

附件一:

编号: \_\_\_\_\_



西華大學  
XIHUA UNIVERSITY

## 更新置换先进设备中长期贷款 项目立项申报书

项 目 名 称: 计算化学和创新实验室建设

申 报 单 位: 理学院

申报单位负责人: 王周玉

项 目 负 责 人: 陈明军

申 报 日 期: 2022 年 10 月 27 日

联 系 电 话: 13980410934

西华大学国有资产与实验室管理处制

## 一、项目基本信息

项目名称	计算化学和创新实验室建设			
项目类别	<input checked="" type="checkbox"/> 新建 <input type="checkbox"/> 改(扩)建 <input type="checkbox"/> 更新			
项目归口 管理部门	<input checked="" type="checkbox"/> 教务处 <input type="checkbox"/> 科技处 <input type="checkbox"/> 网管中心 <input type="checkbox"/> 基建处			
项目负责人	姓名	陈明军	职务职称	教务处副处长,教授
	办公电话	87387181	移动电话	13980410934
	Email 信箱	cmjchem@126.com		
项目总预算	79.53 (万元)			
<p><b>项目简介:</b></p> <p>本项目拟搭建理论化学计算集群,建设线上线下结合、结构设计与反应机理结合的计算化学实验平台。</p> <p>本项目拟依托理论化学计算集群,搭建理论与计算化学实验平台,锻炼学生通过软件将分子的关键微观信息以三维图像的方式表现,在原子和分子层面上利用量子化学计算手段模拟和分析分子的立体构象等,获取分子键能和反应活化能等重要信息,使抽象概念变得直观、易于理解,使设计的反应路线更加可行。计算化学(computational chemistry)是理论化学的一个分支,随着理论化学方法和计算机软硬件技术的迅猛发展,计算化学在化学科学的研究中发挥着越来越重要的作用。目前,西华大学尚未面向本科生开设计算化学实验课程。为加快化学国家一流学科建设,满足新时代化学专业人才培养需求。</p>				

## 二、立项论证

建设项目必要性：

为契合西华大学“十四五”发展纲要，全面实施“11563”发展战略，同时促进化学、食品科学与工程、生物工程、材料科学与工程等国家一流专业建设和助力食品学科申博，搭建计算化学实验平台。

① 人才培养质量取得新成效，协同完成国家级一流专业建设目标。

2013-2017 年教育部高等学校化学类专业教学指导委员会在《化学类专业化学理论教学建议内容》中建议将“计算化学初步”作为化学专业本科生的学习内容。经过调研，许多高校都在本科阶段对化学等相关专业的学生开设计算化学课程和实验，例如：

学校名	课程名	理论课时数	实验课时数
北京师范大学	化学测量与计算实验	—	54
江苏大学	化学软件与计算化学(双语)	18	14
	化工计算技术	32	—
云南大学	计算化学与虚拟波谱实验	—	54
成都理工大学	计算机在化学中的应用	8	8
西南科技大学	计算机在材料中的应用	32	16
	计算机在化学化工中的应用	32	—
西南民族大学	应用化学设计与综合实验	—	52

与此同时，很多高校面向研究生开设计算化学相关的理论与实验课程，例如：

学校名	课程名	课时数
北京理工大学	计算化学基础	32
北京化工大学	计算化学	32
西南石油大学	分子设计与化学产品工程	32
福州大学	理论与量子化学	54
	量子化学计算方法	36
四川师范大学	计算化学	32
西南科技大学	计算机在化学中的应用	36
中国石油大学	分子模拟方法及应用	32

由此可见，将计算化学实验引入本科及研究生培养体系，是满足实践育人贯穿教育教学全过程和学生成长成才全过程的要求，是为了推动育人目的、手段和效果的统一的目标，是满足紧扣时代发展需要的。将理论化学实验引入本科实验教学，为实施理论实践相融合和培养高素质应用型人才的办学思路奠定基础。培育学生的科学精神、社会责任感和社会服务能力，提升美育育人效果。

② **强化课程建设，促进学生全面发展目标。**为构建“覆盖全面、类型丰富、层次递进、相互支撑”的实验课程体系，充分发挥基础专业实验、综合化学实验、创新型科研实验和本科毕业论文等一系列实践活动对人才培养的重要作用。目前《综合化学实验》课程已作为校级一流实践课程，本项目建设完成时，将在《综合化学实验》、《化学信息学》、《化学创新型科研实验》等课程中引入理论与计算化学实验，填补以往理论计算实验的空白，对标国内先进、区域标杆，设置先进的实验项目，充分锻炼学生的综合能力。主动顺应人才培养规律和社会供需要求，促进应用型人才培养，注重学生实践技能，积极探索新型培养模式。

③ **推进双创教育，促进教师成长目标。**强化秉承“全面覆盖、强化实践、分层培养、协同推进”的实践教学理念，全面推进化学类实验课程化、体系化、信息化，本项目将大力推进化学专业混合式课程改革，切实用好师生在“全国高等院校工程应用技术大赛——数字化虚拟仿真主题赛项”等竞赛结果，坚持“以赛促教”“以教促赛”，“以赛促学”“以赛促创”，全面提升教师教学能力和学生创新能力。借此实现通过比赛强化知识获得的制度保障；指导教师以竞赛为基础，开展科研与教



研立项研究，深化教学改革。逐步建立符合本专业的竞赛组织机制，形成配套完善的应用型人才培养的实践平台。通过竞赛提高学生对学科的兴趣，丰富学生的学科学习，拓展学生的知识视野，开发学生的思维潜能，培养学生的个性和特长，保障学生创新能力培养。

④ **强化协同育人，健全质量体系目标。**贯彻落实“新时代高教 40 条”和“六卓越一拔尖”计划 2.0，对标新工科、新文科、新农科专业建设要求，进一步修订完善课程计划，充实大学基础化学实验内容，建立适合理、工学科实验教学平台，重点支持各级一流本科专业内涵建设。从实践出发，推进通识教育与宽口径专业教育相结合，为学校多个专业的工程教育专业认证提供有力支持！

⑤ **全面落实立德树人根本任务，筑牢铸魂育人体系。**以“立德树人”为核心，坚持守正创新、固本铸魂，着力加强“十大育人”体系建设，推动思想建设、知识传授、能力培养。探索建立理论和实践双轨并行、纵向交互，打通劳动教育的“最后一公里”。通过有趣、有意义、有价值的实验项目设置，将劳动教育与人才培养横向融合，推进劳动教育“三进工作”。以学生为中心，将劳动教育纳入人才培养体系，优化实践课程建设，形成学校统一领导、专家全面指导、师生共同参与的实验室管理体系，推进虚拟教研室的建设，编制实践课程教材，推动区域化劳动教育的深层次发展。

建设项目可行性：（需明确拟购仪器设备郫都校区、彭州校区存放地点）

该项目依托学校网络管理中心进行建设，将整体托管在网络管理中心。网络管理中心有较完善的管理团队和服务团队，包括团队负责人、实验室负责人、安全负责人、设备管理员等，为该项目的建设提供了设备管理保障。

建设项目科学性：

化学是在原子、分子及分子以上层次研究物质及其变化过程的基础科学，是一门理论与实验并重、富有创造性的中心学科。按照化学类教学质量国家标准，化学类专业培养的学生应系统、扎实地掌握化学基础知识、基本理论和基本技能。原子/分子/晶体结构、化学键、物质的构效关系与性质变化规律是化学理论教学的基本内容，这些理论是结构化学课程的主要教学内容。随着量子化学理论方法、计算化学软件以及计算机技术的发展，化学工作者在传统和经验性研究模式的基础上更加注重通过模拟、设计和控制合成，实现对物质功能的优化和调控。计算化学逐渐和实验化学、理论化学一起，成为化学科学的三个支柱。因此以结构化学为基础，分子模拟为工具，通过“实验、计算、理论”协同作用解决各种核心化学问题，搭建理论与计算化学实验平台，设计相应实验项目，从而帮助和要求学生掌握一定的计算化学理论知识和计算化学实验技能，对新一代化学专业的学生而言十分必要。

通过计算化学实验的学习，可以让本科生掌握一些计算化学的理论知识和计算化学的实验技能，同时让学生学会用化学理论来解释化学事实，学会用化学实验结果来验证化学理论，增强学生的理论知识水平、

创新能力和解决实际问题的能力。

建设项目利用率：

① 项目建设后受益学生包括化学专业的学生每年涉及学生 120 人左右，及其他相关专业，受益学生面大，使用频率高。

② 该项目建成后将为全校理、工科学生开设具有代表性的综合性化学实验，充实大学基础化学实验内容，增设具有特色的专业实验，建立先进的实验教学平台，满足为全校理学院、食品与生物工程学院、材料科学与工程学院、建筑与土木工程学院、大健康管理学院等 7 个学院 10 余个专业的本科生开设具有“高阶性、创新性、挑战度”的化学及化学相关学科的实验课程。

③ 该项目建成后，将为全校化学及相关专业学生进行毕业论文和教师进行有关课程的实验服务，形成开放式、研究型综合实验与科技训练相结合的实验教学模式，为培养创新人才奠定了坚实的基础；营造新型的人才培养多元化教学环境，开设必做实验、选做实验、演示实验、开放实验，以满足校内相关专业多层次的培养需求。

建设项目使用效益：

本项目涉及的理论化学计算，既节省空间、人力、时间和成本，又满足绿色、低碳、环保的要求，既能提升教学收益，又能提高培养效果，

具有显著的经济效应和社会效益，是未来实现智能制造的重要平台技术之一。

项目建成后，将更新实验项目，促进本科实验改革，为教师进行实验教学教改提供有力支撑。受益学生数达 2000 人以上。切实提高本科生培养质量，提高用人单位对毕业生满意度的认可，其他院校对学生实验能力的认可度稳步提升。毕业生继续攻读研究生的比例逐步提升。

进一步加强化学实验中心对外服务的社会功能，面向校内外众多单位的学生培养提供平台和保障。

项目 建设 进度安排	<p>项目建设时间：1 年（2022 年 11 月—2023 年 11 月）</p> <p>进度安排：</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1、前期准备工作（2022 年 9 月—2022 年 10 月）</li><li>2、主要设备采购（政府采购）（2022 年 11 月—2023 年 1 月）</li><li>3、主要设备安装调试（2023 年 2 月—2023 年 4 月）</li><li>4、设备设施实验验证、投入教学实验（2023 年 5 月—2023 年 9 月）</li><li>5、准备验收资料、完成验收工作（2023 年 10 月—2023 年 11 月）</li></ol> <p>设备到位后 <u>5 个</u> 月完成验收前的全部工作。</p>
---------------	--



### 三、项目采购清单及采购资金预算

主 要 仪 器 设 备						
仪器设备名称	型号	规格	数量	参考单价 (万元)	金 额 (万元)	主要技术参数
刀箱	B5000 G4	台	1	5.83	5.83	形态：4U 机架式机箱； 电源：2000W 冗余电源模块*4； 网络交换：千兆(万兆上联)交换模块(含 2 个 SFP+ 光模块)*1； 管理：管理模块*1； 高速网络：含相应 200Gb HDR 模块； 刀片托轨*1

高性能计算节点	BX50. G40	台	8	8.1	64.8	CPU：XEON 6336Y 2.4GHz 24C *2; 内存：16GB DDR4 3200MHz ECC 内存 *16; 硬盘：480GB SATA R SSD 硬盘*2; 硬盘控制器：SAS 控制器/Raid 控制器 网卡：千兆以太网接口*2;
通用计算服务器	X620 G40	台	1	8.9	8.9	形态：2U 机架式服务器; CPU：XEON 6336Y 2.4GHz 24C *2; 内存：16GB DDR4 3200MHz ECC 内存 *16; 硬盘：480GB SATA R SSD 硬盘*2; 阵列卡：8 口 SAS 卡 *1; 网卡：千兆以太网接口*2; HCA 卡：单端口 HDR 100Gb InfiniBand HCA 卡*1; 电源：800W 冗余电源模块*2 导轨
项目建设总预算：79.53（万元）						

注：单台（套）设备需按设备名称填写。

#### 四、项目技术和管理人员配置计划

姓名	职务职称	所属单位	项目建设中承担的主要任务
陈明军	副处长/教授	教务处	项目负责、规划设计
王周玉	院长/教授	理学院	规划设计
律娅婧	中心主任	理学院	项目实施
王会镇	中心副主任	理学院	项目实施
曾义	教授	理学院	调研、规划设计
李唯一	教授	理学院	项目实施
刘治国	教授	理学院	调研、规划设计

#### 五、支出绩效目标申报表

预算执行率权重(%)：	10%			
整体目标：	提高地方高校办学质量和水平，推进本科教学实验室建设，促进本科实践教学改革，全面提高人才培养质量。支持理学院标准化建设，促进教育教学长效发展。			
一级指标	二级指标	三级指标	指标值	权重（%）
产出指标	数量指标	本科实验教学大纲改革	2 个及以上	6%
		申请教学项目	1 项以上	6%
		本科生发表论文	3 篇及以上	6%
		组织师生培训	每年 2 场及以上	6%
		实验室设备使用率	90%以上	6%
	质量指标	理学院本科教学实验项目更新	不低于 3 项	6%
		仪器设备完	不低于 95%	7%

		好率		
		项目竣工验收合格率	不低于 99%	7%
	时效指标	指标 1:		
		...		
	成本指标	指标 1:		
		...		
效益指标	经济效益指标	本科生就业率	逐步提升	4%
	社会效益指标	受益学生数	3000 人以上	4%
		工作单位对学生的创新实践能力的认可度	逐步提升	4%
		其他院校对学生创新实践能力的认可度	逐步提升	4%
		教学质量改善情况	明显改善	4%
	生态效益指标	指标 1:		
		...		
	可持续影响指标	高校持续健康发展	逐步加强	5%
		毕业生可持续发展能力	≥5 年	5%
满意度指标	服务对象满意度指标	教师满意度	98%	5%
		学生满意度	98%	5%

填报说明：1. 绩效指标由各单位（部门）结合项目具体情况增删，其中产出指标中至少选填数量指标、质量指标两项指标，效益指标中至少选填一项；批复后的绩效目标为绩效考评的主要依据；设定指标时可参考学校“十四五”发展规划纲要。

## 六、承诺

我单位填报的立项论证申报材料真实可行。若有不实，我单位愿承担一切责任。

项目负责人(签字):

立项申报单位负责人(签字、盖章):



## 七、立项论证意见




化学是在原子、分子层面研究物质及其变化过程的重要基础科学，是一门理论与实验并重、富有创造性的中心学科。化学专业为国家一流专业建设点。该项目拟完成理论化学计算集群和依托微通道反应器的连续流实训平台的搭建，建设化学专业从理论教学到实验教学深度融合的混合式学习平台。该平台的搭建有利于培养适应新时代化学及其相关行业人才需求的化学专业人才，通过在课程中引入理论计算和微通道反应流实验，可填补西华大学化学专业本科教学在理论计算实验和绿色化工实验方面的空白，对标国内先进、区域标杆，设置先进的实验项目，可更好地锻炼学生的创新能力、实践能力等，更好地顺应人才培养规律和社会对化学创新型和应用型人才的需求。

该项目所采购设备符合学校及相关规定要求，满足化学国家一流专业建设需要，功能完备，性能先进，技术成熟可靠，可为进一步推动该专业的高水平建设进程提供保障，建议采购。

论证组专家(签字): 陈广军 胡南 姬瑞红 樊超

## 八、审批意见

项目归 口管理 部门 意见	<p>经书程等 28.03.22</p> <p>项目归口管理部门负责人: (签章) 2022年11月17日</p> 
基建处 意见	基建处负责人: (签章) 年 月 日
国资 处意 见	国资处负责人: (签章) 年 月 日
学校 分管 领导 意见	项目归口管理部门分管校领导: 年 月 日
	国资管理部门分管校领导: 年 月 日