

《专业实训一-Gaussian/GaussView 软件使用培训简明教程》教学大纲

课程名称：专业实训一		实践类别： <input type="checkbox"/> 实习 <input checked="" type="checkbox"/> 实训 <input type="checkbox"/> 课程设计	
课程英文名称：Professional training (one)			
周数/学分：1 周/1 学分			
授课对象：2021 级应用化学 1、2 班			
开课学院：化学工程与能源技术学院			
开课地点： <input checked="" type="checkbox"/> 校内（松山湖校区） <input type="checkbox"/> 校外（ ）			
任课教师姓名/职称：苏海燕研究员			
教材、指导书：无			
教学参考资料： 1. 《Exploring Chemistry with Electronic Structure Method》，自编教材；			
考核方式：课堂考勤、实训练习、专业实训报告			
答疑时间、地点与方式：平时上班时间学生可到 12L301-1 进行答疑；也可通过电话或电子邮件等网络工具进行答疑；实训操作现场进行答疑			
<div>课程简介：</div> <div>根据人才培养方案，专业实训二选择《Gaussian/GaussView 软件使用培训简明教程》作为实训项目。此实训分为两部分，第一部分是基础篇，包括第一章 计算模型；第二章 单点能计算；第三章 结构优化；第四章 频率分析；第二部分是进阶篇，第五章 高精度能量计算；第六章 研究反应和反应性；第七章 溶液中的反应；</div> <div>涉及的理论知识包括分子力学、量子力学、计算化学、物理化学、理论催化、自由基反应历程和动力学过程、光谱学、热力学性质等。通过对 Gaussian/GaussView 软件的实训，掌握该软件主要功能，如分子构型优化、能量计算、光谱计算等，使学生对计算化学有一个较全面而深刻的认识，丰富专业知识体系，培养并提高学生的动手能力及分析、解决问题的能力，为今后从事化学研究工作提供坚实的理论和实践知识。</div>			
课程教学目标及对毕业要求指标点的支撑			
课程教学目标		支撑毕业要求指标点	毕业要求

目标 1: 了解分子力学和量子力学方法的基本原理；了解基于量子力学的各种近似发展的计算方法的特点及局限性；掌握各种基组的特点，能够根据体系特点选取合适的基组	5-1: 掌握应用化学中相关分析技术和工具的使用方法，能够识别复杂问题中的各种制约条件，明确各种方法的局限性	5 能够针对化学领域的复杂问题，选择和使用恰当的技术和资源，应用现代工程和信息工具，包括对复杂化学问题的预测，并能够理解其局限性
目标 2: 掌握利用 Gaussian/GaussView 软件计算单点能、分子轨道和轨道能级、电荷分布、偶极矩及核磁；掌握势能面和过渡态计算；掌握红外和拉曼光谱频率和强度计算、热力学、零点能和内能计算等	7-3: 能够利用化学化工相关管理知识和经济决策推进化学各领域工程实践研究	7. 能够理解和评价化学化工相关问题的解决方案对环境和社会可持续发展的影响
目标 3: 激发学生对于理论计算的学习兴趣，培养利用计算方法理解、分析化学问题及自主学习的能力	12-2: 具有终身学习的知识基础，掌握自主学习的方法，了解拓展知识和能力的途径	12. 具有终身学习的意识，能自主学习和适应发展的能力
实施要求、方法/形式及进度安排		
一、实施要求 1.资源配置要求 该课程配置了 Gaussian16W 和 GaussView6 版本，能满足学生对软件操作要求。 2.指导教师责任与要求 （1）指导学生了解分子力学和量子力学计算方法的基本原理、基于量子力学的各种近似发展的计算方法的特点及局限性；熟悉不同基组的适用范围和特点；掌握 Gaussian/ GaussView 软件的主要功能和程序结构； （2）传授学生具体操作 Gaussian/GaussView 软件技能、利用该软件进行分子构型优化、能量计算、光谱计算和其他功能计算； （3）通过该实训环节，引起学生的注意、产生兴趣，使得学生对于本课程表示认同，愿意接受。同时，在学时和实践过程中，培养学生自己去探索，不断深化，认识到计算化学在日常生活中的作用，培养学生终身学习的意识并建立知识基础，掌握自主学习的方法，具有适应发展的能力。 3.学生要求		

知识上，了解分子力学和量子力学方法的基本原理；了解基于量子力学的各种近似发展的计算方法的特点；掌握各种基组的特点，能够根据体系特点选取合适的基组。掌握利用 Gaussian/GaussView 软件计算气相及溶液体系的单点能、分子轨道和轨道能级、电荷分布、偶极矩及核磁；掌握势能面和过渡态计算；掌握红外和拉曼光谱频率和强度计算、热力学、零点能和内能计算等。

技能上，主要培养的职业能力项目分为三方面：

- （1）具体操作技能。包括基础操作技能训练、模型搭建的训练、计算方法训练、体系性质计算的基本训练、数据处理训练；
- （2）运用理论计算理解和评价化学化工相关问题的解决方案。根据实训任务要求，学生能够利用理论计算理解化学化工过程中的相关问题和现象，为推进化学领域实践研究提供理论指导；
- （3）综合技能。利用理论化学方法分析和解决实验过程中出现的问题。拓展知识基础，掌握自主学习的方法，了解拓展知识和能力的途径，提高综合能力和技能。

二、实施方法/形式

（1）本课程的实施方法、策略及教育资源的利用。

本实训项目的开展，要根据学生基础理论课学习的内容，对各种计算方法的特点及适用范围进行总体介绍，并选取实际操作的体系和范例，从 Gaussian/GaussView 软件最基本、最强大的功能入手，指导学生熟悉并掌握其操作技能。根据学生接受程度，再进行进阶篇内容的培训。Gaussian 提供了线上《用户手册》（Gaussian Users Reference）（<https://gaussian.com/man/>），同学们可以在线学习。

（2）学生的实训预习、实训操作、提交实验报告等方面的形式要求。

实训前，同学们需要自行在电脑上安装老师提供的 Gaussian/GaussView 软件，可通过 Gaussian 线上《用户手册》对该程序进行了解；实训过程中，严格按照指导教师指引进行实例操作，掌握各种结构、能量计算参数控制及功能运算，作好实训记录，完成实训报告。

三、实施进度和安排

表 1 实施进度和安排

时间/周次	学时/周	实践内容（重点、难点、课程思政融入点）	学生学习预期成果	教学方式	主讲教师	实践场所	支撑课程目标
-------	------	---------------------	----------	------	------	------	--------

		6	<p>内容：实训动员；各种计算方法的基本原理、特点及适用范围；单点能、核磁共振及结构优化计算实例操作与练习</p> <p>重点：掌握利用 Gaussian/GaussView 软件计算单点能、核磁共振及结构优化</p> <p>难点：了解各种计算方法的基本原理、特点及适用范围；要求学生阅读 Gaussian 线上《用户手册》</p> <p>课程思政融入点：实训过程中对学生严格要求，同时激发学生对现代信息工具的兴趣，培养学生自主学习的能力，了解拓展知识和能力的途径，增强学生的职业适应能力。</p>	<p>了解专业实习的意义，提高对实习的认识，认真对待实习过程。</p> <p>服从指导老师安排，了解各种计算方法的基本原理、掌握 Gaussian/ GaussView 软件基本功能。预习实习相关文献资料，熟悉实习内容，充分做好实习前的准备工作。</p>	<p>讲授：指导老师进行实习动员组织，讲授各种计算方法的基本原理和 Gaussian/GaussView 软件基本功能操作。</p> <p>实训：学生实际操作、练习相关范例内容。</p> <p>课外自主学习：要求学生阅读 Gaussian 线上《用户手册》</p>	苏海燕	校内	目标 1 和 3
		10	<p>内容：Gaussian/GaussView 软件基本操作及进阶操作</p> <p>重点：Gaussian/GaussView 软件基本操作</p> <p>难点：Gaussian/GaussView 软件进阶操作</p> <p>课程思政融入点：要求学生将理论</p>	<p>使学生掌握结构优化、过渡态、频率热力学、原子化能、高精度反应焓及溶液体系的计算</p>	<p>讲授：指导老师讲授 Gaussian/ GaussView 软件基本功能和进阶功能操作。</p> <p>实验：学生实际操作、练习相关范例内容。</p>	苏海燕	校内	目标 2 和 3

			知识与实验相结合，通过对计算机软件的实际操作，培养学生理论联系实际的科学精神。						
课程考核									
序号	课程目标	考核内容	评价依据及成绩比例（%）			权重（%）			
			课堂考勤	实训练习	专业实训报告				
1	目标 1： 了解分子力学和量子力学方法的基本原理；了解基于量子力学的各种近似发展的计算方法的特点及局限性；掌握各种基组的特点，能够根据体系特点选取合适的基组	对各种计算方法的基本原理、特点及适用范围的理解	10	0	12	22			
2	目标 2： 掌握利用 Gaussian/GaussView 软件计算单点能、分子轨道和轨道能级、电荷分	在实训过程中对 Gaussian/GaussView 软件各种功能的掌握情况	10	15	36	61			

	布、偶极矩及核磁；掌握势能面和过渡态计算；掌握红外和拉曼光谱频率和强度计算、热力学、零点能和内能计算等					
3	目标 3： 激发学生对于理论计算的学习兴趣，培养利用计算方法理解、分析化学问题及自主学习的能力	实训报告的撰写及实训项目过程中的参与程度	0	5	12	17
合计			20	20	60	100
注：各类考核评价的具体评分标准见《附录：各类考核评分标准表》						
大纲编写时间：2023.8.24						
<div>系（部）审查意见：</div> <div>我系课程委员会已对本课程教学大纲进行了审查，同意执行。</div> <div>系（部）主任签名：李超</div> <div>日期：2023 年 9 月 2 日</div>						

注：（1）实验安排以视实验室及联合实验室使用情况会有所调整，特此说明。

附录：各类考核评分标准表

线上学习评分标准

教学目标要求	评分标准				权重 (%)
	90-100	80-89	60-79	0-59	
目标 1：使学生掌握涂料的基本组成，掌握涂料配方设计和基本的制备工艺流程；掌握涂料成膜过程的相关工艺及参数控制；熟悉漆膜相关的表面化学知识。 (支撑毕业要求指标点 2-4)	学生能够遵守课程时间，按时完整有效的进行视频学习；清楚熟练掌握涂料成膜过程中的工艺与影响因素，熟悉漆膜形成过程中出现的相关现象及其原因。	学生能够遵守课程时间，按时完整的进行视频学习；掌握涂料成膜过程中的工艺与影响因素，对漆膜形成过程中出现的相关现象及原因亦能掌握。	学生基本能够遵守课程时间，进行视频学习；基本掌握涂料成膜过程中的工艺与影响因素，对漆膜形成过程中出现的相关现象及原因有一定了解。	学生不能够遵守课程时间，进行视频学习；不能掌握涂料成膜过程中的工艺与影响因素，不能对漆膜形成过程中出现的相关现象及其原因进行解释说明。	5
目标 2：掌握树脂的制备方法及涂料配制的基本操作流程，具备典型涂料配方分析和开发实验的能力。 (支撑毕业要求指标点 4-1)	学生可以熟练根据自由基聚合机理对苯丙树脂制备进行说明及现象分析，现象表述清晰，分析充分。具备较好的涂料配方分析与开发实验的能力。	学生可以熟练根据自由基聚合机理对苯丙树脂制备进行说明及现象分析，现象表述清晰，分析充分。具备较好的涂料配方分析与开发实验的能力。	基本掌握自由基聚合机理及树脂制备方法，基本具备涂料配方分析与开发实验的能力，实训中实验方案基本科学合理，现象表述一般清晰，实验数据与分析不够充分。	不能掌握自由基聚合机理及树脂制备方法，不具备涂料配方分析与开发实验的能力，实训中实验方案不合理，现象表述不清晰，实验数据与分析不充分。	5
目标 3：激发学生专业兴趣，培养精细化工行业之职业及伦理规范，使学生初步具备涂料工程师的专业素质和职业道德规范。 (支撑毕业要求指标点 11-1)	能够通过视频学习较好地考虑涂料行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素，表现出优秀的涂料工程师的专业素质和职业道德规范。	通过视频学习，可以考虑涂料行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素，能够表现出涂料工程师的专业素质和职业道德规范。	通过视频学习，基本考虑涂料行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素，基本可以表现出涂料工程师的专业素质和职业道德规范。	通过视频学习，不能考虑涂料行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素，不能够表现出涂料工程师的专业素质和职业道德规范。	5

预习报告评分标准

教学目标要求	评分标准				权重 (%)
	90-100	80-89	60-79	0-59	
<p>目标 1：使学生掌握涂料的基本组成，掌握涂料配方设计和基本的制备工艺流程；掌握涂料成膜过程的相关工艺及参数控制；熟悉漆膜相关的表面化学知识。</p> <p>（支撑毕业要求指标点 2-4）</p>	<p>根据前期学习能够清楚掌握涂料的基本组成，反应原理及乳胶漆的配方及制备工艺。熟练掌握涂料成膜的方法、工艺、影响参数及控制手段，熟练解释漆膜各种表观现象。</p>	<p>根据前期学习能够掌握涂料的基本组成，反应原理及乳胶漆的配方及制备工艺。掌握涂料成膜的方法、工艺、影响参数及控制手段，能够去解释漆膜的各种表观现象。</p>	<p>根据前期学习可以基本掌握涂料的基本组成，反应原理及乳胶漆的配方及制备工艺。基本掌握涂料成膜的方法、工艺、影响参数及控制手段，能够解释漆膜一定表观现象。</p>	<p>根据前期学习仍不能清楚掌握涂料的基本组成，反应原理及乳胶漆的配方及制备工艺。未能掌握涂料成膜的方法、工艺、影响参数及控制手段，不能解释漆膜的各种表观现象。</p>	12
<p>目标 2：掌握树脂的制备方法、涂料配制的基本操作流程，具备典型涂料配方分析和开发实验的能力。</p> <p>（支撑毕业要求指标点 4-1）</p>	<p>熟练掌握树脂制备，能够对反应各个环节进行把握，具备涂料配方分析与开发实验的能力。能够对实验现象与测试数据进行合理准确的分析。</p>	<p>掌握树脂制备，能对反应各个环节进行基本的把握，具备一定的涂料配方分析与开发实验的能力。能够对实验现象与测试数据进行一定的分析。</p>	<p>一定程度掌握树脂制备，对反应各个环节有一定的把握，基本具备涂料配方分析与开发实验的能力。能够对实验现象与测试数据进行一定的分析。</p>	<p>不能掌握树脂制备，不能对反应各个环节进行把握，不具备涂料配方分析与开发实验的能力。不能够对实验现象与测试数据进行合理准确的分析。</p>	12
<p>目标 3：激发学生专业兴趣，培养精细化工行业之职业及伦理规范，使学生初步具备涂料工程师的专业素质和职业道德规范。</p> <p>（支撑毕业要求指标点 11-1）</p>	<p>很好考虑涂料行业的行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素，合理可信且相对全面的论述。明显表现出涂料工程师的专</p>	<p>能够考虑到涂料行业的行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素。表现出一定的涂料工程师的专业素质和职业道德规范。</p>	<p>基本考虑到涂料行业的行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素，有一定的论述。可以表现基本的涂料工程师的专业素质和职业道德规范。</p>	<p>未能考虑行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素，没有合理全面的论述。不能表现出涂料工程师的专业素质和职业道德规范。</p>	12

教学目标要求	评分标准				权重 (%)
	90-100	80-89	60-79	0-59	
	业素质和职业道德规范。				

实验记录评分标准

教学目标要求	评分标准				权重 (%)
	90-100	80-89	60-79	0-59	
目标 1：使学生掌握涂料的基本组成，掌握涂料配方设计和基本的制备工艺流程；掌握涂料成膜过程的相关工艺及参数控制；熟悉漆膜相关的表面化学知识。 (支撑毕业要求指标点 2-4)	掌握涂料成膜过程中的相关工艺，能完整清晰记录树脂合成过程，色漆制备过程及性能测试的现象和数据。	能够掌握涂料成膜过程中的相关工艺，相对清晰记录树脂合成过程，色漆制备过程及性能测试的现象和数据。	基本掌握涂料成膜过程中的相关工艺，能记录树脂合成过程，色漆制备过程及性能测试的现象和数据。	未能掌握涂料成膜过程中的相关工艺，不能完整记录树脂合成过程，色漆制备过程及性能测试的现象和数据。	8
目标 2：掌握树脂的制备方法及其涂料配制的基本操作流程，具备典型涂料配方分析和开发实验的能力。 (支撑毕业要求指标点 4-1)	具备涂料配方分析与开发实验的能力，实训中现象记录清晰，实验数据详实，分析充分。	实训中实验现象表述基本清晰，实验数据相对详实，分析相对充分。	实训中实验现象表述一般清晰，实验数据与分析不够充分。	实训中实验现象表述不清晰，实验数据与分析不充分。	8
目标 3：激发学生专业兴趣，培养精细化工行业之职业及伦理规范，使学生初步具备涂料工程师的专业素质和职业道德规范。 (支撑毕业要求指标点 11-1)	在实训中的实验现象记录和分析能明显地表现出涂料工程师的专业素质和职业道德规范。	在实训过程中的实验现象记录和分析表现出涂料工程师的专业素质和职业道德规范。	在实训过程中的实验现象记录和分析表现出涂料工程师的专业素质和职业道德规范。	在实训过程中的实验现象记录和分析没有展现出涂料工程师的专业素质和职业道德规范。	8

专业实训报告评分标准

教学目标要求	评分标准				权重 (%)
	90-100	80-89	60-79	0-59	
目标 1：使学生掌握涂料的基本组成，掌握涂料配方设计和基本的制备工艺流程；掌握涂料成膜过程的相关工艺及参数控制；熟悉漆膜相关的表面化学知识。 (支撑毕业要求指标点 2-4)	能够准确理解专业实训选题内容，能够清楚掌握涂料的基本组成及乳胶漆的配方及制备工艺。熟练掌握涂料成膜过程中的相关工艺，熟练运用漆膜的相关表面化学知识。	能够较准确理解专业实训选题内容，较清楚掌握涂料的基本组成、乳胶漆的配方、制备工艺、成膜过程中的相关工艺并运用漆膜的相关表面化学知识。	基本理解专业实习选题内容，基本掌握涂料的基本组成及乳胶漆的配方及制备工艺。基本掌握涂料成膜过程中的相关工艺，对运用漆膜的相关表面化学知识不够熟练。	未较好理解专业实习选题，不能掌握涂料的基本组成及乳胶漆的配方、制备工艺及成膜过程中的相关工艺，不能运用漆膜的相关表面化学知识。	10
目标 2：掌握树脂的制备方法及涂料配制的基本操作流程，具备典型涂料配方分析和开发实验的能力。 (支撑毕业要求指标点 4-1)	在实训过程中能够熟练地查询相关技术的国内外最新发展趋势，并表现出良好的跨文化交流和沟通的能力。可以熟练运用相关知识对实验中的现象进行有效分析。	在实训过程中可以地查询相关技术的国内外最新发展趋势，并表现出一定的跨文化交流和沟通的能力。运用相关知识能够对实验中的现象进行分析。	在实训过程中基本可以对相关技术的国内外最新发展趋势进行查询，有一定的跨文化交流和沟通的能力。基本运用相关知识能够对实验中的现象进行分析。	在实训过程中不能对相关技术的国内外最新发展趋势进行查询，有一定的跨文化交流和沟通的能力。不能运用相关知识能够对实验中的现象进行分析。	10
目标 3：激发学生专业兴趣，培养精细化工行业之职业及伦理规范，使学生初步具备涂料工程师的专业素质和职业道德规范。	不仅能在实训过程中较好地考虑行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素，还有比较合理可信且相对全面的论述。在实训过	在实训过程中较好地考虑行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素，还有比较合理可信且相对全面的论述。在实训过程中表现出涂	在实训过程中能考虑行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素，论述相对合理全面。在实训过程中表现出涂料工程师的专业素质和职	在实训过程中不能考虑行业政策、法律法规和社会可持续发展等因素，论述不够合理全面。没有展现出软件开	5

教学目标要求	评分标准				权重 (%)
	90-100	80-89	60-79	0-59	
(支撑毕业要求 指标点 11-1)	程中能明显地表现出涂料工程师的专业素质和职业道德规范。	料工程师的专业素质和职业道德规范。	业道德规范。	发工程师的专业素质和职业道德规范。	