

图解药剂学

4
2

中国医药科技出版社

图 解 药 剂 学

(日)官崎正三等 编著

徐 麟等 译

中 国 医 药 科 技 出 版 社

内 容 提 要

本书从原理出发阐述物理药剂学、生物药剂学、药物新制剂和临床药学等药剂学新进展的各个方面。以文字对照图解进行论述,适合从事药剂工作的生产、科研、教学和医院药房工作者参考阅读。

图 解 药 剂 学

(日)宫崎正三等 编著

徐麟等 译

根据日本南山堂 1984 年第 1 版翻译

中国医药科技出版社 出版
(北京西直门外北礼士路甲 38 号)
毕升信息处理服务部 激光排版
煤炭工业出版社 印刷厂印刷
新华书店北京发行所 发行

*

开本 $787 \times 1092\text{mm}^1/16$ 印张 $16^{1/2}$

字数 382 千字 印数 1—3,500

1989 年 12 月第 1 版 1989 年 12 月第 1 次印刷

ISBN 7-5067-0024-7/ R · 0025

定价 9.00 元

原著作者

东日本学园大学副教授	宫崎正三
东日本学园大学教授	高田昌彦
明治药科大学副教授	野吕俊一
城西大学副教授	森本雍宪
明治药科大学教授	上杉 孝

译校者(按执笔顺序):

刘 健	田会荣	乔太生
邵炳符	张 惠	徐 麟
孙玉书	王 序	高俊德
王义雄	岳来发	侯惠民

序 · 言

近年来,药剂学在取得了令人注目的进展的同时还将广泛的领域作为研究对象。特别是生物药剂学用药物动力学(Pharmacokinetics)的观点来研究和认识药物详细的体内动态,因而能设计出最佳给药剂型,从而产生新的制剂。此外,还出现了使用高分子科学的进步所产生的生体适应性好的新高分子材料的给药系统(drug delivery system,参阅第六章)。

本书出版的目的是祈望对正在学习药学的学生们,能对药剂学上述现状和进步有充分的认识,并且将来在该领域里积极开展工作。

本书采用了许多最近新的领域所取得的研究结果,尽可能系统地解释药剂学的内容,用基本的方法记录其基础原理,确实理解这些内容,就可以正确认识生物体内的药物动态了。并且,本书尽可能地提供和内容相对应的具体图表,以帮助理解,在每一章后都附有习题,给学生们以思考的时间。新颖的《图解药剂学》即以此特点编集而成,对本书中的不妥及错处,请读者给予批评。

本书的编辑出版,承蒙南山堂铃木正二社长,岩井一夫的关照,对编辑部的全体人员的厚意以及提供大量资料的田中淳子和对原稿进行整理的城西大学药学部的大桥智子表示深深的感谢。

原编者
1984年7月

译本代序言

翻阅日本宫崎正三等人新编的《图解药剂学》一书,颇觉内容新,该书从理论出发阐述物理药剂学、生物药剂学、药物新制剂和临床药学等药剂学新进展的各个方面,并以文字对照图解进行论述,既明了又易于理解。该书对从事药剂学教学、科研、生产、临床等方面工作的广大药剂工作者有很大参考价值。有鉴于此,遂组织药剂学几位专家进行翻译、校对。承蒙中国医药科技出版社的大力支持,给予出版,谨此一并致谢。

王肇仪

1987年于北京

目 录

第一章 溶解现象和溶液(宫崎正三、高田昌彦)刘 健译 乔太生校

一、溶液和溶解	2	(4) 无水物	17
1. 溶液	2	(5) 形成盐	17
2. 溶液的浓度	2	4. 溶解速度测定法	18
3. 溶解现象	3	四、助溶	20
4. 分子间的作用力	5	1. 添加助溶剂	20
(1) 范德华(Van der Waals)力	5	2. 添加表面活性剂	21
(2) 氢键结合	5	3. 混合溶媒	21
(3) 疏水结合	5	4. 引入亲水基	23
二、溶解度	6	5. 阻止溶解	23
1. 温度和溶解度	6	五、溶液的性质	25
2. pH值与溶解度	8	1. 溶液的依数性	25
三、溶解速度	9	(1) 蒸气压下降	25
1. 溶解速度公式	10	(2) 沸点上升	26
(1) Noyes-Whitney 公式	10	(3) 冰点下降	26
(2) Nernst-Noyes-Whitney 公式	11	(4) 渗透压上升	27
(3) Hixon-Crowell 公式	12	2. 等渗溶液和等渗化	28
2. 影响溶解速度的外因	12	(1) 冰点下降法	28
(1) 温度	12	(2) 氯化钠价法	28
(2) 搅拌	12	(3) 容积价法	29
(3) 溶媒的粘度	12	(4) 图表法	30
3. 药物的物理化学因素对溶解速度的影		3. 溶液的 pH 值及缓冲溶液	30
响	12	(1) 溶液的 pH 值	30
(1) 粒径(表面积)	12	(2) pH 值与 pKa	31
(2) 多晶型	13	(3) 缓冲溶液	33
(3) 无晶型(非晶质, 不定型, 非晶体)	14	练习题	34

第二章 表面活性剂和乳化机制(野吕俊一) 田会荣译 孙玉书校

一、表面活性剂的作用	38	5. Krafft 点和昙点	42
1. 表面活性	38	二、表面活性剂的种类和用途	43
2. 表面张力测定法	38	1. 表面活性剂的分类法	43
3. 胶团	40	2. 离子型表面活性剂	43
4. 可溶化现象	41	3. 非离子型表面活性剂	43

4.天然存在的表面活性剂	45	四、乳化制品(软膏、霜剂)的配制法及其稳定性	53
5.用于药用的表面活性剂	45	1.乳化剂的添加法	53
三、最佳乳化剂的选择	46	2.乳化系软膏剂的配制法	53
1.HLB值法	46	3.乳化制品的稳定性	56
2.PIT法	50	练习题	58
3.乳剂类型的鉴别法	51		
4.乳化剂的选择条件	52		

第三章 粉体 (宫崎正三、高田昌彦)乔太生译 高俊德校

一、粒子的性质	62	二、粉体的性质	69
1.粒子的大小	62	1.充填性	69
(1)几何学的粒径	62	(1)孔隙	69
(2)有效粒径	63	(2)外观密度	69
(3)比表面积径	63	(3)外观比容积	70
2.粒径的测定方法	63	(4)孔隙率	70
(1)显微镜法	63	(5)缩减度	71
(2)筛选法	63	(6)充填性和粒径	71
(3)沉降法	64	2.流动性	71
(4)小孔通过法	65	(1)流动性(休止角)测定法	72
3.粒度分布	66	(2)流动性和粒径	73
(1)粒度分布图	66	3.粉体的润湿性	73
(2)平均粒径	67	(1)润湿现象	73
4.表面积的测定法	67	(2)润湿(接触角)的测定	75
(1)空气透过法	67	4.吸湿性	75
(2)气体吸附法	68	练习题	75

第四章 药物的稳定性 (宫崎正三、高田昌彦)邵炳符译 张惠校

一、用于药物稳定性反应速度的公式	78	三、固体制剂中的药物稳定性	88
1.一级反应	78	1.临界相对湿度	88
2.零级反应	79	2.Elder假说	90
3.二级反应	80	3.容器与稳定性	90
4.假一级反应	80	四、药物稳定化	92
二、溶液制剂中药物的稳定性	81	1.稳定的溶液条件(pH、缓冲液、离子强度、介电常数)的选择	93
1.pH的影响	81	2.形成络合物的稳定化	93
2.温度的影响	84	3.表面活性剂形成胶团的稳定化	94
3.氧的影响	86	4.形成包藏复合物的稳定化	95
4.光的影响	86	5.形成难溶性盐的稳定化	95
5.缓冲液、离子强度、介电常数的影响	88	6.低温保存	96

7. 临用时溶解	96	练习题	96
----------------	----	-----------	----

第五章 流变学(宫崎正三、高田昌彦) 张惠译 徐麟校

一、弹性及粘性	100	1. 混悬剂	111
1. 弹性变形	100	2. 软膏剂	111
2. 粘性流动(牛顿流动)	100	七、制剂用高分子	111
二、粘弹性	102	1. 高分子的结构和性质	111
1. 麦克斯韦模型	103	(1) 聚合和聚合度	111
2. Voigt(或 Kelvin) 模型	104	(2) 高分子的结构	113
三、非牛顿流动	105	(3) 高分子的分子量	113
1. 塑性流动	105	2. 制剂用高分子	114
2. 假塑性流动	106	(1) 天然高分子	114
3. 扩张性流动	106	(2) 半合成高分子	117
4. 假粘性流动	106	(3) 合成高分子	117
四、触变现象	106	3. 给药系统用高分子(医用高分子)	117
五、流变学的测定	107	(1) 体内非分解性高分子	117
1. 粘度的测定法	107	(2) 生物体内分解性高分子	118
2. 粘稠度的测定法	110	练习题	119
六、制剂的流变学	110		

第六章 新制剂 (森本雍宪) 徐麟译 田会荣校

一、靶指向性制剂	122	练习题	130
二、以全身作用为目的的制剂	126		

第七章 药物的吸收(森本雍宪) 孙玉书译 张惠校

一、给药部位	132	4. 食物及分泌物对消化道吸收的影响	145
二、药物的吸收机理	133	四、消化管吸收和药物的物理化学因素	147
1. 生物膜的构造和性质	133	1. 脂溶性和 pH 分配假说	147
2. 被动扩散	134	2. 消化管吸收和溶解速度	148
3. 主动转运	136	五、消化管以外的药物吸收	151
4. 促进扩散、间接转运	138	1. 从皮肤吸收	151
5. 其它的吸收机理	139	2. 从直肠吸收	153
三、消化管吸收和生物学因子	139	练习题	154
1. 消化管的构造	139		
2. 吸收部位的 pH	142		
3. 胃内容物的排空	144		

第八章 药物的体内分布 (森本雍宪) 邵炳符译 张惠校

一、体内分布及组织中的浓度	156	二、表观分布容积	158
---------------------	-----	----------------	-----

三、分布的机制	159	四、脑部的药物分布	163
1. 血液循环	159	五、胎儿的药物分布	165
2. 蛋白质的结合与分布	160	练习题	166

第九章 药物代谢 (上杉 孝) 张惠译 王义雄校

一、总论	168	(4) 其化的氧化酶	180
1. 关于药物代谢中的“药物”	168	2. 水解酶	180
2. 关于药物代谢中的“代谢”	168	3. 葡萄糖醛酸结合	181
3. 药物代谢的意义	168	4. 硫酸结合	182
4. 药物代谢研究的历史	168	5. 谷胱甘肽结合与硫醇尿酸结合	183
二、药物代谢的形式	169	6. 氨基酸结合	187
1. 极性化反应	169	7. 乙酰结合(乙酰基转移反应)	187
2. 药物代谢的反应型	169	8. 甲基结合(甲基转移反应)	189
3. 药物代谢对生理活性的影响	175	五、使药物代谢能变动的因素	189
三、药物代谢活性的体内分布	175	1. 内因性因素	189
1. 肝脏及其功能	177	(1) 个体差异	189
2. 肝细胞的微细结构	177	(2) 年龄差异	189
3. 药物代谢和内质网的关系	178	(3) 性别差异	191
4. 微粒体	178	(4) 种类差异	192
四、药物代谢酶反应各论	178	(5) 疾病因素的影响	193
1. 氧化	178	2. 外因性因素	193
(1) 细胞色素 P-450 系	178	(1) 诱导药物代谢酶的药物	193
(2) 含有核黄素的单氧化酶	179	(2) 药物代谢的阻碍物质	195
(3) 参与醇和醛的氧化酶	180	练习题	196

第十章 药物的排泄 (上杉 孝) 张惠译 徐麟校

一、肾排泄	198	2. 在胆汁排泄中必要的药物的分子量	204
1. 肾小球过滤	198	3. 胆汁排泄机制	206
2. 肾小管分泌	200	4. 药物与血浆蛋白质的结合对胆汁排泄的影响	207
3. 肾小管再吸收	200	5. 肝肠循环	207
4. 肾排泄功能的解析	202	三、其他排泄途径	208
(1) 肾小球过滤速度	202	练习题	208
(2) 药物的肾清除率	203		
二、胆汁排泄	204		
1. 由胆汁排泄的药物与其极性	204		

第十一章 药物动力学 (森本雍宪) 王序译 张惠校

一、单室模型	210	2. 生物半衰期	212
1. 分布容积	212	二、伴有吸收过程的单室模型	212

1. 分布容积	213	六、消除率	219
三、消除速度常数的求法	214	1. 组织消除率和固有消除率	219
四、双室模型	215	2. 全身清除率	220
五、线性及非线性隔室模型	216	七、给药计划	221
1. 线性模型	216	1. 快速静注的情况	222
2. 非线性模型	217	2. 经口给药的吸收过程	223
(1) 固有清除率的影响	217	3. 点滴恒速注射	224
(2) 蛋白结合率的影响	217	练习题	225

第十二章 临床药剂学 (森本雍宪) 张惠译 徐麟校

一、药品有效性的评价	227	二、药物治疗与血中浓度的监控	232
1. 同一名称的药品对治疗效果的不相同 性	227	1. 药物的血中浓度与药效、毒性	232
2. 生物利用度	229	2. 血药浓度监控的利用	233
		练习题	235
练习题解答	236		
附表: 药物的 pKa 值	248		
参考文献	251		

第一章 溶解现象和溶解

药品的溶液制剂,如表 1-1 所示有注射剂、滴眼剂及糖浆剂、配剂、柠檬水剂等内服制剂,在临床上广泛应用。要配制这些溶液制剂,应该科学地理解“溶解”这一现象及溶液的性质。对于难溶解的药物,要通过添加助溶剂和表面活性剂,或者合成溶解度大的衍生物等各种办法,使其易于溶解。

表 1-1 溶液制剂 (JPX)^①

制 剂(英语名)	内 容
酏 剂(elixirs)	含有芳香甜味的酒精透明内服液剂。
酊 剂(spirits)	用酒精或酒精和水的混合液来溶解挥发性药品的液剂。
糖浆剂(syrups)	含白糖溶液及其他类或甜味剂的医药品,呈较稠溶液或悬浊液等的内服液体制剂。
浸 剂、煎 剂 (infusions, decoctions)	将生药浸在精制水里浸出液剂。
注射剂(injections)	通过皮下、皮肤或粘膜直接注入体内的药品溶液、悬浊液、乳浊液及用时溶解或悬浊后使用的无菌制剂。
酊 剂(tinctures)	将生药浸在酒精或酒精和精制水的混合液中而制出的液剂。
滴眼剂(eye drops)	滴眼剂是药品的溶液、悬浊液或者用时溶解或悬浊后的,适用于结膜囊,并且是无菌配制的制剂。
芳香水剂(aromatic waters)	植物性芳香油和挥发性物质几乎达到饱和的澄明的水溶液。
柠檬水剂(limonades)	具有甜酸味的澄明内服液剂。
流浸膏剂(fluid extracts)	在一毫升生药的浸出液中含有一克生药的可溶性成分的液剂。
洗 剂(lotions)	药品在水性液体中微细均匀地分散,而制成用于皮肤涂布的外用液剂。

①JPX 是日本药局方第十版名称的缩写——译者注

溶解现象是给予生物体固体型制剂时的重要现象。在口服片剂或胶囊剂等固体剂型时,药物首先必须在消化管中溶解,然后才能被消化管吸收。此时的溶解速度将左右消化管的吸收速度及血中药物浓度(图 1-1)。特别当溶解过程为吸收的控制阶段的难溶性药物,由于结晶状态的不同吸收速度也不同。所以做为溶体制剂的基础,了解重要的药物溶解现象及溶解性质,在研制医药品和临床应用方面是重要的。

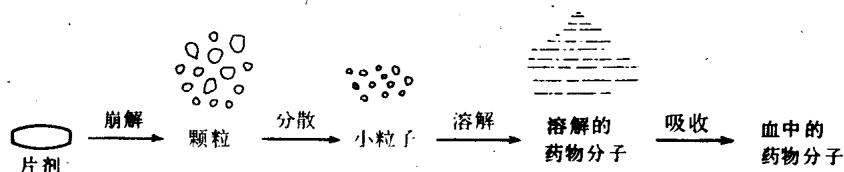


图 1-1 固型制剂(片剂)的溶解和吸收过程

一、溶液和溶解

1. 溶液

当在水中加入砂糖后搅动时,糖体就逐渐溶解(图 1-2),这就是砂糖粒子在水分子的作用下进入水中。这种砂糖分子和水分子互相混合的液体就是溶液(solution)。砂糖等被溶解物称为溶质(solute),水等溶解溶质的液体称为溶媒(solvent),砂糖溶解后的液体称为砂糖的水溶液(aqueous solution)。水是最常用的溶媒,酒精、丙二醇、甘油等也常用来作溶媒。

水和酒精混合时,因为两者都是液体,在成为溶液时,一般将量多者称为溶媒,量少者称为溶质。啤酒或威士忌中的水是溶媒,酒精是溶质。

根据溶质的种类不同,故有盐水之类的电解质溶液和糖溶液之类的非电解质溶液之分。

药品多数属于有机化合物,弱电解质,故在制剂方面弱电解质溶液是重要的。当溶质是高分子化合物时,显示出与一般药物(低分子)溶液不同的性质。这类溶液称为高分子溶液, (polymer solution), 详见第五章。

糖易溶于水,但在一定量的水中溶解度是有一定限度的。这种限度叫溶解度(solubility)。该溶液称为饱和溶液的。所谓饱和溶液即溶解的溶质与未溶解的溶质(固体)处于动态平衡时的溶液(图 1-3)。

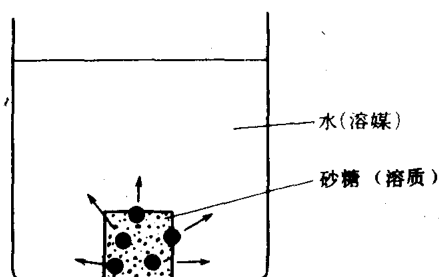


图 1-2 砂糖在水里的溶解

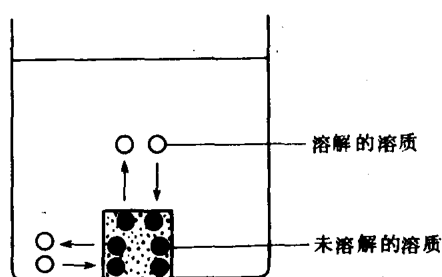


图 1-3 处于平衡态的饱和溶液

2. 溶液的浓度

所谓浓度是指在一定量的溶媒或溶液中溶解的物质质量,可用表 1-2 中的各种方法表示。

表 1-2 溶液浓度的表示法

名 称	记 号	内 容
克分子浓度	M	1 升溶液中所含溶质的克分子数
重量克分子浓度	m	1000 克溶媒中所溶解溶质的克分子数
当量浓度	N	1 升溶液中所含溶质的克分子当量
重量百分比	% (w / w)	100 克溶液中溶质的克分子数
重量 - 容量百分比	% (w / v)	100 毫升溶液中溶质的克分子数
容量百分比	% (v / v)	100 毫升溶液中溶质的毫升数
克分子分率	X	溶质、溶媒的克分子比对应于溶质溶媒的总克分子数

JPX 的通则中的用语是按下述来规定的。溶解性就是固体药品研成粉末后置于溶媒中,在 $20 \pm 5^{\circ}\text{C}$,每隔 5 分钟强烈振动 30 秒,如此在 30 分钟以内所溶解的程度。表 1-3 所列出的是溶解 1 克或 1 毫升溶液时所需要用的溶媒量。

表 1-3 表示溶解性的术语(JPX)

术 语	溶解 1g 或 1ml 溶质所需的溶媒量	对应的美国药典(USP)XX 版的术语
极易溶解	1ml 不到	very soluble
易溶	1ml 以上 10ml 不到	freely soluble
略溶	10ml 以上 30ml 不到	soluble
微溶	30ml 以上 100ml 不到	sparingly soluble
极微溶解	100ml 以上 1,000ml 不到	slightly soluble
几乎不溶或不溶	1,000ml 以上 10,000ml 不到	very slightly soluble
	10,000ml 以上	practically insoluble or insoluble

3. 溶解现象

象糖分子进入水分子中那样,溶质分子进入溶媒分子中形成溶液的过程即称为溶解(dissolution)。溶解过程如图 1-4 所示,可分为三个阶段。各阶段形成的难易,由溶质分子间(A-A)、溶媒分子间(B-B)及溶质分子和溶媒分子间(A-B)的相互作用的亲和力所决定。即 A-A 和 B-B 的亲和力之和大于 A-B 的亲和力时易溶,反之则难溶。

A-A、B-B、A-B 间的分子间的作用亲和力(分子间的力)又决定于各自的极性。所谓“相似者相溶”(like dissolves like),即指极性大的物质在极性大的溶媒中溶解,而极性小的物质则在极性小溶媒中溶解。例如:氯化钠(极性物质)在水中(极性物质)易溶解;而苯(非极性物质)在水中就不易溶解。又如:萘(非极性物质)在水中不溶解,而在苯中易溶解。

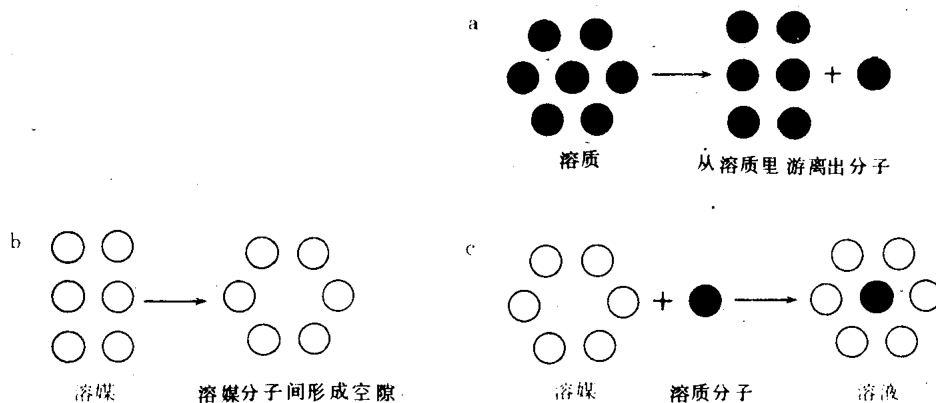


图 1-4 溶解的过程

氯化钠之类离子晶格的结晶放入水中时,如图 1-5 所示,极性大的水分子包围了 Na^+ 和 Cl^- ,破坏了离子间的结合从晶格中夺走了各离子。另一方面,萘在非极性性质的苯中易溶,此与水的极性分子相反。

所谓极性是由分子中的电荷分布是否均一来决定的,可用偶极矩介电常数(dipole

moment) (dielectric constant) 来表示。若分子内的电荷分布不均一,分子内将形成正极和负极,犹如磁铁存在正负两极,这种正负电荷离开中心所形成的相斥的两极的分子叫做偶极子。具有偶极子的分子叫极性分子(表 1-4)。另外,甲烷和苯之类电荷分布均一的分子叫做非极性分子。表 1-5 表示的是主要溶媒的介电常数。

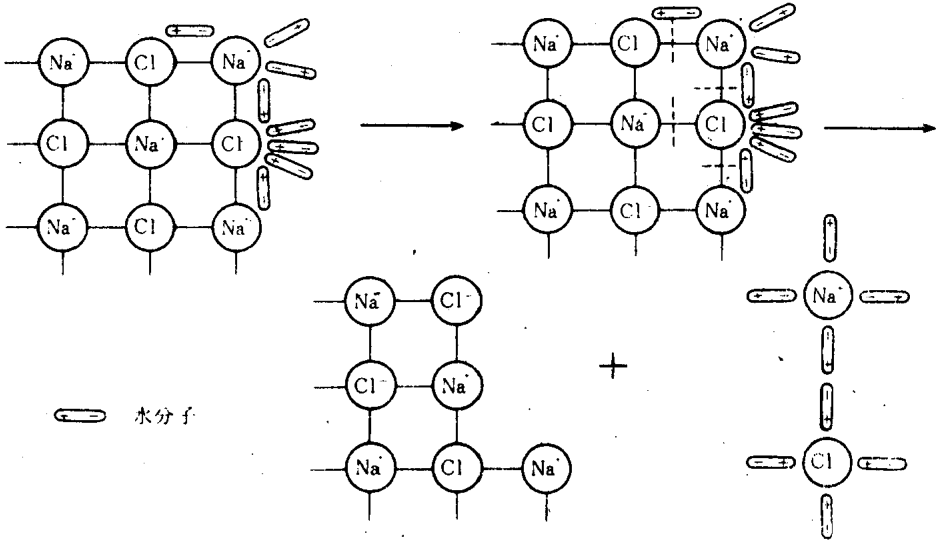


图 1-5 氯化钠结晶溶解

氮

表 1-4 极性分子与非极性分子

极性分子	非极性分子
 水 $\text{H}^+ \text{---} \text{O}^- \text{---} \text{H}^+$	 甲烷 $\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} \text{---} \text{C} \text{---} \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
 氨 $\begin{array}{c} \text{H}^+ \text{---} \text{N}^- \text{---} \text{H}^+ \\ \\ \text{H}^+ \end{array}$	 四氯化碳 $\begin{array}{c} \text{Cl} \\ \\ \text{Cl} \text{---} \text{C} \text{---} \text{Cl} \\ \\ \text{Cl} \end{array}$

表 1-5 溶媒的极性

溶 媒	介 电 常 数	极 性
水	80.4	极 性
甘油	43.0	
甲醇	33.7	
酒精	25.7	
丙酮	21.4	
醇	13.1	半极性
醋酸乙脂	6.4	
氯仿	4.8	
乙醚	4.3	非极性
苯	2.3	
四氯化碳	2.2	
植物油	2 ~ 4	

酒精具有介乎于极性和非极性分子之间的中间性质半极性,既溶于水也溶于苯。酒精溶于水是因为羟基与水分子相互作用(氢结合)的结果;溶于苯是因为乙烷基具有与苯分子相似的性质。

4. 分子间的作用力

下面根据溶质分子-溶质分子间, 溶媒分子-溶媒分子间及溶质-溶媒分子间的亲和力越强越易溶解, 反之则不易溶解. 所以有必要了解这些分子间的作用力. 当分子间的作用力小于共价键时, 其结合能就小. 分子间的作用力主要有以下几种:

(1) 范德华(Van der Waals)力

范德华力是以下三种偶极子间力的总称.

- 1) 偶极子-偶极子的力(定向效果)(orientation effect Keesom force)
- 2) 偶极子-感应偶极子间的力(感应效果)(induction force, Debye force)
- 3) 瞬间偶极子-感应偶极子间的力(分配效果 dispersion effect London force)

另外, 偶极子中一般存在着带有电荷(永久)的偶极子. 有由其它电荷影响而一时产生的感应偶极子, 还有因正负电荷瞬间不平衡而产生的瞬间偶极子.

(2) 氢键结合(hydrogen bond)

氢键是氢原子在氧和氮之类的负电性大的原子间, 形成的结合形式:



氢键作用在极性大的溶质-溶媒间, 显示强的分子间力. 这种力既可在分子间, 也可在分子内产生, 以水杨酸为例(图 1-6). 另外氢键多在蛋白质和碳水化合物等生物体的分子间和分子内, 与生物现象有着密切的关系.

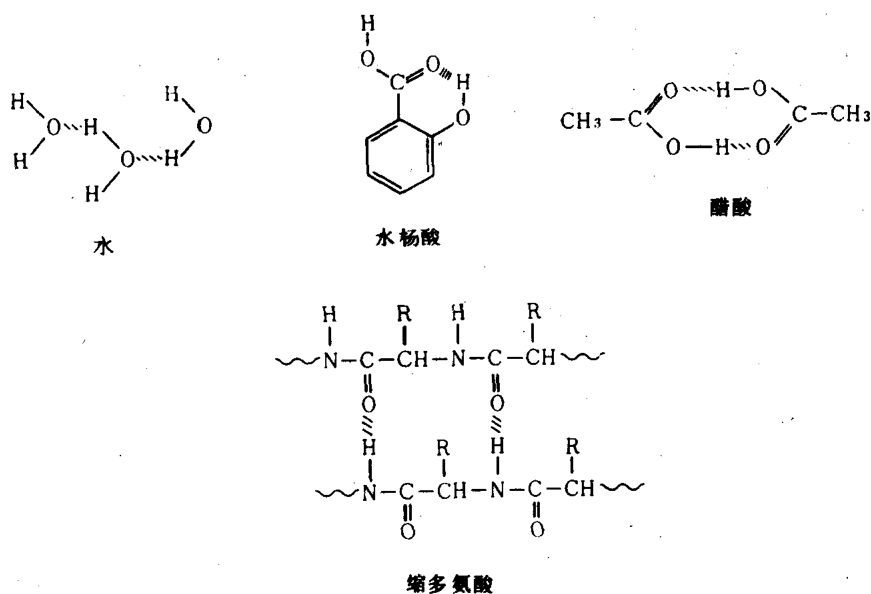


图 1-6 氢键结合

(3) 疏水结合(Hydrophobic bond)

疏水结合可以看作在难于形成与水分子相结合的疏水性基(烷基和苯基)间水溶液的相互作用. 这是因为疏水性基间的作用还不如氢键的水分子强, 故有疏水性基的溶质从水里排出而后结合形成稳定状态(图 1-7).

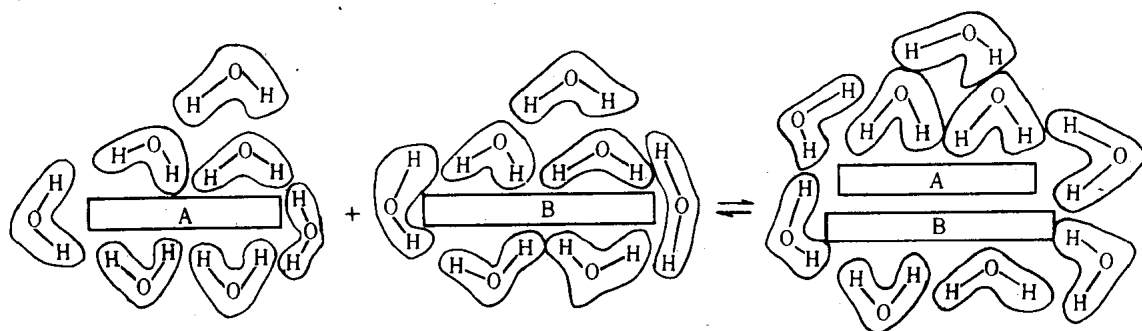


图 1-7 疏水结合

A, B 分子在水中平面和平面上的互相重叠

二、溶解度

溶解度因溶质不同而异, 相同的溶质, 也随溶媒的温度和压力的不同而变化。温度和压力的影响, 又视溶质是处于气态、液态还是固态而不同。在此介绍一下固体溶质的情况。固体药品的溶解度是在固相和液相处于共存平衡状态时的溶液浓度 (参见图 1-3)。

1. 温度和溶解度

固体于水的溶解度与气体的情形不同, 几乎不受压力的影响, 大多随温度的升高而增大。氯化钠之类的溶解度几乎不受温度升高的影响, 铬酸钾和氢氧化钾的溶解度则随温度的上升而减小。图 1-8 所表示的是溶解度和温度关系的溶解度曲线。

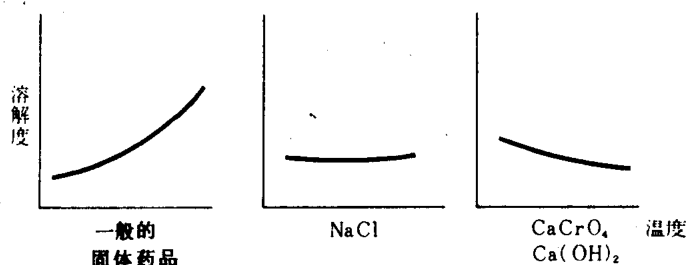


图 1-8 溶解度曲线

溶解度受温度影响, 可由溶解热 (heat of solution) 来决定。理想溶液 (相当于理想气体的溶液, 溶解时既无热变化也无容积变化) 在一定温度下的溶解度, 可由溶质的融点和溶解热, 进行理论计算来求得。现将固体 B 溶于 A 时的溶解度用 B_{mo} 克分子分率表示如下:

$$\ln X_B = -\frac{\Delta H_B}{R} \left(\frac{1}{T_B^m} - \frac{1}{T} \right) \quad (1-1)$$

式中的 ΔH_B 是固体 B 的融解热, R 是气体常数, T_B^m 是 B 的熔点。上式说明理想溶液在一定温度 T 时的固体溶解度, 取决于 B 的融解热 ΔH_B 和熔点 T_B^m , 与溶媒的性质无关。不过上式