

· 经验交流 ·

建立标准IR图谱快速识别 常见有机毒物的方法

沈阳药学院卫生化学教研室(沈阳110015) 张 斌

沈阳药学院计算机中心(沈阳110015) 张敬宝

在毒物分析中用红外光谱对未知毒物进行定性,近年来使用较多。然而有机毒物众多,逐一查找图谱难以在短时间内得出结论。为了使IR图谱定性迅速、有效地运用于毒物分析中,我们收集了70种常见的有机毒物,用溴化钾压片法在岛津IR-G27型红外光谱仪上扫描,绘制其标准IR图谱,然后进行特征编码存贮于计算机中,建立这些毒物的标准IR图谱库。鉴别未知毒物时将其IR图谱编码输入计算机中即可快速检索得到结论。

一、IR图谱编码

首先将整张IR图谱划分为十个区间,即4000~2000, 2000~1500, 1500~1300, 1300~1200, 1200~1100, 1100~1000, 1000~900, 900~800, 800~700, 700~600。区间先疏后密是考虑到指纹区特征性较强,峰较集中。然后每一区间又等分为十个小区间,分别以数字0~9表示之,如图1所

示。然后按下列规则进行整张图谱的编码。

1. 每一小区间中选择最强峰,以该峰所在数字表示。
2. 若同一小区间内有两个或两个以上的同强峰,则选择峰位数大的。
3. 若所选峰正好落在小区间等分线上,则取码数小的表示。
4. 若某一强吸收峰正好落于大区间分界线上,则归属左手区。
5. 若某一小区间内无峰,则以数字“0”表示。

这样每一种毒物的标准IR图谱可由十位阿拉伯数字表示。如图1所示普鲁卡因红外图谱可表示为下列编码:3692399539

二、两张图谱的对照

未知物IR图谱经过编码后输入计算机中,两者对应编码数相减,所得余数的绝对值相加,即为两张图谱特征编码的差异数。计算机按差异数顺序列出可能的毒物,差异数最小者可能性最大。然后用该毒物的专属定性反应进行核实,即可达到用IR光谱鉴别未知毒物的目的。方法既快速又简便,且有较强的实用性。

三、实例应用

现有未知药物片剂 x_1 、 x_2 ,未知原料药粉末 x_3 、 x_4 及分别含有 x_5 、 x_6 两种未知毒物的人工模拟胃内容物共六种样品。用改良stas-

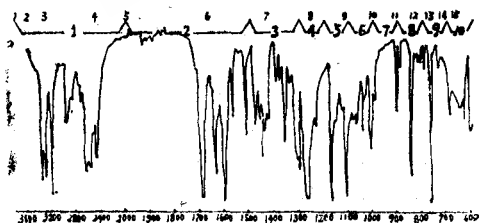


图1 普鲁卡因IR光谱区间划分图

otto 法(Modified Stasotto's Method) 分离提取后经适当净化处理, 绘制其 IR 光谱, 然后进行编码, 输入计算机中, 其检索结果见表 1。

表1 六种未知毒物检索结果

未知物	IR 编码	差异数顺序排列	可能已知物	化学定性反应
X ₁	2582320367	DIGOXINI...6 DIGITOXINI...14 BENGUNLIN...15	DIGOXINI	(+)
X ₂	5716678785	QUININE...6 DIBAIN...11 CHLORPROMAZINE...15	QUININE	(+)
X ₃	3793449428	HYDROCHLORTHLAZIDE ...9 PROCAINI...11 QOINALBARBITONE...18	HYDROCHLORTHLAZIDE	(+)
X ₄	7807963459	IMIPRAMINE...8 PROMETHAZINE...10 CAFFEINE...19	IMIPRAMINE	(+)
X ₅	4550667630	PHENOBARBITONE...8 AMIDOPYRINE...15 CHLORPROTHIXENE...18	PHENOBARBITONE	(+)
X ₆	4475375348	BARBITONE...2 CODEINE...11 THIOPENTONE...18	BARBITONE	(+)