



ZHIYAO GONGCHENG
ZHUANYE SHIYAN

制药工程专业实验

孟江平 张进 徐强 主编



化学工业出版社

制药工程专业实验

孟江平 张进 徐强 主编



化学工业出版社

· 北京 ·

制药工程专业实验是制药工程专业实践教学的重要环节,是培养应用型、创新型、复合型制药工程人才的重要手段之一。《制药工程专业实验》在内容编排上,选择能够代表制药行业发展方向、易于实验室进行的实验项目,内容充分体现了制药行业的发展动态和制药工程专业的发展规律。本书共分五章,包括绪论、化学制药、中药制药、生物技术制药以及药物制剂。详细介绍了制药工程实验的基本知识和基本操作,在各实验项目的教学中,将实验室操作与生产实践有机结合起来,每个实验项目增加工艺设计部分,以增强学生的工程意识,同时注重学生绿色化学实验素养的培养,有助于学生系统、完整地掌握制药工程专业技术,提高实践应用能力,进一步培养应用型制药工程专业人才。

本书可以作为制药工程(化工与制药、化学制药、生物制药、中药制药和药物制剂各方向)、药学、中药学、生物医学工程、化学工程与工艺等专业本科生教材,也可以作为研究生、药学相关实验技术人员和科研人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

制药工程专业实验/孟江平,张进,徐强主编. —北京:化学工业出版社,2015.9

ISBN 978-7-122-25011-7

I. ①制… II. ①孟…②张…③徐… III. ①制药工业-化学工程-实验-教材 IV. ①TQ46-33

中国版本图书馆CIP数据核字(2015)第200394号

责任编辑:闫敏 杨菁

文字编辑:张春娥

责任校对:吴静

装帧设计:关飞

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印装:北京科印技术咨询服务公司海淀数码印刷分部

787mm×1092mm 1/16 印张8 $\frac{3}{4}$ 字数211千字 2015年11月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网址:<http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:37.00元

版权所有 违者必究

《制药工程专业实验》编写人员名单

主 编 孟江平 张 进 徐 强

副主编 唐 英 吴飞跃 胡承波 郑士远 谢志刚 廖文利

编写人员 (按姓氏笔画为序)

王维勋 刘希东 李忠彬 李国强 吴飞跃 张 进

罗 燕 孟江平 胡承波 郑 理 郑士远 徐 迪

徐 峥 徐 强 唐 英 黄孟军 谢志刚 廖文利

前言

进入 21 世纪,随着制药行业的高速发展,极大地推动了对制药工程专业人才的需求,对制药工程专业人才的需求又进一步促进各高校制药工程专业的发展。近年来,全国各高校相继开设了制药工程专业,截至 2014 年,国内开设制药工程专业的本科学校已有二百多所。不同高校对制药工程专业发展的定位有所不同,因此制药工程专业教材建设应与各高校专业发展定位相一致。

制药工程专业旨在培养具备制药工程方面的专业知识,能在医药、农药、精细化工和生物化工等行业从事医药产品的生产、开发、应用研究和经营管理等方面的高级工程技术人才。制药工程专业实验教学是培养制药工程专业人才的重要实践环节,是将制药工程专业的相关理论知识、基本技能应用到实践过程的重要环节。目前国内已有部分优秀制药工程专业实验教材,它们对培养制药工程专业人才起到了重要指导作用。

随着近年来应用型大学的建设,特别是《国务院关于加快发展现代职业教育的决定》(国发[2014]19号)文件的颁发,采取试点推动、示范引领等方式,引导一批普通本科学校向应用技术类型高等学校转型,重点举办本科职业教育。这些由普通本科院校转向应用型的大学,其专业发展也相应往应用型转变,因此,传统的专业教材,特别是实验教材,已不能满足应用型教学要求,这就迫切需要编写能够体现应用型特点的教材,这些教材应充分体现应用型、实践性,更应能够与生产实践相结合。

本教材是在执行《国务院关于加快发展现代职业教育的决定》以及应用型大学建设背景下,根据制药工程专业培养应用型专业人才的指导思想,组织长期在教学一线的教师编写的,编写组成员将其多年来的教学经验与教学成果,汇聚成教材,供培养应用型制药工程专业人才使用。

本教材在内容编排上,遵从制药工程专业的发展方向,以培养应用型制药工程人才为核心,以环境保护为主线,以绿色化学实验素养为宗旨,实验项目充分体现当前制药行业的发展动态和制药工程专业的发展规律。所选择的实验项目能够代表制药行业的发展方向、易于实验室进行,内容编写具时代特色、彰显药物生产的绿色理念,特色鲜明。为了培养学生的工程意识,进一步体现应用型特色,在教学过程中我们以“模型嵌入式”教学模式为主、其他传统教学模式相结合的方式,每个实验项目增加了工艺设计环节,学生可以在课后以小组形式,根据实验过程,设计药物生产工艺流程,鼓励学生进行生产实践调研,在深入生产一线的基础上,根据所设计的工艺,进行药物工艺模型的制作,充分调动学生的学习积极性,培养学生的动手能力、观察能力、生产应用能力和工程设计能力。

本教材共分五章,包括绪论、化学制药、中药制药、生物技术制药以及药物制剂。课程第 1 章为绪论,主要介绍实验基本规则、实验室安全及绿色制药实验素养、新药的临床研究、实验记录及报告、文献检索与辅助软件以及药物结构解析常用波谱等。这些内容对培养学生绿色化学实验素养,培养学生敬畏自然、珍爱自然、节约资源等综合素质具有重要的作用。实验记录及报告对培养学生认真记录、求真务实、科学严谨的学习态度具有重要意义。特别是文献检索方式、数据库、常用化学结构编辑软件以及药物结构解析常用波谱等,对培

培养学生自主学习习惯、确认药物结构起到重要作用。第2章为化学制药,包括药物中间体的制备与工艺,还包括已上市药物的制备与工艺,共13个实验项目,涵盖了化学制药的实验技术、过程控制、药物的分离与纯化、质量控制以及工艺设计等内容。第3章为中药制药,包括传统的溶剂提取方法,如浸渍法、渗漉法、煎煮法、回流提取法、索氏提取法、水蒸气蒸馏法和升华法等。还包括现代生物提取法和新型技术提取法,如微波辅助提取法、超声波辅助提取法、膜分离提取法、高压脉冲法和超临界流体萃取法等,共10个实验项目。第4章为生物技术制药,包括生物技术制药中细菌的液体培养及菌种保存与复苏、氨基酸的纸色谱分离与鉴定、赖氨酸的发酵与工艺过程、蛋黄卵磷脂的提取及其工艺过程、胸腺肽的制备及其工艺、毛发中胱氨酸的提取与工艺过程以及酵母RNA的制备与工艺过程等内容,共7个实验项目。第5章为药物制剂,包括片剂与包衣片的制备、微型胶囊的制备、软膏剂的制备、栓剂的制备、注射剂的制备、混悬型液体制剂的制备、乳浊型液体制剂的制备和药物溶解度的测定以及相关工艺,共8个实验项目。

鉴于制药工程专业实验在大三第一学期开设,该专业学生已在大一和大二分别修读化学实验基本技能、基础化学实验(无机化学实验、有机化学实验、分析化学实验、物理化学实验和仪器分析实验)等实验课程,相关实验基础操作、基本仪器的使用和维护、实验基本素养已具备,因此本教材在编写过程中本着低碳、经济等思想,没有将制药基础实验和基本操作纳入编写内容。如读者在实验中遇到基础实验相关问题,可参考基础实验教材。

本教材凝结了重庆文理学院材料与化工学院化工与制药系全体教师多年教学的心得和经验,主编为孟江平博士、张进教授和徐强教授,副主编为唐英教授、吴飞跃、胡承波博士、郑士远教授、谢志刚教授和廖文利,参编人员为刘希东教授、李忠彬教授、罗燕博士、郑理博士、黄孟军博士、徐迪博士、徐峥、王维勋和李国强,全书由孟江平组织、协调和统稿。

本书编写过程中参考和引用了相关教材的实验项目,在保证原实验项目特色的前提下,对内容有所改进,在此特向相关作者表示衷心感谢。唐思嘉、黄鑫、王转晴和杨梅对本书的文字校对做了大量工作,在此表示诚挚的谢意。

本书编写得到了重庆文理学院校本教材项目(XBJY201415)和环境材料与修复技术重庆市重点实验室的资助。同时,重庆文理学院材料与化工学院全体教师对本书的编写给予了很大的关心与帮助,在此表示感谢。本书的顺利出版,还得到了阿拉丁、华威锐科等单位的大力支持,特别是阿拉丁马亭女士和华威锐科韦晨女士对本书的编写给予了大力支持,在此一并表示真诚的谢意。

本书编写过程中,得到了化学工业出版社和相关院校同行专家的鼓励与支持,在此深表谢意。

由于笔者的水平有限和经验不足,书中不当之处在所难免,恳请广大读者批评指正,敬请提出宝贵意见。

编者

2015年6月

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 实验基本规则	1
1.2 实验室安全及绿色实验素养	2
1.3 新药的临床研究	3
1.4 实验记录及报告	5
1.5 文献检索与辅助软件	7
1.6 药物结构解析常用波谱	10
第 2 章 化学制药	28
2.1 阿司匹林的合成及其工艺过程	28
2.2 丙二酸亚异丙酯合成及其工艺过程	31
2.3 L-抗坏血酸钙的制备及其工艺过程	32
2.4 盐酸萘替芬的合成及其工艺过程	34
2.5 N-苄基乙酰苯胺的合成及其工艺过程	36
2.6 消炎痛的制备及结构确认	38
2.7 美沙拉嗪的制备及其生产工艺过程	41
2.8 贝诺酯的合成及其生产工艺过程	43
2.9 苯妥英钠的合成及其生产工艺过程	45
2.10 (R)-四氢噻唑-2-硫酮-4-羧酸的合成	47
2.11 水杨酰苯胺的制备及其生产工艺过程	49
2.12 4-氨基-1,2,4-三唑-5-酮的制备及其生产工艺过程	51
2.13 安乃近中间体吡唑酮的制备及其生产工艺过程	53
第 3 章 中药制药	57
3.1 葛根中异黄酮类化合物的提取、分离与鉴定	57
3.2 白芷中香豆素的提取及其生产工艺过程	60
3.3 黄芪多糖的提取、含量测定与生产工艺过程	62
3.4 苦参中生物碱类成分的提取、分离、鉴定与生产工艺过程	64

3.5	槐花米中芦丁的提取、分离与鉴定及其生产工艺过程	67
3.6	川黄柏中黄连素的提取、分离及生产工艺过程	70
3.7	柚皮中黄酮类化合物的提取、分离、含量测定及生产工艺过程	72
3.8	茶叶中咖啡因的提取、分离及工艺过程	76
3.9	辣椒红素的提取、分离及工艺过程	79
3.10	大枣中多糖的提取及工艺过程	81
第4章	生物技术制药	85
4.1	细菌的液体培养及菌种保存与复苏	85
4.2	氨基酸的纸色谱分离与鉴定	87
4.3	赖氨酸的发酵与工艺过程	89
4.4	蛋黄卵磷脂的提取及其工艺过程	91
4.5	胸腺肽的制备及其工艺过程	94
4.6	毛发中胱氨酸的提取与工艺过程	95
4.7	酵母 RNA 的制备与工艺过程	98
第5章	药物制剂	101
5.1	片剂与包衣片的制备	101
5.2	微型胶囊的制备	106
5.3	软膏剂的制备	109
5.4	栓剂的制备	112
5.5	注射剂的制备	116
5.6	混悬型液体制剂的制备	121
5.7	乳浊型液体制剂的制备	125
5.8	药物溶解度的测定	129
参考文献		132

第1章

绪 论

1.1 实验基本规则

(1) 学生实验前必须认真预习,并写好预习报告,进入实验室须带预习报告,经指导教师检查同意后方可进行实验。

(2) 必须穿好实验服,佩戴护目镜,不得穿拖鞋、短裤等进入实验室。

(3) 严格按照实验分组进行实验,不得擅自调整分组。遵守上课时间,不得无故迟到、缺席。有事、有病要按照学校相关规定请假。

(4) 实验前检查、清理好所需的仪器、用具。如有缺损,应立即向指导教师报告,不得自己任意乱拿乱用。

(5) 遵守课堂纪律,保持安静整洁的实验环境。

(6) 严禁在实验室吸烟、吃东西、随地吐痰、乱扔脏物、大声喧哗。

(7) 使用电源时,严禁带电接线或拆线,务必经过教师检查线路后才能接通电源,实验后要切断电源。

(8) 爱护仪器,严格按仪器说明书或操作规程操作。仪器用具发生故障、损坏或丢失等特殊情况,应立即向指导教师报告。严禁擅自拆卸、搬弄仪器。有损坏仪器,应做出书面检查,等候处理。公用工具用完后应立即归还原处。

(9) 实验中要注意安全,如仪器设备出现异常气味、打火、冒烟、发热、响声、振动等现象,应立即切断电源,关闭仪器,并向指导教师报告。

(10) 实验中若发生触电等人身伤害,应保持镇定并立即切断电源,马上向指导教师报告,以便采取相应措施。

(11) 实验中要注意节约使用实验材料。

(12) 做完实验,学生应负责将仪器整理还原,桌面、凳子收拾整齐,经教师审查测量数据和仪器还原情况并同意后,方可离开实验室。

(13) 实验室中任何仪器用具不得带出实验室。

(14) 每次实验后,由值日学生打扫卫生并协助指导教师收集和整理仪器。

(15) 实验报告应在实验指导教师规定的时间内交到实验室。

1.2 实验室安全及绿色实验素养

1.2.1 实验室安全

为确保人身和财产安全,维护正常的实验教学秩序,实验人员应注意以下安全。

(1) 安全用电

- ① 用电线路和配置应由专业人员安装、维修和检查,不得私自随意拉接。
- ② 专线专用,杜绝超负荷用电。
- ③ 使用烘箱、电炉、马弗炉等高温电器要使用专用插座,并有专人看守。
- ④ 恒温箱需经长时间试用、检查,确定确实恒温后方可过夜使用。
- ⑤ 不用电器时,必须拉闸断电或拔下插头。
- ⑥ 保险丝烧坏要查明原因,更换保险丝要符合规格,或找专业维修人员更换。
- ⑦ 经常检查电路、插头、插座,发现破损立即维修或更换。
- ⑧ 不得使用湿抹布擦洗插座、电源开关等。

(2) 防火防爆

- ① 实验中经常使用易燃易爆有机试剂,因此,实验室严禁使用明火。
- ② 易燃、易爆物品要远离火源。必须加热处理的,应有专人监护。
- ③ 易燃、易爆药品操作应符合操作规范。
- ④ 易燃、易爆及有毒物品实行双人、双锁专柜管理,领用时需经实验室负责人签字批准。

⑤ 超高压汞灯在通电及断电后的 20min 内,不得检修和撞击,以防爆炸。

⑥ 实验室要有消防器材,并保证人人会用。

(3) 用水安全

① 水槽内不许存放、丢弃任何杂物。用水完毕后随时关闭水龙头。需长时间流水冲洗者,必须留人监护。

② 自来水发生泄漏时,应立即报告指导教师或找专人及时进行修理。

③ 离开实验室前,必须检查水、电、气,确保安全后方可离开。

(4) 污染物处理安全

① 有害、有毒气体不得任意排放,必须经过特殊处理,如化学转化、吸附分离等手段,确保无污染后才能通过通风橱排放。

② 有毒物品的空容器瓶、包装物和废弃物,应统一处理,不得随意乱扔、乱倒或当废品出售。

③ 废液应进行分类处理和存放,不得将废液随意倒入水槽。

④ 不同废液应分类收集在相应的废液桶中,并贴好相应标签,标签上应注明强酸、强碱、有机废液、无机废液等字样。废液桶收集离桶口 5cm 时停止收集。

1.2.2 绿色实验素养

实验教学中所用试剂大多数会对人体健康和环境造成危害和污染,甚至有的是剧毒物

质。众所周知，环境问题和资源短缺，特别是近年来的“雾霾”，已成为威胁人类生存的严重问题。绿色化学是当代化学的一个重要前沿，21世纪是绿色化学时代。在实验教学中，要更新传统观念，始终将“绿色化学”与“环境友好”以及“节约型”思想贯穿于整个实验教学体系中，通过微量化学实验教学和绿色化学实验教学，培养学生的绿色化学实验素养。

在绿色化学实验教学思想的指导下，通过溶剂回收再使用、废弃资源再利用等措施，培养学生热爱环境、热爱自然、节约资源的绿色化学素养，进而培养学生在学习、生活和工作中的环保、节约思想以及对社会的责任心。

(1) 节约实验药品，不得随意丢弃药品，洒落的药品要及时处理，以免污染环境。

(2) 玻璃碎渣应收集在纸盒或塑料瓶中，封闭后，贴上标签，并注明“碎玻璃渣，小心划手”字样。不能用毛巾擦拭玻璃碎渣，以免对他人造成伤害。

(3) 有机溶剂应进行重蒸，回收利用。

(4) 无机酸碱废液应根据性质，用相应的碱酸废液进行中和处理。

(5) 水银温度计不慎打碎后，洒落的水银要收集，并在洒落处用硫黄处理，并保持通风，以免汞蒸气的挥发带来危害。

(6) 节约用水，不浪费水资源。

1.3 新药的临床研究

1.3.1 新药临床前研究

国家食品药品监督管理局《药品注册管理办法（修改草案）》规定：为申请药品注册而进行的药物临床前研究，包括药物的合成工艺、提取方法、理化性质及纯度、剂型选择、处方筛选、制备工艺、检验方法、质量指标、稳定性、药理、毒理、动物药代动力学等研究等。中药制剂还包括原药材的来源、加工及炮制等的研究；生物制品还包括菌毒种、细胞株、生物组织等起始原材料的来源、质量标准、保存条件、生物学特征、遗传稳定性及免疫学的研究等。

药物临床前研究应当执行有关管理规定，其中安全性评价研究必须执行《药物非临床研究质量管理规范》，并在获得《药物非临床研究质量管理规范》认证的机构进行。

药物研究机构应当具有与试验研究项目相适应的人员、场地、设备、仪器和管理制度，并保证所有试验数据和资料的真实性；所用实验动物、试剂和原材料应当符合国家有关规定和要求。

申请人委托其他机构进行药物研究或者进行单项试验、检测、样品的试制等，应当与被委托方签订合同，并在申请注册时予以说明。申请人对申报资料中的药物研究数据的真实性负责。

单独申请注册药物制剂的，研究用原料药必须具有药品批准文号、《进口药品注册证》或者《医药产品注册证》，且必须通过合法的途径获得。研究用原料药不具有药品批准文号、《进口药品注册证》或者《医药产品注册证》的，必须经国家食品药品监督管理局批准。

药品注册申报资料中有境外药物研究机构提供的药物试验研究资料的，必须附有境外药物研究机构出具的其所提供资料的项目、页码的情况说明和证明该机构已在境外合法登记的

经公证的证明文件。国家食品药品监督管理局根据审查需要组织进行现场核查。

药品监督管理部门可以要求申请人或者承担试验的药物研究机构按照其申报资料的项目、方法和数据进行重复试验，也可以委托药品检验所或者其他药物研究机构进行重复试验或方法学验证。

药物研究参照国家食品药品监督管理局发布的有关技术指导原则进行，申请人采用其他评价方法和技术的，应当提交证明其科学性的资料。

申请人获得药品批准文号后，应当按照国家食品药品监督管理局批准的生产工艺生产。药品监督管理部门根据批准的生产工艺和质量标准对申请人的生产情况进行监督检查。

1.3.2 新药的临床研究

药物的临床试验（包括生物等效性试验），必须经过国家食品药品监督管理局批准，且必须执行《药物临床试验质量管理规范》。

新药的临床试验分为Ⅰ期、Ⅱ期、Ⅲ期、Ⅳ期。

Ⅰ期临床试验：初步的临床药理学及人体安全性评价试验。观察人体对于新药的耐受程度和药物代谢动力学，为制订给药方案提供依据。

Ⅱ期临床试验：治疗作用初步评价阶段。其目的是初步评价药物对目标适应证患者的治疗作用和安全性，也包括为Ⅲ期临床试验研究设计和给药剂量方案的确定提供依据。此阶段的研究设计可以根据具体的研究目的，采用多种形式，包括随机盲法对照临床试验。

Ⅲ期临床试验：治疗作用确证阶段。其目的是进一步验证药物对目标适应证患者的治疗作用和安全性，评价利益与风险关系，最终为药物注册申请的审查提供充分的依据。试验一般应为具有足够样本量的随机盲法对照试验。

Ⅳ期临床试验：新药上市后应用研究阶段。其目的是考察在广泛使用条件下的药物的疗效和不良反应，评价在普通或者特殊人群中使用的利益与风险关系以及改进给药剂量等。

新药临床研究的病例数应符合统计学要求。各类新药视类别不同进行Ⅰ期、Ⅱ期、Ⅲ期、Ⅳ期临床试验。某些类别的新药可仅进行生物等效性试验。

生物等效性试验，是指用生物利用度研究的方法，以药代动力学参数为指标，比较同一种药物的相同或者不同剂型的制剂，在相同的试验条件下，其活性成分吸收程度和速度有无统计学差异的人体试验。

药物临床试验的受试例数应当符合临床试验的目的和相关统计学的要求，并且不得少于本办法附件规定的最低临床试验病例数。罕见病、特殊病种等情况，要求减少临床试验病例数或者免做临床试验的，应当在申请临床试验时提出，并经国家食品药品监督管理局审查批准。

在菌毒种选种阶段制备的疫苗或者其他特殊药物，确无合适的动物模型且实验室无法评价其疗效的，在保证受试者安全的前提下，可以向国家食品药品监督管理局申请进行临床试验。

药物临床试验批准后，申请人应当从具有药物临床试验资格的机构中选择承担药物临床试验的机构。

临床试验用药物应当在符合《药品生产质量管理规范》的车间制备。制备过程应当严格执行《药品生产质量管理规范》的要求。

申请人对临床试验用药物的质量负责。

申请人可以按照其拟定的临床试验用样品标准自行检验临床试验用药物，也可以委托本办法确定的药品检验所进行检验；疫苗类制品、血液制品、国家食品药品监督管理局规定的其他生物制品，应当由国家食品药品监督管理局指定的药品检验所进行检验。

临床试验用药物检验合格后方可用于临床试验。

药品监督管理部门可以对临床试验用药物抽查检验。

申请人在药物临床试验实施前，应当将已确定的临床试验方案和临床试验负责单位的主要研究者姓名、参加研究单位及其研究者名单、伦理委员会审核同意书、知情同意书样本等报送国家食品药品监督管理局备案，并抄送临床试验单位所在地和受理该申请的省、自治区、直辖市药品监督管理部门。

申请人发现药物临床试验机构违反有关规定或者未按照临床试验方案执行的，应当督促其改正；情节严重的，可以要求暂停或者终止临床试验，并将情况报告国家食品药品监督管理局和有关省、自治区、直辖市药品监督管理部门。

申请人完成临床试验后，应当向国家食品药品监督管理局提交临床试验总结报告、统计分析报告以及数据库。

药物临床试验应当在批准后3年内实施。逾期未实施的，原批准证明文件自行废止；仍需进行临床试验的，应当重新申请。

临床试验过程中发生严重不良事件的，研究者应当在24小时内报告有关省、自治区、直辖市药品监督管理部门和国家食品药品监督管理局，通知申请人，并及时向伦理委员会报告。

1.4 实验记录及报告

学生进行实验前，必须进行实验预习，认真阅读实验教材，查找与实验相关的文献资料，认真书写实验预习报告。实验过程中，学生须认真观察实验现象，并做好详细记录，实验原始记录不得涂改。实验结束后，在对实验数据分析的基础上，总结实验结果，书写实验报告。

相关报告和记录格式如下。

实验预习报告

实验项目：_____

学生姓名：_____ 年级：_____ 专业：_____ 日期：_____

实验目的：_____

实验原理：_____

实验仪器与药品：_____

实验步骤：_____

注意事项：_____

实验原始记录

实验项目：_____

学生姓名：_____ 年级：_____ 专业：_____ 日期：_____

实验地点：_____ 实验环境温度：_____ 合作者姓名：_____ 指导讲师：_____

实验装置：_____

实验操作记录：

时间	实验操作	现象记录、数据及分析	备注

实验报告

实验项目：_____

学生姓名：_____ 年级：_____ 专业：_____ 日期：_____

实验地点：_____ 实验环境温度：_____ 合作者姓名：_____ 指导讲师：_____

实验目的：_____

实验原理：_____

实验仪器与药品：_____

实验步骤：_____

结果与讨论：_____

工艺过程： _____

注意事项： _____

思考题： _____

1.5 文献检索与辅助软件

文献检索是进行科学研究、生产实践等必须掌握的手段和技能，是每个学生、研究者和科技工作者应具备的能力之一。现简要介绍一下常用数据库和辅助软件。

1.5.1 常用数据库介绍

(1) 中国知网 (CNKI)

CNKI (China National Knowledge Infrastructure) 是由清华同方光盘股份有限公司组织实施的中国知识基础设施工程，旨在提高国家知识和技术的创新能力，增强国际竞争力，以最简单的方式传承人类数千年的文明，以最快捷的方式遍访人类数千年的知识资源，实现知识资源的共建共享。

CNKI 通过与期刊界、出版界及各内容提供商达成合作，已经发展成为集期刊、博士论文、硕士论文、会议论文、报纸、工具书、年鉴、专利、标准、国学、海外文献资源为一体的、具有国际领先水平的网络出版平台。中心网站的日更新文献量达 5 万篇以上。CNKI 提供初级检索、高级检索和专业检索三种检索功能，读者可根据情况选择检索功能。读者可通过全文、主题、篇名、作者、单位、关键词、摘要、参考文献、中图分类号和文献来源进行检索文献。

(2) 万方数据库 (WANFANG DATA)

万方数据资源系统是中国科技信息研究所、万方数据集团公司开发的网上数据库联机检索系统。包括科技信息子系统、商务信息子系统和数字化期刊子系统三个子系统。其中，科技信息子系统汇集科技文献类、标准及法规类、科技动态类、机构和名人类、成果与专利类以及工具书类数据库近百种，信息总量达 1100 多万条；商务信息子系统包括工商资讯、成果与专利、经贸信息、咨询服务等内容，其主要产品《中国企业、公司及产品数据库》收录 96 个行业近 20 万家企业的详细信息；数字化期刊子系统集纳了理、工、农、医、人文五大学科 70 余个类目的 7600 种期刊。

万方数据库检索方式如下。

① 数据库总览和选择数据库

进入万方数据库系统后，可以首先在“科技信息子系统”中的“资源总览”页面浏览全部数据库，系统将全部 120 多个数据库划分为 12 个类目——学位论文、会议文库、科技文

献、成果专利、科技名人、政策法规、中外标准、科技机构、中外期刊、商务与贸易、台湾数据库和其他。

读者可根据需要选择单个数据库检索，点击数据库名即可以进入简单检索页面。每个数据库的检索根据数据库的特点，略有不同。

② 分类浏览检索

在系统中称为“分类检索”，即按学科浏览和检索，进入万方数据库主页的“检索中心”即可找到该功能。分类检索提供的分类浏览以《中国图书馆图书分类法》为基础，将全部数据库划分成工业、农业、医药和其他四大类。

(3) 维普期刊资源整合服务平台

维普期刊资源整合服务平台是维普资讯推出的中文科技期刊资源一站式服务平台，是从单纯的全文保障服务延伸到引文、情报等服务的产品。该平台服务贯穿读者对期刊资源使用需求的各个环节，提供多层次、纵深度的集成期刊文献服务。

① 期刊文献检索

提供中文期刊的检索查新，检索入口——题目、关键词、机构、作者等，新增文献传递、检索历史、参考文献、基金资助、期刊被知名国内外数据库收录的最新情况查询、查询主题学科选择、在线阅读、全文快照、相似文献展示等功能。

② 文献引证追踪

运用科学计量学中的引文分析方法，对文献之间的引证关系进行深度数据挖掘，除提供基本的引文检索功能外，还提供基于作者、机构、期刊的引用统计分析功能，可用于课题调研、科技查新、项目评估、成果申报、人才选拔、科研管理、期刊投稿等用途。

③ 科学指标分析

提供我国各省市地区、高等院校、科研院所、医疗机构、各学科专家学者等的论文产出和影响力，以学科领域为引导，揭示我国近10年300个细分学科最受关注的研究成果，适用于课题调研、科技查新、项目评估、成果申报等用途。

(4) Elsevier ScienceDirect

荷兰爱思唯尔(Elsevier)出版集团是全球最大的科技与医学文献出版发行商之一，已有180多年的历史。ScienceDirect系统是Elsevier公司的核心产品，自1999年开始向用户提供电子出版物全文的在线服务，包括Elsevier出版集团所属的2500多种同行评议期刊和11000多种系列丛书、手册及参考书等，涉及四大学科领域(物理学与工程、生命科学、健康科学、社会科学与人文科学)，数据库收录全文文章总数已超过1200万篇。

(5) Wiley Online Library

Wiley Online Library是2007年由Blackwell出版社与Wiley的科学、技术及医学业务合并而成。Wiley Online Library与超过750个非赢利学协会合作，出版1500余种同行评审的学术期刊和书籍，涵盖科学、技术、医学、社会科学及人文科学等各领域。包括化学、医学、护理、口腔、生命科学、物理、工程、农业、兽医学、食品科学、心理、商业、经济、社会科学、艺术、人类学等多个学科。

(6) RSC数据库

英国皇家化学学会(Royal Society of Chemistry, RSC)，是一个国际权威的学术机构，是化学信息的一个主要传播机构和出版商，其出版的期刊及资料库一向是化学领域的核心期刊和权威性的资料库。每年组织几百个化学会议。该协会成立于1841年，是一个由约4.5

万名化学研究人员、教师、工业家组成的专业学术团体。

RSC 期刊大部分被 SCI 和 MEDLINE 收录, 并且是被引用次数最多的化学期刊。RSC 电子期刊与资料库主要以化学为核心及其相关主题, 包括分析化学、物理化学、无机化学、有机化学、生物化学、高分子化学、材料科学、应用化学、化学工程和药物化学。

(7) ACS 数据库

美国化学学会 (American Chemical Society, ACS) 成立于 1876 年, 现已成为世界上最大的科技协会, 其出版的 34 种期刊涵盖了 24 个领域的文献, 内容涉及化学、药学、植物学、农业学、材料学、环境工程、科学训练、燃料与能源以及生物科技等诸多学科。ACS 的期刊被 ISI 的 Journal Citation Report (JCR) 评为“化学领域中被引用次数最多之化学期刊”。

1.5.2 辅助软件及常用网站

(1) 化学结构式绘制

① ChemDraw

ChemDraw 为当前最常用的结构式编辑软件, 可编辑化合物的结构式、化学反应方程式、化工流程图、简单的实验装置图等。其 ultra 版本还可以预测分子的常见物理化学性质, 如熔点、生成热等, ChemDraw 对化学结构按 IUPAC 原则命名, 可预测化合物的质谱和核磁图谱等波谱。

② ChemWindow

ChemWindow 最突出的特点是与光谱的结合, 它的 6.5 Spectroscopy 版本包括了一个约 5 万张¹³C NMR 的数据库, 其预测更加精确。ChemWindow 除了根据化合物的结构预测¹³C NMR 谱外, 还能预测化合物的红外图谱 (IR) 和质谱 (MS) 等, 更可以读入标准格式的核磁 (NMR)、红外 (IR)、拉曼 (Raman)、紫外 (UV) 及色谱图。

③ Chem3D

Chem3D 可用来绘制或模拟化合物的三维结构。Chem3D 和 ChemDraw 一样, 都是 ChemOffice 的组成部分, 它能很好地同 ChemDraw 一起协同工作, ChemDraw 上画出的二维结构式可以正确地自动转换为三维结构。它的 ultra 版本还包括了一个很好的半经验量子化学计算程序 MOPAC 97, 并能与著名的从头计算程序 Gaussian98 连接, 作为它的输入、输出界面。能够以三维的方式显示量子化学计算结果, 如分子轨道和电荷密度分布等。

(2) 数据处理软件

① Microsoft Office Excel

Excel 电子表格软件是人们日常工作中必不可少的数据管理、处理软件。Excel 中大量的公式函数可以应用选择, 使用 Microsoft Office Excel 可以执行计算、分析信息并管理电子表格或网页中的数据信息列表与数据资料图表制作, 可以实现许多方便的功能。

② Origin

Origin 为 OriginLab 公司出品的较流行的专业函数绘图软件, 该软件简单易学、操作灵活、功能强大, 既可以满足一般读者的制图需要, 也可以满足高级读者数据分析、函数拟合的需要。

Origin 具有两大主要功能——数据分析和绘图。Origin 的数据分析主要包括统计、信号处理、图像处理、峰值分析和曲线拟合等各种完善的数学分析功能。准备好数据后, 进行