

# 国家虚拟仿真实验教学项目论证报告

项目名称	水溶液的介观结构与形成机理的虚拟仿真实验		
申请单位	浙江大学化学系		
论证专家	刘洪来	职称	教授
		单位	华东理工大学
论证意见	项目有创新，计划可行，对学生理解溶液微观结构的能力有很好的促进作用，推荐申报		

## 一、项目现状与存在的问题；

### 1. 项目现状（着重说明申请项目建设的背景和现实情况）

水溶液纳米簇是《物理化学》课程的重要内容，数学推导多，理论性强，抽象，学生理解有难度，是教学的重点与难点。理解水溶液的结构与形成机理是类化学专业本科生和研究生的必修的专业能力之一。

由于实体实验观察到的是宏观现象，但导致此现象的原因往往是抽象的理论原理。例如对于本项目的醇-水-盐混合体系，在宏观上往往被认为是连续、均匀的介质，但由于组分混合比例的不同，在分子层面会形成“纳米簇”或在表面“富集”，而不能简单地认为是连续均匀的介质，这通过实体实验是无法观察到的。针对此现状，利用分子模拟这个先进的手段，通过精确构建数学模型与参数化设计，依托虚拟仿真技术，开发基于分子动力学的乙醇-水-盐溶液分层（双水相）实验的虚拟仿真软件，可将宏观实验以微观的方式呈现出来，延伸实验的空间，在理论语言与实验语言之间搭建起沟通桥梁，引导学生将实体实验观察到的宏观现象与导致此现象的抽象理论原理相关联，因而能强化学生对此宏观现象的深度理解及理论与应用的联系，延伸实验的空间，有效突破课程重点与难点，激发学生的兴趣与潜能，增强学生创新创造能力，提高教学质量。同时也对化学系乃至全校的实验教学模式的改革起到一定的启示和辐射作用，促进教学模式的新探索。

### 2. 存在的问题

水分子簇体积小、稳定时间短，只有 10-12 秒、处于长期的动态过程，传统的实验分析方法较难从分子层面讨论纳米簇的动态特性。而可观测瞬时纳米簇的设备如中子衍射仪，价格昂贵，受众面极小。分子模拟依赖高性能计算机，耗时，有一定的理论和计

计算机操作技术的门槛要求，课堂教学受限。本虚拟实验填补了实体实验教学的不足，降低成本，缩短教学时间，具备经济、便捷与可视化的特点。

## 二、项目立项的必要性（结合具体课程，说明项目建设对提高教学水平、改善教学条件、促进学科发展等方面的作用）

《物理化学》系列课程包括《物理化学》、《物理化学实验》和《高等物理化学》等，是化学系或近化类专业本科生的主干课程、必修课程和专业加深课程。多年教学体验表明，教学效果不尽如人意，特别是《高等物理化学》，数学公式繁多，抽象，没有直观的结果是课程的难点，因而设计高水平虚拟仿真实验是突破课程难点的重要环节。

由于实体实验观察到的是宏观现象，但导致此现象的原因往往是抽象的理论原理。例如对于本项目的醇-水-盐混合体系，在宏观上往往被认为是连续、均匀的介质，但由于组分混合比例的不同，在分子层面会形成“纳米簇”或在表面“富集”，而不能简单地认为是连续均匀的介质，这通过实体实验是无法观察到的。针对此现状，我们在教学环节上引入了实例教学，将理论教学与实验教学贯通一体，利用分子模拟这个先进的手段，通过精确构建数学模型与参数化设计，依托虚拟仿真技术，可将宏观实验以微观的方式呈现出来，延伸实验的空间，在理论语言与实验语言之间搭建起沟通桥梁，引导学生将实体实验观察到的宏观现象与导致此现象的抽象理论原理相关联，因而能强化学生对此宏观现象的深度理解及理论与应用的联系，延伸实验的空间，有效突破课程重点与难点，激发学生的兴趣与潜能，培养学生从现象到本质的思维方式，增强学生创新创造能力，提高教学质量。同时也对化学系乃至全校的实验教学模式的改革起到一定的启示和辐射作用，促进教学模式的新探索。

## 三、项目的可行性（主要说明项目实施的基础条件、人员条件、保障措施和其他条件等，以及是否符合专业、学科、学校发展规划，是否符合国家、省及主管部门有关要求）

该项目教学团队成员结构合理，热爱教学，师德高尚，能力过硬。该实验以问题为导向，从学生的需求出发，解决实际实验达不到的教学效果，注重知识传授、动手能力培养、科学素养提高，微观思维训练的协同实施，调动学生参与实验教学的积极性和主动性。该项目基于分子模拟，通过人机交互与虚拟现实等网络化、数字化、智能化技术手段，提高实验教学的效果。

本项目符合立德树人的根本任务，适应经济社会快速发展对人才培养的新要求、现代大学生成长的新特点、信息时代教育教学的新规律，以提高学生实践能力和创新精神为核心，以现代信息技术为依托的国家发展大趋势，是在新时代下物理化学学科教学发展面临的新挑战，新机遇！

四、 项目主要建设内容（要求就内容目标的创新性、先进性、科学性、合理性、可行性等的合理性和可行性等方面进行论证分析。）

为有效破解水溶液介观结构及其形成机制的教学难点，开发了基于分子动力学的乙醇-水-盐溶液分层（双水相）实验的虚拟仿真软件一套，将无法实验测量获得的水溶液介观结构随时空的演化过程从分子层面可视化地直观呈现，让学生“看到”水纳米簇形成的动态过程。通过对动力学轨迹数据的提取、筛选和分析，既能定量地获得径向分布函数等静态结构信息，也能直观地呈现氢键及溶液分相的动态结构演化，为学生提供了理解微观机理的可视化途径。基于同样的原理，该过程可以拓展到一系列醇-水体系和磷脂分子-水体系，从多角度分析纳米簇效应，使得项目具有系统性、先进性与灵活性的明显特点。

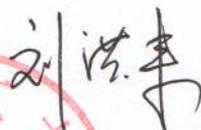
五、 项目绩效预测分析（着重说明项目绩效目标，描述项目实施后的预期效益。）

该项目已面向全校化学化工及相关专业近千名学生自由在线访问，开放共享。

华东理工大学化学系及化工学院的研究生于 2016 年参加过申报单位举办的暑期夏校，实践过虚实结合的课堂教学模式，使用过开发的软件，学生反映该实验能拓展基础实验教学的广度，加深基础实验的深度，提高学生对科研实验的认知，培养大学生的动手能力、微观思维和创新意识。

该项目在日趋完善的基础上，将对浙江省及全国高校和公众开放，在展现理论化学魅力的同时，扩大浙江大学物理化学学科的影响力，获得良好的社会效益，达到更高的学生学习满意水平。

论证专家签名：刘洪来



单位公章：



时间： 2019 年 8 月 5 日