

计算题类型与计算原理

药物分析中的计算题主要有两类：杂质限量计算和药物含量计算。

① 杂质限量计算（见第3章）

$$\text{基本公式如下：杂质限量} = \frac{\text{杂质最大允许量}}{\text{样品供试量}} \times 100\% \quad (1)$$

式中杂质最大允许量由以下几种方法得到：

① 在一般杂质检查中，采用杂质对照品对照法进行检查时，用杂质对照溶液的浓度（C）与体积（V）的乘积来表示，杂质对照溶液的浓度一般是固定的（按药典规定）。

② 在特殊杂质检查中，常用色谱法检查，如薄层层析、高效液相色谱，杂质对照液浓度根据样品不同而不同，杂质的最大允许量由杂质对照液浓度与进样（或点样）体积的乘积来表示，但若杂质对照液和样品供试液的点样（或进样）体积一致，则体积就不用考虑，直接用对照液浓度表示。

③ 在光谱分析中，一般需要通过计算获得杂质最大允许量。

百分吸收系数法：由方法规定的样品溶液在某一波长处的吸光度值（A）除以杂质纯品在该波长处的百分吸收系数（E）值，而获得供试溶液中杂质的浓度（ $C=A/E$ ）。

杂质对照品对照法：根据杂质对照溶液浓度（ $C_{对}$ ）与其吸光度值（ $A_{对}$ ），以及方法规定的样品溶液在某一波长处的吸光度限量值（ $A_{样}$ ），采用单点对照法计算供试溶液中杂质的浓度（ $C_{样}=A_{样}/A_{对} \times C_{对}$ ）。

注意：按公式（1）计算时，分子分母单位应一致，常需换算（ $1g=1000mg=1000000\mu g$ ）。

② 药物含量计算

分为原料药含量计算和制剂含量计算（见第4章），根据分析方法的不同，分为容量法（见第5章）、光谱法（见第6章）、色谱法（见第7章）三种。基本公式如下：

（1）原料药含量计算：

$$\text{容量法：药物含量}\% = \frac{\text{滴定液体积 } V \times \text{滴定度 } T \times \text{滴定液浓度校正因子 } F}{\text{样品取样量 } W} \times 100\% \quad (2)$$

光谱法：有两种方法计算样品溶液浓度：

$$\text{①对照溶液对照法：样品液浓度 } C = \frac{\text{样品液吸光度 } A_{样} \times \text{对照液浓度 } C_{对}}{\text{对照液吸光度 } A_{对}}$$

此式中，样品液浓度 C 的单位与对照液浓度单位一致。

$$\text{②百分吸收系数 E 值法：样品液浓度 } C (\%) = \frac{\text{样品液吸光度 } A}{E}$$

此式中，样品液浓度 C 为百分浓度，单位为%（g/100ml），即每 100ml 中含多少克。

$$\text{药物含量}\% = \frac{\text{样品液浓度 } C \times \text{样品稀释倍数 } F}{\text{样品取样量 } W} \times 100\% \quad (3)$$

注意：上式中，分子、分母单位可能不同，须将两者换算成相同单位。

色谱法：有内标法和外标法计算之分。

$$\text{①外标法：样品液浓度 } C = \frac{\text{样品液峰面积 } A_{样} \times \text{对照液浓度 } C_{对}}{\text{对照液峰面积 } A_{对}}$$

$$\text{②内标法：样品液浓度 } C = \frac{\text{样品液峰面积 } A_{样} \times \text{内标溶液浓度 } C_{内}}{\text{内标溶液峰面积 } A_{内}} \times \text{校正因子 } F$$

$$\left(\text{校正因子 } F = \frac{\text{内标溶液峰面积} \times \text{样品对照溶液浓度}}{\text{样品对照溶液峰面积} \times \text{内标溶液浓度}} \right)$$

$$\text{药物含量}\% = \frac{\text{样品液浓度 } C \times \text{样品稀释倍数 } F}{\text{样品取样量 } W} \times 100\% \quad (4)$$

（2）制剂含量计算：

以上（2）、（3）、（4）式中“样品取样量”为原料药取样量，若为制剂，该取样量就是片粉取样量或注射液取用体积（1ml 相当于 1g）。

制剂通常要求计算相当于标示量的百分含量，由以上（2）、（3）、（4）式计算得到的是所取片粉中药物的百分含量，乘上平均片重（一般片剂取 10 片或 20 片称重后研细，再称取适量片粉，即样品取用量），得每片实际含量，再除以标示量（即片剂的规格），即得相当于标示量的百分含量：

$$\text{相当于标示量}\% = \frac{\text{药物含量} \times \text{平均片重}}{\text{标示量}} \times 100\% \quad (\text{注意分子分母单位的一致性})$$

如果为注射剂，由以上（2）、（3）、（4）式计算得到的是每 100ml 注射液中药物的含量，再除以规格（质量/ml），即得相当于标示量的百分含量：

$$\text{相当于标示量}\% = \frac{\text{药物含量 (mg/ml)}}{\text{标示量 (mg/ml)}} \times 100\%$$

计算题是药物分析课程教学的重要内容，几乎所有的药物分析考试中均有计算题，计算题量不多，但试卷中比重较大，失分也较大，希望引起同学注意。最好平时多练习，不懂时也可电话联系，当面交流可能比书面自己看效果更好。