

基于开源Quantum ESPRESSO软件的固体物理教学模式创新与实践

姜训勇

天津理工大学材料科学与工程学院, 天津

收稿日期: 2024年2月29日; 录用日期: 2024年4月9日; 发布日期: 2024年4月17日

摘要

为了解决固体物理课程学习中的难点, 授课时引入开源Quantum ESPRESSO软件为学生提供全面的理论学习和实践训练。实践训练分为理论学习和实际操作两个阶段, 使学生在理解固体物理的难点的同时获得实际操作经验。通过自主学习、实验报告的撰写和实操演示等分层次的学习方式, 学生逐渐提升对固体物理的整体理解水平。学生对这一学习方式的反应良好。Quantum ESPRESSO软件为学生提供了先进的学习工具, 有效提高了固体物理课程的学习效果。

关键词

Quantum ESPRESSO, 固体物理, 开源软件, 计算实践

Innovation and Practice of Solid State Physics Teaching Model Based on Quantum ESPRESSO

Xunyong Jiang

School of Materials Science and Engineering, Tianjin University of Technology, Tianjin

Received: Feb. 29th, 2024; accepted: Apr. 9th, 2024; published: Apr. 17th, 2024

Abstract

In order to solve the difficulties in learning the solid state physics course, the open source Quantum ESPRESSO software is introduced to provide students with comprehensive theoretical learning and practical training in our lectures. The practical training is divided into two stages: theo-

retical learning and hands-on practice, allowing students to gain practical experience while understanding the difficulties in solid-state physics. Through a tiered learning approach, including independent study, writing experiment reports, and hands-on demonstrations, students gradually enhance their overall understanding of the solid-state physics discipline through the integration of theoretical knowledge and practical applications. Students have responded positively to this learning approach, and Quantum ESPRESSO software serves as an advanced learning tool, effectively improving the learning outcomes in solid-state physics.

Keywords

Quantum ESPRESSO, Solid State Physics, Open Source Software, Calculation

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

固体物理学是一门研究固体物质结构和性质的物理学分支。其主要内容包括晶体结构、电子结构、热学性质、力学性质等[1]。这些知识点是理解固体材料性质和应用的基础。固体物理课程的内容特点是抽象性强,涉及的知识面广,需要用到大量计算。

在传统的教学模式中,固体物理的教学往往以教材为基础,通过课堂讲授的方式向学生传授知识。固体物理的教学主要侧重于理论知识的传授。这种教学方式存在问题。首先,固体物理学的知识点较为抽象,学生难以形成直观的认识和理解。其次,传统的教学模式缺乏实践操作的机会,学生只能在课堂上听讲,难以真正理解和应用所学知识。此外,固体物理课程中涉及的计算和模拟方法也是教学难点之一。学生往往因为缺乏实际操作的经验,对这些计算方法的理解和应用存在困难[2]。

传统的教学模式存在许多限制,其中最显著的是缺乏实践操作的机会。学生只能在课堂上听讲,难以真正理解和应用所学知识。传统的固体物理课程教学模式存在一些困难。例如对于一些抽象概念(如磁性)的学习往往仅限于理论层面,缺乏实际案例的支持。这导致学生难以将理论知识应用到实际问题中。从而影响了他们对固体物理学的全面理解。同时,传统的教学模式缺乏与时俱进的更新和创新,难以适应快速发展的科学技术和社会需求[3]。

2. 从教育学理论看解决固体物理教学难点的解决

固体物理课程教学面临的挑战不仅在于课程内容的复杂性,还包括如何更好地激发学生的学习兴趣和提高他们的学科水平。通过教育学理论的引入,特别是建构主义学习理论、自主学习理论和问题解决学习理论,可以为解决固体物理教学难点提供新的思路。

2.1. 建构主义学习理论

建构主义学习理论认为,知识是由学习者主动建构的,而非被动接受[4]。在固体物理教学中,我们可以运用建构主义学习理论来激发学生的学习兴趣,提高其学习效果。具体来说,我们可以通过以下方式来实现:

(1) 提供实际操作的机会。让学生亲身参与实验、模拟等活动,通过实际操作来理解和掌握固体物理学的知识点。

(2) 鼓励学生主动探究。通过提出问题、设计实验等方式,引导学生主动探究固体物理学的原理和方法,培养学生的探索精神和创新能力。

(3) 提供多元化的学习资源。为学生提供多种学习资源,如教材、参考书、网络资源等,让学生根据自己的需求和兴趣进行自主学习。

2.2. 自主学习理论

自主学习理论强调学生的自主学习和自我管理[5]。在固体物理教学中,我们可以运用自主学习理论来培养学生的自主学习能力,从而提高其学习效率。具体来说,我们可以通过以下方式来实现:

(1) 激发学生的学习兴趣。通过生动有趣的课堂讲解、实验演示等方式,激发学生的学习兴趣 and 动力,让学生愿意主动参与学习。

(2) 培养学生的自我管理 ability。通过制定学习计划、监控学习进度等方式,培养学生的自我管理 ability,让学生能够更好地规划和管理自己的学习。

(3) 提供个性化的学习支持。根据学生的特点和需求,提供个性化的学习支持,如一对一辅导、在线答疑等,帮助学生更好地解决学习中的问题和困难。

2.3. 问题解决学习理论

问题解决学习理论强调通过解决实际问题的学习方式来提高学生的学习效果[6]。在固体物理教学中,我们可以运用问题解决学习理论来设计固体物理课程,从而更好地帮助学生掌握学习内容。具体来说,我们可以通过以下方式来实现:

(1) 设计实际问题。根据学生的兴趣和实际需求,设计具有实际意义的固体物理学问题,让学生通过解决问题来学习和掌握相关知识。

(2) 提供解决问题的工具和方法。为学生提供解决问题的工具和方法,如软件、数据库等,让学生能够更好地解决实际问题。

(3) 鼓励学生合作与交流。鼓励学生之间的合作与交流,共同解决问题和分享经验,培养学生的合作精神和沟通能力。

在固体物理课程教学中引入计算软件,如 Quantum ESPRESSO,是贯彻了以上教育学理论的实践。计算软件作为一种工具,可以帮助学生在实际操作中更好地理解和应用所学知识,从而提高学生的学习效果和能力。首先,计算软件可以为学生提供实际操作的机会,让学生在解决问题的过程中学习和理解知识,这符合建构主义学习理论和问题解决学习理论的要求。其次,计算软件可以帮助学生培养自我管理和自我学习的能力,这符合自主学习理论的要求。最后,计算软件可以促进师生之间的交流和合作,共同推动教学的发展和进步。因此,采用计算软件在固体物理教学中可以很好地实践这些教学理论,提高学生的学习效果和能力。采用计算软件的固体物理教学,实质上是在教育学理论的指导下,更加注重学生的主动参与和问题解决能力的培养,为传统教学模式中的难点提供了新的解决思路。

3. 开源软件在教学中的优势与潜在贡献

固体物理学研究中,有几款常用的计算软件在学术界得到广泛应用。这些软件包括 VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [7]、CASTEP (Cambridge Sequential Total Energy Package) [8]、QE (Quantum ESPRESSO)等[9]。这些软件提供了丰富的功能,包括从第一性原理计算到分子动力学模拟,涵盖了固体物理学的多个方面。

开源软件是指其源代码是公开可用的,任何人都可以查看、使用、修改和分发的软件。与闭源软件相比,开源软件具有诸多优势。首先,开源软件的源代码对用户开放,可以通过学习和参与改进来提高

软件的性能。其次，开源软件通常免费，可以减轻学术机构和个人用户的经济压力。此外，开源软件的社区支持和用户参与度较高，问题可以更迅速地得到解决。

QE 是一款在固体物理学领域广泛使用的开源软件。QE 是一个基于第一性原理的软件套件，旨在通过密度泛函理论等方法解决固体、分子和晶体的电子结构问题[9] [10]。其基本原理涉及通过求解 Kohn-Sham 方程来获得电子的基态性质。QE 支持多种计算方法，包括平面波基组、赝势方法等，使其适用于不同尺度和材料系统的模拟。QE 涵盖了从基础的电子结构计算到复杂的分子动力学模拟的全面功能。QE 在学术界有着广泛的认可，其可靠性和性能在科研领域得到验证。

在开源软件中，QE 以其卓越的性能和广泛的应用成为固体物理学教学的理想选择。QE 作为一个开源项目，强调协作和共享，学生可以参与到这一共同体中，获得他人的经验和成果，促进学科知识的共同发展。同时，学生可以通过 QE 更好地理解固体物理概念，提高实际问题求解的能力。

3.1. 采用 QE 于固体物理课程教学实践的目标

将开源第一性原理计算软件 QE 融入固体物理教学，旨在通过实践计算的方式辅助学生深入理解和掌握固体物理学知识。通过这一教学设计，可以激发学生对固体物理学学科的兴趣，提高其自主学习和解决问题的能力，培养他们在未来科学研究和工作中运用先进计算工具的能力。

3.2. 引入和使用 QE 的步骤

在引导学生建立 QE 环境的过程中，分为三个步骤，确保学生在理论知识、软件环境的搭建以及实际操作中都能够熟练运用。

1) 理论知识的准备

首先，向学生介绍基础的理论知识，以确保他们对局域密度泛函理论等基本概念有清晰的理解。通过阅读相关文献[10]，学生将学习局域密度泛函理论方法的基本原理、其在固体物理学中的应用确保学生在使用 QE 进行计算时能够理解背后的物理原理。

2) 软件环境的安装

学生在个人电脑上搭建适用于 QE 的运行环境。

3) 实例的计算

提供一系列实际案例，引导学生通过 QE 软件解决具体的固体物理问题。这些案例将涵盖材料电子结构、晶格振动等方面，旨在让学生通过实际操作任务，逐步掌握 QE 软件的使用技能。在这一过程中，学生将学会准备计算所需的输入文件，设置计算参数，运行计算，并最终解读和分析计算结果。

3.3. 整合 Quantum ESPRESSO 到固体物理学课程中的方法

3.3.1. 课前准备与学习资料下发

在课程开始之前，提前向学生下发与 QE 相关的学习资料，其中包括 QE 的基本介绍、安装指南、使用手册。这样的预习过程旨在让学生提前了解 QE 软件的基本原理，为后续的实际操作打下坚实基础。

3.3.2. 自主学习与实践操作

指导学生在虚拟机中安装 Linux 系统。学习熟悉基本的 Linux 系统的操作命令。讲述 QE 软件的基本组成，软件的安装和编译过程。通过这一步骤，学生将学会搭建 QE 所需的基础环境，为后续的实际操作打下坚实基础。学生通过按照学习资料中的步骤进行实际操作，逐渐掌握 QE 软件的使用方法。

3.3.3. 由浅入深构建学生的练习案例

在固体物理的教学中，我们设计了一系列由浅入深的练习案例，帮助学生逐步掌握先进计算工具。

1) 晶体结构绘制与合金构建

学生将使用结构软件 Vesta 进行晶体结构的绘制。通过练习在 Vesta 中构建合金和绘制二维材料，学生将熟悉结构软件的基本操作，理解晶体结构的基本概念。

2) 计算小分子的结合能

在基本操作的基础上，学生将以一个小分子为例，练习计算晶体的结合能。这一步骤涉及到第一性原理计算的基本原理和方法，使学生初步了解计算材料性质的核心理论。

3) 计算晶体结合能和弹性模量

学生计算晶体的结合能和弹性模量。在做完示例练习后，给学生布置提高作业，验算教材中提高的结合能数据。这个案例旨在让学生深入理解材料的力学性质，培养其对材料力学行为的计算和分析能力。

4) 计算材料的晶格振动谱

计算材料的晶格振动谱。通过这一步骤，学生将学会利用计算工具模拟材料的振动行为，了解材料的热学性质。

5) 计算材料的能带

学生将进行计算材料的能带结构。

3.3.4. 实验报告的撰写

在实践操作的基础上，要求学生根据实验结果撰写实验报告。报告内容包括对所计算的物理过程的理论分析、计算参数的选择和实验过程的详细描述。这一步骤旨在培养学生的实验设计和数据分析能力。学生可以选择将实验报告呈现为传统的纸质版，也可以选择通过制作视频的方式进行展示。这种多样化的呈现形式不仅能够满足不同学生的学习风格，还有助于培养学生的多媒体表达能力。

3.3.5. 时间节点的控制与实操操作的抽查

为保证教学进度，设定明确的时间节点，要求学生在规定时间内完成预习、实际操作和实验报告的撰写。同时，将进行实操操作的抽查，以确保学生真正参与了整个学习过程。鼓励学生在实验报告完成后进行交流和分享。

4. 教学效果

本教学实践已经在 2019 级、2020 级材料物理专业的“固体物理”课程教学中运行了两次。建立并完善了 QE 指导练习分层次的实验指导书。根据学生的实验报告总结了实验操作手册。

使用 QE 对学生学习经验的影响是积极的。通过实际动手操作，学生得以将抽象的理论知识转化为实际的计算过程，使其更深刻地理解固体物理学的概念。将固体物理的学习与学科前沿紧密联系在一起。学生对开源工具学习的反馈也是积极的。开源工具的透明性和可定制性让学生感到更有掌控力，他们能够深入了解工具的运作机制，这有助于建立对计算软件的信任感。此外，开源软件通常拥有庞大的用户社区，学生能够从中获取丰富的技术支持和分享资源，加速学习过程。学生通过撰写操作手册，发布在知乎等网站上，对学生的交流能力也是很好的锻炼。QE 的应用为学生提供了一个探索先进计算工具的机会，使他们在学术研究和职业发展中更具竞争力。通过与开源工具的互动学习，学生在实践中不仅获取了专业知识，还培养了合作精神和创新思维。

我们对 2020 级的学生进行了课程培训效果的调研。调研评议为 Mycos 问卷调研系统。图 1 的内容为询问学生 QE 的练习内容与固体物理课程的联系程度。从图中可以看到，超过 70% 的同学任务 QE 的练习与固体物理课程的内容联系紧密。

对 QE 对自习能力的培养的问卷结果如图 2 所示。从图中可以看到 75% 以上的同学任务这种练习对于自主学习能力的帮助很大。

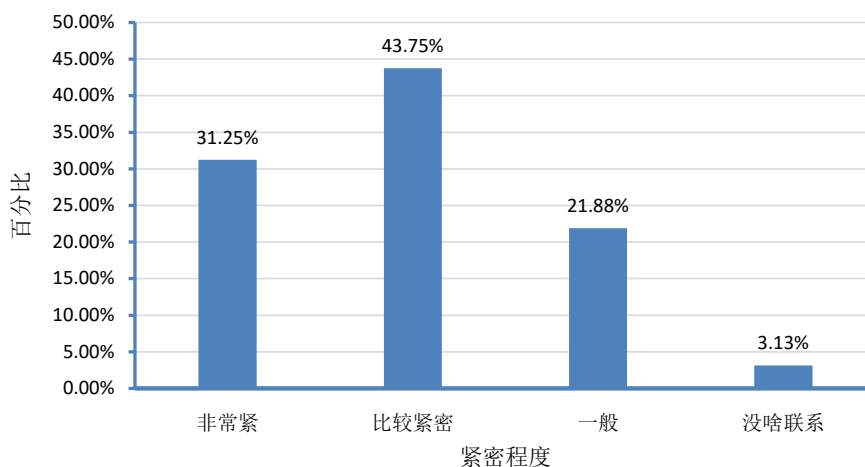


Figure 1. QE exercise content with content exercises for solid state physics courses
图 1. QE 练习内容与固体物理课程的内容练习

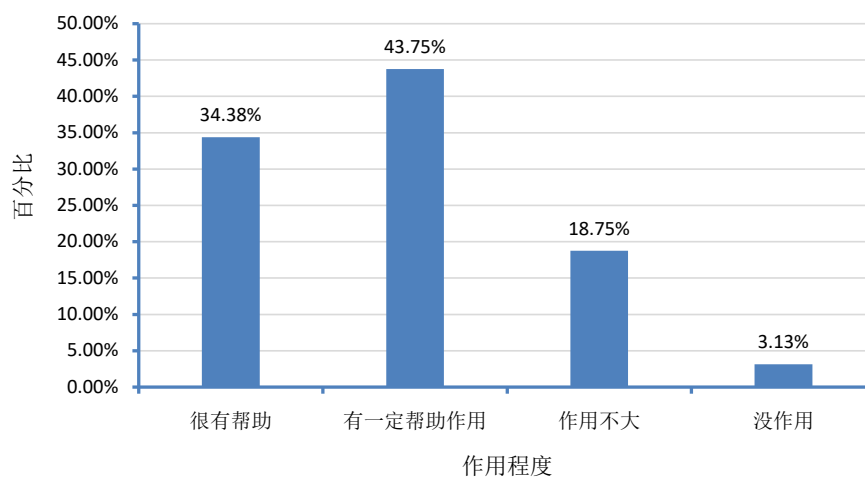


Figure 2. QE training on self-learning skills
图 2. QE 对自学能力的训练

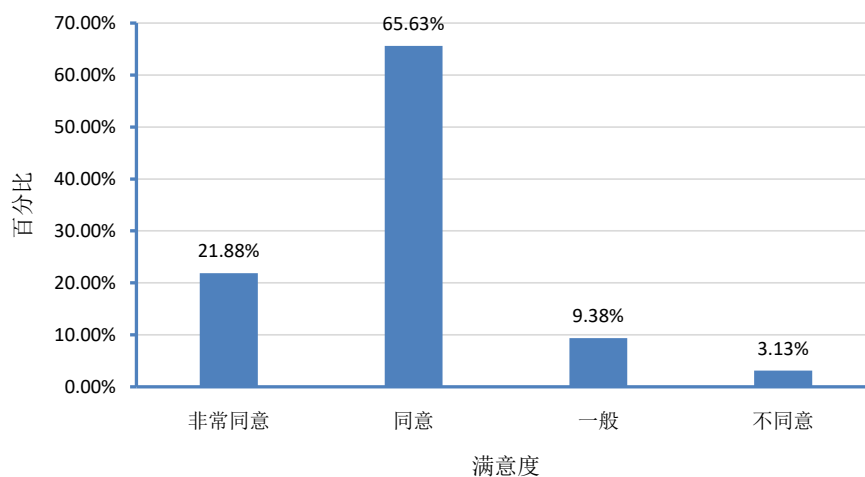


Figure 3. Improvement of writing skills by lab report writing
图 3. 实验报告撰写对写作能力的提高

实验报告撰写对写作能力的训练结果如图 3 所示。从图中可以看到 80% 以上的同学认为通过实验报告的撰写对写作能力有很好的提高作用。

通过以上问卷调查学生普遍认为 QE 练习与固体物理课程紧密相关,对自主学习和写作能力的提高效果显著。这种积极的反馈为进一步改进教学模式和拓展开源软件在教育中的应用提供了有力的支持。

5. 结论

本文致力于解决固体物理学习中的难点,通过引入开源 Quantum ESPRESSO 软件,为学生提供了理论学习和实践训练的机会。实践训练分为理论学习和实际操作两个阶段,逐步递进,使学生在理解固体物理难点的同时能够获得实际操作经验。通过分层次的学习方式,学生通过自主学习,撰写实验报告,在实践中逐渐建立起对固体物理知识的完整认知。学生将理论知识和理论的应用结合起来,反应良好,提高了对固体物理整体理解水平。Quantum ESPRESSO 软件的引入为固体物理的课程学习提供了一个先进的学习工具。

基金项目

本文由天津理工大学校级教学研究与改革项目 YB22-08 资助。

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, 2005: 1-5.
- [2] 张思远. 固体物理学教学中的问题及对策[J]. 物理教学探讨, 2009, 27(8): 29-31.
- [3] 王小明. 个性化学习在固体物理学教学中的应用[J]. 高等教育研究, 2012, 29(4): 45-48.
- [4] 何克抗. 建构主义的教学模式、教学方法与教学设计[J]. 北京师范大学学报(社会科学版), 1997(5): 74-81.
- [5] 庞维国. 自主学习: 学与教的原理和策略[M]. 上海: 华东师范大学出版社, 2003: 10-25.
- [6] 高文. 问题解决教学的理论与实践[J]. 教育研究, 1993(7): 30-36.
- [7] Kresse, G. and Furthmüller, J. (1996) Efficient Iterative Schemes for *Ab Initio* Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set. *Physical Review B*, **54**, Article ID: 11169. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
- [8] Clark, S.J., *et al.* (2005) First Principles Methods Using CASTEP. *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*, **220**, 567-570. <https://doi.org/10.1524/zkri.220.5.567.65075>
- [9] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., *et al.* (2009) Quantum ESPRESSO: A Modular and Open-Source Software Project for Quantum Simulations of Materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **21**, Article ID: 395502. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
- [10] Hung, N.T., Nugraha, A. and Saito, R. (2022) Quantum ESPRESSO Course for Solid-State Physics. Jenny Stanford Publishing, Dubai, 1-5.