

计算模拟在“近代物理实验”教学中的应用

王 潇 梁 莹 罗锻斌 张 孟
(华东理工大学物理学院, 上海 200237)

摘 要 “近代物理实验”是物理类专业的一门必修课程, 结合近代物理实验课程的特点以及培养目标, 将前沿的科学研究思想和方法引入到教学实践是实验课程改革的重要方向之一。本文介绍了我校在近代物理实验中开设计算模拟实验, 以常规光电效应实验内容为基础设计物理建模和模拟内容, 通过研究光电阴极材料的结构和特性增强基础实验的内涵和深度, 加深学生对相关物理概念、计算模拟过程与思路的理解掌握, 提高学生的科创水平, 提升综合应用知识的能力, 为高校实验课程改革提供一定的参考价值。

关键词 近代物理实验; 光电效应; 物理建模; 计算模拟

APPLICATION OF COMPUTATIONAL SIMULATION IN MODERN PHYSICS EXPERIMENTS COURSES

WANG Xiao LIANG Ying LUO Duanbin ZHANG Meng

(School of Physics, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237)

Abstract Modern Physics Experiment is a compulsory course for students majoring in physics. Combining the characteristics of the course, introducing cutting-edge scientific research ideas and methods into teaching practice is one of the important directions of experimental course reform. This paper introduces the design of computational simulation experiments in modern physics experiments at our school. All the physical modeling and simulation contents are developed based on traditional photoelectric effect experiments. By studying the structures and properties of photocathode materials, the connotation and depth of basic experiments can be enhanced. This also improves students' understanding and mastery of relevant physical concepts, computational simulation processes and methods, increases their capacity for scientific and technological innovation, enhances their ability to fully apply knowledge, and provides some guidelines for the reform of university experimental courses.

Key words modern physics experiments; photoelectric effect; physical modeling; computational simulation

物理学是一门以实验为基础的学科, 物理实验教学在物理专业学生的培养中具有非常重要的

作用。我校“普通物理实验”针对低年级(大一、大二)物理专业学生开设, 主要涉及力、热、电、光等

收稿日期: 2023-09-23

基金项目: 2022 年高等学校教学研究项目(DWJZW202225hd); 中国高等教育学会 2022 年度高等教育科学研究规划课题(新工科建设背景下大学物理实验课程模块式教学的探讨, 课题编号: 22LK0304); 中国高等教育学会 2022 年度高等教育科学研究规划课题(高等理科人才培养中的通识教育研究, 课题编号: 22LK0403)。

作者简介: 王潇, 华东理工大学物理学院副教授, laricswang@ecust.edu.cn。

通信作者: 张孟, 华东理工大学物理学院副教授, mzhang@ecust.edu.cn。

引文格式: 王潇, 梁莹, 罗锻斌, 等. 计算模拟在《近代物理实验》教学中的应用[J]. 物理与工程, 2024, 34(4): 65-70.

Cite this article: WANG X, LIANG Y, LUO D B, et al. Application of Computational Simulation in Modern Physics Experiments Courses [J]. Physics and Engineering, 2024, 34(4): 65-70. (in Chinese)

基础实验,向学生传授实验设计思想、实验方法,培养学生的动手实践能力,提升科学素养。《近代物理实验》面向物理专业高年级学生(大三),课程更多强调物理思想的建立,科学思维的锻炼,综合能力的提高。近年来随着科学技术的快速发展,大学教育的教学内容和模式进入了革新阶段,这就要求在物理实验课程中也与时俱进地注入教学新理念和教学新模式^[1],在教学实践中更加注重培养学生的工程思维、创新意识和独立分析问题、解决问题的综合能力。

利用计算机进行计算模拟是解释实验现象、验证假说、优化实验或工程设计、解决复杂物理问题的一种新兴科学研究方法,已被广泛应用于物理、材料、化学、生物制药、机械等领域^[2,3]。计算模拟对实验场所要求较低,不受时空的限制,因此在教学中可广泛开展,许多高校已经开始在一些专业课程的教学利用计算模拟将抽象的物理化学过程进行再现,使学生在深入理解相关专业概念的同时了解计算模拟,培养学生的分析能力和创新能力,开拓研究性思维^[4-7]。另外计算模拟实验可以综合应用量子力学、固体物理、计算物理等相关专业知识,因此,在物理类高年级《近代物理实验》课程中,我们设计了以基础实验为立足点,开设使用计算模拟方法的研究性实验内容,通过建模计算、数据分析等环节激发学生的学习兴趣,将理论用于实践,培养科研思维,提升科学实验素养,开阔思维和眼界。

光电效应实验在物理学发展史上具有里程碑意义。自1887年赫兹发现光电效应以来,许多研究者对光电效应理论及实验进行了深入的研究。利用光电效应制造的光电转换器可以实现光信号与电信号之间的相互转换,这些光电转换器如光电管、光敏电阻、光电耦合器、光敏二极管、光电电池、光电倍增管等已广泛应用于电影、电视、制造、医疗、环保、红外探测、光纤通信、自动控制等领域。在华东理工大学《普通物理实验》中开设了光电效应相关实验,实验内容包括记录光电管光伏特性曲线,读取阈值电压计算普朗克常数,通过实验实践理解和掌握光电效应的原理和科学规律。为了开拓科创思维,将前沿研究方法引入实验教学,在《近代物理实验》中我们设计了一个与光电效应相关的使用计算模拟的探究型实验,使学生通过计算模拟深入研究光电效应实验背后的物理

机理。相关的实验内容主要包括以理论计算辅助研究光电阴极材料的结构和特性,通过计算材料功函数加深对其物理概念的理解,掌握以理论计算筛选阴极材料的原理和方法,了解计算模拟用于科学研究的基本思路,学时为4学时。将计算机模拟手段与实验教学相结合,可在学生通过实验验证光电效应规律的基础上,深入理解实验现象背后的物理实质及实验设计思路,了解相关操作,实现数字化赋能实验教学,培养学生的创新思维和科研素养,以及利用现代信息化手段解决复杂问题的能力,实现高质量教学。

1 实验内容

光电效应测试仪中光电管的常用阴极材料有银-铯-氧(Ag-Cs-O)和铟-铯(Sb-Cs)等^[8],其中银-铯-氧是最早出现的一种实用光电阴极材料,对可见光和近红外敏感,我校光电效应测试仪中光电管使用的即为此类阴极材料。新设实验要求学生通过计算模拟来分析判断阴极材料中Ag、O、Cs三种元素的可能结合方式,比如是形成了三元化合物还是构建了异质结构,使用密度泛函理论计算结构的功函数及其他物理性质,判断是否能产生光电效应并分析原因。目前,基于量子力学原理的密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)是研究材料多电子体系电子结构的一种普遍方法^[9]。这种计算模拟方法可以预测材料的结构参数和物理化学性质,通过与实验结果进行对比能进一步解释实验现象的本质和反应^[10,11]。通过该实验使学生初步了解计算模拟方法、计算思路以及核心物理概念,进而理解计算模拟的原理和作用,培养学生的团队协作、自主学习、科研分析、创新思维等多项能力,提高科研素养。

2 计算模拟环节

整个模拟过程采用具有友好操作界面的Materials Studio (MS)软件中Castep计算程序包完成,选用广义梯度近似GGA中的Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)^[12]。在结构弛豫过程中,收敛精度SCF取Fine,能量收敛标准为 10^{-5} eV/atom,赝势选择OTFG超软(OTFG ultrasoft),平面波

截断能设定为 574eV, 布里渊区采用 $5 \times 5 \times 1$ Monkhorst-Pack 网格采样, 具体软件界面及参数设置如图 1 所示。真空层厚度为 $15 \text{ \AA}$ 来避免层间的相互影响。

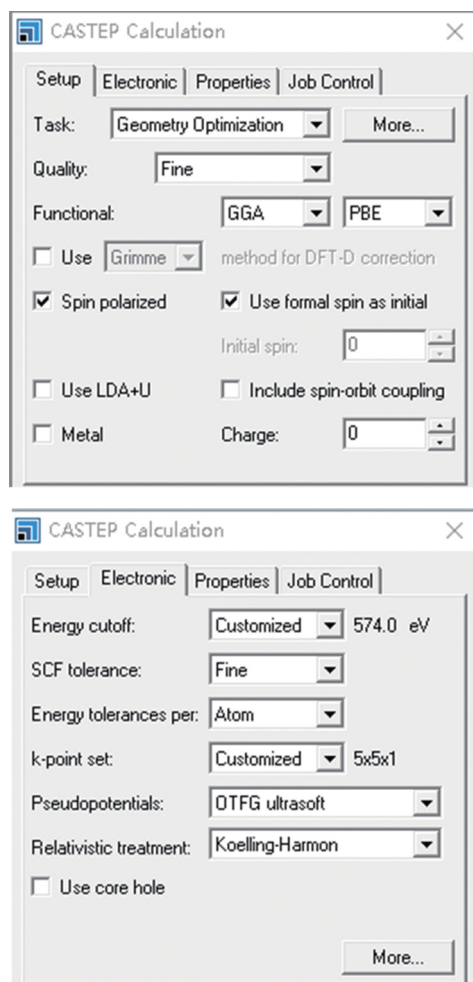


图 1 Castep 界面及参数设置示意图

3 实验教学设计

3.1 实验预习

实验前学生通过 MS 软件自带教程和实验室准备的实验讲义, 了解密度泛函理论, 掌握软件基本操作。并观看教研室录制的教学示范视频, 了解实验内容及实验操作。

3.2 教学环节和实验内容

实验课堂上教师首先就实验背景, 计算模拟内容与学生展开交流, 明确实验目的, 引导学生理解实验过程, 再次讲授模型构建、结构优化以及性能计算的具体实验内容。

3.2.1 实验内容一: AgCsO 晶体

1) 建模及结构优化

模型构建是计算模拟过程的基础, 我们的实验设计中首先考虑纯晶体情况, 使用 Materials Studio 软件包建立银-铯-氧三种元素组成的化合物, 其晶相的分子式为 AgCsO , 在体系结构优化时计算任务选择 Geometry Optimization, 根据计算模拟环节选取的参数进行设置并向实验中心服务器提交任务。优化后结构如图 2(a) 所示, 晶格常数如表 1 所示为 $a=b=c=10.63 \text{ \AA}$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。根据公式

$$E_{\text{form}} = \frac{(E_{\text{总}} - n_{\text{Ag}}E_{\text{Ag}} - n_{\text{Cs}}E_{\text{Cs}} - n_{\text{O}}E_{\text{O}})}{N} \quad (1)$$

可计算此晶体的形成能。其中, $E_{\text{总}}$ 、 E_{Ag} 、 E_{Cs} 、 E_{O} 分别是化合物总能量、单个 Ag 原子、Cs 原子及 O 原子能量, N 、 n_{Ag} 、 n_{Cs} 、 n_{O} 分别是化合物中原子总个数, Ag 原子、Cs 原子及 O 原子个数。通过从 Castep 的文本输出结果中摘录对应体系能量, 可计算形成能 $E_{\text{form}} = -3.89 \text{ eV/atom}$, 表明该材料具有较高的稳定性。

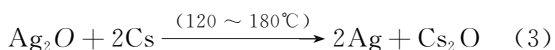
2) 功函数计算

光电管中阴极材料的选取除了稳定性外, 材料的功函数是光电效应现象的至关重要参数。功函数是物理中一个重要概念, 表示固体中的一个电子转移到远离表面时所需要的能量, 通常用 Φ 表示。显然, 功函数小的金属比功函数大的金属更容易失去电子。在我们计算模拟过程给出的模型中, 功函数是通过真空的静电势与体系费米能级的差值进行计算的, 公式为 $\Phi = E_{\text{vac}} - E_{\text{F}}$ 。为了计算 AgCsO 晶体的功函数, 使用 MS 软件中的 surface 工具首先对晶体进行切面, 得到 $\text{AgCsO}(001)$ 面, 接着对其进行充分的结构弛豫优化, 计算参数保持不变。优化完成后对已经完成结构优化的模型进行体系单点能和相关性质计算, 同样选择与结构优化时相同的计算参数, 计算任务选择 Energy, 在 Properties 选项中勾选 Population analysis 选项, 计算结束后保存计算结果。对模拟结果分析后发现 $\text{AgCsO}(001)$ 的功函数计算结果如表 2 所示, 为 2.89 eV , 由此可见若直接选用 AgCsO 晶体材料作为光电效应实验的阴极, 电子逸出将需要极大的能量。实操实验中使用的光源为汞灯, 最长可见光波长为 577 nm , 根据波长与能量的相互转换关系: $(\text{能量}) \text{ eV} = 1240/\lambda(\text{nm})$ 。对应为

2.15eV。对比 AgCsO(001)的功函数计算结果可发现,若光电管中阴极材料为 AgCsO 化合物,汞灯照射后将无法产生电子逸出,显然光电管中的 Ag-Cs-O 三种元素不是以化合物存在的。随后引导同学们查阅资料进行后续实验。

3.2.2 实验内容二:Ag 掺杂 Cs₂O 晶体

根据光电管阴极制备工艺,Ag-O-Cs 阴极反应方程式为



透明玻璃内表面的 Ag-O-Cs 薄膜主要成分应为 Cs₂O 中含 Ag 杂质或含 Ag 粒子^[13]。接下来的实验内容二和实验内容三要求学生根据上述制备工艺线索通过计算模拟继续探讨 Ag 与 Cs₂O 相结合材料的微观结构。分别以 Ag 粒子掺杂 Cs₂O 晶体及 Ag 和 Cs₂O 组成异质结两种方式展开实验。在实验内容二中将首先探讨 Ag 掺杂 Cs₂O 晶体的情况。实验过程同样包括模型建立、结构优化及性能计算。结果列于表 1 和表 2 中。

第 1 部分:在反应方程式(2)和式(3)中 Ag₂O 和 Cs₂O 都是稳定存在的晶体,其中 Cs₂O 的晶体属于三方晶系, R₃m 点群对称,计算发现由图 2 (b)中 Cs₂O 晶体切出的(001)面的逸出功为 1.19eV,明显小于可见光波长范围,从功函数的角度 Cs₂O 晶体材料完全符合阴极材料条件,在早期的实际应用中也有用 Cs₂O 直接作为阴极材料的尝试^[14],然而在后续研究中发现 Cs₂O 材料在可见光范围内的光学吸收率不是很好。考虑到 Ag 具有很好的可见光吸收性能,因此在 Cs₂O 材料中加入 Ag 纳米颗粒可以有效提高材料的可见光吸收率。

第 2 部分:考虑 Cs₂O 与 Ag 的结构为掺杂,在结构模型中用一个 Ag 原子直接替换 Cs₂O 材料中的一个 Cs 原子,对掺杂体系进行计算模拟,结果显示掺杂不仅不能有效改善材料的可见光吸收率,还会增大材料的逸出功(1.83eV),显然这不利于光电效应实验。

3.2.3 实验内容三:Ag-Cs₂O 异质结

在这个实验内容中考虑将图 2 中的 Cs₂O 和 Ag 晶体以异质结方式结合。

1) 建模及结构优化

首先切出 Cs₂O 材料的(001)面,其晶格常数为 $a = 4.30\text{\AA}$, $b = 10.02\text{\AA}$, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma =$

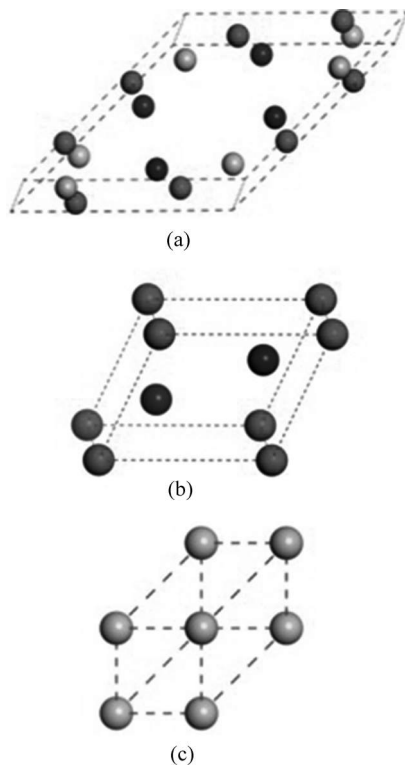


图 2 晶体原胞结构图

(a) AgCsO; (b) Cs₂O; (c) Ag

浅色、深色和黑色小球分别代表 Ag、O 和 Cs 原子

102.4°,为了能更好的和 Ag 晶体的晶格角度匹配,从 Ag 晶体中切出 Ag(124)面,其晶格常数为 $a = 5.00\text{\AA}$, $b = 5.00\text{\AA}$, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 99.7^\circ$,两者晶格的失配率小于 5%。在此基础上对 Ag(124)面进行 $1 \times 2 \times 1$ 的扩胞,然后将 $1 \times 1 \times 1$ 的 Cs₂O(001)面和 $1 \times 2 \times 1$ Ag(124)面构造形成异质结 Ag-Cs₂O,异质结的晶格常数如表 1 所示,为 $a = 4.65\text{\AA}$, $b = 10.01\text{\AA}$, $c = 21.50\text{\AA}$, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 101^\circ$ 。几何结构优化后的 Ag-Cs₂O 异质结如图 3 所示,晶胞结构中包含 4 个 Ag、4 个 Cs 和 2 个氧共 10 个原子,灰色界面处 Cs₂O 中的 O 原子同时和 Cs 及 Ag 成键,其中异质结界面处的 Cs-O 和 Ag-O 键长分别为 3.03Å 和 2.17Å,平均形成能为 -2.87eV/atom,可见已构成异质结结构是稳定的。

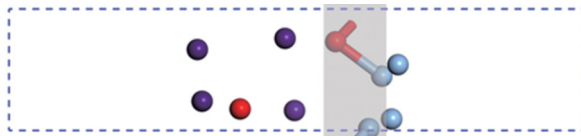


图 3 由 Ag(124)表面和 Cs₂O(001)表面构成的 Ag-Cs₂O 异质结结构图,灰色区域代表界面

表 1 MS 建模和优化后晶体材料的晶格常数

体系	对称性	晶格常数					
		$a/\text{\AA}$	$b/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	$\alpha/^\circ$	$\beta/^\circ$	$\gamma/^\circ$
Ag	F_{m3m}	2.89	2.89	2.89	60	60	60
Cs_2O	R_{3m}	10.02	10.02	10.02	24.8	24.8	24.8
AgCsO	$I_{4/mmm}$	10.63	10.63	10.63	90	90	90
Ag(124)	P_1	5.00	5.00	10.69	90	90	99.7
$\text{Cs}_2\text{O}(001)$	P_1	4.30	10.02	16.35	90	90	102.4
Ag- Cs_2O 异质结	P_1	4.65	10.01	21.50	90	90	101

表 2 不同晶体材料功函数数值

体系	功函数/eV
AgCsO(001)	2.89
$\text{Cs}_2\text{O}(001)$	1.19
Ag(124)	5.09
Ag 掺杂 Cs_2O	1.83
Ag- Cs_2O 异质结	1.23

2) 性能计算

通过对异质结功函数进行计算,如图 4 所示,发现其逸出功为 1.23eV,数值和 Cs_2O 材料的(001)面的 1.19eV 接近,但远小于 Ag_2O (001)的功函数 4.59eV 和 Ag(124)的 5.09eV,说明 Ag 以异质结方式与 Cs_2O 材料结合,并不会显著增大材料的逸出功。同时还可以借助 Castep 模块对材料的光学性能进行计算,在 Property 中勾选 Optical property 后可计算 Ag(124)、 $\text{Cs}_2\text{O}(001)$

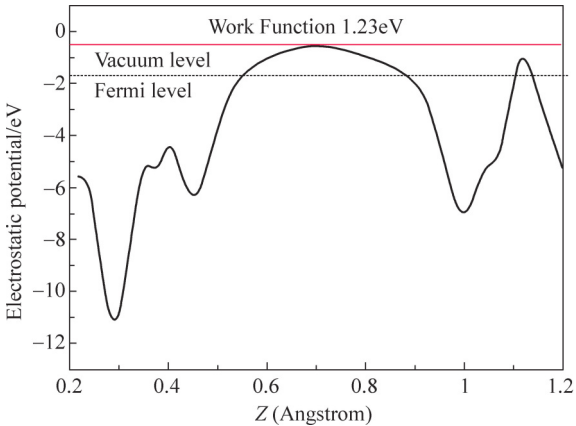


图 4 Ag- Cs_2O 异质结的静电势能沿表面法线方向(Z 轴)的变化曲线

表面和 Ag- Cs_2O 异质结材料的光吸收性质(图 5),从图中可以明显看到,和纯的 Cs_2O 材料相比,加入 Ag 晶体组成的 Ag- Cs_2O 异质结材料的光吸收性能显著提高,特别是频率 1eV 以后的可见光范围内,吸收性能提升非常明显(图 5 中浅色线),显然这是受 Ag 材料光吸收性能的影响,这也解释了为什么工业上生产的光电效应阴极材料要掺入金属 Ag 的原因。

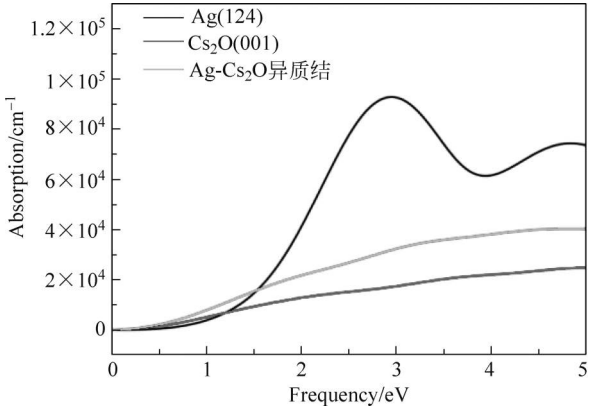


图 5 Ag(124)、 $\text{Cs}_2\text{O}(001)$ 表面和 Ag- Cs_2O 异质结材料的光吸收性质

3.3 实验数据记录和实验报告

实验课堂上学生们分组进行实验内容,根据讲义建立模型,选取参数计算材料的性能,保存记录实验数据并判断在可见光照射下是否可产生光电效应。实验记录参考表格如表 3 所示。

表 3 光电效应阴极材料计算模拟实验记录表格

体系	晶格常数						晶面	功函数	可否产生光电效应
	$a/\text{\AA}$	$b/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	$\alpha/^\circ$	$\beta/^\circ$	$\gamma/^\circ$			
AgCsO									
Ag 掺杂 Cs_2O									
Ag- Cs_2O 异质结									

实验课后,学生对实验数据进行分析讨论,撰写实验报告。另外在《近代物理实验》校学习通平台,提供多篇文献供学生们补充学习。通过计算

模拟研究内容,可以从微观层面了解光电效应阴极材料的化学成分、晶体结构和物理性质,加深对近代物理、固体物理、材料物理和计算物理等课程相关专业知识的了解,培养学生学以致用兴趣,提高参与科研的热情。实验内容按层次递进展开,引导培养学生逐步分析问题、解决问题的能力,同时培养学生自主学习和创新能力。

4 结语

在《近代物理实验》中开设以基于密度泛函理论的计算模拟实验,对光电效应实验中阴极材料的多种可能微观结构物理性能进行研究。此实验虽然对动手能力要求不高,但需要将固体物理、计算物理等知识有机结合,可以增强基础实验的内涵和深度,加深学生对材料结构、相关物理概念如功函数的理解掌握,提高学习基础理论知识的热情。通过计算模拟在物理实验中的应用,开阔学生学科视野,激发学生积极探索的精神,培养科研的基本素养^[15,16]。

参 考 文 献

- [1] 李智, 张朝晖. 以“科研引领实验教学”理念, 推动物理实验教学的改革和团队建设[J]. 物理实验, 2018, 38(3): 24-27.
LI Z, ZHANG Z H. Improvement of the physical experiment teaching guided by the idea of “leading experiment teaching by scientific research”[J]. Physics Experimentation, 2018, 38(3): 24-27. (in Chinese)
- [2] SANTNER T J, WILLIAMS B J, NOTZ W I. The design and analysis of computer experiments[M]. Springer New York, 2003.
- [3] HUMPHREYS P. Extending ourselves: computational science, empiricism, and scientific method[M]. Oxford University Press, 2004.
- [4] 李邵仁, 鲁效庆, 朱后禹. 创新性计算材料试验设计与实践[J]. 实验室研究与探索, 2018, 37(2): 203-206.
LI Z R, LU X Q, ZHU H Y. Design of innovative computing material experiment and its practice[J]. Research and Exploration in Laboratory, 2018, 37(2): 203-206. (in Chinese)
- [5] 王海鹏, 赵炯飞. 分子动力学计算液态金属性质的启发式教学方法[J]. 物理与工程, 2022, 32(5): 1-7.
WANG H P, ZHAO J F. Heuristic teaching method for molecular dynamics calculation of liquid alloy properties[J]. Physics and Engineering, 2022, 32(5): 1-7. (in Chinese)
- [6] 郭丹, 金剑锋, 王明涛, 等. 新工科背景下计算材料学实验教学改革与实践[J]. 实验室研究与探索, 2022, 41(3): 181-186.
GUO D, JIN J F, WANG M T, et al. Reform and practice of experimental teaching of computational materials science under the background of new engineering[J]. Research and Exploration in Laboratory, 2022, 41(3): 181-186. (in Chinese)
- [7] 华春燕. 科教融合促进卓越育人—分子动力学虚拟仿真教学[J]. 实验室研究与探索, 2022, 41(5): 248-252.
HUA C Y. Integrating science and education to promote excellent education—Teaching practice of virtual simulation experiment of molecular dynamics[J]. Research and Exploration in Laboratory, 2022, 41(5): 248-252. (in Chinese)
- [8] 石文奇, 张连正, 陆玉新, 等. 光电阴极的研究进展[J]. 真空, 2020, 57(3): 42-48.
SHI W Q, ZHANG L Z, LU Y X, et al. Research progress of photocathode[J]. Vacuum, 2020, 57(3): 42-48. (in Chinese)
- [9] 黎乐民, 刘俊婉, 金碧辉, 等. 密度泛函理论[J]. 中国基础科学, 2005, (3): 27-28, 68.
LI L M, LIU J W, JIN B H, et al. Density functional theory[J]. China Basic Science, 2005, (3): 27-28, 68. (in Chinese)
- [10] 张鹏. “材料模拟与计算”教学模式改革实践[J]. 大学物理, 2021, 40(6): 62-65, 75.
ZHANG P. Practices of teaching mode reform on “computational materials science”[J]. College Physics, 2021, 40(6): 62-65, 75. (in Chinese)
- [11] 司聪慧, 刘金华, 卢启芳, 等. 基于密度泛函理论的模拟电化学实验教学探索[J]. 实验室研究与探索, 2022, 41(2): 155-159.
SI C H, LIU J H, LU Q F, et al. Exploration on simulation of electrochemistry experiment teaching based on density functional theory[J]. Research and Exploration in Laboratory, 2022, 41(02): 155-159. (in Chinese)
- [12] CLARK S J, SEGALL M D, PICKARD C J, et al. First principles methods using CASTEP[J]. Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 2005, 220(5/6): 567-570.
- [13] 赵文锦, 丁继华. 真空转移装置中透射式 Ag-O-Cs 光电阴极的研制[J]. 光电子技术, 2010, 30(2): 73-76.
ZHAO W J, DING J H. Development on the transmission type Ag-O-Cs photocathode in the vacuum transfer equipment[J]. Optoelectronic Technology, 2010, 30(2): 73-76. (in Chinese)
- [14] 赵恒, 常乐, 李廷涛, 等. 多碱光电阴极的 Cs-O 激活技术研究[J]. 红外技术, 2018, 40(7): 695-700.
ZHAO H, CHANG L, LI Y T, et al. Study on Cs-O activation technology of multi-alkali photocathode[J]. Infrared Technology, 2018, 40(7): 695-700. (in Chinese)
- [15] 张映辉. 构建突出实践创新能力的物理实验教学体系[J]. 大学物理, 2013, 32(12): 43-45.
ZHANG Y H. Setting physical experiment teaching system with remarkable practical and innovative capability[J]. College Physics, 2013, 32(12): 43-45. (in Chinese)
- [16] 王立英, 秦珠, 廖怡, 等. 新工科下多学科交叉创新性物理实验课程改革[J]. 大学物理, 2019, 38(9): 43-44.
WANG L Y, QIN Z, LIAO Y, et al. Reform of the multi-disciplinary integrated innovative physics experiment course under the background of emerging engineering education[J]. College Physics, 2019, 38(9): 43-44. (in Chinese)