

计算机在测熔点用温度计校验中的应用

浙江省药品检验所 (杭州市 310004)

高素英 殷国真

测定药品熔点用温度计需用由中国药品生物制品检定所统一颁发的熔点测定用对照品(下文简称对照品)进行校验。怎样进行校验和校正值在多大范围内可以使用, 中国药典^[1]未作任何规定。

常用的校验方法有五种:

(1) 选取与供试品熔点最接近的对照品与供试品同时测定, 根据对照品的校正值修正供试品的熔点(I法)

(2) 选取与供试品熔点最接近的上下二种对照品与供试品同时测定, 用内插法计算得出校正值, 修正供试品熔点(II法)

(3) 将温度计预先用对照品(一般3~4种)进行校验, 得出各点的校正值, 使用时选取与供试品熔点最接近的点的校正值, 修正供试品熔点(III法)

(4) 同(3)得出校正值, 使用时选取与供试品熔点最接近的上下二个校正值, 用内插法算出新校正值, 修正供试品熔点(IV法)

(5) 同(3)得出校正值, 绘出该温度计的校正曲线图, 使用时, 直接从图上查出校正值、修正供试品熔点(V法)

在上述五种方法中, I、II法每次使用均需对照品, 比较麻烦, 也不经济, III法使用时若供试品熔点与校值点差异较大则会引入较大的误差, IV法每次使用均需计算, 颇感不便。V法使用较多, 但仅根据3~4点很难绘理想的校正曲线图。我们应用小型计算机, 参照有关报导^[2], 编制了拟合计算程

序, 可以很方便的找到对照品熔点标值与对照品在温度计上实测值之间的函数关系, 从而绘出较为理想的温度计的校正曲线图。计算机程序框图见图1。

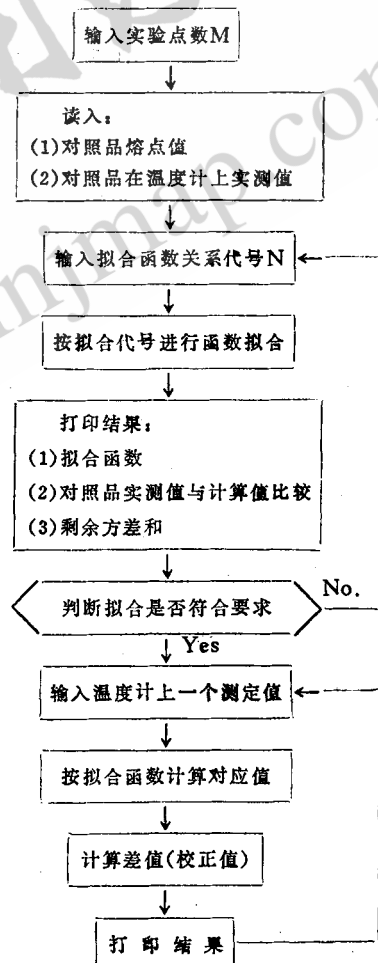


图1 熔点温度计校正计算程序框图

根据对照品标值X与实测值Y_(EXP)分别进行幂函数、指数函数与多项式函数的拟合,以选择最佳拟合方法,拟合方法好坏可以从二方面来衡量:(一)剩余差方和S 越小越好,(二)将所有测得值Y_(EXP)与用拟合函数计算得出的值Y_(Cal)进行比较、其差值Diff 越小越好,如果拟合的结果符合要求,可随意输入一系列测得值Y(Det)即 计算出一系列与之对应的校正值Diff,从而绘出校正曲线图,供日常熔点测定使用。

应用实例:校验110~220℃温度计

按中国药典一九九〇年版二部附录“熔点测定法”第一法操作,结果如下表:

对照品名称	标 值 X	实测值Y (三次均值)
非那西丁	136℃	135.8℃
磺 胺	166℃	165.7℃
磺胺二甲嘧啶	200℃	199.3℃
双 氧 胺	210.5℃	210.9℃

按在CASIOBP-700计算机顺序输入Y值后,选用六种数学函数拟合,结果以多项式-5拟合程度最佳、S值仅为0.02,结果见下:

Uerification of Melting Thermometer & Polynomial Function:

$$Y = -7.909454899E-06 \\ + 1.616023203E-06X \\ + 0.01819602133X^2 \\ - 1.090118442E-04X^3 \\ + 2.146643239E-07X^4$$

Compare Y(Exp.) with Y(Calc.):

X	Y(Exp.)	Y(Calc.)	Diff.
136	135.8	135.78	-0.02
166	165.7	165.76	0.06
200	199.3	199.21	-0.09
210.5	210.9	210.69	0.06

Sum of square errors = 0.02

按多项式-5拟合函数计算结果为:

*** Correctlo. Uata ***

Y(Det.) X(S.) Diff.

125	126.07	1.07
130	130.62	0.62
135	135.27	0.27
140	140.02	0.02
145	144.87	-0.13
150	149.83	-0.17
155	154.88	-0.12
160	160.01	0.01
165	165.21	0.21
170	170.44	0.44
175	175.68	0.68
180	180.89	0.89
185	186.04	1.04
190	191.08	1.08
195	195.99	0.99
200	200.74	0.74
205	205.31	0.31
210	209.69	-0.31
215	213.87	-1.13

并绘制出校正曲线图(图2),供熔点测定时使用。

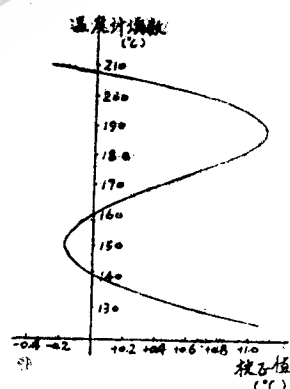


图2 110~220℃温度计校正曲线图

参 考 文 献

- 1 中国药典. 一九九〇年版. 二部附录.
- 2 李克安, 等. 分析实验室, 1988, 7(2), 46.