

《材料创新研究体验》研讨课大纲

“千姿百态的晶体结构及其计算机建模”

16 学时, 1 学分

1、名称

千姿百态的晶体结构及其计算机建模

2、背景、目的及解决的问题

固体材料是由大量的原子（或离子、分子）组成的。固体材料中的原子按一定规律排列，根据排列规律的不同可以将固体材料分为晶体、非晶体和准晶体。

晶体结构是贯穿材料专业学习的重要基础。本体验项目将引导学生熟练应用 FindIt 晶体结构数据库、建模软件 MS Visualizer、建模软件 CrystalMaker 和建模软件 Diamond，构建千姿百态的晶体结构。并在认知晶体结构的基础上，对非晶体和准晶体的结构特征有初步认识。

本项目训练，通过授课、自学、自我探索、讨论等多种方式，让学生学习探索体验多类晶体结构的计算机建模，同时引导培养学生初步的文献检索利用能力和撰写规范科技论文能力。

3、指导教师

于金

4、学时安排

授课：2~4 学时；实验：8 学时；讨论：2~4 学时；汇报：2 学时。共 16 学时。

根据不同题目特点，提交《研究报告》《材料计算学习指导书》《PPT》《建模实践电子文档》。授课内容：

- (1) 讲授构建晶体结构的基本要素；讲授 FindIt 晶体结构数据库的使用。
- (2) 讲授三种典型的金属晶体结构。
- (3) 演示姿态万千的晶体结构，及利用 MS Visualizer 软件建模。
- (4) 提供 MS Visualizer 软件建模的《材料计算学习指导书》，推荐学习资料；学习完成典型晶体结构的建模实践，初步具有晶体结构建模能力。
- (5) 进行复杂晶体结构的建模探索体验。

(6) 以下每人任选一题：

- ◇ C 的同素异构体及其建模。
- ◇ Fe 晶体结构实验测定及其建模。
- ◇ CrystalMaker 软件的晶体结构建模探索体验。
- ◇ Diamond 软件的晶体结构建模探索体验。
- ◇ 非晶体的结构特征初探。
- ◇ 准晶体的结构特征初探。
- ◇ 基于 BFDH 方法的完整晶体平衡形状的计算。

(7) 本课程体验的汇报与交流。

5、实验准备：原材料及相关设备等

相关软件的学习；初步的文献检索利用；学习科技论文撰写规范。

6、实验内容和考核指标

- ◇ 完成指定的典型晶体结构的建模。
- ◇ 进行复杂晶体结构的建模。
- ◇ 完成自选任务。

7、考核方式

总评成绩 $100\% = \text{课堂考勤 } 10\% + \text{试验安全性和服从实验室管理规定情况 } 10\% + \text{样品质量或水平, 或样机实用效果 } 40\% + \text{汇报水平 } 40\%$

8、实验项目预算

每个小组提供购买配件的经费 300 元。

附：



