

药品红外光谱的计算机编码及快速识别¹

苏薇薇 吴 忠 谭载友 吕华冲

(广东药学院药理学系, 广州 510224)

摘要 以《药品红外光谱集》收录的582种药品的红外光谱为标准模式, 建立了常用药品红外光谱数据库, 并设计了对未知药品快速识别的程序系统。

关键词 药品鉴定 红外光谱 数据库

用红外光谱对药品进行鉴别, 是药品检验最准确可靠的方法, 该法的优点是具有高度的专属性。但该方法也存在着明显的缺点——费时。由于药品众多, 因此在用红外光谱鉴别某一未知药品时, 必须逐一核对图谱, 须相当多的经验, 且难以在短时间得出结论。

本研究以国家卫生部药典委员会所编《药品红外光谱集》收录的582种药品的红外光谱为标准模式, 对其进行数量化编码, 然后将数量化特征输入计算机, 建立常用药品红外光谱数据库, 并设计了对未知药品进行快速识别的程序系统。当需要鉴别某一未知药品时, 只需将该药的红外光谱按相同方法进行编码, 将数量化特征输入计算机, 即可快速检查得出结论。

鉴别系统是基于目前国内最流行的dBASE III, FOXBASE数据库管理系统实现的, 该系统通用性强, 易推广。

1 基本方法

1.1 药品红外光谱的编码

采用二维编码方法, 既考虑峰位, 又考虑峰强。首先将整张红外光谱划分为十个大区间。即4000~2000, 2000~1500, 1500~1300, 1300~1200, 1200~1100, 1100~1000, 1000~900, 900~800, 800~700, 700~600 cm^{-1} 。大区间先疏后密是考虑到指纹区特征性较强, 峰较集中。每个区间又等分为十个小区, 分别以数字0—9表示。然后按如下规划进行整张图谱的编码:

1.1.1 每一大区间内选择一个最强峰, 以该峰所在小区的数字表示其峰位特征。若某峰透光率为80—100%, 则其峰强特征为0; 透光率为40—80%, 则其峰强特征为1; 透光率为0—40%, 则其峰强特征为2。

1.1.2 若同一大区间内有两个或两个以上的同强峰, 则选择波数大的峰编码。

1.1.3 若所选峰正好落在小区间等分线上, 则取码数小的表示。

1.1.4 若某一强吸收峰正好落在大区间分界线上, 则归属左手区。

1.1.5 若某一区间内无峰, 则其峰位和峰强特征均为0。

例如, 牛磺酸的红外光谱。其特征为4, 2, 7, 1, 9, 1, 8, 2, 1, 2, 6, 2, 3, 1, 0, 1, 6, 2, 0, 0。其中奇数位为峰位特征, 偶数位为峰强特征。

1.2 未知药品的鉴别

未知药品红外光谱经编码后输入计算机, 两者对应编码数相减, 所得余数的绝对值相加, 即为两张光谱特征编码的差异数。计算机按差异数顺序列出可能的药品。差异数最小者可能性最大。然后用该药品的专属定性反应进行核实。这样可达到快速鉴别未知药物的目的。

2 操作系统

2.1 系统功能

2.1.1 数据编辑: 建立药品红外光谱数据库。可对

¹ 广东省科委自然科学基金课题91338

该库进行增加、修改、删除、建立索引等操作。保证数据库内的数据随时可用。

2.1.2 查询功能：可根据药品中文名、拉丁名查询该药红外光谱数量化特征。显示或显示打印查询结果。

2.1.3 打印功能：除打印查询结果和鉴别结果之外，还可按序号打印出部分或全部药品的红外光谱

数量化特征信息。

2.1.4 药品鉴定：根据用户给出的某一未知药品红外光谱数量化特征，在数据库中检索出与其对应的药品。显示或显示打印鉴别结果。若库中无与其对应的药品，可根据用户要求的鉴别精度，在库中检索打印出符合鉴别精度的三组药品，供用户参考。

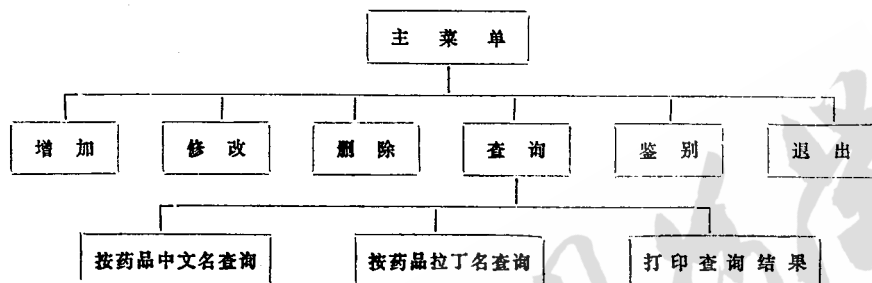


图1 系统功能结构图

2.2 数据结构

本系统数据结构如下：

项目	序号	中文名称	拉丁名称	峰位特征	峰强特征
类型	数字	汉字	字符	数字	数字
长度	4	30	40	1	1
重复次数	1	1	1	10	10

2.3 支撑环境

2.3.1 硬件：主机为IBM286及以上档次的各种兼容机。内存大于640K。打印机不限。显示器建议26行彩色显示；若11行显示，可稍改程序中的定位即可；若单色显示，去掉程序中颜色设置语句即可。

2.3.2 软件：操作系统DOS3.3及以上版本。汉字系统建议2.13H，因为程序中当需要输入汉字时，自动进入拼音输入状态，随后又自动进入ASCⅡ输入状态。应用语言dBASE 2.0以上版本。

2.4 程序设计

本系统采用模块化程序结构设计，功能选择既可根据提示输入功能代码，也可通过光标控制键上、下移动光标来实现。屏幕上大量的汉字提示引

导用户操作，即使是初学者也不会迷失方向。各种颜色的设置，以增加操作者的醒目感和新鲜感，减轻疲劳程度。汉字输入方式(汉语拼音输入方式)与英文输入方式的自动切换是本系统的又一特色。旨在免去操作人员，特别是非计算机专业人员中英文输入方式的状态转换之麻烦。使操作更加简便自如。

3 讨论

本研究建立了药物红外光谱数据库。在此基础上，编辑、查询、鉴别三大功能使得药品鉴定、核对图谱工作变得简便容易。特别是本系统采用目前国内最流行的IBM系列微机及汉字dBASEⅡ，FoxBASE语言，易于推广。本研究有极好的应用前景，即实现药品的快速鉴别。这将把整个药检工作提高到一个新水平，并产生较大经济效益和社会效益。

参考文献

1. 中华人民共和国卫生部药典委员会，药品红外光谱集，北京：化学工业出版社，1990

收稿日期：1994—11—07

Computer Coding of Infrared Spectra and Rapid Identification of Drugs

Su Wei-wei, Wu Zhong, Tan Zai-you, Lu Hia-chong

(Guangdong College of Pharmacy, Guangzhou 510224)

Abstract In our study, we took on infrared spectra of 582 drugs stipulated in China Pharmacopoeia as standard pattern and treated them with numerical interpretation method. The numerical characteristics of standard pattern were stored in computer to establish a data bank of

infrared spectra of normal drugs. A computer program that can identify unknown drug has been designed. The computer will quickly give the result of identification according to your data of infrared spectrum of the drug. This drug identification program system is based on data management system of dBASE^{III} and Fox BASE that is most fashionable in China.

Key words Identification of drugs Infrared spectrum Data bank

(on page 10)