

《药物化学综合》考试大纲

一、考试目的

考察考生是否掌握了基本的有机化学、药物化学概念、知识，能否适应将来的硕士学习及科研需要。

二、考试的性质与范围

本大纲适用于辽宁大学药学院药物化学专业的硕士研究生招生考试。

三、考试基本要求

(一) 有机化学方面：

- 1、掌握各类有机化合物的普通命名及国际 IUPAC 命名原则和中国化学会命名原则的关系；有机化合物的同分异构现象；有机化合物结构式的各种表示方法；有机化合物的物理性质及其结构关系。
- 2、应用价键理论的基本概念，理解有机化合物的结构；应用分子轨道理论的基本概念解释乙烯、丁二烯、苯及类似物的结构。
- 3、掌握诱导效应和共轭效应，并能运用和理解有机物结构和性质的关系。
- 4、了解过渡态理论，初步掌握碳正离子、碳负离子、碳自由基、卡宾、苯炔等活性中间体及其在有机反应中的应用。
- 5、掌握亲核取代、亲电取代、亲核加成、亲电加成、消去反应、游离基反应和缺电子重排反应的历程。并能初步运用来解释相应的化学反应和合成上的应用。
- 6、掌握常见有机金属化合物（锂、镁、锌）的重要反应。
- 7、掌握立体化学的基本知识、基本理论、化合物手性的判断及取代、加成、消除、重排、周环反应的立体化学。
- 8、掌握常见官能团的特征化学鉴别方法；理解常见有机化合物的核磁共振谱(HNMR、CNMR)、红外光谱(IR)、紫外光谱(UV)和质谱(MS)的谱学特征，并能运用化学方法及四大波谱对简单有机化合物进行结构鉴定
- 9、掌握各类重要有机化合物的来源、工业制法及其主要用途。了解碳水化合物、蛋白质主要生物碱等天然产物的结构、性质和用途。
- 10、掌握各类重要有机人名反应及反应机理。
- 11、掌握有机化学实验的基本技能和原理。
- 12、掌握官能团导入、转换、保护；碳碳键形成及断裂的基本方法；逆向合成分析的基本要点及其在有机合成中的应用。综合运用有机化学基本知识，设计目标化合物的合成路线；推测有机化合物的结构及不同类型化合物的分离与鉴别。

（二）药物化学方面：

- 1、掌握药物化学的基本概念、基本知识。
- 2、掌握药物的分类及结构类型。
- 3、掌握药物的名称、化学结构、理化性质和用途。
- 4、掌握药物作用的基本原理。
- 5、掌握药物的化学结构与药效的关系。
- 6、掌握药物代谢的重要途径。
- 7、掌握一些重要药物的合成方法，一些重要药物及重要药物中间体的合成路线。
- 8、初步具备综合运用药物化学知识进行药物开发研制的能力。

四、考试知识点基本要求

（一）有机化学方面：

1、烷烃

掌握烷烃的同系列和构造异构，乙烷和丁烷的构象、优势构象、用 Newman 投影式表示构象；烷烃的系统命名法和普通命名法，正、异、新的概念，常见的烷基；烷烃的物理性质。熔点、沸点的变化规律；烷烃卤代反应及其历程，自由基的稳定性，过渡态和中间体的概念。熟悉反应过程中能量变化对反应速度和产物的影响。了解常见烷烃；烷烃的氧化反应和热裂反应。

2、脂环烃

掌握环烷烃的命名方法，构造异构，构型异构；环丙烷的结构，小环烷烃的加成反应；环己烷及一取代和二取代环己烷的构象，船式，椅式、平伏键和直立键的概念，取代环己烷的优势构象。熟悉十氢萘的构型和构象。了解：桥环、螺环烃和螺环分子中存在的对映异构；手性轴的概念。

3、立体化学

掌握旋光度 α 、比旋光度 $[\alpha]$ 、手性分子，对映体、非对映体、内消旋体和外消旋体的概念；含一个手性碳的光学异构，手性分子的旋光性、手性分子的表示方法、费歇尔投影式；用 D / L 和 R / S 标示构型的次序规则。含二个手性碳的光学异构和构型的标示。熟悉绝对构型、相对构型、赤型、苏型和差向异构的概念。了解含更多个手性碳的光学异构，外消旋体拆分，烷烃卤代反应中手性分子的立体化学。

4、卤代烃

掌握卤代烃的分类和命名；卤代烃的亲核取代反应和消除反应；格氏试剂的生成和性质；卤代烃亲核取代反应的历程和卤代烃结构，亲核试剂，溶剂，离去基团对反应影响的一般规律。正碳离子的结构，稳定性和对反应活性的影响，不同卤素对反应活性的影响；消除反应的历程，消除反应的扎依采夫规律及其解释。了解卤代烃的结构和物理性质；多卤代烃的特性。

5、烯烃

掌握烯烃的分子结构； sp^2 杂化， π 键的形成及特性；烯烃的分子通式，顺反异构现象的产生及用顺反和 Z / E 标示顺反异构；烯烃的系统命名；烯烃亲电加成反应（与 HX、 H_2O 、 H_2SO_4 、 X_2 及 HOX 等）亲电加成反应的历程，正碳离子的重排，加成反应的立体化学，马氏规则及其现代理论解释， σ - π 共轭；硼氢化反应及反应方向和应用。烯烃的氧化反应（ $KMnO_4$ 、 O_3 / H_2O 和环氧化），双键氧化的方向及其立体化学；烯烃的 α -卤代反应， p - π 共轭。炔与 HBr 加成的过氧化物效应和原因。熟悉物理性质；聚合反应。

6、二烯烃和炔烃

掌握二烯烃的分类和命名；共轭二烯烃的结构， π - π 共轭和共轭效应；电子离域的概念，共振论的基本概念；二烯烃的 1, 2-加成和 1, 4-加成及其解释。D-A 反应；炔烃的结构， sp 杂化；炔烃的命名；炔烃的亲电加成（与 H_2 、 X_2 及 HX 等加成）、加成反应的方向。炔烃的水合反应及其应用，氢化反应；末端炔烃的酸性，金属炔化物的生成及用途。熟悉二烯烃和炔烃的氧化和聚合反应。了解分子轨道法对 1、3-丁二烯的结构和性质的描述。

7、芳香烃

① 苯及其同系物

掌握苯的结构和表示法，芳香大 π 键及苯的稳定性；苯及其同系物的命名；苯环上的亲电取代反应：卤代、硝化、磺化和傅-克反应；苯环侧链的卤代和氧化反应；苯环亲电取代反应的历程，定位规律和应用；芳卤烃卤原子的稳定性及其原因。了解苯环的加成反应；芳卤烃的亲核取代；苯炔。

② 多环芳烃

了解萘的氧化和加氢；蒽和菲的化学性质。

③ 非苯芳烃

掌握利用 Hückel 规则判定化合物的芳香性；环戊二烯负离子和环庚三烯正离子的芳香性。

8、醇、酚和醚

① 醇

掌握醇的分类、命名、结构、沸点、以及水溶解度的关系；氢键对物理性质的影响；醇的酸性及与金属 Na， PX_3 ， H_2SO_4 ， HNO_3 等的反应，卢卡斯试剂；醇的消除反应，分子间消除成醚，分子内消除成烯烃，消除的扎依采夫规律；醇的氧化反应，伯、仲、叔醇对氧化反应的不同活性，欧芬脑尔氧化；频哪醇重排；邻二醇与 $Pb(Ac)_4$ 和 HIO_4 的反应；醇的制备：烯烃水合、硼氢化反应，格氏试剂和醛酮加成。

② 酚

掌握酚的结构和命名；钠熔法制备酚；酚的酸性，环上取代基对酸性影响的一般规律；酚环上亲电取代反应的特点；瑞曼-梯曼反应，柯尔柏-斯密特反应，傅瑞斯重排和克莱森重

排。酚和 FeCl_3 的显色。了解制备酚的异丙苯法和芳卤烃水解法；卡宾的概念。

③ 醚和环氧化合物

掌握醚的分类和命名；用氢卤酸断裂醚键的反应；环氧化物的取代开环反应，环氧丙烷开环的方向和历程，环氧化物和开环反应的立体化学。熟悉醚羊盐的形成，过氧化物的形成。了解硫醇和硫醚；醚的物理性质。

9、醛和酮

掌握醛酮的系统命名；羰基的结构；醛酮的亲核加成反应及历程； α -H 的卤代，卤仿反应，酮式-烯醇式互变异构，羟醛缩合反应及其历程，负碳离子，克莱森-斯密特反应，珀琴反应，安息香缩合，曼尼希反应和魏悌希反应；用 NaBH_4 和 LiAlH_4 的还原反应，克莱门森还原，黄鸣龙还原，用斐林试剂和杜伦试剂氧化醛，康尼查罗反应； α 、 β -不饱和醛酮的亲核加成，迈克尔加成反应，插烯规律。熟悉醛酮的制备反应；物理性质；醌的结构。了解常见的醛酮；乙烯酮；醌的制备。

10、羧酸和取代羧酸

掌握羧酸及取代羧酸的结构和命名；氢键对物理性质的影响；羧酸的酸性和成盐，结构、取代基和诱导效应等对酸性的影响及其一般规律；与醇作用成酯的反应；形成酰卤、酐和酰胺的反应；酯化反应的历程及其影响因素；还原反应和脱羧反应；羧酸的制备，腈水解、格氏试剂法和醇氧化。熟悉 α -H 的反应；二元酸、羟基酸和羧基酸在受热时的反应；卤代酸的水解反应；氨基酸的等电点、偶极离子和显色反应。了解常见羧酸的性质；多肽和蛋白质。

11、羧酸衍生物

掌握羧酸衍生物的结构和命名法；亲核取代反应（水解、醇解、氨解）；与格氏试剂的反应；用 LiAlH_4 的还原反应，催化氢化还原反应。酯水解反应的历程及影响因素；酯缩合（克莱森缩合）反应及其历程；乙酰乙酸乙酯的 α -亚基烃基化、酰基化、酸式分解、酮式分解及其在合成上的应用；丙二酸二乙酯在合成上的应用；酰胺的 Hoffmann 降解反应，酰胺和酰亚胺的酸碱性。丙二酰脲的结构；胍的碱性和芳香性。熟悉酰卤和酸酐的制备；羧酸基和卤烃反应制备酯；羧酸铵盐脱水制酰胺；贝克曼重排；酯的物理性质。了解常见的酰卤、酸酐、光气、脲、胍和硫脲的结构。

12、有机含氮化合物

掌握胺的分类、命名、碱性以及取代基对碱性影响的一般规律；胺的烃基化和酰基化反应；与亚硝酸的反应；芳胺环上的亲电取代反应；胺的制备：硝基还原，卤烃氨解，腈和酰胺的还原，还原胺化，盖布瑞尔合成法；季铵盐和季铵碱的形成，季铵碱的消除及其消除的方向和历程，立体化学和在测定结构上的应用；芳香重氮盐的制备，被卤素取代，被 CN 取代，被氢、羟基和硝基取代等。偶合反应。熟悉胺和醛生成希夫碱；异腈反应；重氮盐的还原反应；重氮甲烷的性质；硝基对苯环上亲核取代活性的影响。

13、杂环化合物

掌握五元单杂环和六元单杂环的命名；吡咯、呋喃和噻吩的电子结构，芳香性和多 π 特性；吡咯、呋喃和噻吩的酸碱性、稳定性及其亲电取代反应。呋喃的 D-A 反应、呋喃甲醛的特殊反应；吡唑、咪唑、噁唑、异噁唑和噻唑的结构和命名；吡啶的电子结构、芳香性和缺 π 特征；吡啶的溶解度、偶极矩、碱性、稳定性、亲电取代反应、氧化和还原反应。N-氧化吡啶的生成和取代反应。吡啶的亲核取代反应；吡啶、嘌呤的结构和命名。熟悉吡咯、呋喃和噻吩的偶极矩、熔点、沸点和溶解度；吡唑、咪唑、噁唑和异噁唑的结构、化学性质和物理性质，咪唑和吡唑的互变异构；吡喃和吡喃酮的结构、稳定性和水解反应；吡喃的主要衍生物如烟酸、VB₆等；嘧啶环的合成；嘧啶的物理性质和化学性质；喹啉的合成；喹啉的物理性质和化学性质。嘌呤的重要衍生物的结构；香豆素，色酮和黄酮的结构；吡喃的水解反应。

14、糖类

掌握单糖链状结构的表示法（Fischer 投影式）和构型（D、L 及赤藓型和苏阿型等）；重要的单糖赤藓糖、苏阿糖、核糖、葡萄糖、甘露糖和半乳糖等；以葡萄糖为例，结合实验事实掌握环状结构、Haworth 透视式、优势构象及有关基本概念（如：端基异构体， α 、 β 判定方法，呋喃、吡喃型和变旋现象等）；单糖的化学性质：成脎反应，氧化反应（与吐伦试剂和斐林试剂反应，被硝酸和溴水氧化），还原反应，与含氮试剂的反应，环状缩醛和缩酮的形成及碱性条件下的反应和酸性条件下的脱水等；还原糖的判断和主要性质，甙类的结构特点和性质；重要双糖（蔗糖、麦芽糖、乳糖和纤维二糖）的组成、结构、名称、还原性和非还原性，双糖的类型（ α 或 β ）和甙键类型；重要多糖淀粉和纤维素的结构特征和两者的区别（甙键类型），淀粉的主要性质（非还原性、遇碘成蓝色和水解等）。了解双糖的系统命名法和优势构象；肝糖（动物淀粉）的结构和用途；环糊精、核糖核酸和 2-去氧核糖的结构。

（二）药物化学方面：

1、绪论

了解药物化学的起源与发展；熟悉药物化学的研究内容和发展方向。

2、新药研究与开发概论

熟悉新药研究与开发的基本途径和方法。

3、药物设计的基本原理和方法

药物产生药效的过程（三个阶段：药剂学阶段，药代动力学阶段，药效学阶段，或药剂相、药代动力相、药效相）；先导化合物发现的方法和途径；先导化合物优化的各种方法；药物的结构和药效的关系；定量构效关系方法；计算机辅助药物设计。

4、药物代谢

了解药物代谢的影响因素；理解药物代谢的在新药研究中的应用；熟悉药物的结构与代谢的关系。

5、麻醉药

掌握常见麻醉药的结构与作用机理（盐酸氯胺酮，依托咪酯，盐酸普鲁卡因，盐酸利多卡因）；掌握局部麻醉药的构效关系。

6、镇静催眠药和抗癫痫药

熟悉常见镇静催眠药的结构性质与作用机理；熟悉常见抗癫痫药的结构性质与作用机理；掌握巴比妥类药物的构效关系；掌握苯二氮卓类药物的构效关系。一些重要药物的合成方法。

7、精神神经疾病治疗药

掌握常见抗精神病药的结构、性质与作用机理；掌握常见抗抑郁药的结构、性质与作用机理；熟悉常见抗躁狂药和抗焦虑药的结构、性质与作用机理（碳酸锂）；熟悉吩噻嗪类抗精神病药的构效关系。一些重要中间体的合成方法。

8、镇痛药

熟悉常见镇痛药的结构、性质与作用机理；掌握吗啡结构与受体的关系。

9、非甾体抗炎药

掌握常见非甾体抗炎药的结构性质与作用机理；理解水杨酸类药物结构修饰的目的与手段。掌握重要药物及中间体的合成方法。

10、拟胆碱和抗胆碱药物

熟悉乙酰胆碱受体分类及其性质；掌握胆碱受体激动剂的构效关系。

11、作用于肾上腺素能受体的药物

熟悉肾上腺素受体的分类、分布、效应和典型配基；掌握肾上腺素、盐酸多巴胺、盐酸可乐定、盐酸多巴酚丁胺、盐酸哌唑嗪的结构，性质与作用机理；掌握肾上腺受体激动剂和构效关系。

12、抗高血压药和利尿药

掌握各类抗高血压药的作用部位与机理；熟悉利尿药的作用机理；熟悉卡托普利，氯沙坦，硝苯地平，氨氯地平，乙酰唑胺的结构、性质与作用机理。一些简单结构药物的合成方法。

13、心脏疾病用药和血脂调节药

掌握强心苷类药物的结构特点与作用机理；熟悉抗心律失常药物的作用机理；熟悉硝酸酯类药物的结构、作用机理和构效关系。

14、组胺受体拮抗药及抗过敏药和抗溃疡药

熟悉组胺的结构与组胺受体的类型；掌握组胺 H_1 受体拮抗剂的构效关系。掌握组胺 H_2 受体拮抗剂的结构类型。

15、抗寄生虫药

掌握喹啉类抗疟药物的结构特点与作用机理；掌握青蒿素类抗疟药物的结构特点与作用

机理；熟悉嘧啶类抗疟药物的结构特点与作用机理

16、合成抗菌药和抗病毒药

理解磺胺药物的发展及代谢拮抗学说；掌握磺胺药物的构效关系；掌握喹啉酮类药物的作用原理和结构特点；掌握抗病毒药物的作用机制；熟悉诺氟沙星，环丙沙星，异烟肼，利福平，克霉唑，盐酸金刚烷胺，阿昔洛韦的结构特点、作用机制。

17、抗生素

理解抗生素的作用机制；熟悉各类抗生素的发展历史与结构特点；掌握 β -丙酰胺类抗生素的构效关系；掌握阿莫西林、克拉维酸、卡那霉素、红霉素的结构特点与作用机理。

18、抗肿瘤药

理解抗肿瘤药物的作用机理；熟悉氮芥类药物的结构特点与构效关系；熟悉顺铂类药物的结构特点与构效关系；掌握氟尿嘧啶、阿糖胞苷、甲氨蝶呤的结构特点与作用机理。

19、激素及相关药

了解重要的肽类激素药物的作用与用途；熟悉甾体激素的结构特点。

20、维生素

熟悉维生素的分类与主要作用；熟悉维生素 C 的结构特点与性质。