

分子模拟在医用物理教学实践中的应用*

田文得

(苏州大学软凝聚态物理及交叉研究中心 江苏 苏州 215000;

苏州大学物理科学与技术学院 江苏 苏州 215000)

(收稿日期:2020-02-14)

摘要:医用物理学是针对医学及其相关专业开设的一门公共基础课。作为一门提高医学相关专业学生科学素养的课,教学过程中存在物理概念讲解抽象乏味,学生学习热情不高等问题。结合自身科学研究,把分子模拟手段运用到课堂教学中,通过可视化技术,直观地展示物理现象的微观运动规律,帮助学生理解微观物理机理,取得了良好的教学效果。

关键词:分子模拟 医用物理 课堂教学

医用物理学是高等医药院校相关专业(比如儿科学、临床医学、护理学、中医学)本科生必修的一门基础课,对提高医学生科学素养,掌握医用检测设备基本原理具有重要的意义。鉴于目前医用物理课时少、内容多的实际情况,怎么能够使医学生较好地掌握相关物理学的基本理论知识,精准理解相关物理概念并有一定的物理图像,是教学中迫切需要解决的问题。

1 医用物理课堂教学存在的问题

医学生对学习物理课的兴趣不高。大多数学生认为物理学与自己的专业关系不大,学物理没什么用,学习物理课程没有太多动力^[1]。此外,因为大多数教师都是物理学出身,教学中无法很好地阐明物理学在医学中的应用,教学过程比较枯燥乏味,无法激起学生的学习热情。再者,报考医学相关专业的学生,高考所选科目主要是生物或者化学,物理基础相对薄弱,存在一定的畏惧情绪^[2,3]。上物理课完全

是为了应付考试,并不理解相关的物理概念。如何形象的讲解物理概念,并激发学生的学习兴趣,提高教学效果,是教学改革中必须探讨的问题之一。当前,微课、课堂翻转、ISEC课程教学方法等都被尝试提高教学效果和质量^[4,5]。

因课时数的限制,很多高校医用物理课分配课时为54学时,课堂上只能选一部分内容来讲,比如流体的运动、振动和波、静电场、原子核和放射性^[4]。像分子动理论、量子力学基本上只作为学生自学内容,不讲解;导致课堂内容有部分知识点在理解上出现不连贯性。此外,高中物理讲解物理规律,大多是直接通过生活现象引入相关规律,然后介绍这些规律的实际应用;平时,学生主要记忆知识点,很少探究物理规律的微观机理是什么,对部分物理现象的来源也并不清楚。到大学,启发学生多问物理规律的来源对锻炼学生思维能力变得特别重要。

为了提高学生学习兴趣,笔者结合自己的科研工作,在教学过程中,采用计算机模拟手段,再现相

* 国家自然科学基金资助,项目编号:21474074

作者简介:田文得(1981-),男,博士,副教授,主要从事医用物理教学和软物质物理研究工作。

关物理现象,让学生对物理过程、微观机理有了更深入的理解. 计算机模拟是和实验、解析理论一样重要的科学研究手段之一^[6]. 经典分子动力学模拟方法依靠数值求解牛顿力学来模拟分子体系的运动,在分子体系不同状态构成的系统中抽取样本,统计计算体系的热力学量和其他宏观性质. 它对包含原子分子的多体系统,求解运动方程,不仅可以直接模拟物质的宏观演变特性,得出与实验结果相符合或相近的计算结果,还可以提供微观结构、粒子运动以及它们和宏观性质关系的明确物理图像. 随着计算机处理器速度的快速增长以及大规模并行计算的发展,分子模拟被用于很多研究领域来理解宏观现象的微观机制. 目前市面上也开发了很多分子模拟用的软件包,如 LAMMPS^[7] 和 GROMACS^[8]. 为了直观展示模拟结果,可以借助 VMD^[9] 或 OVITO^[10] 可视化软件来进行动画演示. 下面,通过一案例,具体地说明分子模拟在教学过程中的应用.

2 漂移速度的计算和微观运动

在电流和电路的章节^[11],笔者先讲解学生比较熟悉的知识点:电荷和电流,后又举例说明电流这个物理量无法表征粗细不均匀导体内的电荷分布和流动情况,随之引入电流密度的概念;并通过简单模型体系,推导出电流密度的决定式

$$j = zenv \quad (1)$$

其中 z 是载流子的带电荷量, e 是基本电荷, n 是体系中载流子的密度, v 是载流子的漂移速度. 为了让学生对基本物理量具有数量级上的直觉,笔者设计了一个例题,内容如下:一直径为 1 mm 的银导线在 1 h 15 min 内通过了 26 100 C 的电荷,已知每 1 m^3 的银含有 5.8×10^{28} 个自由电子,求导线中电子的漂移速度? 通过公式计算得出漂移速度为

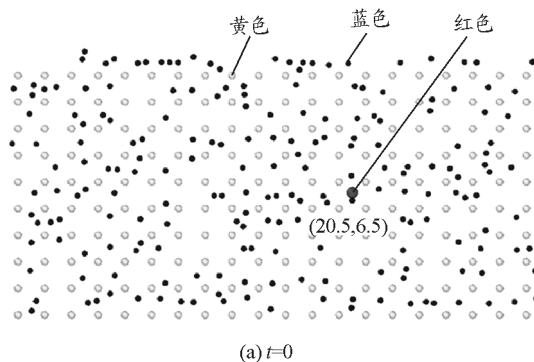
$$v = \frac{\Delta C}{zen \Delta t \Delta S}$$

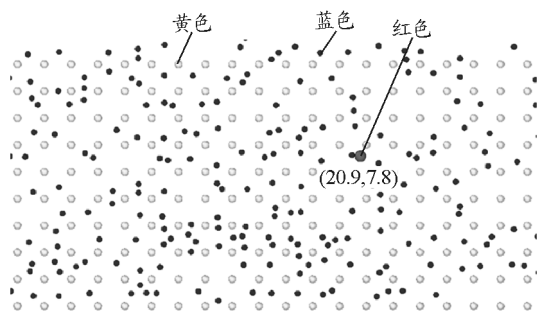
代入数据得

$$v = 8 \times 10^{-4} \text{ m/s} \quad (2)$$

笔者然后通过开关教室里的日光灯,演示灯在打开开关的一瞬间就亮了,进而引出漂移速度那么小,应该不能导致灯瞬间亮起这一结论,启发学生思考电场速度和漂移速度是两码事. 然而,学生并不是很理解漂移速度的形成过程. 笔者先介绍了漂移速度的产生原因:载流子在没有受到任何驱动力时,它们进行无规则的热运动;载流子运动没有方向性,并不断遭受散射. 在加了电场之后,载流子即发生漂移运动. 漂移运动的特点是:载流子从平均上看沿着电场的方向运动,漂移运动是叠加在热运动基础上的一种定向运动,漂移过程中载流子也不断遭受晶格散射. 为了更好地让学生理解这一过程,笔者设计了一个简单的模型体系(载流子在晶格间隙间运动),来展示上面过程. 模拟采用约化的时间和长度单位.

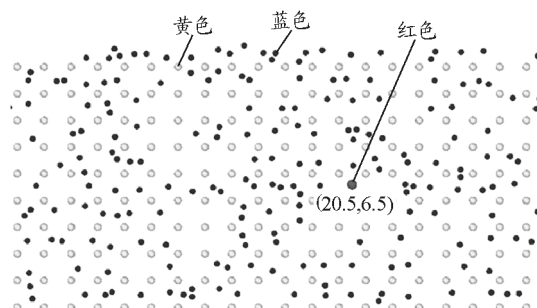
金属导体不仅有作为载流子的电子,而且也有金属晶格. 在不加电场的情况下,载流子在热运动下,和晶格格点随机碰撞,展现出随机热扩散行为;而加了电场的情况下,载流子运动出现了偏移. 为了更直观地显示运动特征,笔者制作了模拟视频进行展示(图 1 和图 2 中给出了不同时刻载流子位置). 学生能够直接观察到载流子在运动过程中,不断和晶格碰撞,运动并不那么顺利,当加了电场之后,碰撞照常存在,但是带负电的示踪载流子明显往电场的反方向运动.



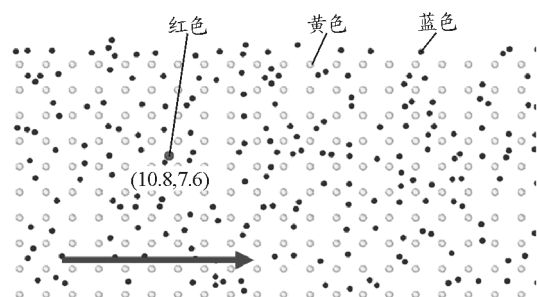


(b) $t=250$
黄色大球代表晶格格点, 带电荷量为+1, 蓝色小球代表载流子, 带电荷量为-1. 红色标注的球, 带电荷量为-1, 用于展示运动轨迹. 红色数值表示标注点的 (x, y) 坐标.

图1 无电场时载流子的分布状况



(a) $t=0$



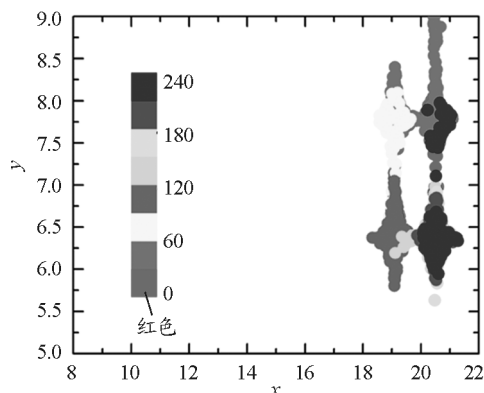
(b) $t=250$

黄色大球代表晶格格点, 带电荷量为+1, 蓝色小球代表载流子, 带电荷量为-1. 红色标注的球, 带电荷量为-1, 用于展示运动轨迹. 红色数值表示标注点的 (x, y) 坐标. 箭头表示电场方向.

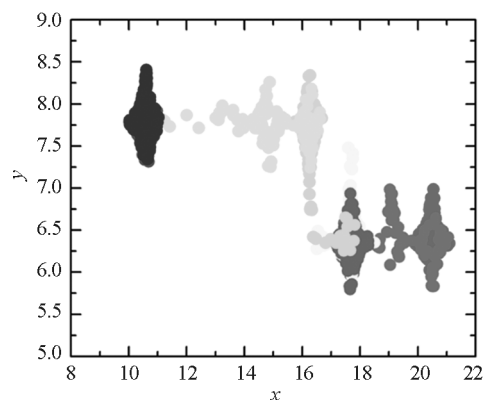
图2 有电场时, 载流子的分布状况

此外, 若取一个载流子作为示踪粒子, 可观察其轨迹来展示载流子的运动行为, 从图 3 可以清晰地看出来, 示踪粒子在无电场的情况下, 运动位移偏差小 (x 方向位置偏差在 3 个长度单位以内); 有电场的情况下, 明显有往左边运动的偏向性, 左偏性非常大 (x 方向位置偏差进 10 个长度单位). 这种偏移的碰撞运动, 让载流子呈现跌跌撞撞地往前走, 而不会像光速一样那么快. 通过模拟结果展示能让学生对

例题计算结果的量级有一定的理解, 并建立微观上载流子运动的物理图像.



(a) 无电场



(b) 有电场

颜色表示时间流逝, 总跟踪时间为 250 个时间单位, 红色表示时间开始, 开始处坐标值为 $(20.5, 6.5)$.

图3 示踪载流子的坐标随时间的演化

3 模拟技术

本文主要使用分子动力学模拟软件 LAMMPS, 可视化软件 OVITO 和科学作图软件 gnuplot 实现. LAMMPS 是物理研究工作者常用的模拟软件, 该软件具有丰富的动力学模拟功能. LAMMPS 是美国 Sandia 国家实验室的科研人员开发并维护的, 详细学习资料和使用手册可以在其官网上 (<https://lammps.sandia.gov>) 找到, 国内也有相关的入门培训网络课程. OVITO (<https://www.ovito.org>) 是用于分子模拟输出轨迹的可视化和分析工具, 基于 Python 语言开发, 具有出色的着色方案和易用的分析插件. 如图 4 所给出实现载流子布朗运动的 LAMMPS 代码, 并对其功能进行注释说明.

```

# 实现载流子运动的 in. File
units          lj                      # 设定模拟单位
boundary       p p p                  # 设定周期性边界条件
dimension      2                      # 设定模拟维度
atom_style     charge                 # 设定原子类型
read_data      init_carrier.data nocoeff # 读入准备好的坐标文件
pair_style     lj/cut/coul/cut 1.12246 # 设置相互作用和参数
pair_coeff     1 1 1.0 1.0
pair_coeff     1 2 * 3 1.0 0.7 0.7857 1.12246
pair_coeff     2 * 3 2 * 3 1.0 0.4 0.4490 1.12246
dielectric     100.0                  # 电介质常数
group          t1 type 1              # 分组以便于控制动力学
group          t4 type 2 3
fix            10 t1 move linear 0 0 0 units box # 实现布朗运动
fix            20 t4 nve
fix            21 t4 langevin 1.2 1.2 0.1 9434634 zero yes
fix            40 all enforce2d
fix            30 t4 efield 1 0 0
dump           1 all custom 250 carrier - efield. lam mpstrj id type x y z # 输出轨迹文件
run            250000                  # 设定模拟步数

```

图 4 实现载流子布朗运动的 LAMMPS 代码

安装好 LAMMPS 软件以后,在命令行执行 `lmp_serial < in. File`,即可获得 `carrier - efield.lam mpstrj` 文件,该文件是粒子运动的轨迹文件,导入到 OVITO 软件中即可观看粒子的运动特征.图 1 和图 2 是指定时刻粒子坐标的可视化处理.图 3 是通过标记载流子不同时刻的坐标在 gnuplot 中通过 scatter 画图法,并用时间作为着色方案实现的.

4 实践和思考

分子模拟方法引入医用物理教学主要强调物理图像的直观性,这个和传统仿真方法具有相似的优点.但不同的是,分子模拟除了再现课本上实验结论外,还能辅助对现象进行微观机制上的理解,这对培养物理基础薄弱的医学生的物理直觉具有促进作用.在课堂实践中需要注意以下几点:

(1) 因为分子模拟要求所关心的研究对象要遵循牛顿运动规律,所以在实践中要慎重考虑讲解内容是否可以用分子模拟方法再现现象.笔者在课堂教学中主要对泊肃叶定律、斯托克斯公式、横波和纵波传播等内容引入了分子模拟方法配合教学.

(2) 课堂做演示之前,需要先说明模型对应的实际物理系统,并阐述清楚模型主要抓住了实际物理系统哪些重要的特征及存在的可能缺陷,让学生全面了解模型.此外,三维模型和二维模型相结合,因为二维模型在课堂上能更直观地演示,三维模型给出的结果更接近于书本上的实验规律.

(3) 模拟结果可能和书本上解析结果有偏差,有必要在课堂上讲清楚偏差的主要根源是什么,告诉学生,统计规律和实验结果的对应关系,物理规律如何来的,为什么是书本上的样子.学生没有学过统计物理,这块有可能比较难以接受,所以最好说明采用的分析方法,并强调宏观和微观的差异性.课堂教学实践中,如果能提前把分子模拟相关讲解内容的课堂设计发给学生,让学生提前了解一下,效果会更好.

5 总结

分子动力学模拟利用计算机求解原子或分子的运动方程,获取其运动的统计规律,是一种重要的科学研究方法.同时,分子动力学模拟得到的运动轨

迹,通过可视化手段可以直观展示给学生.此外,分子尺度直接展示相关物理现象的微观动力学,利于教学中解释清楚现象产生的物理机理.笔者尝试把这种方法用于医用物理的教学实践中,与理论推导及实验现象密切结合,使相关物理现象变得更加直观立体,从而易于学生理解.实践证明,结合多媒体技术、可视化技术,这种教学手段能更好地激发学生的学习兴趣,提升教学效果.

参考文献

- 1 侯淑莲,李石玉,马新超,等.关于医药院校物理课程的思考[J].大学物理,2005,24(5):53
- 2 喀蔚波,孙大公,苑桂红,等.医药专业物理实验课程教学改革的思考与实践[J].大学物理,2016,35(10):46~51
- 3 喀蔚波,孙大公,苑桂红,等.医药类专业物理课程教学存在的问题及对策[J].大学物理,2005,24(11):48
- 4 童家明,喀蔚波,王晨光,等.医学类专业物理理论课教学状况比较分析[J].大学物理,2017,36(11):64~69
- 5 谈笑玲.医用物理学教学改革与探索[J].高教学刊,

- 2016(2):122~123
- 6 Allen M,Tildesley D..Computer Simulation of Liquids [M].Clarendon Press,1989.1~300
- 7 Plimpton S,Fast Parallel Algorithms for Short - Range Molecular Dynamics[J].J Comp Phys,1995, 117(10): 1~19
- 8 Hess B,Kutzner C,van der Spoel D,and Lindahl E, GROMACS 4:Algorithms for Highly Efficient,Load - Balanced,and Scalable Molecular Simulation[J].J. Chem. Theory Comput,2008,4(3):435~447
- 9 Humphrey W,Dalke A.,and Schulten K.VMD - Visual Molecular Dynamics[J].J. Molec. Graphics,1996, 14(5):33~38
- 10 Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the Open Visualization Tool Modelling Simul[J]. Mater. Sci. Eng.,2010, 18(3):015 012
- 11 洪洋.全国高等学校医学规划教材:医用物理学(第2版)[M].北京:高等教育出版社,2004.268~281

Application on Molecular Simulations in the Teaching of Medical Physics

Tian Wende

(Center for Soft Condensed Matter & Interdisciplinary Research, Soochow University, Suzhou, Jiangsu 215000;

School of Physical Science and Technology, Soochow University, Suzhou, Jiangsu 215000)

Abstract: Medical Physics is a general - requisite course for medicine and related majors. As a course to improve the scientific literacy of medical students, there exists a status of tedious explanation of physical concepts in the teaching process. Molecular simulation was used to intuitively reproduce the microscopic behaviors of physical phenomena via visualization technology, and help students to understand the physical mechanism.

Key words: molecular simulation; medical physics; classroom teaching