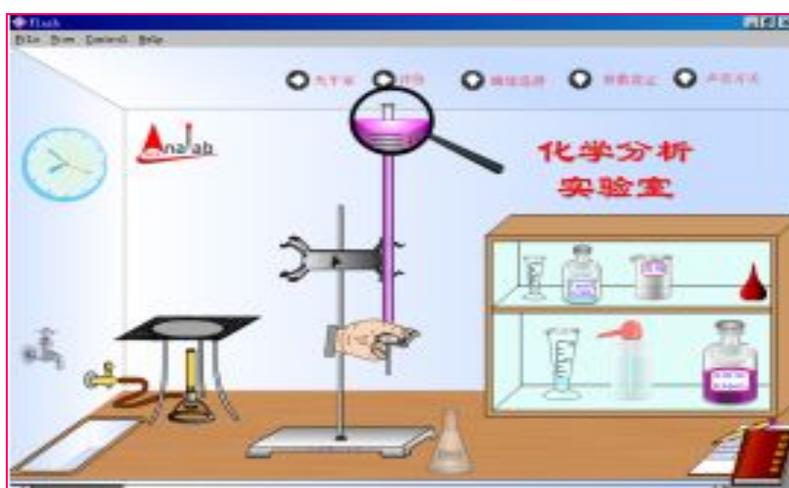


中药成分虚拟仿真实验

一、基础化学虚拟仿真实验

主要包括无机化学实验、有机化学实验、分析化学实验及物理化学实验，与实做实验内容一一对应，做到了“全覆盖、超覆盖”，让学生能够在网络上完成实验预习、虚拟操作以及实验复习等内容，本着相互补充的原则，使同学们能够进一步加强对相关实验内容的理解、巩固与消化。该平台整合有使用记录及成绩评定系统等功能，与实验最终成绩直接挂钩，充分调动了学生的积极性，加深了对实验内容的认识，起到了良好的教学效果。



化学分析虚拟仿真



物理化学虚拟仿真

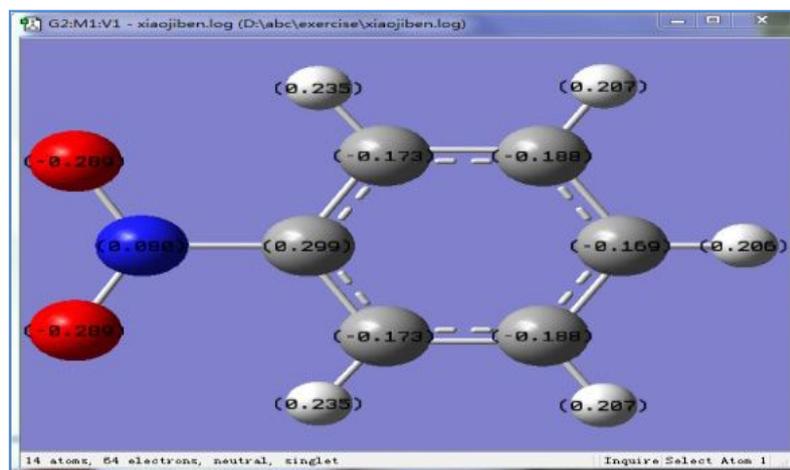
基础化学虚拟仿真实验可开展的实训试验项目表

编号	项目名称
1	无机化学虚拟仿真实验
2	元素及其化合物的性质虚拟仿真实验

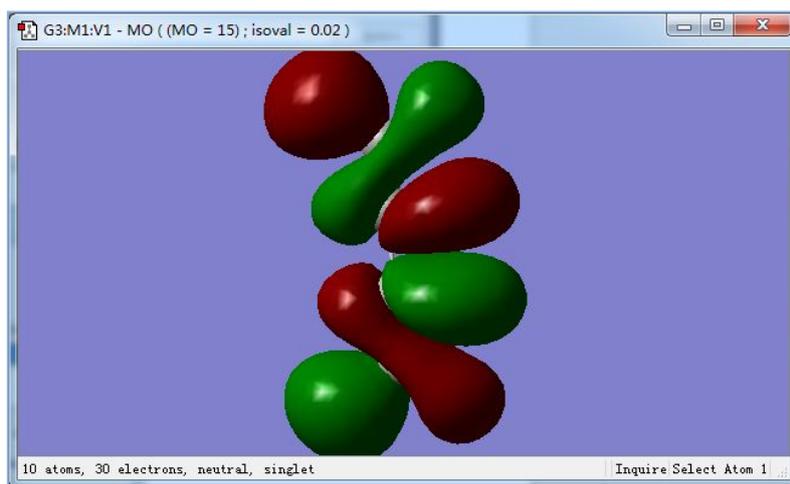
3	物理化学虚拟仿真实验
4	有机化学虚拟仿真实验
5	滴定分析虚拟仿真实验
6	色谱分析虚拟仿真实验
7	电化学分析虚拟仿真实验

二、计算化学虚拟仿真实验：

充分发挥我校相关研究方向雄厚的研究实力，为了促进实验教学与学科前沿发展相结合，进一步调动同学们对于科学研究的积极性，将一些抽象的化学及药物化学知识用虚拟仿真的方式得以展现，主要包括计算化学程序(Gaussian 09 D.01)、分子的电荷密度量子化学、分子动力学模拟软件(Amber)、分子团簇构型和分子构象搜索程序(Molclus)等虚拟仿真软件，起到了良好的教学效果，使学生产生了浓厚的研究兴趣，有效掌握了相关的理论化学知识及运用技能，为中药新药创新设计与中药药效研究打下必要的化学理论基础。



硝基苯亲电取代反应中的应用



前线轨道理论中的应用

计算化学虚拟仿真实验可开展的实训试验项目表

编号	项目名称
1	丙烯分子几何构型的优化——极小值点的寻找
2	分子振动频率计算
3	氟代乙烯和乙烯胺分子振动频率的计算
4	几何构型优化——寻找过渡态（一阶鞍点）
5	SN2 反应途径的量子化学研究
6	甲基取代吡啶亲电取代反应的分析