

基础化学 在医药中的应用

编 著 武冬梅 史伟国

王凤芝 李敬芬

哈尔滨地图出版社

基础化学在医药中的应用

JICHU HUAXUE ZAI YIYAOZHONG DE YINGYONG

编 著 武冬梅 史伟国
王凤芝 李敬芬

哈尔滨地图出版社

• 哈尔滨 •

图书在版编目 (CIP) 数据

基础化学在医药中的应用/武冬梅等编著. —哈尔滨:
哈尔滨地图出版社, 2004. 12
ISBN 7-80529-987-0

I. 基... II. 武... III. 医用化学 - 基本知识
IV. R313

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2004) 第 135922 号

哈尔滨地图出版社出版、发行

(地址: 哈尔滨市南岗区测绘路 2 号 邮政编码: 150086)

佳木斯市四海印刷厂印刷

开本: 850 mm×1 168 mm 1/32 印张: 10.375 字数: 268 千字

2004 年 12 月第 1 版 2004 年 12 月第 1 次印刷

印数: 1~1 000 定价: 18.60 元

内 容 提 要

本书以基础化学理论及其与医药科学的关系为基础，较为系统地介绍了无机化学、有机化学理论及其在医药生产实践和科学研究中的成果。全书共分20章，第1章至第15章详细地介绍了与医药有关的化学基本理论，第16章至第20章有针对性地简述了化学在医学和药学领域的部分应用，综述了最新研究成果。

本书内容丰富，资料翔实，融科学性、知识性、系统性、实用性于一体，简明且针对性强。

本书可供化学、药学和相关边缘学科的工作者参考使用。

目 录

1 溶液.....	1
1.1 分散系的分类.....	1
1.2 溶液组成的部分表示方法.....	2
1.3 溶液的渗透.....	7
1.4 电解质溶液.....	10
1.5 缓冲溶液.....	22
2 化学反应速率.....	34
2.1 化学反应速率基本概念和理论.....	34
2.2 浓度对化学反应速率的影响.....	39
2.3 温度对化学反应速率的影响.....	42
2.4 催化剂对化学反应速率的影响.....	45
3 化学反应热力学及化学反应的方向和限度.....	48
3.1 第一定律.....	48
3.2 化学反应的方向和推动力.....	55
3.3 化学反应的限度.....	62
4 氧化还原与电极电势.....	72
4.1 原电池与电极电势.....	72
4.2 Nernst 方程.....	78
4.3 电极电势的应用.....	79
5 配位化合物.....	85
5.1 配合物的基本概念.....	85
5.2 配合物的化学键理论.....	90
5.3 配位平衡.....	94
5.4 螯合物.....	100
6 有机化合物概述.....	102

6.1	有机化合物和有机化学	102
6.2	有机化合物的特点	103
6.3	有机化合物的结构理论	104
6.4	有机化合物结构式表示方法	111
6.5	有机化合物的分类	113
7	开链烃	116
7.1	烷烃	116
7.2	烯烃	126
7.3	炔烃	134
8	环烃和卤代烃	138
8.1	脂环烃	138
8.2	芳香烃	140
8.3	卤代烃	149
9	醇、酚和醚	153
9.1	醇	153
9.2	酚	162
9.3	醚	166
10	羰基化合物	169
10.1	醛和酮的分类	169
10.2	醛和酮的命名	169
10.3	羰基的结构	170
10.4	醛和酮的化学性质	171
10.5	几种常见的重要的醛酮	176
11	羧酸与酯	179
11.1	羧酸	179
11.2	酯	187
11.3	脂类	189
12	含氮化合物	195
12.1	胺类化合物	195

12.2 杂环化合物.....	203
13 糖类化合物.....	208
13.1 糖类化合物的概述.....	208
13.2 单糖.....	209
13.3 二糖.....	219
13.4 多糖.....	222
14 氨基酸、蛋白质和核酸.....	225
14.1 氨基酸.....	225
14.2 蛋白质.....	232
14.3 核酸.....	237
15 计算机与医药化学.....	243
15.1 计算机对化学的主要影响.....	243
15.2 化学中使用的计算机语言.....	244
15.3 计算机在化学中的应用.....	245
16 元素化合物与生物化学.....	256
16.1 概述.....	256
16.2 生物元素种类.....	256
16.3 生物体内的配位化合物.....	258
16.4 金属离子和配位体软硬的分类.....	261
16.5 生物体内微量元素的作用.....	264
17 配合物和溶液在医学中的应用.....	268
17.1 配合物在医学中的应用.....	268
17.2 溶液与医学.....	270
17.3 缓冲作用在医学中的应用.....	273
18 有机合成方法在药学中的应用.....	276
18.1 FAA 类化合物的合成.....	277
18.2 4-溴-3,5-二甲氧基苯甲酸的合成热力学条件研究.....	287
18.3 均匀试验设计在对氟苯胺合成中的应用.....	289
19 电导法在消毒药中的应用.....	293

19.1	添加剂对次氯酸钠和过氧乙酸稳定性的影响	293
19.2	电导法研究碘的稳定性	295
19.3	过氧化氢溶液的电导变化研究	297
20	化学法在天然药物研究中的应用	301
20.1	板蓝根稳定性的研究	301
20.2	白桦皮化学成分的研究	303
20.3	沙棘油乳剂制备工艺优化	305
附录	常用医药化学中英文名词对照表	307
参考文献		320

1 溶 液

物质以分子、原子或离子状态分散于另一种物质中所形成的均匀而稳定的体系称为溶液。溶液不仅在工农业生产、日常生活中有着重要的意义，而且与生命现象有着极其重要的关系。人体内的血液、淋巴腺及各种腺体的分泌液等都是溶液，它们对于体内物质交换和新陈代谢是必不可少的。人体的体液不仅有一定的成分、分布，而且还要有一定的含量，以便维持人体的正常生理功能。

1.1 分散系的分类

一种物质或几种分散在另一种物质中所形成的系统称为分散系。分散系中被分散的物质称为分散相，而另一种物质称为分散介质。分散系又可分为均相分散系和非均相分散系两大类。按照分散相粒子直径的大小，可以将分散系分为真溶液、胶体分散系和粗分散系，如表 1-1 所示。

分散相粒子以分子或离子状态（分散相粒子直径小于 1 nm ）所形成的均匀的、稳定的单相系统称为真溶液，简称溶液。溶液并不限于液体状态，任何聚集状态都可成为溶液。例如，空气是气态溶液，合金是固态溶液，溶胶是胶体溶液，等等。但通常所说的溶液如未特别指定条件，所指的是液态溶液。

一般常将溶液中的液态组分称为溶剂，而将其他组分称为溶质。如果溶液中两种组分都是液态时（如三氯甲烷的苯溶液），则以其中含量较多的组分作为溶剂。当有一个组分为水时，通常把水看做是溶剂。以水为溶剂的水溶液，可以简称为溶液。当以其他物质作溶剂形成溶液时，都要指明溶剂是何种物质，如酒精溶

液、苯溶液等。当然，溶液的表示方法还有其他的方法，由于使用得不多，在这里不做介绍，详细内容可参考相关的资料。

表 1-1 分散系分类

分散相粒子 直径 / nm	分散系		一般性质	实例
>100	粗分散系		非均相，热力学不稳定系统； 分散相粒子不能通过滤纸和 半透膜	泥浆 豆浆
1~100	胶体分 散系	溶胶	非均相，热力学不稳定系统； 分散相粒子能通过滤纸， 不能通过半透膜	金溶胶 As ₂ S ₃ 溶胶
		高分子 溶液	均相，热力学稳定系统； 分散相粒子能通过滤纸， 不能通过半透膜	蛋白质水溶液
<1	分子(离子)分散系		均相，热力学稳定系统； 分散相粒子能通过滤纸和半 透膜	NaOH 溶液 蔗糖溶液

1.2 溶液组成的部分表示方法

1.2.1 质量分数

B 的质量分数定义为 B 的质量 m_B 与混合物(或溶液)的质量 m 之比，用符号 w_B 来表示。

质量分数的 SI 单位是一，符号是 1，在表示量值时，它们一般不明确写出。

$$w_B = \frac{m_B}{m}$$

(1-1)

例 1-1: 将 6.3 g NaHCO_3 溶于 500 g 水中配成溶液, 计算此溶液中 NaHCO_3 的质量分数。

解: 根据式(1-1), 该溶液中 NaHCO_3 的质量分数为

$$w(\text{NaHCO}_3) = \frac{m(\text{NaHCO}_3)}{m} = \frac{6.3 \text{ g}}{500 \text{ g} + 6.3 \text{ g}} = 0.012$$

答: 此溶液中 NaHCO_3 的质量分数为 0.012。

1.2.2 体积分数

B 的体积分数定义为在相同的温度和压力下, B 的体积 V_B 与混合物体积 V 之比, 用符号 φ_B 表示:

$$\varphi_B = \frac{V_B}{V} \quad (1-2)$$

体积分数的 SI 单位也是一。

例 1-2: 取 750 ml 纯酒精加水配成 1000 ml 医用消毒酒精溶液, 计算此酒精溶液中酒精的体积分数。

解: 根据式(1-2), 该溶液中酒精的体积分数为

$$\varphi_{\text{酒精}} = \frac{V_{\text{酒精}}}{V} = \frac{750 \text{ ml}}{1000 \text{ ml}} = 0.75$$

答: 此酒精溶液中酒精的体积分数为 0.75。

1.2.3 质量浓度

B 的质量浓度定义为 B 的质量 m_B 除以混合物 (或溶液) 的体积 V , 用符号 ρ_B 表示:

$$\rho_B = \frac{m_B}{V} \quad (1-3)$$

质量浓度的 SI 单位是 $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ，医学上常用的单位是 $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ 、 $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 和 $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ 。

[例 1-3] 将 25 g 葡萄糖晶体溶于水配成 500 ml 葡萄糖溶液，计算此葡萄糖溶液的质量浓度。

解：根据式 (1-3)，葡萄糖溶液的质量浓度为：

$$\rho_{\text{葡萄糖}} = \frac{m_{\text{葡萄糖}}}{V} = \frac{25 \text{ g}}{0.50 \text{ l}} = 50 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$$

答：此葡萄糖溶液的质量浓度为 $50 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$ 。

1.2.4 分子浓度

B 的分子浓度定义为 B 的分子数 N_B 除以混合物（或溶液）的体积 V ，用符号 c_B 表示：

$$c_B = \frac{N_B}{V} \quad (1-4)$$

分子浓度的 SI 单位是 m^{-3} ，这个单位太小，医学上常用的单位是 L^{-1} 。

临床上常用分子浓度来表示体液中细胞的含量，如成人血液中红细胞的分子浓度的正常参考值为 $2.8 \times 10^{12} \sim 5.5 \times 10^{12} \text{ L}^{-1}$ 。

1.2.5 物质的量浓度

B 的物质的量浓度定义为 B 的物质的量 n_B 除以混合物（或溶液）的体积 V 。用符号 c_B 或 $[B]$ 表示：

$$c_B = \frac{n_B}{V} \quad (1-5)$$

物质的量浓度的 SI 单位是 $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$ ，由于这个单位太小，医

学上常用的单位是 $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 、 $\text{mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ 和 $\mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 。物质的量浓度可以简称为浓度，但不能称为摩尔浓度，使用时应指明基本单元。

例 1-4：100 ml 正常人血清中含 165 mg HCO_3^- 离子，计算正常人血清中 HCO_3^- 离子的物质的量浓度。

解： HCO_3^- 离子的摩尔质量是 $61 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ ，正常人血清中 HCO_3^- 离子的物质的量浓度为：

$$\begin{aligned} c(\text{HCO}_3^-) &= \frac{n(\text{HCO}_3^-)}{V} = \frac{165 \text{ mg} / 61 \times 10^4 \text{ mg} \cdot \text{mol}^{-1}}{0.10 \text{ l}} \\ &= 0.027 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} = 27 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1} \end{aligned}$$

答：正常人血清中的 HCO_3^- 离子的浓度是 $27 \text{ mmol} \cdot \text{L}^{-1}$ 。

物质的量浓度已在医学上推广使用。世界卫生组织建议：在医学上表示体液的组成时，凡是体液中相对分子质量已知的物质，均应使用物质的量浓度，对于体液中未知其相对分子质量的物质，可以暂时使用质量浓度。

使用法定计量单位后，体液中已知相对分子质量的物质组成改用物质的量浓度表示，因此有必要把临床上注射液的组成也相应地改用物质的量浓度来表示，尤其是对于与体液含有相同组分的注射液更为必要。世界卫生组织提出：在绝大多数情况下，推荐在注射液的标签上同时写明质量浓度和物质的量浓度。例如，血液中的 Cl^- 、 Na^+ 、葡萄糖的含量用物质的量浓度表示，则注射用氯化钠和葡萄糖等注射液的标签上应同时标明质量浓度和物质的量浓度。

B 的质量浓度 ρ_B 与 B 的物质的量浓度 c_B 之间的关系为：

$$\rho_B = c_B M_B \quad (1-6)$$

式中： M_B 为 B 的摩尔质量。

例 1-5: 1 L 碳酸氢钠 (NaHCO_3) 注射液中含 50 g 碳酸氢钠。计算该注射液的质量浓度和物质的量浓度。

解: 碳酸氢钠注射液的质量浓度为:

$$\rho(\text{NaHCO}_3) = \frac{m(\text{NaHCO}_3)}{V} = \frac{50 \text{ g}}{1 \text{ L}} = 50 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$$

NaHCO_3 的摩尔质量是 $84 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, 碳酸氢钠注射液的物质的量浓度为:

$$c(\text{NaHCO}_3) = \frac{n(\text{NaHCO}_3)}{V} = \frac{50 \text{ g} / 84 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{1 \text{ L}} = 0.60 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$$

答: 该注射液的质量浓度是 $50 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$ 。物质的量浓度是 $0.60 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 。

1.2.6 摩尔分数

B 的摩尔分数又称 B 的物质的量分数, 其定义为 B 的物质的量 n_B 与混合物的物质的量 n 之比。用符号 x_B 表示:

$$x_B = n_B / n \quad (1-7)$$

摩尔分数的 SI 单位是一。如果溶液是由溶质 B 和溶剂 A 组成, 则溶质 B 和溶剂 A 的摩尔分数分别为:

$$x_B = n_B / (n_A + n_B) \quad x_A = n_A / (n_A + n_B)$$

显然有 $x_A + x_B = 1$

对于任何混合物, 摩尔分数的总和为 1。

例 1-6: 将 112 g 乳酸钠 ($\text{NaC}_3\text{H}_5\text{O}_3$) 溶于 1 L 纯水中配成溶液, 计算该溶液中乳酸钠的摩尔分数。

解: 水的密度为 $1000 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$, 乳酸钠的摩尔质量是 $112 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, 水的摩尔质量是 $18 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。溶液中乳酸钠的摩尔分数为:

$$x(\text{NaC}_3\text{H}_5\text{O}_3) = \frac{n(\text{NaC}_3\text{H}_5\text{O}_3)}{n(\text{NaC}_3\text{H}_5\text{O}_3) + n(\text{H}_2\text{O})}$$

$$x(\text{NaC}_3\text{H}_5\text{O}_3) = \frac{\frac{112 \text{ g}}{112 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}}{\frac{112 \text{ g}}{112 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} + \frac{11 \times 1000 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}}{18 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}} = 0.018$$

答：溶液中乳酸钠的摩尔分数为 0.018。

1.2.7 质量摩尔浓度

溶质 B 的质量摩尔浓度定义为溶质 B 的物质的量 n_B 除以溶剂的质量 m_A 。用符号 b_B 表示

$$b_B = n_B / m_A \quad (1-8)$$

质量摩尔浓度的 SI 单位是 $\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$

例 1-7：将 0.27 g KCl 晶体溶于 100 g 水中，计算所得 KCl 溶液的质量摩尔浓度。

解：KCl 的摩尔质量为 $74.5 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ ，KCl 溶液的质量摩尔浓度为：

$$b(\text{KCl}) = \frac{n(\text{KCl})}{m(\text{H}_2\text{O})} = \frac{0.27 \text{ g} / 74.5 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{0.10 \text{ kg}} = 0.036 \text{ mol} \cdot \text{kg}^{-1}$$

答：KCl 溶液的质量摩尔浓度是 $0.036 \text{ mol} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

1.3 溶液的渗透

1.3.1 渗透现象和渗透压

对于渗透现象，需从扩散谈起：将一滴红墨水滴进一杯水中，

很快就把整杯水染成红色；在盛有浓糖水的杯子中，在液面上小心地加入一层清水，过一会儿，上面的水也有甜味了，最后得到浓度均匀的糖水。以上现象是溶质分子和溶剂分子相互扩散的结果。两种不同浓度的溶液相互接触时，同样可发生扩散现象，最后成为浓度均匀的溶液。

如果我们用一种只让溶剂分子通过、而溶质分子不能通过的半透膜，把水和糖水隔开，则水分子将通过半透膜由纯水进入糖溶液，使溶液的体积增大、浓度降低；将两种浓度不同的溶液用半透膜隔开，同样可以使稀溶液的溶剂分子通过半透膜扩散到浓溶液中去。

我们把这种溶剂分子通过半透膜由纯溶剂进入溶液或由稀溶液进入浓溶液的扩散现象，称为渗透现象，简称渗透。产生渗透现象必须具备两个条件：一是有半透膜存在；二是半透膜两侧单位体积内溶剂分子数不相等。

常用的半透膜有膀胱膜、硫酸纸、玻璃纸、火棉胶膜等。半透膜有半透性。机体内的细胞膜、毛细血管壁等都是生物半透膜，其半透性不完全，往往可以或多或少地使低分子溶质或离子透过。

为什么会发生渗透现象呢？这是因为膜两侧单位体积内溶剂分子数不相等，因此在单位时间内由纯溶剂进入溶液中的溶剂分子数要比由溶液进入纯溶剂中的溶剂分子数多，其结果是溶液一侧的液面升高；溶液液面升高后，静水压增大，使溶液中的溶剂分子加速通过半透膜进入纯溶剂；静水压增大到一定值后，单位时间内从膜两侧透过的溶剂分子数相等，达到渗透平衡。为使渗透现象不发生，必须在溶液液面上施加一额外的压力。为维持只允许溶剂通过的膜所隔开的溶液与纯溶剂之间的渗透平衡而需要的超额压力称为渗透压，渗透压的符号 π ，单位为 Pa 或 kPa。

将两种浓度不同的溶液用半透膜隔开，为使渗透现象不发生，必须在浓溶液液面上施加一额外的压力，但此压力并不代表任一溶液的渗透压，它仅仅是两溶液渗透压之差。如施加的外压过大，

则溶液中将有更多的溶剂分子通过半透膜进入纯溶剂，这种使渗透作用逆向进行的过程称为反向渗透。反向渗透常用于从海水中提取淡水和在“三废”治理中处理污水。

1.3.2 溶液的渗透压与浓度及温度的关系

范特荷甫 (Van't Hoff) 根据实验数据得出稀溶液渗透压与浓度、温度的关系如下式:

$$\Pi = cRT \quad (1-9)$$

式中: Π 为溶液的渗透压; c 为溶液的物质的量浓度 ($\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$); T 为绝对温度 ($T = 273^\circ\text{C} + t^\circ\text{C}$); R 为常数, 即 $8.314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

由上式可以得出: 稀溶液的渗透压与溶液的物质的量浓度及绝对温度成正比, 而与溶质及溶剂的种类无关。这个规律叫做渗透压定律或范特荷甫定律。这个定律说明: 在一定温度下, 稀溶液的渗透压只与单位体积溶液内的溶质颗粒数成正比, 而与溶质的性质 (如轻重、分子或离子等) 无关。

上式仅适用于非电解质溶液。非电解质的分子在溶液中不电离, 起渗透作用的粒子就是非电解质分子。对任何非电解质溶液, 在相同的温度下, 只要物质的量浓度相同, 单位体积内溶质颗粒数目就相等, 它们的渗透压也必相等。

例如: $0.3 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 的葡萄糖溶液与 $0.3 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 的蔗糖溶液的渗透压相等。在 37°C 时它们的渗透压为:

$$\begin{aligned} \Pi &= cRT = 0.3 \times 8.31 \times (273 + 37) \\ &= 772.8 \text{ kPa} \end{aligned}$$

如果溶质是电解质, 由于电解质在溶液中发生电离, 单位体积溶液中所含溶质颗粒的数目要比相同浓度非电解质溶液多, 故渗透压也大, 因此对电解质溶液, 当利用上述公式计算渗透压时必须引进一个校正系数 i 。