### 多环芳烃活性参数与色谱保留指数相关性分析

解静芳<sup>1,\*</sup>,韩琦<sup>1</sup>,杨彪<sup>1</sup>,郝婷娟<sup>1</sup>,张秋华<sup>1</sup>,李瑞金<sup>2</sup>,范仁俊<sup>3</sup>

1. 山西大学环境与资源学院,太原 030006

2. 山西大学环境科学与工程研究中心,太原030006

3. 山西省农业科学院植物保护所,太原 030031

摘要:为了简化多环芳烃(PAHs)的 K<sub>w</sub>、K<sub>w</sub>和 BCF 等活性参数的测定和预测工作 通过对 PAHs 的活性参数与气相色谱保留 指数(I)、苯环个数(N)的相关关系分析 ,分别建立了 I 与  $\lg K_w$ 、 $\lg K_w$ 和  $\lg BCF$  ,N 与  $\lg K_w$ 、 $\lg K_w$ 和  $\lg BCF$  间的 2 类一元线性回 归预测方程 ,以及 I、N 与  $\lg K_w$ 、 $\lg K_w$ 和  $\lg BCF$  间的二元线性回归预测方程。结果表明 ,PAHs 类化合物的 I 值或 N 值分别与  $\lg K_w$ 、 $\lg K_w$ 和  $\lg BCF$ 存在明显的线性相关性 ,均能对上述 3 种活性参数进行准确预测 ,其中 ,用 I 值建立的一元回归方程的预 测精度更好;而利用 I 值和 N 值共同建立的二元预测方程经 t 检验发现 ,方程中变量 N 的偏回归系数的统计检验没有显著意 义。本研究利用 I 值建立的一元线性预测模型能较好地预测 PAHs 类化合物的 K<sub>w</sub>、K<sub>w</sub>和 BCF 等活性参数 ,从而为 PAHs 的活 性参数预测提供了一种简便易行的方法。

关键词:多环芳烃;有机碳吸附常数(K<sub>oc</sub>);正辛醇/水分配系数(K<sub>ox</sub>);生物浓缩因子(BCF);色谱保留指数(I) 文章编号:1673-5897(2012)1-107-06 中图分类号:X171.5 文献标识码:A

### **Correlation Analysis on Active Parameters and Retention Index of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons**

Xie Jingfang<sup>1,\*</sup>, Han Qi<sup>1</sup>, Yang Biao<sup>1</sup>, Hao Tingjuan<sup>1</sup>, Zhang Qiuhua<sup>1</sup>, Li Ruijin<sup>2</sup>, Fan Renjun<sup>3</sup>

1. College of Environment and Resource , Shanxi University , Taiyuan 030006 , China

2. Research Center of Environmental Science and Engineering , Shanxi University , Taiyuan 030006 , China

3. Institute of Plant Protection , Shanxi Academy of Agricultural Sciences , Taiyuan 030031 , China

Received 14 July 2011 accepted 15 September 2011

Abstract: To simplify the determination and prediction of  $K_{oc}$ ,  $K_{ow}$  and BCF of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), the correlations of activity parameters with retention index (I) and benzene ring number (N) were analyzed in this paper. Unary linear regression equations including I (or N) with  $lgK_{oc}$ ,  $lgK_{ow}$ , lgBCF, and binary linear regression equations of I and N with  $lgK_{oc}$ ,  $lgK_{ow}$ , lgBCF were established, respectively. Results showed that a clear linear relationship was observed between I (or N) and  $lgK_{oc}$ ,  $lgK_{ow}$ , lgBCF. The established equations could accurately predict the three active parameters, and the linear regression equation of I showed a higher predicting ability. The correlation coefficients of binary linear regression coefficient of variable N had no statistic significance. It was demonstrated that  $lgK_{oc}$ ,  $lgK_{ow}$  and lgBCF of PAHs could be well predicted based on the linear prediction model of I, providing a simple method for predicting the activity parameters of PAHs compounds.

Keywords: polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs); organic carbon adsorption constant in soil ( $K_{oc}$ ); octanol

基金项目: 山西省自然科学基金资助项目(20021014); 国家自然科学基金资助项目(30740037)

收稿日期: 2011-07-14 录用日期: 2011-09-15

water partition coefficient (Kow); bioconcentration factor (BCF); retention index(I)

多环芳烃 (polycyclic aromatic hydrocarbons, PAHs) 是一类含有 2 个或 2 个以上苯环的芳香烃类 化合物,是人们所熟知的一种持久性有机污染物,主 要由有机物的热解或不完全燃烧形成<sup>[1]</sup>。目前,已 知多种 PAHs 具有 DNA 损伤、诱导有机体基因突变 以及染色体畸变等毒性作用,能引发呼吸、消化和生 殖等多系统癌变,并且还具有肝脏毒性和神经毒 性<sup>[2]</sup>。相关研究已对 2 000 余种化合物进行了毒性 研究,发现具有致癌作用的化合物多达 500 余种,其 中,多环芳烃及其衍生物就有 200 种<sup>[3]</sup>,约占 40%。 可见,了解 PAHs 类化合物的理化性质,预测其环境 行为及其对环境的潜在危害具有重要的意义<sup>[4]</sup>。

能够反映进入不同环境的 PAHs 理化性质的活 性参数主要有土壤有机碳吸附常数(organic carbon adsorption constant in soil, K<sub>oc</sub>)、正辛醇/水分配系数 (octanol water partition coefficient, K<sub>ow</sub>)和生物浓缩 因子(bioconcentration factor, BCF) 等 其中 K<sub>ac</sub>反映 土壤对污染物的吸附过程 K "反映化学物质在水相 和有机相间的分配情况,BCF用来描述化学物质在 生物体中的可富集程度<sup>[5]</sup>。目前 K<sub>a</sub>主要采用批量 平衡法测定 Kaa 主要采用震荡法、反相高效液相色 谱(RP-HPLC) 法和产生柱法测定 ,BCF 主要采用动 态法和静态法测定。其中 震荡法测定速度较快 但 存在有机物易形成胶体颗粒、挥发和吸附等缺点;其 他方法也都存在测定步骤多、达平衡时间长等不 足<sup>[6-7]</sup>。所以,这些活性参数的直接测定通常都需 要巨大的工作量,并且由于实验过程会受多种因素 影响,所得数据难免存在一定误差。另有一些研究 者提出建立预测方程 借助某些参数预测 K<sub>ac</sub>、K<sub>aw</sub>和 BCF 例如  $K_{oc}$ 、 $K_{ow}$ 和 BCF 之间的互相预测<sup>[8-9]</sup> 但该 法仍需进行这些参数的测定 故同样存在多种影响 测定过程的因素,导致结果存在较大的方法误差。 此外,也有研究者提出利用化合物的结构参数对 K<sub>ac</sub>、K<sub>w</sub>和 BCF 进行预测,但该法计算繁琐,往往在 不同基团上的应用受到限制<sup>[1045]</sup>。色谱保留指数 (retention index, I) 是化合物色谱定性分析的重要 参数,也可用来进行定量结构-活性(性质)关系的研 究<sup>[16-19]</sup>。色谱法具有分离效率高,分析速度快,选 择性好 样品用量少和检测灵敏度高 操作简单 费 用低以及应用广泛等优点 同时 化合物色谱保留指 数易于测定(有些也

可以通过色谱手册查出)<sup>[20]</sup>。鉴于此,本研究尝试 用色谱法对 PAHs 类化合物进行定性、定量分析的 同时,用保留指数对所测 PAHs 的其他活性参数进 行预测,使活性参数繁复的测试步骤大大简化,以期 为研究 PAHs 类化合物在不同环境中的迁移转化和 毒性预测提供科学依据。

1 材料与方法(Materials and methods)

1.1 材料

仪器: GC-9A 气相色谱仪 配 C-R2AX 数据处理 机(日本岛津公司)。

试剂: 萘、芴、菲、蔥、荧蔥、芘、屈、苯并 [b] 荧 蔥、苯并 [k] 荧蔥、苯并 [a] 芘、二苯并 [ah] 蔥等多环 芳烃标准品购自上海安谱科学仪器有限公司,由德 国 Dr. Ehrenstorfer 公司生产。

1.2 方法

1.2.1 保留指数(I)的测定

PAHs 类保留指数(I) 的测定参考了文献 [20] 的方法 具体的气相色谱实验条件为: 柱温 270 ℃; 固定液 OV-101; 检测器 FID; 载气为 N<sub>2</sub>,流速 30 mL•min<sup>-1</sup>; 燃气为 H<sub>2</sub>,流速 35 mL•min<sup>-1</sup>; 空气流速 400 mL•min<sup>-1</sup>。

实验时,首先分别测定每一种 PAHs 的色谱保 留时间及其相应的正构烷烃的保留时间,然后根据 实验结果,选取适宜的色谱条件,使所测各种化合物 的保留时间之间保持适当的间隔,以便在各种 PAHs 同时进样时,其保留时间能够清晰地分开,分析各 PAHs 的调整保留时间,记为 X<sub>i</sub>,根据公式(1) 求出 该种 PAHs 的 I 值。

$$\begin{split} I &= 100 \left[ Z + (\ \mathrm{lgX_i} - \mathrm{lgX_2}) \ / (\ \mathrm{lgX_{Z+1}} - \ \mathrm{lgX_2}) \ \right] \\ &= \vec{\mathfrak{I}}(\ 1) \end{split}$$

其中,X为调整保留值;Z与Z+1均代表正构 烷烃所含碳原子数目,且X<sub>z</sub> < X<sub>i</sub> < X<sub>(Z+1)</sub>。 1.2.2 数据处理

采用 SPSS( statistical package for the social science) 13.0 统计分析软件对实验数据进行一元线性 和二元线性回归分析与统计检验。

### 2 结果(Results)

2.1 PAHs 类化合物的活性参数与色谱保留指数

用上述方法对 11 种 PAHs 类化合物的色谱保 留指数进行了测定 结果列于表 1 中。

#### 表1 PAHs 类化合物的活性参数与色谱保留指数

Table 1 Active parameters and retention indexes of PAHs

化合物编号	化合物名称	Ι	N	$lgK_{oc}$	$lgK_{ow}$	lgBCF
1	茶	1 254	2	2.97	3.29	2.62
2	芴	1 645	3	3.86		
3	菲	1 836	3	4.15	4.45	3.67
4	茵	1 846	3	4.15	4.45	3.67
5	荧蒽	2 092	4	4.58	4.90	4.08
6	芘	2 139	4	4.52	4.90	4.08
7	屈	2 526	4	5.20	5.61	4.72
8	苯并[b]荧蒽	2 796	5	5.74	6.06	5.15
9	苯并[k]荧蒽	2 802	5	5.74	6.06	5.15
10	苯并[a]芘	2 870	5	5.74	6.06	5.15
11	二苯并[ah]蔥	3 138	5	6.52	6.84	5.84

注:  $lgK_{oc}$ 、 $lgK_{ow}$ 和 lgBCF 值引自参考文献 [8],  $lgK_{oc}$ 、 $lgK_{ow}$ 和 lgBCF分别为土壤有机碳吸附常数、正辛醇/水分配系数和生物浓缩因子的 对数值; I 为色谱保留指数; N 为 PAHs 化合物的苯环数。

2.2 PAHs 类化合物的 I 值与其活性参数的相关性 分析

2.2.1 PAHs 类化合物的 I 值与其活性参数的一元 线性回归方程

利用统计软件用 I 值分别对  $l_{gK_{oe}}$ 、 $l_{gK_{ow}}$ 和  $l_{gBCF做-元线性回归分析,结果如表 2 所示。可$ 知,对回归系数的 t 检验结果表明,1 号、2 号和 3 号 $方程的 t 值均大于临界值 <math>t_{0.05(9)} = 2.262$ ,说明 3 个 方程的回归系数均有意义,并且回归方程的 t 值越 大,回归系数越有意义。所以 I 与  $l_{gK_{oe}}$ 、 $l_{gK_{ow}}$ 、 $l_{gB-}$ CF 之间存在线性关系。3 个回归方程的 R 值也均 远大于临界值  $R_{0.05(9)} = 0.602$ ,这表明,I 与  $l_{gK_{oe}}$ 、  $l_{gK_{ow}}$ 、 $l_{gBCF}$  3 个参数均属于高度显著相关。表中 标准误差 SE 反映的是实测值与预测值之间的误差 大小 SE 值愈小,回归方程精度愈高。

### 表 2 用 I 值预测 PAHs 类化合物的 3 种活性参数的一元线性回归方程

Table 2Linear correlation between I valuesand three active parameters of PAHs

 方程 编号	参数	回归方程	相关 系数 R	样本数	SE	t
1	$lgK_{oc}$	$lgK_{oc} = 1.743E - 3I + 0.881$	0.996	11	0.1043	1.556
2	$lgK_{ow}$	$lgK_{ow} = 1.693E - 3I + 1.496$	0.997	10	0.0893	5.412
3	lgBCF	lgBCF = 1.619E - 3I + 0.641	0.995	10	0.0753	8.051

注: SE 为预测值的标准误差; t 为回归系数进行 t 检验的计算 t 值。

2.2.2 PAHs 类化合物的 I 值与其活性参数的一元 线性回归方程的误差分析

通过统计分析软件用 1 号、2 号和 3 号方程分 别对 11 种 PAHs 化合物的 3 种参数进行误差分析, 结果列于表 3 中。可知,1 号、2 号和 3 号方程的预 测值与实测值间的绝对误差的平均值( | e | 的平均 值) 分别为 0.17、0.06 和 0.05,平均相对百分误差 ( Re% 的平均值) 分别为1.77%、1.20% 和 1.23%。

### 表 3 用 I 值预测 PAHs 类化合物的 lgK<sub>w</sub>、lgK<sub>w</sub>和 lgBCF 的误差分析

Table 3 Error analysis for estimated values of  $lgK_{ac}$ ,  $lgK_{aw}$  and lgBCF of PAHs based on I values

化合物		$\rm lgK_{\rm oc}$			$lgK_{\rm ow}$			lgBCF	
编号	Y	е	Re%	Y	е	Re%	Y	е	Re%
1	3.07	0.10	3.31	3.35	-0.06	1.90	2.67	-0.05	1.98
2	3.75	-0.11	2.89	_	-	_	_	-	
3	4.08	-0.07	1.65	4.39	0.06	1.45	3.61	0.06	1.53
4	4.10	-0.05	1.24	4.40	0.05	1.05	3.63	0.04	1.09
5	4.53	-0.05	1.18	4.84	0.06	1.23	4.03	0.05	1.28
6	4.61	0.09	1.97	4.92	0.02	0.47	4.11	-0.02	0.59
7	5.28	0.08	1.61	5.61	0.00	0.00	4.73	-0.01	0.22
8	5.75	0.01	0.17	6.09	-0.03	0.48	5.17	-0.02	0.34
9	5.76	0.02	0.35	6.10	-0.04	0.66	5.18	-0.03	0.53
10	5.88	0.14	2.50	6.22	-0.16	2.65	5.29	-0.14	2.66
11	6.35	-1.17	2.63	6.70	0.14	2.10	5.72	0.12	2.04
平均值	—	0.17*	1.77	-	0.06*	1.20	-	0.05*	1.23

注: Y 为预测值; e 为实测值与预测值的差值; Re% 为相对百分误差; \* 标记的数值表示 11 种 PAHs 化合物的 e 取绝对值后的平均值。

# 2.3 PAHs 类化合物的苯环数(N值)与其活性参数的相关性分析

2.3.1 PAHs 类化合物的 N 值与其活性参数的一 元线性回归方程

利用统计软件用 N 值分别对  $l_{gK_{oc}}$ 、 $l_{gK_{ow}}$ 和  $l_{gBCF}$ 做一元线性回归分析,结果如表 4 所示。可 知,对回归系数的 t 检验结果表明 A 号、5 号和 6 号 方程的 t 值均大于临界值  $t_{0.05(9)} = 2.262$ ,说明 3 个 方程的回归系数均有意义,且 3 个回归方程的 R 值 也均远大于临界值  $R_{0.05(9)} = 0.602$ ,这表明,N 与  $l_{gK_{ov}}$ 、 $l_{gBCF}$ 之间也存在着线性关系,且相 关性也很好。与表 2 中的数据相比 A 号、5 号和 6 号方程的 R 值和 t 值均小于1 号、2 号和 3 号方程的 相应值,这表明,用 I 值所建立的 3 个预测方程的预 测精度更好。

## 表 4 用 N 值预测 PAHs 类化合物的 3 种活性参数的一元线性回归方程

Table 4Linear correlation between N valuesand three active parameters of PAHs

方程 编号	参 数	回归方程	相关 系数 R	样本 数	SE	t
4	$lgK_{oc}$	$lgK_{oc} = 0.960N + 1.081$	0.958	11	0.317	9.997
5	$lgK_{ow}$	$lgK_{ow} = 0.954N + 1.446$	0.954	10	0.334	9.045
6	lgBCF	lgBCF = $0.871$ N + $0.929$	0.956	10	0.299	9.217

注: 同表2。

2.3.2 PAHs 类化合物的 N 值与其活性参数的一 元线性回归方程的误差分析

通过统计分析软件用 4 号、5 号和 6 号方程分 别对 3 种参数进行误差分析,结果列于表 5 中。可 知 A 号、5 号和 6 号方程的预测值与实测值间的 lel 的平均值分别为 0.24、0.25 和 0.22 ,Re% 的平均值 分别为 4.69%、4.62% 和 4.91%。与表 3 中的数据 相比,这 2 项平均值都大于用 I 值所建立的一元预 测方程,这表明,从预测精度来看,I 号、2 号和 3 号 方程优于 4 号、5 号和 6 号方程。不过,统计学检验 也已表明 A 号、5 号和 6 号方程也可较好地预测  $K_{ac}$ 、 $K_{av}$ 和 BCF。

### 表 5 用 N 值预测 PAHs 类化合物的 lgK<sub>oc</sub>、 lgK<sub>ow</sub>和 lgBCF 的误差分析

Table 5 Error analysis for estimated values of  $lgK_{\rm oc}$  ,  $lgK_{\rm ow} \text{ and } lgBCF \text{ of PAHs based on N values}$ 

化合物	$lgK_{oc}$			$lgK_{ow}$			lgBCF		
编号	Y	е	Re%	Y	е	Re%	Y	е	Re%
1	3.00	-0.03	1.04	3.35	-0.06	1.95	2.52	-0.05	1.95
2	3.96	-0.10	2.61	-	-	-	—	-	-
3	3.96	0.19	4.56	4.31	0.14	3.19	3.44	0.13	3.49
4	3.96	0.19	4.56	4.31	0.14	3.19	3.44	0.13	3.49
5	4.92	-0.34	7.44	5.26	-0.36	7.39	4.36	-0.33	8.16
6	4.92	-0.40	8.87	5.26	-0.36	7.39	4.36	-0.33	8.16
7	4.92	0.28	5.37	5.26	0.35	6.20	4.36	0.31	6.50
8	5.88	-0.14	2.46	6.22	-0.16	2.57	5.28	-0.13	2.60
9	5.88	-0.14	2.46	6.22	-0.16	2.57	5.28	-0.13	2.60
10	5.88	-0.14	2.46	6.22	-0.16	2.57	5.28	-0.13	2.60
11	5.88	0.64	9.80	6.22	0.62	9.12	5.28	0.56	9.52
平均值	_	0.24*	4.69	_	0.25*	4.62	_	0.22*	4.91

注:同表3。

若只是用上述方程了解 PAHs 类化合物在不同 环境的迁移、转化、富集浓缩的潜在趋势,方程精度 可以满足要求。因此,不论是用 I 还是用 N 建立的 一元预测方程均能很好地预测多环芳烃的 3 种参 数,亦即能在保证实验结果可靠的同时简化实验步 骤,大量减少实验的工作量。

2.4 PAHs 类化合物的 I 值和 N 值与其活性参数的 相关性分析

为了探究引入 N 值后的二元线性回归方程能 否更好地对  $l_{gK_{oe}}$ 、 $l_{gK_{ow}}$ 和  $l_{gBCF}$ 进行预测,利用统 计软件用 PAHs 类化合物的 I 值和 N 值对  $l_{gK_{oe}}$ 、  $l_{gK_{ow}}$ 和  $l_{gBCF}$ 进行了二元线性回归分析,结果如 表 6所示。可知,二元线性回归方程的相关系数与 一元回归相比略有升高,但经统计学检验发现两者 没有显著性差异(p > 0.05)。二元回归预测的误差分 析结果表明 Re% 均小于一元回归预测 对  $l_{gK_{oe}}$ 、 $l_{gK_{ow}}$ 和  $l_{gBCF}$ 的 Re% 分别为 1.75%、1.16% 和 1.16% (表 6 中未列出)。通过对 7 号、8 号和 9 号方程中每个自变 量的偏回归系数进行显著性 t 检验发现 表 6 中的  $t_N$ 值 均小于临界值  $t_{0.05(8)} = 2.306$  这说明,变量 N 的偏回归 系数不显著 应从方程中剔除该变量 即加入 N 值后的 二元回归方程没有显著意义。

### 表 6 用 I 值和 N 值预测 PAHs 类化合物的

### 3种活性参数的二元线性回归方程

方稻 编号	量参数 异	回归方程	相关 系数 R	样本 数	t <sub>I</sub>	t <sub>N</sub>
7	$\lg K_{oc} \lg$	$K_{oc} = 1.853E-3I-6.500E-2N + 0.$	8860.996	11 8.	. 255-0	. 506
8	lgK <sub>ow</sub> lg	$K_{ow} = 1.953E-3I-1.037E-1N + 1.$	1270.997	10 10	. 223-0	. 967
9	lgBC <b>l</b> gF	BCF = 1.754E-3I-7.820E-2N + 196	6.1870.998	10 10	. 685-0	. 850

注:  $t_1 n t_N$ 分别表示自变量 I 和 N 的偏回归系数进行 t 检验的计算 t 值。

### 3 讨论(Discussion)

上述研究结果表明,PAHs 的 lgK<sub>e</sub>、lgK<sub>ow</sub>和 lgBCF分别与其相应的 I 值和 N 值之间存在非常显 著的相关性,用 I 值建立的一元回归方程的相关系 数分别为 0.996、0.997 和 0.995,用 N 值建立的一 元回归方程的相关系数分别为 0.958、0.954 和 0. 956,且统计检验表明均属显著相关,回归方程的回 归系数检验均有意义。相关系数及 t 检验结果表 明,用 I 值建立的一元回归方程预测精度略好于用 N 值建立的一元回归方程,而用 I 值和 N 值共同建 立的二元预测方程经 t 检验发现,方程中变量 N 的 偏回归系数的统计检验没有意义。文献 [8]报道了 用农药的 S<sub>w</sub>(有机化合物在水中的溶解度) 对其 K<sub>ac</sub> 和 K<sub>w</sub>进行预测 预测误差的均值分别为 0.88 和 0. 74 而本研究用 I 值对 K<sub>ac</sub>和 K<sub>ac</sub>预测的误差均值分 别为 0.17 和 0.06 ,用 N 值对 K<sub>ac</sub>和 K<sub>ac</sub>预测的误差 均值分别为 0.24 和 0.25 预测精度明显更高 这表明, 利用 PAHs 类化合物的 I 值或 N 值预测其相应的  $K_{ax}$ 、 K<sub>w</sub>和 BCF 等活性参数可以达到较好的效果。同时 用 气相色谱法测定 I 值影响因素少 快速 简便 易操作, 实验结果显示 对上述 PAHs 类化合物的 I 值测定的相 对百分偏差为 0.079% ~ 0.16% ,有着很好的重现性。 采用实验法直接测定 K<sub>ac</sub>、K<sub>aw</sub>和 BCF 等参数值受到的 影响因素较多 实验中涉及的动力学及相平衡过程复 杂 既受温度、生物种类、个体大小和脂肪含量等实验 条件的影响 又与化合物自身的结构以及测定方法的 准确度有关 因而 实际测定值往往误差较大 而通过 操作条件相对易于控制的色谱分析方法获得 I 值 进 而对 PAHs 类化合物的 K<sub>ac</sub>、K<sub>ow</sub>和 BCF 进行预测 在保 证较好的预测精度的同时,大大简化了实验步骤,减少 了实验的工作量 为进一步了解和探究 PAHs 类化合物 在不同环境的迁移、转化和富集浓缩的潜在趋势提供 了可靠的数据支持。

综上所述,利用 PAHs 类化合物的 I 值建立一 元方程对 K<sub>ac</sub>、K<sub>ax</sub>和 BCF 3 种活性参数进行预测 同 时预测精度高,结果可靠,工作量小,使活性参数的 预测工作变得更加简单易行,具有很好的实际应用 价值。

#### 参考文献:

- [1] Douben P E T. PAHs: An Ecotoxicological Perspective
   [M]. Chichester: John Wiley & Sons Ltd., 2003: 3
- [2] 王欣心,金银龙. 多环芳烃遗传毒性研究进展[J].
   环境与健康杂志,2010,27(2):174-177
   Wang X X, Jin Y L. Research progress on genotoxicity of polycyclic aromatic hydrocarbons [J]. Journal of Environ-
- ment and Health, 2010, 27(2): 174 177 (in Chinese)
  [3] 岳敏,谷学新,邹洪,等. 多环芳烃的危害与防治[J].
  首都师范大学学报: 自然科学版, 2003, 24(3): 40 44
  Yue M, Gu X X, Zou H, et al. Killer of health——Polycyclic aromatic hydrocarbons [J]. Journal of Capital Normal University: Natural Science Edition, 2003, 24
- [4] 邓欢,郭光霞,乔敏. 多环芳烃污染土壤毒性评价指标的研究进展[J]. 生态毒理学报,2009,4(1):1-13

(3): 40 – 44 (in Chinese)

Deng H , Guo G X , Qiao M. Advances in the biological indicators for toxicity assessment of polycyclic aromatic hydrocarbons contaminated soil-A Review [J]. Asian Journal of Ecotoxicology ,2009 ,4(1): 1 - 13 (in Chinese)

- [5] 王连生. 有机污染化学[M]. 北京: 高等教育出版 社,2004: 253-271
- [6] 夏玉宇. 化验员实用手册[M]. 北京: 化学工业出版
   社,2004: 994 1042
- [7] 王连生. 有机污染化学进展[M]. 北京:化学工业出版社,2006:144-166
- [8] 莫汉宏,杨克武,安凤春,等.农药和其它有机化合物环境参数的相关性及其预测[J].环境化学, 1994,13(5):401-408

Mo H H , Yang K W , An F C , et al. The relationship and prediction of environmental parameter of pesticides and other organic compounds [J]. Environmental Chemistry , 1994 , 13(5): 401 – 408 (in Chinese)

- [9] Sabljić A , Güsten H , Verhaar H , et al. QSAR modelling of soil sorption. Improvements and systematics of logK<sub>oc</sub> vs. logK<sub>ow</sub> correlations [J]. Chemosphere , 1995 , 31(11-12): 4489 - 4514
- [10] de Lima Ribeiro F A, Ferreira M M C. QSPR models of boiling point ,octanol-water partition coefficient and retention time index of polycyclic aromatic hydrocarbons
  [J]. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM , 2003 ,663 (1-3): 109 – 126
- [11] Ferreira M M C. Polycyclic aromatic hydrocarbons: A QSPR study [J]. Chemosphere ,2001 ,44(2): 125 – 146
- [12] Bermúdez-Saldaña J M, Escuder-Gilabert L, Medina-Hernúndez M J, et al. Modelling bioconcentration of pesticides in fish using biopartitioning micellar chromatography [J]. Journal of Chromatography A, 2005, 1063(1-2): 153 – 160
- [13] Wang Y H , Wong P K. Correlation relationships between physico-chemical properties and gas chromatographic retention index of polychlorinated-dibenzofurans
   [J]. Chemosphere , 2003 , 50(4) : 499 - 505
- [14] Hu R J, Liu H X, Zhang R S, et al. QSPR prediction of GC retention indices for nitrogen-containing polycyclic aromatic compounds from heuristically computed molecular descriptors [J]. Talanta , 2005, 68(1): 31 – 39
- [15] 许罗南,梁桂兆,梅虎,等.三维原子场全息作用矢量用于芳香类化合物的三维QSAR研究[J].生态毒理学报,2008,3(1):72-79
  - Xu L N , Liang G Z , Mei H , et al. 3D-QSAR study of 200 aromatic compounds using three-dimensional holographic vector of atomic interaction field (3D-HoVAIF) [J]. Asian Journal of Ecotoxicology , 2008 , 3(1): 72 – 79 (in Chinese)
- [16] Héberger K. Quantitative structure (chromatographic) retention relationships [J]. Journal of Chromatography A , 2007 , 1158(1-2): 273 – 305

- [17] Škrbić B , Djurišić-Mladenović N , Cvejanov J. Discrimination between linear and non-linear models for retention indices of polycyclic aromatic hydrocarbons in the socalled Lee's scale [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems , 2004 , 72(2): 167 – 171
- [18] Drosos J C , Viola-Rhenals M , Vivas-Reyes R. Quantitative structure retention relationships of polycyclic aromatic hydrocarbons gas-chromatographic retention indices [J]. Journal of Chromatography A , 2010 , 1217 (26): 4411-4421
- [19] 仝建波,李云飞,刘淑玲,等. 多氯代二苯并呋喃定 量结构性质关系的研究[J]. 计算机与应用化学, 2010,27(2): 225-227
  - Tong J B , Li Y F , Liu S L , et al. Study the relevance of quantitative nature of the structure of multi-chlorimated dibenzofuran [J]. Computers and Applied Chemistry , 2010 , 27(2): 225 – 227 ( in Chinese)
- [20] 李浩春.分析化学手册(气相色谱分析 第五册)[M].北京:化学工业出版社,1999:226-237 ◆