

## 药物的波谱解析（科目代码810）考试大纲

### I、考查范围

紫外光谱、红外光谱，约20%；核磁共振氢谱、碳谱，约35%；质谱，约15%；综合图谱，30%。

### II、考查要求

要求考生了解UV、IR、MS和NMR四大光谱的基本原理，熟悉和掌握测定药物结构的技术，掌握将所测得光谱数据翻译为有机药物的结构的能力。

### III、考查形式及试卷结构

1. 考试方式：闭卷，笔试

2. 考试时间：180分钟

3. 试卷分值：满分150分

4. 题型结构：

选择题（A型题、B型题、X型题） 约占30%

图谱解析 约占40%

综合解析 约占15%

论述题/简答题 约占15%

### IV、考查内容

#### 药物的波谱解析

##### （一）绪论

###### 【考试目标】

了解UV、IR、MS和NMR等四大光谱在结构鉴定中的重要性及其与新药研究的关系。

###### 【考试内容】

分子结构与四大光谱的关系及通过四大光谱鉴定结构在新药研究中的应

用。

## (二) 紫外光谱

### 【考试目标】

1. 了解UV的基本原理、基本概念以及研究对象，了解紫外光谱仪器的基本构造和实验方法；了解紫外光谱在新药研究中的应用。
2. 熟悉有机药物的类型与电子跃迁的关系、有机药物结构与各种紫外吸收带的关系，熟悉溶剂效应在紫外光谱中的作用。
3. 掌握解析紫外光谱的方法。

### 【考试内容】

有机药物的类型与电子跃迁的关系，有机药物分子结构与UV吸收带的关系，紫外光谱在新药研究中的应用。

## (三) 红外光谱

### 【考试目标】

1. 了解IR的基本原理、基本概念以及红外吸收与分子偶极矩的关系。
2. 熟悉各类有机药物的IR谱图特点和功能团与特征频率的关系，以及影响特征频率的各种因素，包括分子的对称性、振动耦合、氢键等因素。
3. 掌握解析各种有机药物的IR谱图的方法。
4. 实例分析小分子药物的IR图谱。

### 【考试内容】

各类有机药物的结构类型与IR谱图特征频率的关系，应用红外光谱解析药物结构。

## (四) 核磁共振氢谱

### 【考试目标】

1. 了解<sup>1</sup>HNMR的基本原理和基本概念，了解<sup>1</sup>HNMR各种实验技术。
2. 掌握通过三个重要参数化学位移、耦合常数、积分常数解析各种有机药物的<sup>1</sup>HNMR谱图的方法。掌握重水交换、位移试剂、动态平衡，以及双照射等各种实验技术。
3. 掌握解析各种有机药物的<sup>1</sup>HNMR谱图的方法。

### 【考试内容】

化学位移、耦合常数、积分常数；各类有机药物的分子结构与<sup>1</sup>HNMR图谱的关系；各类有机药物的结构类型与氢谱特征的关系，应用氢谱解析药物结构。

## (五) 核磁共振碳谱

### 【考试目标】

1. 了解<sup>13</sup>CNMR的三个重要参数（化学位移、耦合常数、弛豫时间）的概念。
2. 掌握通过三个重要参数解析各种有机药物的<sup>13</sup>CNMR图谱的方法。
3. 熟悉全去耦技术、偏共振去耦、选择性去耦、门控去耦，以及反门控去耦等技术，熟悉ATP、DEPT等实验技术。
4. 掌握解析各种有机药物的<sup>13</sup>CNMR谱图的方法。

### 【考试内容】

化学位移、耦合常数、弛豫时间；各类有机药物的分子结构与<sup>13</sup>CNMR图谱

的关系；各类有机药物的结构类型与碳谱特征的关系，应用碳谱解析药物结构。

#### (六) 质谱

##### 【考试目标】

1. 了解MS的基本原理、基本概念和MS的各种裂解方式。
2. 掌握各类有机药物的MS特征，掌握通过MS谱确定药物分子和碎片质量信息。
3. 掌握解析各种有机药物的MS谱图的方法。

##### 【考试内容】

类型质谱仪离子源的电离方式；MS的各种裂解方式和各类有机药物分子结构的质谱行为。

#### (七) 综合解析

##### 【考试目标】

1. 了解四大光谱与药物结构的关系。
2. 掌握用四大光谱鉴定药物结构的方法。
3. 熟悉综合四大光谱解析结构的方法。

##### 【考试内容】

综合四大光谱解析未知药物结构，并归属。

## V、参考书目

- (1) 彭师奇，赵明；药物的波谱解析，高等教育出版社，2014年8月第1版
- (2) 国家药典委员会，药品红外光谱集，化学工业出版社，2000
- (3) Robert M. Sliverstein, Francis X. Webster, Spectrometric Identification of Organic Compounds, 6th ed, 1997
- (4) E.D. Hoffmann, V. Stroobant, Mass Spectrometry, Principles and Applications, 2nd ed, John Wiley & Sons