

# 数理材料交叉视域下研究生跨学科思维培养创新实践

宁 华 蒙志鹏\*

广西民族大学, 广西 南宁 530006

**摘要:** 随着新质生产力对复合型创新人才的迫切需求, 传统单一学科研究生培养模式已难以适应数学、物理与材料科学交叉融合的发展趋势。据调研, 我国材料学科研究生中存在数理工具应用能力薄弱问题, 导致储氢材料设计等研究效率低下。本文以新能源储氢材料课题为核心载体, 针对学科壁垒明显、理论与实践脱节、跨学科思维不足等痛点, 提出“三级课程体系+项目式驱动+跨学科团队”三位一体改革方案: 通过基础层(《数学物理方程应用》等)、进阶层(《计算材料学》等)、创新层(竞赛/科研项目)的课程衔接, 结合“问题提出-模型构建-实验验证-成果转化”的项目式学习流程, 构建跨学科师资与资源共享机制, 为高校交叉学科人才培养提供可复制的实践范式。

**关键词:** 交叉学科; 研究生培养; 项目式教学; 储氢材料; 教学改革

## 1 引言

### 1.1 研究背景与意义

数学、物理与材料科学的交叉融合是现代科技发展的重要趋势, 其创新成果在能源、环境、生物医学等领域具有深远应用价值。习近平总书记强调, 新质生产力的核心在于人才, 而当前我国交叉学科人才培养体系存在显著空白: 数学教学侧重理论灌输, 物理课程与创新实践脱节, 材料学科研究生数理基础薄弱, 导致学生难以应对复杂跨学科问题[1-3]。氢能作为“双碳”目标的关键能源载体, 其规模化应用的核心瓶颈在于高效储氢材料的开发。传统储氢材料研发依赖大量实验试错, 成本高、周期长, 亟需具备数理建模与材料工程能力的复合型人才突破“卡脖子”技术难题。因此, 构建数学、物理与材料科学交叉融合的研究生培养模式, 对推动新质生产力发展、提升人才培养质量具有重要现实意义。

### 1.2 国内外研究现状

国外麻省理工学院、斯坦福大学等已开设“计算材料学”“纳米科学与技术”等交叉课程, 采用“理论课+实验室实操+企业项目”模式, 学生需完成2个真实材料设计课题, 有效提升了跨学科实践能力[4-5]。国内部分高校虽尝试跨学科课程建设, 但多停留在单一学科知识叠加, 缺乏系统性融合机制: 例如《固体物理》中“电子结构计算”章节与《材料科学基础》“性能表征”内容重复率达30%, 但前者侧重公式推导, 后者缺乏计算工具应用教学, 导致学生无法将理论知识转化为科研能力。

本研究立足新能源储氢材料课题, 探索“以项目为载体、以能力为核心”的交叉培养路径,

弥补现有研究的不足, 为高校交叉学科人才培养提供新的思路与方法。

## 2 交叉学科研究生培养存在的问题与原因分析

### 2.1 主要教育教学问题

数学、物理与材料科学分属不同学科体系, 课程内容缺乏衔接, 学生难以将数理模型与材料性能分析有机结合[6-7]。例如, 材料专业研究生在进行储氢材料设计时, 因缺乏数学建模能力, 无法建立吸附动力学方程预测材料性能; 物理专业学生虽掌握电子结构计算方法, 但对材料制备工艺与性能的关联理解不足。传统教学模式侧重单一学科知识传授, 抑制学生多视角解决问题的能力。调研显示部分研究生在面对跨学科问题时, 仅能从本学科角度思考, 缺乏整合多学科知识的意识与能力。缺乏同时精通数理与材料科学的跨学科教师, 导致课程设计与科研实践脱节。部分高校虽尝试跨学科授课, 但教师多为单一学科背景, 难以将不同学科知识深度融合。材料学科研究生在储氢材料设计等实际研究中, 因数理基础不足需额外补课, 影响研究效率。例如, 在进行第一性原理计算时, 学生需花费大量时间学习数学物理方程与计算机软件操作, 延误科研进度。

### 2.2 问题原因分析

传统教学强调学科独立性, 忽视交叉学科的内在联系, 教师缺乏跨学科教学的意识与能力。数理课程与材料课程缺乏衔接, 课程内容重复且缺乏系统性, 导致学生无法形成完整的跨学科知识体系。学生缺乏将数理模型应用于材料性能预测的实战机会, 如密度泛函理论计

算、分子动力学模拟等，导致理论知识无法转化为实践能力。

### 3 交叉学科研究生培养改革举措

#### 3.1 构建“三级递进”课程体系

以储氢材料课题为核心，整合数学、物理、材料学科知识点，设计基础层、进阶层、创新层三级课程，实现课程内容的衔接与递进：首先开设《数学物理方程在材料科学中的应用》《固体物理与材料性能》等课程，强化数理工具与材料学基础的衔接。其中，《数学物理方程在材料科学中的应用》涵盖“偏微分方程在扩散方程中的求解”“张量分析在材料力学性能中的应用”等模块，帮助学生掌握材料研究中的核心数理工具。其次进阶设置《计算材料学》《储氢材料设计与优化》等课程，教授密度泛函理论、分子动力学模拟等交叉方法。《储氢材料设计与优化》增设“机器学习预测储氢性能”“高通量计算筛选材料”等前沿技术章节，使学生了解学科最新发展动态。最后通过“研究生大创”“互联网+”“全国大学生节能减排竞赛”等竞赛项目，引导学生将数理模型应用于储氢材料吸放氢性能优化，提升科研创新能力。例如，学生可参与“中国研究生能源装备创新设计大赛”，针对储氢材料性能优化问题提出解决方案，实现理论知识的实际应用。

#### 3.2 实施项目式驱动学习

以二维 MXenes/MBenes 材料储氢性能研究为载体，推动“做中学”，将项目式学习贯穿研究生培养全程。提出“如何通过数学建模预测材料储氢容量？”“物理中的量子效应如何影响储氢容量？”“材料制备工艺如何调控储氢性能？”等实际问题，引导学生从跨学科角度思考解决方案。学生分组完成数学建模（如热力学方程推导）、物理性能分析（如电子结构计算）、材料实验验证（如吸放氢测试）。例如，数学专业学生负责建立储氢材料吸附能的数学模型，物理专业学生利用密度泛函理论计算材料的电子结构，材料专业学生制备复合材料并进行性能测试，通过团队协作完成项目研究。鼓励学生将研究成果转化为 SCI 论文（考博导向）或创新创业项目（就业导向）。

我们以“基于 MXenes 催化的镁基储氢材料性能优化研究”教学案例为例，引出项目式教学具体实施：

##### 3.2.1 项目背景与目标

镁基储氢材料因高储氢容量（ $\text{MgH}_2$  理论储氢容量达 7.6 wt%）、原料廉价等优势成为氢能储运领域的研究热点，但存在放氢温度高

（需 280℃ 以上）、吸放氢动力学迟缓等瓶颈。MXenes 作为一种新型纳米碳基催化剂，具有独特的孔隙结构和表面活性位点，可有效降低 Mg-H 键能，加速氢原子扩散。本项目旨在通过 MXenes 催化改性，揭示其在镁基储氢材料中的催化机制，制备高性能镁基储氢材料，同时让研究生掌握新型催化剂在能源材料中的应用方法。我们项目的目标是让研究生掌握“催化剂设计—第一性原理计算—材料制备—性能测试”的跨学科研究路径，能够运用 MXenes 催化剂优化镁基储氢材料的吸放氢性能，从原子层面解释催化机制。

##### 3.2.2 跨学科团队配置

学生团队由 3 名研究生组成，分别来自物理专业（负责第一性原理计算与催化机制分析）、材料专业（负责储氢材料的制备与性能测试）、数学专业（负责计算与实验数据的建模分析）。导师团队包括物理学科导师（指导 DFT 计算与电子结构分析）、材料学科导师（指导储氢材料的制备与表征技术）、企业导师（来自某氢能企业，提供催化剂原料与测试设备支持）

##### 3.2.3 项目执行流程

###### 3.2.3.1 知识补位与方案设计

先导课程共同学习《新型碳基催化剂原理》《镁基储氢材料催化改性》《计算材料学数据分析》三门课程，掌握 MXenes 催化剂的结构特点、催化改性的基本方法以及数据建模分析工具。通过文献调研，确定 MXenes 的掺杂比例（1 wt%、3 wt%、5 wt%）方案设计和制备工艺（机械球磨法），设计“计算—制备—测试”的完整研究方案

###### 3.2.3.2 第一性原理计算与催化机制预测

物理方向构建  $\text{MgH}_2$  和  $\text{MgH}_2$ -MXenes（3 wt%）的晶体结构模型，通过 VASP 软件计算几何优化后的电子结构，分析 MXenes 与  $\text{MgH}_2$  的界面相互作用、Mg-H 键的键能变化以及电子转移情况。数学方向对计算得到的键能、电子态密度等数据进行统计分析，建立 MXenes 掺杂量与 Mg-H 键能的关联模型，预测最优掺杂比例（计算结果显示 3 wt% MXenes 掺杂时 Mg-H 键能降低幅度最大）

###### 3.2.3.3 材料制备与性能测试

材料方向采用机械球磨法制备纯  $\text{MgH}_2$  和不同比例 MXenes 掺杂的  $\text{MgH}_2$  复合储氢材料，通过 X 射线衍射（XRD）、扫描电子显微镜（SEM）表征材料的晶体结构和微观形貌。性能测试：通过程序升温脱附（TPD）测试放氢温度，通过恒容充放电测试吸放氢动力学性能，实验结果显示 3 wt% MXenes 掺杂的  $\text{MgH}_2$  放氢温度降低至 195℃，100℃ 下吸氢容量可达 5.2

wt%，较纯  $MgH_2$  提升 40%

### 3.2.3.4 机制验证与成果总结

结合第一性原理计算与实验结果，揭示 MXenes 的催化机制：MXenes 的纳米孔隙结构可作为氢原子的扩散通道，表面活性位点与 Mg 原子相互作用，削弱 Mg-H 键强度，降低氢扩散能垒，从而加速吸放氢反应。跨学科总结：撰写研究报告，梳理 MXenes 催化改性镁基储氢材料的完整研究流程，总结新型催化剂在能源材料中的应用经验。

### 3.3 建立跨学科教学团队与资源共享机制

组建由数学、物理、材料学科教师组成的教学团队，定期开展跨学科教研活动，提升教师跨学科教学能力。团队含 2 名数学建模专家、2 名物理计算学者、2 名材料实验研究员（拥有氢能材料实验室），形成优势互补的跨学科师资力量。共享实验室平台（如计算材料学模拟平台）、校企合作基地（如新能源企业实习岗位），为学生提供实践支撑。计算材料学模拟平台配备 VASP、LAMMPS 等软件，校企合作基地提供扫描电镜（SEM）、程序升温脱附仪（TPD）等设备，学生可申请企业导师指导的实习项目，参与实际企业项目开发。

### 3.4 创新“三维价值观”培养体系

通过项目实践引导学生实现“知物—知己—

知世界”的递进式成长：知物：掌握新能源储氢材料的本质与研究方法，理解数学、物理与材料科学的交叉融合在能源领域的应用价值。知己：明确自身科研兴趣与能力边界，规划考博、就业或创业路径。例如，对理论计算感兴趣的学生可选择考博深造，对实验实践感兴趣的学生可选择进入企业从事研发工作，对创新创业感兴趣的学生可尝试孵化科技企业。知世界：了解国际科技前沿，树立服务国家能源战略的志向。通过参与国际学术会议、阅读顶级期刊论文等方式，让学生了解全球储氢材料研究的最新进展，增强民族自豪感与使命感。

## 4 结论

数学、物理与材料科学交叉学科研究生培养是适应科技发展的必然要求。通过以新能源储氢材料课题为载体，构建三级课程体系、实施项目式学习、建立跨学科团队，能够显著提升研究生的跨学科思维与实践能力。本研究构建的交叉学科培养体系，可有效破解传统教学中“学科壁垒”“科教脱离”等难题，为高校深化研究生教育改革、服务新质生产力发展提供实践范式。形成可复制的“课题载体+跨学科融合+项目驱动”培养模式，为其他交叉学科（如生物数学、计算金融）提供参考。

### 参考文献：

- [1] 朱明伟, 李红梅, 农智升, 等。学科交叉背景下 AI 赋能材料类研究生创新能力培养模式探究 [J]. 创新教育研究, 2025,13 (10):344-350.
- [2] 柴苑婷, 李明超, 霍京京。《数理统计》研究生课程跨学科融合研究——以河北工程大学为例 [J]. 教育进展, 2025,15 (7): 889-896.
- [3] 曹妍, 吴凯霖, 杨兰。研究生跨学科人才培养的组织建制研究：理论建构与实证检验 [J]. 华东师范大学学报(教育科学版),2025 (11):45-54.
- [4] 林健。面向未来的中国新工科建设 [J]. 清华大学教育研究, 2017,38 (2):26-35.
- [5] 刘晓楠, 崔迎春。美国一流大学跨学科培养研究生的实践路径及启示 [J]. 世界教育信息, 2024 (6):45-50.
- [6] 卢江杰, 王艺涵, 卢珏, 等。交叉学科视域下复合型研究生人才培养的中外对比与启示 [J]. 高教学刊, 2025 (33):176-179.
- [7] 周开发, 曾玉珍。新工科的核心能力与教学模式探索 [J]. 重庆高教研究, 2017,5 (3):22-35.

**作者简介：**宁华（1982.09—），女，壮族，广西南宁人，博士，教授，研究方向：凝聚态物理。

**通讯作者：**蒙志鹏（1982.12—），男，汉族，广西南宁人，硕士，实验师，研究方向：计算机科学。

**项目信息：**广西学位与研究生教育改革课 -JGY2025126。