

# 《固体物理学》教学中 Materials Studio 的应用

肖文志 文大东 贺君 段伟杰 何婷 肖刚 易洲\*  
湖南工程学院

DOI:10.12238/er.v5i10.4840

**[摘要]** Materials Studio模拟软件是基于多种先进算法的综合应用,在优化晶体结构、预测晶体物理性质等方面,都能从一些简易的操作中获取切实可靠的数据。本文结合Materials Studio模拟软件的功能和《固体物理学》课程的特点,阐述Materials Studio模拟软件应用于《固体物理学》教学后,对学习态度、学习兴趣、学习动机、学习效果等产生的一系列可能的作用。

**[关键词]** 《固体物理学》; Materials Studio; 教学效果

**中图分类号:** O48 **文献标识码:** A

## Application of Materials Studio in the Teaching of *Solid State Physics*

Wenzhi Xiao Dadong Wen Jun He Weijie Duan Ting He Gang Xiao Zhou Yi\*

Hunan Institute of Engineering

**[Abstract]** Materials Studio simulation software is a comprehensive application based on a variety of advanced algorithms, which can obtain practical and reliable data from some simple operations in optimizing crystal structure and predicting crystal physical properties. Combined with the functions of Materials Studio simulation software and the characteristics of *Solid State Physics*, this paper expounds a series of possible effects of Materials Studio simulation software on learning attitude, learning interest, learning motivation and learning effect after it is applied to the teaching of *Solid State Physics*.

**[Key words]** *Solid State Physics*; materials studio; teaching effectiveness

### 引言

目前《固体物理学》的教学大多采用传统的教学手段,教学内容中大量抽象的概念和图像决定了传统教学的众多缺陷。针对这一问题,本文根据Materials Studio模拟软件在《固体物理学》教学中的应用进行系统性研究。

### 1 《固体物理学》教学现状

《固体物理学》作为微电子科学与工程专业一门重要的专业学位课,融汇了大学物理、热力学与统计物理、量子力学、半导体物理等课程基础知识及众多现代科技的前沿内容。《固体物理学》是微电子技术、光电子技术、材料科学等技术学科的一门基础课程,同时也是这些基础理论和众多高科技应用学科之间的纽带。《固体物理学》主要是研究固体物质的物理化学性质、微观结构、构成物质的各种粒子的运动形态及其相互关系的学科。因此,微电子科学与工程专业学生学完本课程后,能够获得本课程完整的知识内容,且对凝聚态物理的知识内容有一个基本的了解。同时,《固体物理学》课程研究内容越来越丰富,手段趋于多样化,而与之相对应的传统固体物理教学方法明显滞后,大多数还停留在上世纪90年代的水平,很难满足学科自身发展和学生培养目标的要求。

微电子科学与工程专业的《固体物理学》课程设置为大三年级的专业学位课,以往的授课模式主要为课堂讲授极少开展实践课,且传统固体物理课程内容的结构体系是以长程有序的晶体为研究对象,主要研究晶体的结构、晶格动力学和能带理论等主要内容。在过去的固体物理教学内容中,充满了眼花缭乱的晶体结构空间图形变换、繁琐的数学推导。《固体物理学》是整个微电子科学与工程专业培养阶段最根本的专业基础课程,最终目的是使本专业学生能够对固体物理知识的内容、概念和物理图像从整体上有一个全面的了解。但是,传统的固体物理教学不利于培养学生的主观能动性、创造性,从而难以培养出为社会做出成就的创新型应用人才。因此,《固体物理学》课程教学改革与实践势在必行。

《固体物理学》在本科阶段对理工科学生整个知识体系的奠基性及引导性的重要作用是不容置疑的。通常学习《固体物理学》课程的困难主要有以下两个方面:第一方面,固体物理学具有很强的综合性,需要学生具有较为深厚的数学基础、大量的物理学知识基础;第二方面,固体物理学涉及大量的数学理论推导,需要学生具备扎实的数学推导能力,较多的课程内容需要空间展示或是进行数值化计算、作图才能较好地讲授知识要点,

学生学习起来普遍感到困难。《固体物理学》对学生逻辑思维能力、理解能力的要求比较高,对此,若要改革教学,就应从教学手段入手,使其符合学生对晶体结构的认知是学习固体物理学的基础。若局限于平面模型,学生的理解往往都要慢半拍,这就给固体物理教学带来了挑战。繁杂的物理公式、繁琐的数学演算以及抽象的晶格空间变换都是巨大的挑战,学生容易陷入到数学推导中而忽视对物理本质的把握,如果能恰当地使用形象、直观的物理图像,就能有效地使学生获得感性认识,提高课堂教学效果。

## 2 Materials Studio在《固体物理学》中的应用

### 2.1 Materials Studio应用的必要性

从《固体物理学》教学来讲,由于学生需面对大量且复杂的数学推导很容易忽视对物理本质的把握,若是能够合理利用形象直观的物理图像,便可以使学生获得感性认识,然后顺利地对待物理本质理性认识,从而提高教学及学习效率。因此,针对《固体物理学》的内容特点及教学中存在的问题,迫切需要有效的模拟软件辅助《固体物理学》教学。同时,学习《固体物理学》,只看书做题是不够的,还应当让学生掌握一定的计算机模拟技术,这也是当前乃至今后理论物理教学改革的大方向,这种改革有助于培养物理专业学生的学习能力、创新能力及科学研究能力。Materials Studio模拟软件的引入,可以促进计算机技术在理论物理学中的应用。一方面,物理学家一致表明,“计算物理”连同“理论物理”、“实验物理”一起构成了现代物理学的三大支柱。另一方面,在工程领域中,CAD等软件,已经很大程度地提高了设计业、制造业的效率。同理,在教学领域中也需借助计算机技术,就像设计业和制造业的做法一样,通过相关专业软件硬件的运用,可以减少重复、繁琐的劳动,将节省的时间和精力去思考物理原理、物理概念,从而提高学习及教学的效率。因此,在理论物理教学及学习中引入计算机模拟软件,是整个物理课程改革的需要,是顺应新时代物理教育发展要求的明智做法。为了切实培养出符合新时代要求的微电子专业大学生,必须使计算机技术和物理学课程的教学方法有机地结合在一起,让学生借助计算机进行学习和研究理论物理问题。

### 2.2 Materials Studio应用的可行性

《固体物理学》教学中,计算机模拟技术不仅能够形象、立体的展示微观粒子的结构,而且还能进行模拟、结构分析以及数据处理等,然后从微观的角度揭示结构与性质之间的关系。Materials Studio模拟软件无论是优化晶体结构、预测晶体物理性质,还是分析晶体的X射线衍射等,都能从一些简易的操作中获取切实可靠的数据。而且,Materials Studio模拟生成的晶体结构、制作的图表等都能够及时地共享到其它PC软件。同时,Materials Studio系统配置要求低,一般的PC机就能实现基本的模拟和计算功能。

### 2.3 Materials Studio的应用内容

本文主要进行Materials Studio软件在《固体物理学》教学中的应用研究。主要内容包括:第一,理论支撑,即教学相关

体系的理论探讨。鉴于将Materials Studio模拟软件应用于《固体物理学》教学,是建立在一定的相关教学理论基础之上的,本项目结合Materials Studio模拟软件的功能和《固体物理学》课程的特点,对学习理论方面进行相关阐述,揭示Materials Studio模拟软件应用于《固体物理学》教学后,对学习态度、学习兴趣、学习动机、学习效果等产生的一系列可能的作用。第二,举例应用,即Materials Studio模拟软件在《固体物理学》教学中的具体应用,包括Materials Studio软件在固体物理学教学中的晶体结构部分(如晶格中原子的具体排列、晶格的周期性和对称性、原胞、晶胞、晶向、晶列、密勒指数、密堆积、配位数等)、布里渊区部分、能带理论部分等相关内容和知识点的具体呈现。

培养人才是高校发展最根本的任务目标和必由之路,其中课程教学是人才培养最关键的环节,而课堂效果直接影响着整体教学质量。因此,针对实际情况本课程采取多软件协同《固体物理学》教学。通过多软件协同《固体物理学》课程教学的方式,改善原本教学方法单一、注重知识点的灌输、只让学生知道固体物理的知识点而忽视对学习能力的培养的弊端,激发学生学习兴趣,增强学习热情,培养逻辑思维能力。同时,利用软件辅助教学让《固体物理学》中的抽象概念通过图形化的输出可以加深印象,提高学习效率。在教授《固体物理学》主要知识点外,在教学过程中还应注入当下科技发展的新观点,着重强调本学科特有的科学思维方法。结合Materials Studio模拟软件实例展示新教学模式提高《固体物理学》课程教学质量的新思路。

### 2.4 Materials Studio的实施方案

《固体物理学》教学过程中,空间立体感的建立极为重要。针对这种情况,利用Materials Studio模拟软件可以构建晶格结构、晶格原胞和晶胞基矢以及晶胞有效格点数目。以面心立方晶格结构为例,整体是一个立方体,顶角和面心都有一个原子,如Cu, Al, Ni等,首先确定原子尺寸,形成三维球形,再构建原子图形,确定晶键尺寸,模拟晶键,最后合成面心立方晶格(见图1)。这样就清晰地讲解了面心立方格子的特征,使学生深度掌握晶格空间立体性的特点,强化记忆,达到被动记忆为主动记忆的目的,提高学习效率,高效完成教学目标。

Materials Studio模拟软件具有强大的建模功能,可以从软件自带的结构数据库导入常见的晶体结构,也可以通过输入其结构和对称性参数来构建晶体。对于结构比较复杂的晶胞,如六角晶胞、复式晶格等,学生对这类结构认知往往有偏差。因此,三维晶体建模及演示在此类晶体相关的教学中更为重要。通过Materials Studio模拟软件的模型界面,可以对晶体结构进行空间旋转,从不同的角度去演示结构,帮助学生准确地理解晶体的空间结构。如图1所示为金属Cu的晶体结构,而图2为Cu晶体的密排面排列结构。通过对密排面构建过程的演示,可帮助学生更好地理解密排面与晶体结构的空空间关系。而通过图2也可直观地看到立方密堆积晶体密排面的原子排布特征,即呈

ABCABCABCABC.....堆垛的相邻原子层的空间关系。除了完美晶体, Materials Studio模拟软件也可以建立缺陷晶体结构。常见的缺陷类型, 包括肖特基缺陷, 弗伦克尔缺陷以及替位式的外来杂质缺陷, 都可以通过Materials Studio模拟软件轻松构建相应模型。通过缺陷模型的展示, 学生可更为直观地了解不同缺陷的空间结构特点。

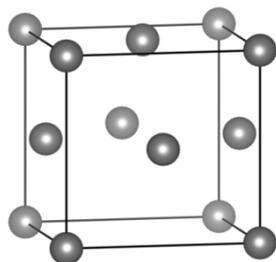


图1 面心立方晶格

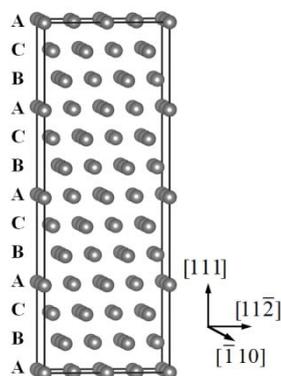


图2 Cu晶体沿密排面排列的示意图

《固体物理学》课程内容是后续微电子科学与工程专业学习和科学研究的基础, 是必须掌握的基本知识, 在教学过程中可通过增加一些微电子学科前沿知识, 将更多的基本内容拓展为包含新知识生长点的知识。同时, 在提高学生科学素养和创新能力方面, 在讲述晶体的对称性基础上增加物理定律的对称性。在提高学生应用能力方面, 增加一些固体物理基础知识在微电子学中的应用讲解, 比如晶体的各向异性与微电子工艺中的异性刻蚀等。

《固体物理学》是一门无论是结构还是概念和原理都很抽象的课程, 虽然固体应用范围很广泛, 但固体物理是从电子原子层次上来认识结构和研究材料, 微观的东西看不见摸不着, 很多问题要靠想象, 而利用计算机模拟软件教学则可以解决这一困

难。借助于计算机模拟软件技术, 用动态的画面直观地演示固体物理课程所涉及到的晶体微观有关的物理规律和性质, 提高教学内容直观性和感染力, 可以方便使用在《固体物理学》教学模式中, 提高教学效果。

### 3 结语

本文以Materials Studio模拟软件为工具, 探讨Materials Studio模拟软件在《固体物理学》教学中的应用, 进一步促进现代教育技术与物理教学的结合。将Materials Studio模拟软件应用于《固体物理学》教学是解决教学困境、提高学生学习效率以及教学发展的需要。《固体物理学》教学中Materials Studio模拟软件的引入, 使教学过程具有三维立体操控性、自主探索特性以及动态交互特性, 从而能显著调动学生的学习兴趣, 在学习知识的同时培养自主学习探索的能力。

### [基金项目]

湖南工程学院校级教学改革研究项目“基于学习通平台大学物理线上线下混合教学模式的理论与实践”; 湖南工程学院校级教学改革研究项目“工程应用型人才培养模式下《电磁场与电磁波》课程教学改革研究”; 湖南工程学院校级教学改革研究项目“新时代高校线上教学管理体系初步探索——以湖南工程学院为例”; 湖南省普通高等学校教学改革研究项目“新工科理念引领下地方院校微电子科学与工程专业人才培养探索实践”(编号: HNJG-2022-0249); 湖南工程学院校级研究生教育教学改革项目“《固体物理》教学中建模软件应用的实践与探索”。

### [参考文献]

- [1]黄昆, 韩汝琦. 固体物理[M]. 北京: 高等教育出版社, 2017.
- [2]王矜奉. 固体物理教程[M]. 济南: 山东大学出版社, 2007.
- [3]香莲, 张建芳, 何颖卓. 《固体物理学》教学改革浅析[J]. 内蒙古民族大学学报, 2012, 18(05): 156-157.
- [4]王红心, 汤莉莉. 固体物理学教学探索[J]. 教育现代化, 2019, 6(50): 132-133.

### 作者简介:

肖文志(1974--), 男, 汉族, 湖南邵阳人, 博士, 教授, 研究方向: 磁性材料。

### 通讯作者:

易洲(1989--), 男, 汉族, 湖南常德人, 博士, 讲师, 研究方向: 凝聚态物理。