%；平时成绩中出勤率占比50%，课堂交流占比50%。

(3) 以“中国教育现代化”理念中的“终身学习”为指导，帮助学生形成终身学习的习惯。进行开放课程建设，提供在线资源和持续学习的机会，如通过学院官网等平台对讲座进行预告，让对某场讲座内容感兴趣的研究人员可以通过线上线下等多种方式参与到课程中；在条件允许的情况下，安排讲座专家与学校相关领域的青年教师进行小型座谈会，研讨会等，以此充分利用学术资源，增强学术交流与合作。虽然在教学计划中，本课程只是为期一学期的硕博一年级课程，但通过开放课程的建设，能够让更多的高年级研究生、教师、校友乃至兄弟院校师生通过本课程受益，促进学术共同体成员之间的知识共享。这样的课程设计理念能够让学生意识到学习是一个持续的过程，而不仅仅是学位教育的一部分。

#### 2.4 课程成效及反馈

在课程结束后，通过问卷调查，我们收集了学生的反馈。问卷调查的结果显示，绝大多数学生对课程持正面评价：95%的学生表示对理论与计算化学交叉领域，前沿领域的知识有了更多的了解，对自身学科视野的拓展有很大帮助；93%的学生表示通过讲座中主讲人对实际案例的分析，对理论与计算化学的抽象概念有了更深刻的理解；92%的学生认为课程提高了他们将理论应用于解决具体科研问题的能力；90%的学生表示计算软件和理论方法的实践操作得到了很好的训练；90%的学生认为课程提升了他们的创新能力和独立解决科学问题的能力，并为科研发展方向提供了宝贵的指导。这些结果表明，本课程采用的以讲座为核心的“1+1+1>3”全新教学模式在学生理论知识提升、实际应用能力锻炼、科研素养培养等方面取得了积极成效。因此，我们认为该教学模式是有效的，并且值得在未来的教学实践中进一步推广和应用。

### 3 总结与展望

本文深入探讨了在“中国教育现代化”理念指导下，高校化学专业理论与计算化学课程以讲座为核心的“1+1+1>3”的全新教学模式。作者希望通过改变教学思想、创新教学体系，使研究生教育更加注重科研素质的培养、跨学科领域的融合以及前沿知识的探索。本文以吉林大学“理论与计算化学”课程为例，详细说明了此教学模式的设计思想和具体实施过程。针对选课学生的问卷调查结果证明了此课程模式在提升学生综合能力、拓宽学科视野以及培养创新型人才方面的显著效果。同时，文中论证了该模式对于适应中国教育现代化需求的实施方法和重要意义，确保该模式能够在未来更广泛的推广和应用，使理论与计算化学教育能够不断适应时代变化和科研发展趋势。

理论与计算化学的发展日新月异，研究生理论化学课程的建设与创新改革需要高校长期坚持，形成持续发展的有效机制。我们在一线进行教学工作的教师更应秉持服务学生、服务社会主义建设的教育理念，助力高校办学水平与人才培养能力的提升，为构建符合中国教育现代化的研究生课程教学模式贡献力量。

### 参 考 文 献

- [1] 新华社. 人民教育, **2019**, No. 5, 7.
- [2] 帅志刚. 化学进展, **2009**, *21* (11), 2259.
- [3] Emily, A. C.; Peter, J. R. *Acc. Chem. Res.* **2006**, *39* (2), 71.
- [4] Giovanni, C.; Rosati, M.; Nico, S. *Comput. Phys. Commun.* **2001**, *139* (1), 1.
- [5] Pavlo, O. D. *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, *11* (6), 2336.
- [6] 江元生. 化学进展, **2011**, *23* (12), 2399.
- [7] 赵容浩, 黄职钱, 杨一莹, 朱荣秀, 张冬菊. 大学化学, **2023**, *38* (8), 299.
- [8] 朱荣秀, 郭今心, 杨一莹, 张冬菊. 大学化学, **2023**, *38* (10), 258.
- [9] 习近平. 求是, **2021**, No. 24, 4.
- [10] 许秀芳. 化学教育(中英文), **2021**, *42* (18), 105.
- [11] 尤汀汀, 高宇坤, 王广胜, 鹿现永, 殷鹏刚. 大学化学, **2021**, *36* (7), 2009014.
- [12] 李中华, 陈刚. 大学化学, **2008**, *23* (1), 11.
- [13] 郝平. 优化建设学科布局, 促进学科交叉融合. 光明日报, 2022-02-15 (13).
- [14] 任爽. 厚积薄发培养基础学科人才. 光明日报, 2023-03-12 (11).
- [15] 王顺, 李伟, 崔淑敏, 魏民, 范彩玲, 宋美荣. 化学教育(中英文), **2023**, *44* (8), 110.
- [16] 刘延东. 求是, **2012**, No. 10, 3.
- [17] 李珏. 化学工程, **2023**, *51* (9), 103.
- [18] 张树永, 朱亚先. 大学化学, **2017**, *32* (1), 9.
- [19] 潘玲, 周仕东. 大学化学, **2021**, *36* (5), 2010074.
- [20] 戴亚飞, 沈祥建. 中国科学: 化学, **2021**, *51* (5), 547.
- [21] 苏培峰, 谭凯, 吴安安, 吕鑫, 赵仪, 曹泽星, 吴玮. 厦门大学学报(自然科学版), **2011**, *50* (2), 311.
- [22] 胡浩. 科技导报, **2013**, *31* (34), 18.
- [23] 于漪, 李瑾瑜. 教师发展研究, **2022**, *6* (4), 21.
- [24] 李辉, 钱虎军, 曲泽星, 朱有亮, 李延春, 翟羽. 化学教育(中英文), **2022**, *43* (14), 86.
- [25] 张冬菊. 大学化学, **2022**, *37* (10), 2204059.