

基于物理算法的虚拟仿真实验教学理论与实验

霍纯青, 杨亮*, 林仕伟, 战光辉

海南大学材料科学与工程学院, 海南 海口

收稿日期: 2025年10月23日; 录用日期: 2026年1月9日; 发布日期: 2026年1月20日

摘要

随着元宇宙概念的兴起,虚拟仿真实验教学在教育领域的应用逐渐成为实验教学创新与改革的重要方向。基于物理算法的虚拟仿真实验教学是将元宇宙技术应用于教育领域的重要方式之一。然而,传统的理论教学与真实实验在演示材料微观结构演化方面存在直观性不足的问题,而现有的虚拟仿真实验则面临数据反馈不够精准、实验参数可调范围有限、难以有效关联材料微观结构与宏观性质等不足,这在一定程度上制约了学生微观思维和科学素养的培养。本研究遵循“教学与科研相结合”“虚拟与真实相促进”的原则,以物理算法为技术核心,以微观结构可视化为实现手段,开发出一套能够真实可靠地模拟微观结构演化过程、参数精确可调、结果精确可信、实验条件外推性强、可预测材料宏观性质的教学软件,并构建了与之相匹配的仿真教学理念。该教学方法能够有效加深学生对材料微观结构与宏观性质之间对应关系的理解,培养学生创造思维和理论科学素养,为探索基于物理算法的虚拟仿真实验教学实践与理论提供了新的思路和方法。

关键词

知识建模技术, 知识可视化, 知识表征技术及其应用, 物理算法

Virtual Simulation Experimental Teaching Theory and Practice Based on Physical Algorithms

Chunqing Huo, Liang Yang*, Shiwei Lin, Guanghui Zhan

School of Materials Science and Engineering, Hainan University, Haikou Hainan

Received: October 23, 2025; accepted: January 9, 2026; published: January 20, 2026

Abstract

With the rise of the metaverse concept, the application of virtual simulation experimental teaching

*通讯作者。

文章引用: 霍纯青, 杨亮, 林仕伟, 战光辉. 基于物理算法的虚拟仿真实验教学理论与实验[J]. 创新教育研究, 2026, 14(1): 357-368. DOI: [10.12677/ces.2026.141045](https://doi.org/10.12677/ces.2026.141045)

in the education field has gradually become an important direction for the innovation and reform of experimental teaching. Virtual simulation experimental teaching based on physical algorithms is one of the important ways to apply metaverse technology in the education field. However, traditional theoretical teaching and real experiments have the problem of insufficient intuitiveness in demonstrating the evolution of material micro-structure. Existing virtual simulation experiments also have problems such as inaccurate data feedback, limited adjustable range of experimental parameters, and difficulty in effectively associating material micro-structure with macro-properties, which to some extent restricts the cultivation of micro-thinking and scientific literacy of students. This study follows the principles of “combining teaching and research” and “promoting the real by the virtual”, taking physical algorithms as the technical core and micro-structure visualization as the means of realization. It has developed a set of teaching software that can reliably simulate the micro-structure evolution process, with adjustable parameters, reliable results, strong experimental condition extrapolation, and the ability to predict material macro-properties. It has also constructed a simulation teaching concept that matches it. This teaching method can effectively deepen understanding of the correspondence between material micro-structure and macro-properties, cultivate creative thinking and theoretical scientific literacy, and provide new ideas and methods for exploring the practice and theory of virtual simulation experimental teaching based on physical algorithms.

Keywords

Knowledge Modeling Technology, Knowledge Visualization, Knowledge Representation Technology and Its Applications, Physical Algorithms

Copyright © 2026 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

元宇宙的概念最早由尼尔·斯蒂芬森在其1992年出版的科幻小说《雪崩》中提出，却在近年来迅速走红，成为2021年最受关注的科技概念之一^[1]。这一概念不仅频繁出现在武汉、上海等地的政府文件中^[2]，也已成为众多科技巨头战略布局的重要方向。据摩根士丹利预测，元宇宙的潜在市场空间有望突破8万亿美元。元宇宙将打破现实世界所遵循的物理规则，与不同产业深度融合，以全新的模式和业态推动相关产业的跃迁升级^[3]。在这一背景下，教育领域面临着前所未有的挑战与机遇。如何在元宇宙的浪潮中探索出一条教育改革与创新的道路，成为教育工作者亟待解决的重要课题。

2. 国内外发展现状

近年来，虚拟仿真实验教学成为高等教育新的发展方向和目标，各地高校建设了一批功能集约、资源共享、运行高效的虚拟仿真实验教学项目，涵盖专业类或跨专业类。截至2021年，符合“三性一度”认证标准的国家级虚拟仿真一流课程已达700多门(2022年的认证课程尚未公布)，各省的虚拟仿真一流课程数量保守估计超过5000门。这些课程的建设在很大程度上满足了疫情期间“停课不停学”的实验教学需求，为在线教育的发展提供了有力支持。

虚拟仿真实验教学方法的应用最早可追溯到20世纪60年代初。当时，美国国防部率先采用虚拟仿真实验方法进行军事模拟训练，以显著提升军事训练的效果。此后，麻省理工学院(MIT)将虚拟实验环境引入教育教学领域，并取得了令人瞩目的成果。这一创新举措引发了全球范围内的积极跟进。英国通过

运用虚拟现实技术,成功实现了建筑科学的可视化,并将其融入计算虚拟教学领域,取得了良好的教学成效[4][5]。德国汉堡大学医学院借助现代信息技术,开发出虚拟解剖、虚拟手术、医学训练以及手术计划制定等一系列医学虚拟教学应用[6],不仅显著提高了教学质量,还大幅节省了教学资源。在虚拟实验教学领域,其他国家也在不断创新和拓展。例如,挪威的船舶仿真技术、瑞典的机械虚拟系统、日本的全息系统和数据手套技术,以及荷兰的模拟系统等,均为虚拟仿真教学提供了先进的技术支持[7]。如今,在发达国家,虚拟实验室已极为普及,并与实验教学深度融合,形成了一个有机的整体。

虚拟仿真实验教学是高等教育信息化建设的关键组成部分,也是近十年来高等学校实验教学重点扶持的项目[8]。其主要目的是解决实验教学过程中面临的安全性、教学条件以及时间空间限制等问题,在电工、电子、医学、建筑、生物、化学和物理等众多学科领域都占据着极为重要的地位。国内高校根据自身的教学需求,建立了许多具有本校特色的虚拟仿真项目。例如,中国科学技术大学在物理仿真实验项目方面取得了显著成绩;浙江大学开发的基于WEB的虚拟化学实验室,具有良好的人机交互性,并已成功上线运行;同济大学实现了建筑景观及建筑结构的虚拟仿真;西南交通大学开发了TDS-JS机车模拟系统;清华大学虚拟重构了汽车发动机检测仿真系统;中国农业大学实现了虚拟土壤-作物系统,部分替代了难以进行或成本高昂的田野实验。此外,复旦大学、上海交通大学、中南科技大学和陕西师范大学等众多高校也相继开发了一批虚拟仪器或虚拟仿真实验教学项目。从这些项目的交互界面可以看出,我国当前虚拟仿真实验界面的交互过程已经达到了相当高的水平,实验过程仿真或虚拟仪器仿真达到了极高的还原度。虚拟仿真教学的兴起推动现代信息技术与实验教学项目的深度融合,拓展实验教学内容的广度和深度,延伸实验教学的时间和空间。虚拟仿真实验教学无疑将成为推动高等教育教学质量实现跨越性提升的重要工具。

3. 存在问题及解决方案

尽管国内外的虚拟仿真实验教学项目在近年来取得了显著进展,但目前大多数项目仍集中在工艺过程仿真、仪器操作仿真、实验过程仿真、加工参数仿真以及仪器结构仿真等方面。这些仿真内容对于解决宏观操作或结构功能认知教学问题、培养新工科学生的实践能力具有重要意义。然而,这些仿真软件大多受到计算机硬件和软件的限制。在数据反馈方面,它们通常采用植入数据、插值法或公式法,这使得学生只能按照预设的参数进行操作,限制了仿真项目的交互性。这种局限性不利于学生对物理或化学现象的深入理解,也不利于创新思维的培养。同时,学生对实验过程参数的理解不够深入,难以培养微观结构思维。此外,目前的虚拟仿真实验项目普遍缺乏对物理现象微观机理的探索。这不仅不利于理科或工科学生对自然规律的理解,也不利于培养他们的微观思维,还会影响学生对宏观现象与微观结构之间联系的理解[9],进而影响学生科学素养的提高。

为解决上述问题,我们提出一种基于元宇宙的教学思想,并遵循“教学内容与科研成果相结合”“虚拟实验与真实实验相结合”的原则。以分子动力学、蒙特卡罗等物理算法为基础,采用三维可视化技术,将宏观实验现象与微观仿真紧密联系起来。通过这种方式,将真实实验中表现的物理现象用微观机理解释,从而培养学生的微观思维,提高其科学理论素养。

随着我国高性能计算机的高速发展以及算法的不断优化,基于高性能计算的物理算法能够在一定程度上弥补虚拟仿真实验在微观机理方面的不足。分子动力学方法以牛顿力学为基础,用于解决原子层面的微观结构问题[10]。该方法可根据真实实验条件设定仿真参数,通过经典力学原理的演化计算出所需的物理统计量,从而在微观与宏观之间建立起联系[10]。分子动力学仿真过程具有较高的灵活性和参数交互性,其结果也具有较高的可靠性和科学性,能够满足仿真实验教学的理论需求。随着计算机可视化技术的不断进步,分子动力学仿真过程能够输出原子位置的演化过程,清晰地再现微观分子(原子)在特定条件

下的演化过程[11]。这些成熟的技术方法已经在科学的研究中得到了长期且广泛的应用。因此,将科研模型合理地转换为教学仿真实验模型,成为本课题研究的核心内容。

在科研领域,分子动力学方法能够解决晶体材料的结构、力学性质、振动光谱、弹性模量、扩散系数、相变、自由能以及化学反应速率和反应微观进程等一系列宏观问题[12]。特别是在材料力学性质方面,分子动力学仿真实验已经开展了多年的研究。图1~3列举了近十年来利用分子动力学方法研究材料拉伸性能的典型案例。通过这些案例可以看出,分子动力学对特定结构材料的三维可视化,能够显著提升研究者对材料性能的理解,以及对新材料和新结构材料力学性质的预测能力,更加直观地展现材料拉伸变形的微观机理。

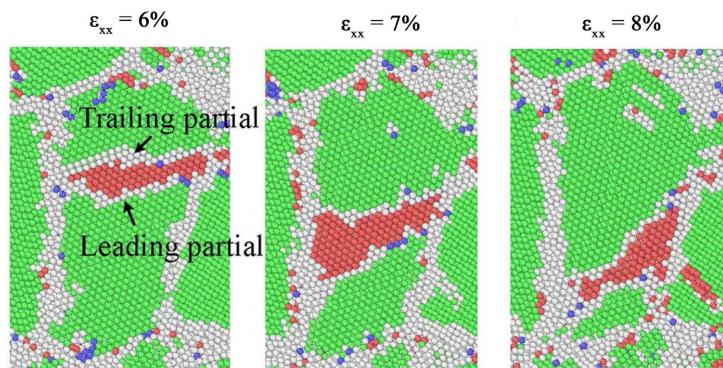


Figure 1. Tensile properties of nano-copper polycrystals structure studied by molecular dynamics method [13]

图1. 分子动力学方法研究纳米铜微晶结构的拉伸性能[13]

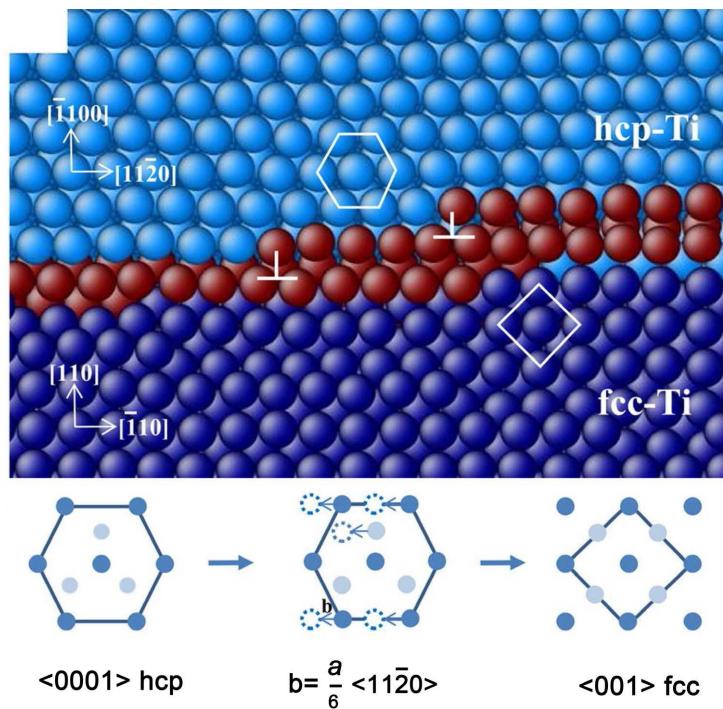


Figure 2. Phase transformation behavior of titanium metal (0001) during tensile process [14]

图2. 金属钛(0001)拉伸过程中相转换行为[14]

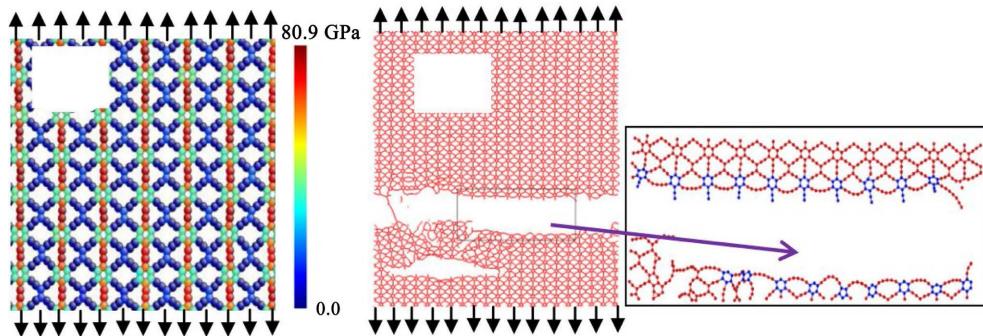


Figure 3. Structural deformation mechanism of graphene sheets during tensile process [15]
图 3. 拉伸过程石墨片的结构变形机理呈现[15]

4. 方法与模型

真空镀膜仿真实验主要采用蒙特卡罗算法结合无规行走算法实现原子尺度上沉积原子的位置预测，原子之间相互作用势采用经典的 Morser 势函数，既可保障计算的精度又可保障计算效率，为学生在线虚拟仿真模拟提供了可能。三维显示采用 Unity3D 进行在线实时渲染、采用 Ovito 软件线下实时显示；材料力学性能和热导率测量虚拟仿真项目采用分子动力学方法，势函数采用 EAM 势，可实现金属材料性质的准确预测，增强学生的学习乐趣。

基于此，本研究从简单的力学实验模型入手，通过广泛的调研，对已发表的研究成果进行系统总结与改造。在此基础上，建立不同金属、氧化物以及有机物的微观力学模型，并对虚拟力学实验的参数进行精准调校，实现三维可视化显示。这一过程旨在建立材料微观结构与宏观性质之间的直接联系[16]，从而显著提升虚拟仿真实验的质量和教学效果[17]。在力学实验模型研究成果的基础上，进一步拓展至其他相关力学模型，利用先进的信息技术、物理算法以及三维显示技术，将理论课程与实验课程紧密相连，使微观机理与宏观现象相互印证。通过这种方式，探索并建立基于分子动力学方法的三维可视化虚拟仿真实验教学新模式。这不仅是一次针对虚拟教学实验项目研发、应用及实践演练，更是对基于元宇宙概念及多种技术手段整合的虚拟实验教学理论的一次深入探索与创新实践。

5. 教学实践及效果

遵循“能实不虚”和“虚实结合”的实验教学原则，本虚拟教学项目将真实实验与虚拟实验有机结合，以实现相互补充、层层深入的“1+1>2”教学效果。实验场景具有较高的仿真度，操作过程具有较高的灵活性和挑战度，机理仿真具备逻辑推演能力，并建立了完善面向产出的学习评价体系。目前，本项目已在三个实验项目上进行了探索与实践。

5.1. 拉伸实验

材料力学在材料科学与工程的教学中占据着极为重要的地位。科学地设计基于物理算法的教学辅助系统，不仅能够丰富实验内容，还能有效提升教学质量。本虚拟实验主要针对材料物理性能实验中的力学性能实验，特别是使用万能材料测试机进行材料拉伸或压缩实验时存在的问题。在传统实验中，学生只能观察到宏观的断裂曲线和断口形貌，却无法从机理上解释不同材料力学性质的差异。为此，本虚拟实验采用分子动力学算法结合三维成像技术，从微观层面解释力学性质的差异，并与《固体物理》《统计力学》等专业理论课程的基础知识高度整合，实现理论指导实验、实验验证理论，从而提高教学效果和质量。

以铜的 EAM(嵌入原子势函数)为基础，运用分子动力学算法构建面心立方(FCC)结构的铜单晶模型，

模拟铜的单轴拉伸实验(图 4~6)。通过输出应力 – 应变曲线以及三维可视化展示原子位置的演化、原子受力等数据,直观地向学生展示了铜在拉伸过程中微观结构的变化。更为重要的是,学生可以通过修改实验参数,进行外推实验模型和极限实验条件下的实验,例如在极高温度、材料内部存在缺陷以及不同晶型的测试等。这不仅可以极大地丰富实验教学内容,还能有效提高教学质量,同时培养学生的创新意识和探索精神[18]。

5.2. 纳米压痕实验

纳米压痕作为一种重要的材料表面测试手段,已经得到了广泛应用。然而,由于经费、设备成本以及实验成本等限制,该实验项目很少能引入本科实验教学。这不仅不利于新工科学生能力的培养和素质的提高,也限制了学生对材料表面研究的深入理解。为了使学生能够更好地了解和掌握纳米压痕实验,本项目采用 Unity3D 软件,按照 1:1 的比例构建了纳米压痕虚拟仿真仪器,实现了高交互性的仪器仿真。这使得学生能够获得与真实设备相同的操作体验,为他们未来从事材料表面研究工作奠定了坚实的基础。

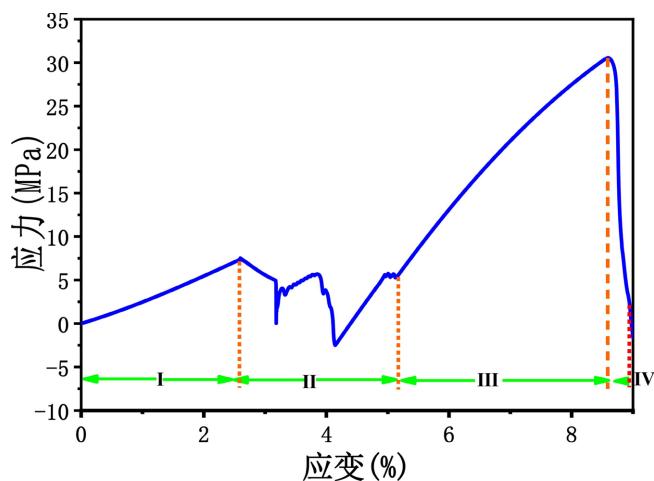


Figure 4. Tensile curves of copper simulated by molecular dynamics
图 4. 分子动力学模拟的铜的拉伸曲线

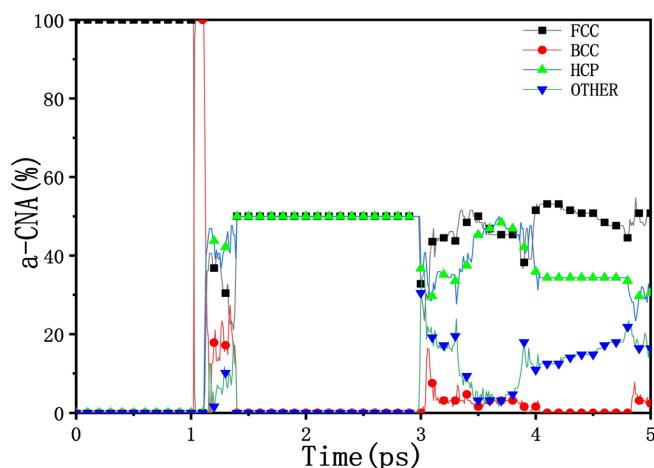


Figure 5. Statistical chart of microstructural changes in copper during tensile process
图 5. 铜在拉伸过程中微观结构变化的统计图

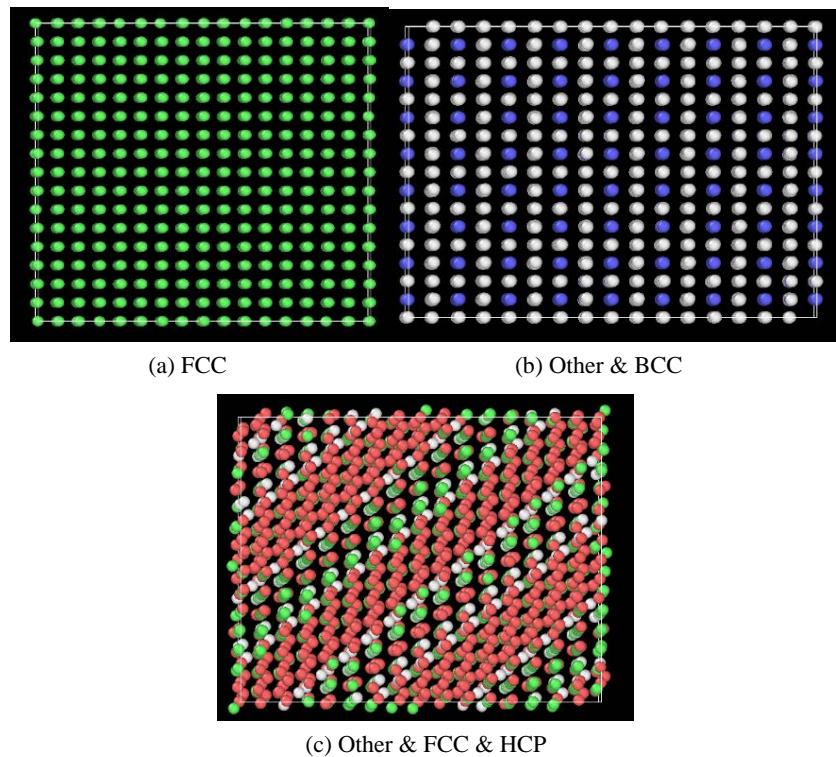


Figure 6. Microstructural changes of copper during 1K tensile process. Grey represents Other structures, green represents FCC structures, red represents HCP structures, and blue represents BCC structures

图 6. 1K 拉伸过程中铜的微观结构变化过程。其中灰色代表 Other 结构，绿色代表 FCC 结构，红色为 HCP 结构，蓝色为 BCC 结构

更重要的是，为了帮助学生深入理解纳米压痕的内在机理，本项目采用分子动力学算法，引入铜的 EAM，对 FCC 结构的铜单晶进行微观纳米压痕仿真实验(图 7~9)。通过采集载荷 - 位移曲线以及三维可视化展示原子位置的演化、原子受力等数据，直观地向学生展示了金属铜在压头作用下微观结构的变化。此外，通过外推实验的微观表面模型、实验测试条件以及压头的形状和尺寸，不仅可以进一步丰富实验教学内容，提高教学质量，还能有效激发学生的创新思维，增强他们的实践能力和探索精神，为未来的科研工作打下坚实的基础[19]。



Figure 7. Interface of instrument simulation and operational process simulation
图 7. 仪器仿真及操作过程仿真界面

5.3. 真空镀膜虚拟仿真实验

真空镀膜虚拟仿真实验由两部分相互联系的内容组成。第一部分主要进行真空镀膜真实实验的操作仿真，通过3D技术重构实验场景和设备，使学生能够获得高度的交互性和沉浸感(图10~12)。第二部分则采用基于蒙特卡罗算法的膜形成机理仿真，利用Morse势对薄膜的生长过程进行模拟，并将模拟结果以三维形式展示出来(图13, 图14)。

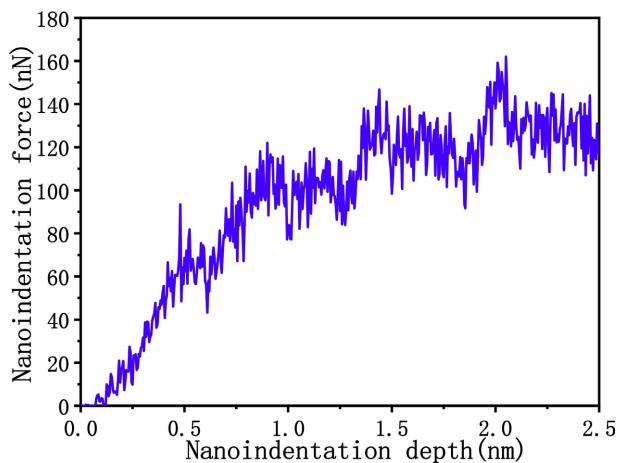


Figure 8. Relationship between load and indenter depth
图 8. 载荷与压头深度的关系

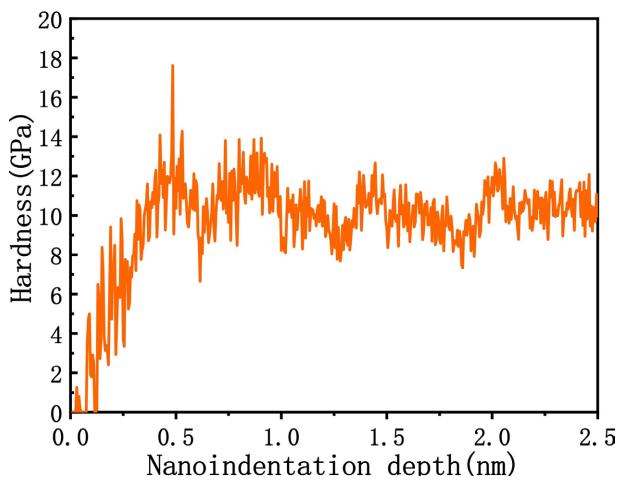


Figure 9. Relationship between hardness and indenter depth
图 9. 硬度与压头深度的关系

在真空镀膜机物理结构仿真方面，该虚拟仿真软件不仅能够仿真仪器的外形及操作流程，还能图解真空机的内部气路结构，并动态显示抽气气流的流动方向。这使得原本在真空镀膜机内部不可见的物理结构及气流方向得以直观呈现。当学生在操作过程中出现失误或不当行为时，软件会及时提醒或报错，帮助学生纠正错误。

对于核心部件工作原理的仿真，真空镀膜机所涉及的机械泵、油扩散泵及真空计等部件的结构和工作原理都较为复杂，也是理解真空获得和测量的核心教学内容。借助虚拟仿真技术，可以方便地展示这

些部件的内部结构、工作原理及工作过程，使学生能够更清晰地理解其运行机制。

在镀膜过程仿真方面，阻蒸镀膜方法是一种利用高温将镀料气化并沉积到基底成膜的物理方法。然而，真空中粒子的运动规律与大气环境中的不同。根据所设置的蒸镀条件，软件会根据电压的变化展示粒子的运动过程，主要体现在预热、预熔、蒸发过程中镀料相态的变化，以及镀料被蒸发为气体分子并蒸镀在硅片表面的过程。每个原子的运动描述是通过计算平均自由程和麦克斯韦速率分布共同决定的。

在镀膜机理仿真方面，实验采用蒙特卡罗方法，利用 Morse 势对薄膜的生长过程进行模拟，并将模拟结果以三维形式展示。由于薄膜生长参数(如基底温度、蒸发温度、蒸发物质原子量、表面系数等)可以调节，学生可以进行一些薄膜生长过程的实验研究，从而加深对实验的理解，并进行实验内容的推演。

本虚拟实验已经上线国家虚仿平台 4 年，目前学生均需在线学习后再进行线下实验，80%以上的同学可以线下独立完成实验，课堂交流发现 60%以上学生可以根据实验现象描述其微观机理；实验报告完成情况明显好于未开设虚拟仿真实验教学时期的报告；学生在线操作实验次数可达十次以上，这是线下实验不可能达到的操作练习时长。由此可见，虚拟仿真在操作、机理理解和报告撰写方面均具有良好的教学效果。



Figure 10. Virtual simulation experimental apparatus
图 10. 虚拟仿真实验装置

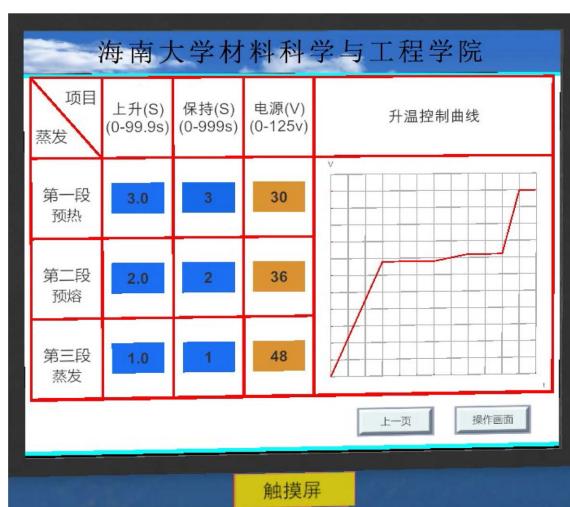


Figure 11. Settings of coating parameters
图 11. 镀膜参数的设置

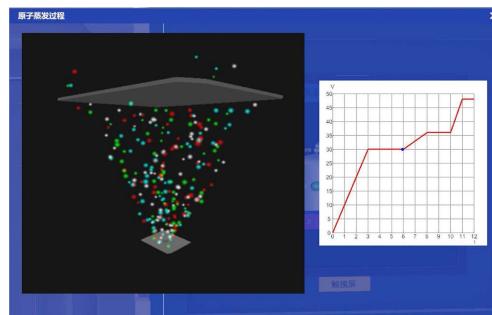


Figure 12. Microscopic display animation of vacuum coating vapor deposition process

图 12. 真空镀膜蒸镀过程微观显示动画

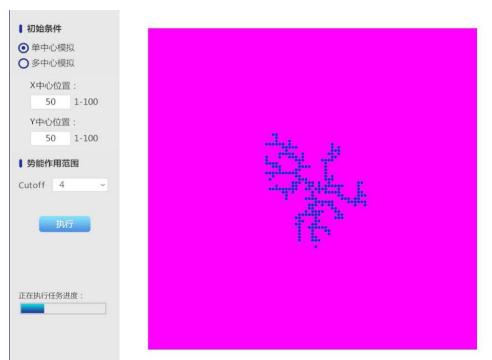


Figure 13. Particle deposition process based on monte Carlo algorithm

图 13. 基于蒙特卡罗算法的粒子沉积过程

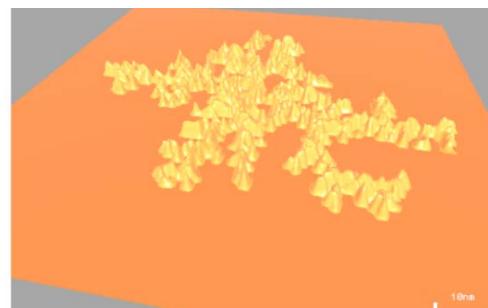


Figure 14. Three-dimensional display of simulation results with Nurbs surface

图 14. 仿真结果的 Nurbs 曲面三维显示

《原子水平上的虚拟仿真实验——基于蒙特卡罗算法的薄膜生长机理的模拟》课程已被认定为第三批虚拟仿真一流本科课程，并在实验空间上线共享。目前，已有来自 21 个省市的高校学生注册使用该课程，超过千人进行了实验操作。这表明该虚拟仿真实验在教学实践中取得了显著的效果，为学生提供了宝贵的学习资源和实践机会。

6. 结论

本研究围绕基于物理算法的虚拟仿真实验教学展开了深入探索，取得了以下成果：一方面，我们成

功构建了一套以物理算法为核心的虚拟仿真实验教学体系。通过引入分子动力学、蒙特卡罗等算法，实现了材料微观结构与宏观性质的深度融合，解决了传统实验教学中微观结构演化难以直观呈现的问题；另一方面，我们提出了“教学与科研相结合”“虚拟与真实相促进”的教学理念，开发出一系列虚拟仿真实验项目，如拉伸实验、纳米压痕实验和真空镀膜实验等。这些项目不仅丰富了实验教学内容，还显著提高了学生的学习兴趣和参与度，有效培养了学生的微观思维能力和科学素养。

然而，本研究仍存在一些局限性。物理算法对计算资源的需求较高，一定程度上限制了虚拟仿真实验的实时性和大规模推广；当前的虚拟仿真实验主要聚焦于金属材料，对于高分子材料等其他体系的拓展尚显不足；部分学生对复杂物理算法的理解存在困难，影响了其对仿真实验结果的深入分析。

未来，我们计划从以下几个方面进一步拓展和完善本研究：一是将研究对象从金属材料拓展到高分子材料、复合材料等更广泛的领域，探索不同材料体系的独特力学性能和微观机理；二是尝试将机器学习算法融入虚拟仿真实验框架，通过数据驱动的方法优化实验参数、提高仿真效率，并为学生提供更加智能化的学习体验；三是进一步加强虚拟仿真实验与真实实验的融合，探索线上线下混合式实验教学模式，为学生提供更加全面、立体的学习平台。

基金项目

- 1) 海南大学高等教育(研究生)教学成果奖培育项目，新能源材料拔尖创新人才国际合作联合培养模式的探索与实践(HDYJXCG2024004)。
- 2) 海南大学研究生创新能力提升建设项目，专业学位研究生教学案例建设项目(项目编号：HDJXAL2025Y0017)。

参考文献

- [1] 刘革平, 高楠, 胡翰林, 秦渝超. 教育元宇宙: 特征、机理及应用场景[J]. 开放教育研究, 2022, 28(1): 24-33.
- [2] 刘艳美. 布局元宇宙, 这些城市正在抢跑[EB/OL]. https://m.thepaper.cn/baijiahao_16255390, 2022-01-11.
- [3] 翟雪松, 楚肖燕, 王敏娟, 张紫徽, 董艳. 教育元宇宙: 新一代互联网教育形态的创新与挑战[J]. 开放教育研究, 2022, 28(1): 34-42.
- [4] 吴迪, 黄文骞. 虚拟现实技术的发展过程及研究现状[J]. 海洋测绘, 2002, 22(6): 15-17.
- [5] Cugola, F.R., Fernandes, I.R., Russo, F.B., Freitas, B.C., Dias, J.L.M., Guimarães, K.P., et al. (2016) The Brazilian Zika Virus Strain Causes Birth Defects in Experimental Models. *Nature*, **534**, 267-271. <https://doi.org/10.1038/nature18296>
- [6] 姜学智, 李忠华. 国内外虚拟现实技术的研究现状[J]. 辽宁工程技术大学学报, 2004, 23(2): 238-240.
- [7] Pflessner, B., Petersik, A., Pommert, A., Riemer, M., Schubert, R., Tiede, U., et al. (2001) Exploring the Visible Human's Inner Organs with the VOXEL-MAN 3D Navigator. In: Westwood, J.D., Hoffman, H.M., Mogel, G.T., Stredney, D. and Robb, R.A., Eds., *Studies in Health Technology and Informatics*, IOS Press, 379-385. <https://doi.org/10.3233/978-1-60750-925-7-379>
- [8] 关松磊. 虚拟仿真实验平台在实验教学中的应用现状[J]. 长春教育学院学报, 2018, 34(11): 45-48.
- [9] Burgin, S.R., Oramous, J., Kaminski, M., Stocker, L. and Moradi, M. (2018) High School Biology Students Use of Visual Molecular Dynamics as an Authentic Tool for Learning about Modeling as a Professional Scientific Practice. *Biochemistry and Molecular Biology Education*, **46**, 230-236. <https://doi.org/10.1002/bmb.21113>
- [10] Burkholder, P.R., Purser, G.H. and Cole, R.S. (2008) Using Molecular Dynamics Simulation to Reinforce Student Understanding of Intermolecular Forces. *Journal of Chemical Education*, **85**, 1071-1077. <https://doi.org/10.1021/ed085p1071>
- [11] Lundquist, K., Herndon, C., Harty, T.H. and Gumbart, J.C. (2016) Accelerating the Use of Molecular Modeling in the High School Classroom with VMD Lite. *Biochemistry and Molecular Biology Education*, **44**, 124-129. <https://doi.org/10.1002/bmb.20940>
- [12] 孙迎新, 裴素朋, 刘卫民, 袁联群. LAMMPS 软件在物理化学教学中的应用[J]. 广州化工, 2013, 41(11): 238-240.

-
- [13] Zhou, K., Liu, B., Shao, S. and Yao, Y. (2017) Molecular Dynamics Simulations of Tension-Compression Asymmetry in Nanocrystalline Copper. *Physics Letters A*, **381**, 1163-1168. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2017.01.027>
 - [14] Ren, J., Sun, Q., Xiao, L., Ding, X. and Sun, J. (2014) Phase Transformation Behavior in Titanium Single-Crystal Nanopillars under [0001] Orientation Tension: A Molecular Dynamics Simulation. *Computational Materials Science*, **92**, 8-12. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.05.018>
 - [15] Zhang, Y.Y., Pei, Q.X. and Wang, C.M. (2012) Mechanical Properties of Graphynes under Tension: A Molecular Dynamics Study. *Applied Physics Letters*, **101**, Article 081909. <https://doi.org/10.1063/1.4747719>
 - [16] Cremin, I., Watson, O., Heffernan, A., Imai, N., Ahmed, N., Bivegote, S., *et al.* (2018) An Infectious Way to Teach Students about Outbreaks. *Epidemics*, **23**, 42-48. <https://doi.org/10.1016/j.epidem.2017.12.002>
 - [17] Ardag, D. and Akaygun, S. (2005) Using Static and Dynamic Visuals to Represent Chemical Change at Molecular Level. *International Journal of Science Education*, **27**, 1269-1298. <https://doi.org/10.1080/09500690500102284>
 - [18] 杨亮, 战光辉, 林仕伟. 基于分子动力学算法的材料拉伸虚拟仿真实验设计[J]. 创新教育研究, 2021, 9(3): 725-731.
 - [19] 杨亮, 邓乔元, 战光辉, 林仕伟. 基于分子动力学的纳米压痕虚拟仿真教学设计[J]. 教育进展, 2021, 11(5): 1752-1761.