

重庆大学化学化工学院 AI 化学与智能创造微专业

《计算化学设计与实践》

课程教学大纲

一、课程名称：计算化学设计与实践

二、学时和学分：32 学时，2 学分

三、授课对象：面向全校理工医类专业本科二年级及以上学生开放，重点支持化学与材料、化工与制药、生物与环境等方向学生开展“模拟—AI—实验验证”交叉研究。

四、先修课程：建议已完成《高等数学（或同等数学基础）》及至少一门理工医基础课程（如《大学化学》《大学物理》《生物化学》《工程基础导论》等）之一；必修《Python 编程与化学数据科学》或具备同等 Python/Linux/化学信息学基础。

五、开课单位：化学化工学院

六、授课教师：

序号	教师姓名	工号	职称	所在单位
1	陈效华	31394	教授	化学化工学院
2	商波	31543	讲师	化学化工学院
3	田维全	31871	教授	化学化工学院
4	勾茜	T0091	教授	化学化工学院
5	胡小华	30910	副教授	本科生院

七、课程描述：（200-300 字左右）

本课程是数智化学微专业的进阶核心课程，旨在建立学生“用计算模拟解决实际问题”的系统思维。课程以计算化学解决实际化学相关问题中的设计出发，系统讲授从计算方案设计、高级模型构建、热力学/动力学性质分析到光谱模拟的全流程方法。

课程强调“从问题出发”，而非单纯的软件操作，重点培养学生评估计算方法适用性与精度的能力。在课程特色上，充分利用学生的 Python 基础，通过代码实现批量建模与自动化 workflow，实现计算数据与实验光谱的深度对标。

通过综合大作业，使学生掌握将计算数据转化为化学机理的科研闭环能力，为后续

材料基因工程与人工智能辅助设计奠定基础。

表 教学环节对应的教学内容

教学环节	教学内容
计算方案构建与评估	方案设计的六维度模型、方法选择逻辑 (DFT vs MM)、精度与成本的平衡、收敛性测试原理
多尺度模型建模及合理性判断	团簇、表面、复杂界面的建模及基础优化, Python 代码化建模
热力学类性质分析	基态寻找与几何优化、结合能与吸附能计算、静态电子结构 (DOS)、构象搜索
动力学类性质分析	过渡态理论 (NEB 方法)、反应能垒分析、分子动力学 (MD)、扩散系数与输运性质
光谱模拟与实验对标	离散数据连续化 (卷积)、MD 轨迹处理与 FFT 变换、XPS/IR 光谱模拟与指认
高通量与自动化 workflow	流程 workflow 串联、批量自动化提交、智能错误处理、数据库思维

八、教学目标

教学环节	知识贡献	能力贡献	素质贡献
计算方案构建与评估	理解不同计算方法的适用边界与误差来源	具备独立设计计算方案并评估资源可行性的能力	形成严谨的科研评估与批判性思维
多尺度模型建模及合理性判断	掌握化学结构的规律, 及规律的数字化转化	Python 构建结构和 GUI 建模	建立模型抽象与物理合理性并重的工程意识
热力学类性质分析	理解能量稳定性判据掌握常规静态性质	能够通过结构优化与静态计算判断物质稳定性	培养基于热力学原理分析化学问题的逻辑
动力学类性质分析	理解反应路径、能垒概念与原子扩散机制	能够利用过渡态搜索和 MD 模拟分析化学动力学过程	建立动态演化的时空观念与过程分析能力
光谱模拟与实验	掌握数据后处理算法及	能够将原始计算数据转化为	强化数据驱动分析与实

对标	光谱原理	可对标实验的谱图并指认峰位	验-计算相互印证的科学素养
高通量与自动化 workflow	理解自动化流水线架构 与数据库思维	具备编写全流程自动化脚本 解决复杂科研问题的综合能力	形成高效、规范、可复 现的研究范式

九、教学方法：

本课程采用“理论讲授+ 上机实践+ 项目驱动”的混合式教学。

理论部分聚焦计算化学的战略思维与方法原理，强调为何选此方法及如何判断结果可靠；实践部分以全流程科研案例为主线，组织学生完成从建模、计算到分析的自动化操作训练，并通过小作业积累，综合大作业实现知识的整合，完成闭环的科研类项目实践。

十、考核及成绩评定方式：

采用过程性评价与终结性评价相结合的方式，突出“方案是否科学、代码是否规范、分析是否深入”的评价导向：

平时作业与上机练习：30%

阶段性小项目（建模与分析脚本/Notebook）：30%

期末综合项目（含全流程自动化代码、互评、答辩）：40%

十一、教材/参考书目：

1. 教材

《计算化学——从理论化学到分子模拟》，科学出版社，陈敏伯，2009年

2. 中文参考教材

《计算材料学：从算法原理到代码实现》，华中科技大学出版社，单斌等，2023年

《分子模拟——理论与实验》，化学工业出版社，苑世领等，2016年

3. 英文参考教材与资源

- 1) David Sholl, Janice A. Steckel, Density Functional Theory: A Practical Introduction

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9780470447710>

- 2) Daan Frenkel, Berend Smit, Understanding Molecular Simulation
<https://www.elsevier.com/books/understanding-molecular-simulation/frenkel/978-0-12-267351-1>
- 3) ASE(Atomic Simulation Environment) Official Documentation
<https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>
- 4) Pymatgen Official Documentation <https://pymatgen.org/>