

融合第一性原理计算，革新《固体物理》教学：理论、实践与成效

梁铎强¹ 梁宏宇¹ 刘芳远^{2*}

1. 广西大学资源环境与材料学院，中国·广西 南宁 530004

2. 广西工业职业技术学院，中国·广西 南宁 530001

摘要：针对《固体物理》课程概念抽象、学科交叉性强、传统教学模式单一导致学生理解困难、学习兴趣不足等问题，本文提出将第一性原理计算融入课程教学的改革方案。通过构建“理论讲授—计算实践—项目探究”一体化教学模式，将密度泛函理论（DFT）等先进计算方法引入晶体结构、能带理论、晶格振动等核心知识点，实现抽象理论的可视化与具象化。教学实践表明，该模式显著提升了学生的知识掌握水平（平均成绩提高8分）、实践能力（软件操作熟练度提升至70%）和学习兴趣（课程满意度达85%）。同时，通过项目式学习与小组合作，有效培养了学生的科学计算能力、问题解决能力与创新思维。研究为《固体物理》等高阶物理课程的教学改革提供了可复制、可推广的“理论—技术—实践”融合范式。

关键词：第一性原理计算；固体物理；教学改革；计算实践；教学模式；教学成效

Integrating first-principles calculations to innovate the teaching of "Solid State Physics": Theory, practice, and outcomes

Liang Duoqiang¹, Liang Hongyu¹, Liu Fangyuan^{2*}

1. College of Resources, Environment and Materials, Guangxi University, China Guangxi Nanning 530004

2. Guangxi Vocational and Technical College of Industry, China Guangxi Nanning 530001

Abstract: In response to problems in the "Solid State Physics" course such as abstract concepts, strong interdisciplinary nature, single traditional teaching methods leading to student comprehension difficulties and lack of interest, this paper proposes a reform plan integrating first-principles calculations into course teaching. By constructing an integrated teaching model of "theoretical lectures—computational practice—project exploration", advanced computational methods such as Density Functional Theory (DFT) are introduced into core topics like crystal structures, band theory, and lattice vibrations, achieving visualisation and concretisation of abstract theories. Teaching practice shows that this model significantly improves students' knowledge mastery (average score increased by 8 points), practical abilities (software operation proficiency rose to 70%), and learning interest (course satisfaction reached 85%). Meanwhile, through project-based learning and group collaboration, students' scientific computing abilities, problem-solving skills, and innovative thinking are effectively cultivated. The study provides a replicable and promotable "theory-technology-practice" integration paradigm for the teaching reform of advanced physics courses such as "Solid State Physics".

Keywords: First-principles calculations; Solid-state physics; Teaching reform; Computational practice; Teaching model; Teaching effectiveness

1 引言

1.1 研究背景

《固体物理》作为物理学专业的核心课程，在整个物理学科体系中占据着举足轻重的地位，是凝聚态物理、材料科学等众多学科的重要理论基础。它主要研究固体的结构、组成粒子间的相互作用与运动规律，从微观层面揭示固体材料的物理性质，为理解和开发新型材料、设计电子

器件等提供了关键的理论支持。当今，众多新技术、新材料和新器件的诞生都离不开固体物理的理论指导，其重要性不言而喻。例如，半导体技术的发展依赖于对固体中电子行为的深入理解，使得现代电子设备如计算机、智能手机等得以实现小型化和高性能化；超导材料的研究为能源传输和储存带来了新的突破方向，有望大幅降低能源损耗。

然而，在实际教学过程中，《固体物理》课程面临着

诸多挑战。首先,该课程概念高度抽象,涉及到大量微观世界的概念和模型,如晶格振动、能带理论等,这些内容对于学生来说理解难度较大。晶格振动中的简正模概念,描述的是晶体中原子集体振动的模式,由于其抽象性,学生往往难以直观地把握其物理本质。其次,学科综合度较高,它融汇了普通物理、热力学统计物理、量子力学和晶体学等多学科的知识,要求学生具备扎实的多学科基础,这对学生的知识储备和综合运用能力提出了很高的要求。学生需要将量子力学中的波函数、能级等概念与固体物理中的电子态、能带相结合,才能深入理解固体中电子的行为。再者,传统的教学方法侧重于理论知识的传授,教学手段相对单一,多以课堂讲授为主,缺乏生动性和互动性,难以激发学生的学习兴趣 and 主动性。这种教学模式下,学生往往处于被动接受知识的状态,缺乏对知识的深入思考和探索,导致学生在学习过程中普遍感到枯燥无味、难度大,容易出现畏学心理。

随着科技的飞速发展,对物理专业人才的需求也在不断变化,不仅要求他们具备扎实的理论基础,更需要具备创新思维 and 实践能力,能够将理论知识应用于实际问题的解决中。因此,对《固体物理》课程教学进行改革,以提升教学效果、培养适应时代需求的高素质人才,已成为当务之急。

1.2 第一性原理计算的发展及应用

第一性原理计算源于量子力学理论,其核心思想是从最基本的物理原理出发,不借助任何经验参数,直接求解体系的薛定谔方程,从而获得体系的电子结构和相关物理性质。它的发展历程与量子力学的发展紧密相连,经历了从理论提出到逐步完善的过程。早期,由于计算能力的限制,第一性原理计算仅能应用于简单体系的研究。随着计算机技术的迅猛发展,计算能力大幅提升,使得第一性原理计算在材料科学、物理研究等众多领域得到了广泛应用。

在材料科学领域,第一性原理计算发挥着至关重要的作用。它可以用于预测材料的晶体结构,通过计算不同结构下材料的能量,找到能量最低的稳定结构,为新材料的设计提供理论依据。在研究新型超导材料时,利用第一性原理计算可以深入探究材料的电子结构和晶格动力学性质,从而理解超导机制,为寻找更高临界温度的超导材料提供指导。在物理研究中,第一性原理计算也为科学家们提供了强大的研究工具。在半导体物理研究中,通过第一性原理计算可以精确计算半导体的能带结构、载流子有效质量等关键参数,为半导体器件的设计和优化提供理论支持。在磁性材料研究中,它可以解释磁性起源和磁相互作用机制,推动磁性材料在信息存储、传感器等领域的应用发展。

第一性原理计算在《固体物理》教学中具有巨大的潜在价值。它能够将抽象的理论知识转化为直观的图像和数据,帮助学生更好地理解固体物理中的概念和原理。在讲解能带理论时,可以通过第一性原理计算展示不同晶体结构材料的能带图,让学生直观地看到电子在晶体中的能量分布情况,从而加深对能带形成机制的理解。它还可以培养学生的科学思维 and 实践能力,使学生学会运用计算工具解决实际物理问题,提高学生的综合素质。

1.3 研究目的与意义

本研究旨在将第一性原理计算融入《固体物理》课程教学中,通过引入这一先进的计算方法,创新教学模式,丰富教学内容,提升教学效果,培养学生的综合能力,推动学科发展。

将第一性原理计算融入《固体物理》课程教学,能够有效提升教学效果。通过具体的计算实例和可视化结果展示,将抽象的固体物理概念和理论直观地呈现给学生,帮助学生克服理解困难,提高学习效率。在讲解晶体结构时,利用第一性原理计算软件展示不同晶体结构的原子排列方式以及电子云分布情况,使学生能够更直观地理解晶体结构的特点和形成原因,增强学生的学习兴趣 and 积极性,提高学生对知识的掌握程度。

这一融合有助于培养学生的综合能力。在使用第一性原理计算工具解决固体物理问题的过程中,学生需要将所学的理论知识与计算实践相结合,从而提高他们的理论联系实际能力。在计算材料的物理性质时,学生需要运用固体物理的基本原理确定计算模型和参数,然后通过计算得到结果并进行分析,这一过程能够锻炼学生的逻辑思维能力 and 问题解决能力。同时,学生还能够掌握计算软件的使用方法,培养他们的科学计算能力和实践操作能力,为今后从事科研工作 or 相关领域的工作打下坚实的基础。

第一性原理计算融入《固体物理》课程教学,对推动学科发展 also 具有重要意义。这一融合能够促进教学内容的更新 and 完善,使教学内容紧跟学科前沿研究动态。随着第一性原理计算在材料科学、物理研究等领域的不断发展和应用,将其最新成果 and 方法引入教学中,能够拓宽学生的视野,培养出更具创新能力和国际竞争力的物理专业人才,为固体物理及相关学科的发展注入新的活力,推动整个学科的进步。

2 《固体物理》课程教学现状剖析

2.1 课程特点与重要性

《固体物理》是物理学专业的一门专业基础课,在整个物理学科体系中占据着核心地位,是凝聚态物理、材料物理等多个专业方向的基石课程。它主要研究固体的微观

结构、组成粒子间的相互作用以及运动规律,从而揭示固体材料的各种物理性质。其重要性体现在多个方面,是连接基础物理理论与实际材料应用的关键桥梁,为材料科学、电子学、半导体物理等众多领域提供了理论支撑。在半导体物理中,对固体中电子能带结构的理解是设计和制造半导体器件的基础,从简单的二极管到复杂的集成电路,其工作原理都离不开固体物理的知识。

该课程具有鲜明的特点。首先,理论性极强,涉及大量抽象的物理概念和复杂的理论模型。晶格振动中的简正模理论,它描述了晶体中原子集体振动的模式,需要学生具备深厚的数学和物理基础才能深入理解。其次,概念抽象,许多内容无法通过直观的实验或日常生活经验来理解。能带理论中的布里渊区概念,它是描述晶体中电子能量状态的重要工具,但由于其抽象性,学生往往难以把握其物理内涵。再者,学科交叉性显著,融合了普通物理、热力学统计物理、量子力学和晶体学等多学科的知识。在研究固体的热学性质时,需要综合运用热力学统计物理中的热平衡概念和量子力学中的能级理论。

2.2 传统教学模式的问题

在传统的《固体物理》教学中,教学模式存在诸多弊端。教学方式多以理论讲授为主,教师在课堂上占据主导地位,通过板书和口头讲解向学生传授知识,学生则处于被动接受的状态。这种教学方式缺乏互动性,难以激发学生的学习兴趣 and 主动性。在讲解晶体结构时,教师可能只是通过黑板画图或简单的 PPT 展示来介绍晶体的原子排列方式,学生难以形成直观的认识,容易感到枯燥乏味。

传统教学模式还普遍存在缺乏实践环节的问题。由于课程内容的理论性较强,教学往往侧重于理论知识的传授,而忽视了实践教学的重要性。学生缺乏通过实际操作和实验来验证理论的机会,这使得他们对知识的理解仅停留在表面,难以深入掌握。在学习晶格振动的实验测定方法时,学生如果没有实际操作相关实验仪器,就很难理解实验原理和数据处理方法。

教学方法单一也是传统教学模式的一大问题。多采用“满堂灌”的方式,注重知识的灌输,而忽视了学生的思维能力和创新能力的培养。这种教学方法不利于学生构建完整的知识体系,也无法满足学生个性化的学习需求。不同学生对知识的接受能力和学习方式存在差异,单一的教学方法无法因材施教,导致部分学生学习困难,学习效果不佳。

这些问题严重影响了学生的学习兴趣 and 效果。学生在学习过程中容易感到枯燥乏味,缺乏学习动力,对知识的理解和掌握也不够深入。在考试中,学生往往只能死记硬

背公式和概念,而无法灵活运用知识解决实际问题。

2.3 学生学习情况分析

为了深入了解学生在《固体物理》课程学习中的情况,我们对相关专业的学生进行了问卷调查和访谈。调查结果显示,学生在课程学习中面临着诸多困难。在概念理解方面,超过 70% 的学生表示对能带理论、晶格振动等抽象概念理解困难。在问卷调查中,当被问及对能带理论的理解程度时,许多学生表示只能一知半解,无法真正掌握其核心思想。在知识应用方面,约 60% 的学生认为难以将所学知识应用到实际问题的解决中。在访谈中,有学生提到,虽然在课堂上学习了固体物理的理论知识,但在遇到实际的材料物理问题时,却不知道如何运用所学知识进行分析。

学生的学习积极性也有待提高。约 40% 的学生表示对课程兴趣一般,甚至有 15% 的学生表示对课程缺乏兴趣。这主要是由于课程内容的抽象性和教学方法的单一性,使得学生在学习过程中难以获得成就感,从而降低了学习的积极性。在问卷调查中,当被问及对课程的兴趣时,部分学生表示因为课程太难,听不懂,所以逐渐失去了兴趣。

学习方法不当也是学生在学习中存在的一个问题之一。许多学生习惯于被动接受知识,缺乏主动学习和探索的精神。在学习过程中,他们主要依赖教师的讲解和教材,缺乏对知识的深入思考和总结。在访谈中,有学生表示自己在学固体物理时,只是跟着老师的节奏走,没有自己主动去查阅资料、思考问题。

这些学习情况为后续教学改革提供了重要依据。在教学改革中,应针对学生的困难点,采取更加有效的教学方法和手段,帮助学生理解抽象概念,提高知识应用能力。应通过创新教学模式,激发学生的学习兴趣,培养学生的主动学习能力。

3 第一性原理计算融入课程的理论依据

3.1 第一性原理计算的基本原理

第一性原理计算,又称从头计算,是一种基于量子力学原理的计算方法,它的核心在于从最基本的物理定律出发,不依赖任何经验参数,直接对体系进行求解。在凝聚态物理和材料科学领域,第一性原理计算主要基于量子力学的基本方程——薛定谔方程。对于一个包含多个粒子(原子核和电子)的体系,其哈密顿量可以表示为:

$$H = \sum_i^{N_e} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 \right) + \sum_A^{N_n} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_A} \nabla_A^2 \right) + \sum_{i < j}^{N_e} \frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_{i,A}^{N_e N_n} \frac{Z_A e^2}{r_{iA}} + \sum_{A < B}^{N_n} \frac{Z_A Z_B e^2}{R_{AB}}$$

其中 N_e , N_n 和分别是电子和原子核的数目, m_e 和 m_A 分别是电子和原子核 A 的质量, $\hbar$ 是约化普朗克常数, ∇_i 和 ∇_A 分别是电子 i 和 A 原子核的梯度算符, r_{ij} 是电子 i 和 j

之间的距离, r_{iA} 是电子 i 与 A 原子核之间的距离, r_{AB} 是原子核 A 和 B 之间的距离, Z_A 和 Z_B 分别是原子核 A 和 B 的原子序数。然而, 直接精确求解多粒子体系的薛定谔方程是极其困难的, 因为电子之间存在着复杂的相互作用, 这使得计算量随着粒子数的增加呈指数增长。

为了在合理的计算资源下获得体系的近似解, 通常会引入一些近似方法。其中, 波恩 - 奥本海默 (Born-Oppenheimer) 近似是第一性原理计算中常用的重要近似之一。由于原子核的质量远大于电子质量, 原子核的运动速度远小于电子, 因此可以将原子核看作是固定在其平衡位置上的点电荷, 而电子则在由这些固定原子核产生的静电场中运动。在波恩 - 奥本海默近似下, 体系的哈密顿量可以简化为只包含电子的动能、电子 - 电子相互作用势能以及电子 - 原子核相互作用势能。这一近似将原本复杂的多体问题简化为在固定原子核势场下的多电子问题, 大大降低了计算的复杂度。

密度泛函理论 (Density Functional Theory, DFT) 是第一性原理计算中广泛应用的理论框架。DFT 的核心思想是将体系的基态能量表示为电子密度的泛函, 而不是像传统量子力学方法那样依赖于多电子波函数。Hohenberg-Kohn 定理为 DFT 提供了坚实的理论基础, 该定理指出: 对于一个处于外部势场中的多电子体系, 其基态能量是电子密度的唯一泛函。这意味着, 只要知道了体系的电子密度, 就可以确定体系的基态能量和其他物理性质。在实际计算中, 通常采用 Kohn-Sham 方程来求解电子密度。Kohn-Sham 方程将多电子问题转化为一组单电子方程, 通过迭代自洽的方法求解这些方程, 最终得到体系的电子密度和基态能量。在计算过程中, 需要选择合适的交换关联泛函来描述电子之间的交换关联作用, 常见的交换关联泛函有局域密度近似 (LDA)、广义梯度近似 (GGA) 等。不同的交换关联泛函适用于不同的体系和计算目的, 选择合适的泛函对于得到准确的计算结果至关重要。

3.2 与《固体物理》课程内容的关联性

第一性原理计算与《固体物理》课程内容存在着紧密的联系, 在多个重要知识点中都有着广泛的应用。在晶体结构方面, 第一性原理计算可以精确地预测晶体的稳定结构。通过计算不同原子排列方式下晶体的总能量, 找到能量最低的结构, 即为晶体的稳定结构。在研究金属铜的晶体结构时, 利用第一性原理计算可以确定铜原子在面心立方结构下能量最低, 从而验证了铜的实际晶体结构。计算还可以得到晶体的晶格常数、原子间距离等结构参数, 这些参数对于理解晶体的物理性质和化学键本质具有重要意义。通过第一性原理计算得到的晶格常数与实验测量值的

对比, 可以验证计算方法的准确性, 并深入分析晶体结构与性能之间的关系。

在能带理论中, 第一性原理计算是研究能带结构的重要工具。它可以计算出晶体中电子的能量与波矢的关系, 即能带结构。在半导体硅的研究中, 通过第一性原理计算可以清晰地展示硅的能带结构, 包括价带、导带以及禁带宽度等信息。这些信息对于理解半导体的电学性质、光学性质以及半导体器件的工作原理至关重要。通过分析能带结构, 还可以研究电子在晶体中的运动状态、有效质量等物理量, 为半导体材料的设计和优化提供理论依据。

电子态密度也是《固体物理》课程中的重要概念, 第一性原理计算能够准确地计算电子态密度。电子态密度表示在能量空间中单位能量间隔内的电子态数目, 它反映了电子在不同能量状态上的分布情况。在研究过渡金属的磁性时, 通过第一性原理计算得到的电子态密度可以揭示磁性起源与电子结构之间的关系。过渡金属的磁性通常与 d 电子的态密度分布密切相关, 计算结果可以帮助我们理解磁性材料中电子的自旋极化、交换相互作用等物理机制, 为磁性材料的开发和应用提供理论指导。

第一性原理计算在研究固体的力学性质、光学性质、热学性质等方面也发挥着重要作用。在力学性质研究中, 通过计算晶体的弹性常数、杨氏模量等参数, 可以评估材料的力学性能, 为材料在工程领域的应用提供参考。在光学性质研究中, 计算材料的介电函数、吸收光谱等光学参数, 可以深入理解材料的光学响应机制, 为光电器件的设计和开发提供支持。在热学性质研究中, 计算材料的热容、热导率等参数, 可以帮助我们了解材料的热传输特性, 为材料在能源领域的应用提供理论依据。

3.3 教育教学理论支持

从建构主义学习理论的角度来看, 将第一性原理计算融入《固体物理》课程教学具有重要的意义。建构主义学习理论认为, 学习是学生主动构建知识的过程, 而不是被动地接受知识。学生在已有的知识和经验基础上, 通过与环境的互动, 对新知识进行理解、整合和内化, 从而构建起自己的知识体系。在《固体物理》教学中引入第一性原理计算, 为学生提供了一个实际的探究环境。当学生使用第一性原理计算软件去研究晶体结构时, 他们需要运用已学的量子力学、晶体学等知识来理解计算的原理和过程。在计算过程中, 学生可能会遇到各种问题, 如选择合适的计算参数、理解计算结果等, 这些问题促使学生主动查阅资料、思考分析, 与同学和教师进行交流讨论。通过解决这些问题, 学生不仅能够掌握第一性原理计算的方法和技能, 还能够深入理解固体物理中的相关概念和理论, 将新

知识与原有知识进行有机整合,从而构建起更加完整和深入的知识体系。

探究式学习理论也为第一性原理计算融入教学提供了有力的支持。探究式学习强调学生的主动探究和实践操作,通过提出问题、做出假设、收集证据、进行实验、分析数据、得出结论等一系列探究活动,培养学生的创新思维和实践能力。将第一性原理计算融入教学,为学生提供了丰富的探究素材和机会。在学习能带理论时,教师可以提出一些具有启发性的问题,如“不同晶体结构的材料其能带结构有何差异?”“如何通过第一性原理计算来解释半导体的导电性?”学生在教师的引导下,运用第一性原理计算工具进行探究。他们需要自己设计计算方案,选择合适的计算模型和参数,对计算结果进行分析和讨论。在这个过程中,学生的自主学习能力、问题解决能力和创新思维得到了充分的锻炼和培养。同时,探究式学习还注重学生的合作与交流,学生在小组合作中共同完成探究任务,分享彼此的想法和经验,培养了团队协作精神和沟通能力。

将第一性原理计算融入《固体物理》课程教学,符合建构主义和探究式学习等教育教学理论,能够有效地促进学生的知识建构和能力培养,提高教学质量。

4 融合第一性原理计算的教学实践设计

4.1 教学目标设定

结合《固体物理》课程标准和学生实际情况,设定以下三维教学目标:

在知识与技能目标方面,学生应深入理解《固体物理》中的核心概念和理论,如晶体结构、能带理论、晶格振动等。学生要熟练掌握第一性原理计算的基本原理、方法和流程,包括对密度泛函理论的理解以及常用计算软件(如 VASP、Quantum Espresso 等)的操作。能够运用第一性原理计算软件对固体材料的结构和性质进行模拟计算,如计算晶体的晶格常数、能带结构、电子态密度等,并能够准确分析和解释计算结果。通过对具体固体材料的计算研究,培养学生将理论知识与实际计算相结合的能力,提高学生的科学计算和数据处理能力。

从过程与方法目标来看,通过项目式学习和小组合作探究的方式,学生能够提出关于固体物理的研究问题,并运用第一性原理计算方法设计解决方案。在计算实践过程中,学会自主查阅文献资料,获取相关信息,培养学生独立思考和解决问题的能力。通过小组讨论和交流,分享各自的观点和计算结果,培养学生的团队协作精神和沟通表达能力。学会对计算结果进行分析和总结,从数据中归纳出物理规律,培养学生的归纳推理和批判性思维能力。

在情感态度与价值观目标层面,通过第一性原理计算

在《固体物理》课程中的应用,激发学生对固体物理学科的兴趣和探索欲望,培养学生的科学精神和创新意识。让学生体会到理论与实践相结合的重要性,增强学生对科学研究的严谨性和责任感。在小组合作学习中,培养学生的团队合作意识和集体荣誉感,提高学生的人际交往能力。引导学生关注学科前沿动态,了解第一性原理计算在材料科学、物理研究等领域的最新应用成果,拓宽学生的学术视野。

4.2 教学内容整合

在《固体物理》课程教学中,选取晶体结构、能带理论等章节,将第一性原理计算的案例和知识点融入其中,以增强教学内容的深度和广度,提高学生的学习效果。

在晶体结构章节,传统教学主要侧重于晶体结构的基本概念、晶格类型和晶胞参数等知识的传授。引入第一性原理计算后,教学内容得到了进一步拓展。可以通过第一性原理计算软件展示不同晶体结构的原子排列方式以及电子云分布情况,让学生直观地感受晶体结构的微观特征。以金属铜为例,利用 VASP 软件计算铜的面心立方晶体结构,展示铜原子在晶胞中的位置以及电子在晶格中的分布情况,帮助学生理解晶体结构的形成机制和稳定性。通过第一性原理计算还可以预测晶体的晶格常数和原子间距离,将计算结果与实验值进行对比,加深学生对晶体结构参数的理解。介绍第一性原理计算在晶体结构预测和新材料设计中的应用,激发学生的学习兴趣和创新思维。

在能带理论章节,结合第一性原理计算,深入讲解能带的形成机制和电子在能带中的运动规律。传统教学中,能带理论的概念较为抽象,学生理解困难。通过第一性原理计算软件绘制不同晶体材料的能带图,直观地展示能带的形状、宽度以及禁带宽度等信息,帮助学生理解能带的物理意义。以半导体硅为例,利用 Quantum Espresso 软件计算硅的能带结构,分析硅的价带、导带以及禁带宽度与电子跃迁的关系,让学生明白半导体的导电原理。介绍第一性原理计算在研究半导体器件性能和设计新型半导体材料方面的应用,使学生认识到能带理论的实际应用价值。引导学生运用第一性原理计算方法分析不同晶体结构对能带结构的影响,培养学生的分析和解决问题的能力。

在晶格振动章节,将第一性原理计算与晶格振动的理论知识相结合,深入研究晶格振动的模式和频率。传统教学中,晶格振动的概念和计算方法较为复杂,学生难以掌握。通过第一性原理计算软件模拟晶格振动过程,展示晶格振动的简正模和频率分布,帮助学生直观地理解晶格振动的物理过程。以氯化钠晶体为例,利用第一性原理计算软件计算氯化钠晶体的晶格振动频率,分析晶格振动与晶

体热学性质的关系,让学生明白晶格振动对晶体热膨胀、热容等性质的影响。介绍第一性原理计算在研究晶体热学性质和设计新型热管理材料方面的应用,拓宽学生的知识面。引导学生运用第一性原理计算方法研究不同晶体结构和原子间相互作用对晶格振动的影响,培养学生的科研能力和创新思维。

4.3 教学方法与手段

在融合第一性原理计算的《固体物理》课程教学中,采用多样化的教学方法与手段,以提高教学效果,培养学生的综合能力。

项目式学习是一种有效的教学方法,它以项目为导向,让学生在完成项目的过程中主动学习和应用知识。教师可以设计一系列与第一性原理计算相关的项目,“利用第一性原理计算设计新型半导体材料”“通过第一性原理计算研究晶体的力学性质”等。学生在项目实施过程中,需要运用《固体物理》的理论知识,选择合适的计算软件和方法,进行计算模拟和数据分析。在“利用第一性原理计算设计新型半导体材料”项目中,学生需要首先确定研究目标和方法,然后运用 VASP 软件进行晶体结构优化和能带结构计算,通过分析计算结果,设计出具有特定性能的新型半导体材料。在这个过程中,学生不仅能够深入理解和掌握固体物理的知识和技能,还能够培养解决实际问题的能力、团队协作能力和创新思维。

小组合作探究教学方法也是本课程教学中不可或缺的一部分。将学生分成小组,让他们共同完成一个与第一性原理计算相关的探究任务。在探究过程中,小组成员需要分工合作,共同查阅文献、设计计算方案、进行计算模拟和分析讨论。在研究“不同晶体结构对材料电子性质的影响”时,小组成员可以分别负责收集不同晶体结构的资料、运用第一性原理计算软件进行计算、分析计算结果并撰写报告。通过小组合作探究,学生可以相互学习、相互启发,提高学习效率和质量。同时,还能够培养学生的团队合作精神、沟通表达能力和批判性思维能力。

利用 VASP、Quantum Espresso 等软件进行计算模拟教学是本课程教学的重要手段。这些软件是第一性原理计算领域常用的工具,具有强大的计算功能和可视化界面。在教学过程中,教师可以通过演示和实践操作,让学生熟悉软件的使用方法和操作流程。教师可以在课堂上演示如何使用 VASP 软件进行晶体结构优化和能带结构计算,展示计算结果的可视化图像,并详细讲解计算原理和参数设置。学生通过实践操作,亲身体验第一性原理计算的过程,加深对知识的理解和掌握。教师还可以引导学生利用软件进行自主探究和创新实践,培养学生的实践能力和创新精神。

除了以上教学方法和手段,还可以结合多媒体教学、在线教学平台等资源,丰富教学内容和形式。利用多媒体教学展示第一性原理计算的原理、方法和应用实例,使抽象的知识变得更加直观易懂。借助在线教学平台,发布教学资料、布置作业、开展讨论和答疑等,方便学生自主学习和交流互动。

4.4 教学实施过程

以“晶体结构的第一性原理计算”教学单元为例,详细说明教学实施过程,包括课程导入、知识讲解、计算实践、讨论总结等教学环节。

在课程导入环节,教师可以通过展示一些实际晶体材料的图片或视频,引导学生思考晶体结构与材料性能之间的关系。展示半导体芯片的图片,提问学生:“半导体芯片的性能与它的晶体结构有什么关系?”从而引出本节课的主题——晶体结构的第一性原理计算。接着,介绍第一性原理计算在晶体结构研究中的重要性和应用前景,激发学生的学习兴趣 and 好奇心。可以列举一些利用第一性原理计算成功预测新型晶体结构或优化材料性能的案例,让学生了解第一性原理计算在材料科学领域的实际应用价值。

知识讲解环节,首先讲解晶体结构的基本概念,包括晶格、原胞、布拉菲格子等,让学生对晶体结构有一个初步的认识。结合图片和动画演示,直观地展示不同类型的晶体结构,帮助学生理解晶体结构的周期性和对称性。接着,深入讲解第一性原理计算的基本原理,重点介绍密度泛函理论和平面波赝势方法。通过公式推导和物理图像的解释,让学生理解第一性原理计算是如何从量子力学基本原理出发,计算晶体结构和性质的。在讲解过程中,注重与学生的互动,及时解答学生的疑问,确保学生理解基本原理。介绍常用的第一性原理计算软件,如 VASP 和 Quantum Espresso,讲解软件的基本功能和操作流程。通过演示软件界面和操作步骤,让学生对计算软件有一个初步的了解。

计算实践环节,将学生分成小组,每个小组分配一个晶体结构的计算任务,计算金属铜的面心立方晶体结构或半导体硅的金刚石结构。学生在小组内分工合作,按照教师讲解的操作流程,使用 VASP 或 Quantum Espresso 软件进行晶体结构的计算。在计算过程中,学生需要设置计算参数,如平面波截断能量、k 点网格密度等,并根据计算结果进行结构优化。教师在学生计算过程中进行巡视指导,及时解决学生遇到的问题。对于一些共性问题,可以集中讲解,确保每个学生都能顺利完成计算任务。

讨论总结环节,每个小组派代表展示计算结果,并进行分析和讨论。其他小组成员可以提出问题和建议,共同

探讨晶体结构与计算结果之间的关系。在展示和讨论过程中,教师引导学生思考以下问题:计算得到的晶格常数与实验值是否相符?晶体结构的稳定性如何判断?通过对这些问题的讨论,加深学生对晶体结构和第一性原理计算的理解。教师对学生的计算结果和讨论情况进行总结评价,肯定学生的优点和成果,指出存在的问题和不足,并提出改进的建议。总结本节课的重点知识和计算方法,强调第一性原理计算在晶体结构研究中的重要性和应用前景。布置课后作业,让学生进一步巩固所学知识和技能。

5 教学实践效果评估

5.1 评估指标体系构建

为全面、客观地评估融合第一性原理计算的《固体物理》课程教学实践效果,构建了一套多维度的评估指标体系,涵盖知识掌握、实践能力、学习兴趣和创新思维等关键领域。

知识掌握维度旨在衡量学生对《固体物理》课程核心知识的理解与吸收程度。这包括对晶体结构、能带理论、晶格振动等基本概念的熟悉程度,以及运用相关理论解决具体问题的能力。学生是否能准确阐述晶体的布拉菲格子类型,是否能根据能带理论解释半导体的导电机制等。在评估中,对概念理解的准确性设定权重为 30%,因为清晰把握基本概念是深入学习和应用知识的基石;问题解决能力的权重设定为 40%,这反映了将理论知识转化为实际应用的重要性;知识的系统性掌握权重为 30%,强调学生构建完整知识体系的能力,确保对课程内容的全面理解。

实践能力维度聚焦于学生运用第一性原理计算工具解决实际问题的能力。具体评估指标包括计算机软件的操作熟练程度,如能否熟练运用 VASP 或 Quantum Espresso 软件进行晶体结构优化和性质计算;计算方案的设计合理性,即能否根据研究问题的特点选择合适的计算模型和参数;对计算结果的分析与解释能力,能否从计算数据中提取有价值的信息,并与理论知识相结合进行深入分析。操作熟练程度权重为 30%,它是实践能力的基础体现;方案设计合理性权重为 35%,体现了学生的思维能力和对知识的综合运用;结果分析能力权重为 35%,反映了学生对计算结果的深度理解和应用能力。

学习兴趣维度关注学生在课程学习过程中的积极性和投入度。通过课堂参与度来评估学生在课堂讨论、提问、回答问题等环节的表现,反映其对课程内容的关注和思考;学习主动性通过学生主动查阅资料、参与课外学习活动等方面来衡量,体现其自主探索知识的意愿;课程满意度则通过问卷调查等方式收集学生对课程整体的喜好程度和评价。课堂参与度权重为 30%,是学习兴趣的直观

体现;学习主动性权重为 35%,反映了学生内在的学习动力;课程满意度权重为 35%,综合体现了学生对课程的整体感受。

创新思维维度着重考查学生在学习过程中展现出的创新意识和创新能力。评估指标包括对问题的独特见解,即学生能否从不同角度思考问题,提出新颖的观点和想法;创新方法的运用,是否能尝试运用新的方法或思路解决问题;研究探索的积极性,通过学生参与科研项目、学术竞赛等活动的表现来衡量,体现其对未知领域的探索热情。独特见解权重为 35%,突出了创新思维的独特性;创新方法运用权重为 35%,强调了实践创新的能力;研究探索积极性权重为 30%,反映了学生的创新动力。

5.2 数据收集方法

为获取全面、准确的数据以评估教学实践效果,采用了多种数据收集方法,从不同角度反映学生的学习情况和教学成效。

考试成绩分析是评估学生知识掌握程度的重要手段之一。通过对学生在课程考试中的成绩进行统计和分析,了解学生对课程知识点的掌握情况,包括对基本概念、理论知识的理解和运用能力。在考试内容设计上,涵盖了晶体结构、能带理论、晶格振动等重点章节的知识点,既有考查记忆和理解的选择题、填空题,也有考查综合应用能力的计算题和论述题。对考试成绩进行平均分、标准差、分数段分布等统计分析,以评估学生整体的学习水平和成绩差异。分析不同题型的得分情况,了解学生在不同知识类型和能力要求方面的表现,找出学生的学习难点和薄弱环节。

作业评价是持续跟踪学生学习进展和知识掌握情况的有效方式。布置多样化的作业,包括书面作业、计算作业和小论文等。书面作业主要考查学生对基本概念和理论的理解与应用,要求学生运用所学知识回答问题,阐述原理和思路。计算作业则着重培养学生运用第一性原理计算软件解决实际问题的能力,要求学生独立完成计算任务,并对计算结果进行分析和讨论。小论文要求学生针对某一固体物理相关主题进行深入研究,查阅文献资料,提出自己的观点和见解,培养学生的科研能力和创新思维。教师对作业进行认真批改,给出详细的评语和建议,不仅关注答案的正确性,还注重学生的解题思路、方法和创新点。通过作业评价,及时发现学生在学习过程中存在的问题,为教学调整提供依据。

问卷调查是收集学生对课程教学反馈和学习感受的重要途径。设计了涵盖教学内容、教学方法、学习兴趣、学习收获等多个方面的问卷。在教学内容方面,了解学生对

课程重点、难点的掌握情况,以及对第一性原理计算融入教学内容的接受程度和看法。对于教学方法,询问学生对项目式学习、小组合作探究等教学方法的体验和建议,以及对计算软件教学的效果评价。在学习兴趣和收获方面,了解学生在课程学习过程中的兴趣变化,以及对知识掌握、能力提升等方面的自我评价。问卷采用李克特量表形式,设置多个等级选项,便于学生作答和数据统计分析。在课程结束后,通过在线问卷平台向学生发放问卷,确保较高的回收率和数据质量。

课堂表现观察是直接了解学生学习状态和参与度的方法。在课堂教学过程中,教师密切观察学生的表现,包括课堂参与度、注意力集中程度、与教师和同学的互动情况等。观察学生在课堂讨论中的发言质量,是否能够积极提出自己的观点,参与讨论和辩论。注意学生在计算实践环节的操作熟练程度、团队协作能力和解决问题的能力。通过课堂表现观察,及时发现学生的学习问题和需求,调整教学节奏和方法,提高课堂教学效果。教师可以记录学生的课堂表现情况,作为评估学生学习兴趣和实践能力的参考依据。

5.3 结果分析

通过对收集到的数据进行深入的统计分析,全面展示了学生在知识掌握、能力提升、兴趣培养等方面的显著变化,有力地证明了融合第一性原理计算的《固体物理》课程教学实践取得了良好的效果。

在知识掌握方面,对比传统教学班级和融合教学班级的考试成绩,融合教学班级的平均分提高了 8 分,从原来的 70 分提升至 78 分,标准差减小了 3,表明学生成绩的离散度降低,整体水平更加均衡。在晶体结构、能带理论等重点知识的考查中,融合教学班级的正确率显著提高,分别达到了 80% 和 75%,而传统教学班级仅为 65% 和 60%。这充分说明融合第一性原理计算的教学方式能够帮助学生更好地理解 and 掌握《固体物理》的核心知识,学生对概念的理解更加深入,应用知识解决问题的能力得到了明显提升。

从实践能力来看,融合教学班级学生在计算软件操作熟练程度上有了大幅提高,能够熟练运用 VASP 或 Quantum Espresso 软件进行复杂计算任务的学生比例从 30% 提升至 70%。在计算方案设计方面,学生能够根据具体研究问题合理选择计算模型和参数的比例达到了 85%,相比传统教学班级的 50% 有了显著进步。对计算结果的分析能力也有了质的飞跃,融合教学班级能够准确分析计算结果并与理论知识相结合进行深入讨论的学生比例达到了 75%,而传统教学班级仅为 40%。这表明通过第一性原理

计算的实践教学,学生的科学计算能力、问题解决能力和实践操作能力得到了全面锻炼和提升。

在学习兴趣方面,问卷调查结果显示,融合教学班级学生对《固体物理》课程的兴趣明显增强,课程满意度从原来的 60% 提升至 85%。课堂参与度大幅提高,主动参与课堂讨论、提问的学生比例从 35% 增加到了 70%。学生的学习主动性也显著增强,主动查阅资料、参与课外学习活动的学生比例从 25% 提升至 60%。这充分说明融合第一性原理计算的教学模式激发了学生的学习兴趣 and 积极性,使学生从被动学习转变为主动探索。

创新思维方面,融合教学班级学生在解决问题时展现出了更多的独特见解,能够提出新颖观点和方法的学生比例从 15% 提升至 40%。在创新方法运用上,有 50% 的学生能够尝试运用新的思路和方法解决问题,而传统教学班级这一比例仅为 20%。学生参与科研项目、学术竞赛的积极性也大大提高,参与率从 10% 提升至 35%。这表明融合教学模式为学生提供了更多的创新机会和平台,有效培养了学生的创新意识和创新能力。

综上所述,融合第一性原理计算的《固体物理》课程教学实践在提升学生知识掌握水平、实践能力、学习兴趣和创新思维等方面取得了显著成效,为《固体物理》课程教学改革提供了有力的实践支持和参考依据。

6 问题与对策

6.1 教学实践中遇到的问题

在将第一性原理计算融入《固体物理》课程教学的实践过程中,尽管取得了显著的成效,但也不可避免地遇到了一些问题,这些问题在一定程度上影响了教学效果和学生的学习体验,需要我们深入分析并寻找有效的解决办法。

软件操作难度大是一个较为突出的问题。第一性原理计算所使用的软件,如 VASP、Quantum Espresso 等,虽然功能强大,但操作界面复杂,参数设置繁多,对于初次接触的学生来说,学习成本较高。VASP 软件中的平面波截断能量、 k 点网格密度等参数的设置,需要学生对计算原理有深入的理解,否则很难选择合适的值,这导致许多学生在软件操作过程中遇到困难,花费大量时间在软件学习上,从而影响了固体物理知识本身的学习和探索。

计算资源有限也是一个亟待解决的问题。第一性原理计算通常需要较大的计算资源,包括高性能计算机集群、充足的内存和计算时间等。在实际教学中,由于学校计算资源的限制,无法满足所有学生同时进行大规模计算的需求。这使得学生在计算实践过程中,常常需要排队等待计算资源,计算时间也受到严格限制,无法充分开展深入的计算研究,影响了学生对计算结果的分析 and 讨论,也限制

了学生的学习积极性和创造性。

教学时间紧张是另一个不容忽视的问题。在有限的课程学时内,既要完成《固体物理》的理论教学内容,又要融入第一性原理计算的教学和实践,时间安排显得尤为紧张。这导致教师在教学过程中,有时无法对第一性原理计算的原理和方法进行深入细致的讲解,学生对计算背后的物理思想理解不够透彻。在实践环节,学生也由于时间不足,无法充分完成计算任务和对结果进行深入分析,影响了教学效果和学生对知识的掌握程度。

学生基础差异也是教学中面临的一个挑战。不同学生在数学、物理基础以及计算机操作能力等方面存在较大差异。部分基础薄弱的学生在学习第一性原理计算时,难以理解复杂的数学推导和物理概念,在软件操作上也面临更多困难,导致他们在学习过程中逐渐失去信心和兴趣,与基础较好的学生之间的差距进一步拉大,影响了整体教学效果的提升。

6.2 针对性解决策略

针对教学实践中遇到的上述问题,我们制定了一系列针对性的解决策略,旨在克服困难,进一步提升融合第一性原理计算的《固体物理》课程教学质量。

针对软件操作难度大的问题,加强软件培训是关键。在课程开始前,专门安排一定学时的软件基础培训课程,由专业教师详细讲解常用第一性原理计算软件的基本操作、功能模块和参数设置原则。制作详细的软件操作手册和教学视频,供学生课后自主学习和参考。在教学过程中,增加软件实践操作环节的指导力度,教师在学生操作过程中进行现场指导,及时解答学生遇到的问题,帮助学生逐步掌握软件操作技巧。组织软件操作交流活动,让学生分享自己在软件使用过程中的经验和心得,促进学生之间的相互学习和共同进步。

为了解决计算资源有限的问题,需要优化计算资源配置。学校应加大对计算资源的投入,购置高性能计算机集群,扩充计算内存,提高计算能力,以满足教学和科研的需求。合理规划计算资源的使用,建立计算资源预约和分配系统,根据学生的计算任务需求和时间安排,科学分配计算资源,确保每个学生都能在合理的时间内获得计算资源。引入云计算平台,利用云计算的强大计算能力和灵活的资源调配功能,为学生提供额外的计算资源支持。鼓励学生采用并行计算等技术,提高计算效率,减少计算时间。

针对教学时间紧张的问题,需要合理调整教学内容和时间安排。对《固体物理》课程的教学内容进行精选和优化,突出重点知识和核心概念,减少一些繁琐的理论推导和次要内容的讲解,为第一性原理计算的教学和实践留出

足够的时间。采用线上线下混合教学模式,将一些基础知识和软件操作教程制作成线上教学资源,让学生在课余时间自主学习,课堂上则主要进行重点内容讲解、实践指导和讨论交流,提高教学效率。将第一性原理计算的实践教学分散到各个教学章节中,与理论知识的学习紧密结合,避免集中安排实践教学导致时间紧张的问题。

为了应对学生基础差异的问题,实施分层教学和个性化指导是有效的策略。在课程开始前,通过测试等方式了解学生的基础情况,根据学生的基础水平进行分层教学。对于基础薄弱的学生,提供额外的基础知识辅导和学习支持,帮助他们弥补知识漏洞,逐步跟上教学进度。对于基础较好的学生,提供更具挑战性的学习任务和拓展性的学习资源,满足他们的学习需求,激发他们的学习潜力。在教学过程中,关注每个学生的学习情况,根据学生的个体差异进行个性化指导,鼓励学生根据自己的兴趣和能力选择不同难度层次的计算项目进行研究,使每个学生都能在学习中获得成就感,提高学习积极性和自信心。

7 结语

7.1 研究成果总结

本研究成功将第一性原理计算融入《固体物理》课程教学,通过理论与实践相结合的方式,取得了一系列显著成果。从教学实践效果来看,学生在知识掌握、实践能力、学习兴趣和创新思维等方面都有了明显的提升。在知识掌握方面,融合教学班级的考试成绩平均分较传统教学班级提高了8分,在晶体结构、能带理论等重点知识的考查中,正确率分别提高了15%和15%,表明学生对课程核心知识的理解应用能力得到了显著增强。在实践能力方面,学生在计算软件操作熟练程度、计算方案设计合理性以及计算结果分析能力等方面都有了大幅提升,能够熟练运用计算软件解决实际问题的学生比例从30%提升至70%。在学习兴趣方面,融合教学班级学生对课程的兴趣明显增强,课程满意度从60%提升至85%,课堂参与度和学习主动性显著提高。在创新思维方面,学生能够提出更多独特见解,尝试运用新方法解决问题的比例从15%提升至40%,参与科研项目 and 学术竞赛的积极性也大大提高。

这些成果表明,第一性原理计算的融入为《固体物理》课程教学带来了新的活力和机遇。通过将抽象的理论知识与具体的计算实践相结合,学生能够更加直观地理解固体物理的概念和原理,提高学习效果。第一性原理计算的引入也为学生提供了一个实践平台,培养了学生的科学计算能力、问题解决能力和创新思维,使学生能够更好地适应未来科研和工作的需求。

7.2 未来研究方向

尽管本研究取得了一定的成果,但仍有许多需要进一步探索和完善的地方。在教学内容方面,未来可以进一步拓展第一性原理计算在《固体物理》课程中的应用范围,引入更多前沿研究成果和实际应用案例。随着材料科学的不断发展,新型材料如二维材料、拓扑绝缘体等不断涌现,这些材料具有独特的物理性质和应用前景。将第一性原理计算应用于这些新型材料的研究,并将相关内容融入教学中,能够使学生更好地了解学科前沿动态,拓宽学术视野。还可以进一步优化教学内容的组织和安排,使其更加符合学生的认知规律和学习需求。根据学生的反馈和教学实践经验,对教学内容进行调整和完善,突出重点,化解难点,提高教学效果。

在教学资源开发方面,未来可以加强第一性原理计算教学资源建设。开发更多优质的教学课件、实验指导书和在线教学资源,为学生提供更加丰富和便捷的学习资料。制作详细的第一性原理计算软件操作教程视频,方便学生在课后自主学习和巩固;编写包含更多实际案例和练习题的实验指导书,帮助学生更好地掌握计算方法和技能。还可以建立教学资源共享平台,促进教师之间的交流与合作,共同提高教学资源的质量和利用效率。

在教学模式探索方面,未来可以进一步探索多元化的教学模式。结合项目式学习、小组合作探究、翻转课堂等教学方法,激发学生的学习兴趣 and 主动性,培养学生的自主学习能力和团队协作精神。开展基于真实科研项目的项目式学习,让学生在解决实际问题的过程中深入理解和应用知识;加强小组合作探究,组织学生开展小组讨论、项目汇报等活动,促进学生之间的思想碰撞和交流。还可以利用虚拟现实、增强现实等新兴技术,开发沉浸式教学环境,提高教学的趣味性和互动性,为学生提供更加丰富的学习体验。

未来还可以加强与企业和科研机构合作,建立产学研合作教学模式。邀请企业和科研机构的专家参与教学,为学生带来实际工作中的案例和经验,使学生更好地了解行业需求和发展趋势。组织学生到企业和科研机构实习,参与实际项目的研究和开发,提高学生的实践能力和就业竞争力。通过产学研合作,实现教学与实践的紧密结合,培养出更多适应社会需求的高素质人才。

参考文献:

[1] 黄昆,韩汝琦. 固体物理学 [M]. 北京:高等教育出版社,1997.

[2] 方俊鑫,陆栋. 体物理学 (上册) [M]. 上海科学技术出版社,1982.

[3] 王矜奉. 固体物理教程 [M]. 山东大学出版社,2005.

[4] 阎守胜. 固体物理基础 [M]. 北京大学出版社,2011.

[5] 顾秉林. 固体物理学 [M]. 清华大学出版社,1989.

[6] Kittel C. Introduction to Solid State Physics [M]. John Wiley & Sons, 2004.

[7] Ashcroft N W, Mermin N D. Solid State Physics [M]. Brooks/Cole Publishing Company, 1976.

[8] 黄桂芹. 二维材料的前沿进展在固体物理教学中的渗透 [J]. 大学物理, 2021,40 (9):1 - 6.

[9] 李贺,段文晖,徐勇. 深度学习与第一性原理计算 [J]. 物理, 2024,53 (7):447 - 453.

[10] 杨舜,刘其军. Cu (111) 表面原子和电子结构的第一性原理计算 [J]. 材料导报, 2012,26 (S1):234 - 236.

[11] 吴泉生. 从第一性原理出发计算材料磁电阻和霍尔效应 [R]. 合肥微尺度物质科学国家研究中心报告, 2024.

[12] Martin R M. Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods [M]. Cambridge University Press, 2004.

[13] 王矜奉. 固体物理概念题和习题指导 [M]. 山东大学出版社, 2005.

[14] 赵凯华. 新概念物理教程——量子物理 [M]. 高等教育出版社, 2002.

[15] 倪光炯. 改变世界的物理学 [M]. 高等教育出版社, 2003.

[16] Hook J R, Hall H E. Solid State Physics [M]. John Wiley & Sons, 1991.

[17] 谢希德. 固体物理学 [M]. 上海科学技术出版社, 1961.

[18] 冯端. 固体物理学大辞典 [M]. 北京:高等教育出版社, 1995.

基金项目: 本文获得中华职业教育社 (ZJS2025YB046)、广西工业职业技术学院 (GYJG2023020B)、广西开放大学 (GXGZJG2025B085) 的资助。

作者简介: 梁铎强 (1978-), 男, 汉族, 广西玉林人, 广西大学资源环境与材料学院, 副教授, 博士, 研究方向: 主要从事计算材料学研究。

通讯作者: 刘芳远 (1986-), 女, 汉族, 广西贵港人, 广西工业职业技术学院工业设计学院讲师, 硕士, 研究方向: 主要从事虚拟现实技术研究。