多环芳烃活性参数与色谱保留指数相关性分析

解静芳¹*,韩琦¹,杨彪¹,郝婷娟¹,张秋华¹,李瑞金²,范仁俊³

- 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

关键词: 多环芳烃; 有机碳吸附常数(K_{∞}); 正辛醇/水分配系数(K_{∞}); 生物浓缩因子(BCF); 色谱保留指数(I)

文章编号: 1673-5897(2012)1-407-06 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 Jingfang¹,* , Han Qi¹, Yang Biao¹, Hao Tingjuan¹, Zhang Qiuhua¹, Li Ruijin², Fan Renjun³

- 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 equation of I and N with lgK_{oc} , lgK_{ow} , lgBCF were analyzed with t-test, which revealed that the partial 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

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^[1]。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^[2]。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^[3] ,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^[4]。

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_{oc})、正辛醇/水分配系数 (octanol water partition coefficient , Kow) 和生物浓缩 因子(bioconcentration factor, BCF) 等 其中 Koc 反映 土壤对污染物的吸附过程 长 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[5]。目前 ,K,,,主要采用批量 平衡法测定 水 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[6-7]。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 Koc X Kow和 BCF 例如 K_{oc}、K_{ow}和 BCF 之间的互相预测^[8-9] 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 Koc、Kow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[1045]。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[16-19]。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) ^[20]。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、蒽、荧蒽、芘、屈、苯并[b]荧蒽、苯并[k]荧蒽、苯并[a]芘、二苯并[ah]蒽等多环 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_2 ,流速 30 mL•min $^{-1}$; 燃气为 H_2 ,流速 35 mL•min $^{-1}$; 空气流速 400 mL•min $^{-1}$ 。

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_i ,根据公式(1) 求出该种 PAHs 的 I 值。

$$I = 100 [Z + (lgX_i - lgX_Z) / (lgX_{Z+1} - lgX_Z)]$$
 $\equiv (1)$

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 $\mathcal{L}_{X_{Z}} < X_{(Z+1)}$ 。

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	I	N	${\rm lgK}_{\rm oc}$	${\rm lgK}_{\rm ow}$	lgBCF
1	萘	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	蒽	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]蒽	3 138	5	6.52	6.84	5.84

注: $\lg K_{oc} \setminus \lg K_{ow}$ 和 $\lg BCF$ 值引自参考文献 [8], $\lg K_{oc} \setminus \lg K_{ow}$ 和 $\lg BCF$ 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_{oc} 、 l_gK_{ow} 和 l_gBCF 做一元线性回归分析 ,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 $t_{0.05(9)}=2.262$,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_{oc} 、 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_{oc} 、 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 2 Linear correlation between I values and three active parameters of PAHs

方	方程	会 粉	回归方程	相关 样本		CE	
	编号	参 数	凹归力性	系数 R	数	SE	ι
	1	${\rm lgK}_{\rm oc}$	${\rm lgK_{oc}} = 1.743{\rm E} - 3{\rm I} + 0.881$	0.996	11	0.1043	1.556
	2	${\rm lgK}_{\rm ow}$	${\rm lgK_{ow}} = 1.693 {\rm E} - 3 {\rm I} + 1.496$	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_{oc} 、 lgK_{ow} 和 lgBCF 的误差分析

Table 3 Error analysis for estimated values of $\lg K_{oc}$, $\lg K_{ow}$ and $\lg BCF$ of PAHs based on I values

化合物		${\rm lgK_{oc}}$			${\rm lgK_{\rm ow}}$			lgBCF	
编号	Y	e	Re%	Y	e	Re%	Y	e	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 $l_g K_{oc}$ 、 $l_g K_{ow}$ 和 $l_g B C F$ 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 $l_g K_{oc}$ 、 $l_g K_{ow}$ 和 $l_g B C F$ 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 4 Linear correlation between N values and 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	${\rm lgK}_{\rm oc}$	$lgK_{oc} = 0.960N + 1.081$	0.958	11	0.317 9.997
5	${\rm lgK}_{\rm ow}$	${\rm lgK_{ow}} = 0.954{\rm N} + 1.446$	0.954	10	0.334 9.045
6	lgBCF	lgBCF = 0.871N + 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 4 号、5 号和 6 号方程的预测值与实测值间的 |e| 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 ,1 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 4 号、5 号和 6 号方程也可较好地预测 K_{ox} 、 K_{ox} 和 BCF。

表 5 用 N 值预测 PAHs 类化合物的 lgK_{oc} 、 lgK_{ow} 和 lgBCF 的误差分析

Table 5 Error analysis for estimated values of $\rm lg K_{\rm oc}$, $\rm lg K_{\rm ow}$ and $\rm lg BCF$ of PAHs based on N values

化合物		lgK_{oc}			lgK_{ow}			lgBCF	
编号	Y	e	Re%	Y	e	Re%	Y	e	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 $\lg K_{\infty}$ 、 $\lg K_{\infty}$ 和 $\lg BCF$ 进行预测 ,利用统计软件用 PAHs 类化合物的 I 值和 N 值对 $\lg K_{\infty}$ 、 $\lg K_{\infty}$ 和 $\lg BCF$ 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 $\lg K_{\infty}$ 、 $\lg K_{\infty}$ 和 $\lg BCF$ 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

Table 6 Linear correlation between I , N values and three active parameters of PAHs

方程 参数 编号	回归方程	相关: 系数 R		t _I t _N		
7 lgK _{oc} lgK _{oc} :	= 1.853E-3I-6.500E-2N -	+0.8860.996	11 8.2	255-0.506		
$8 lgK_{ow}lgK_{ow}$	=1.953E-3I-1.037E-1N	+ 1. 1270. 997	10 10.	223-0.967		
9 lgBC l gBCF =	= 1.754E-3I-7.820E-2N +	196.1870.998	10 10.	685-0.850		
\succeq ι_I 和 ι_N 分别表示自变量 I 和 N 的偏回归系数进行 ι 检验的计算 ι 值。						

3 讨论(Discussion)

上述研究结果表明,PAHs 的 lgK。、lgK。,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_w (有机化合物在水中的溶解度) 对其 K_{oo} 和 K_w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 oc 和 K ow 预测的误差均值分 别为 0.17 和 0.06 ,用 N 值对 K₀ 和 K₀ 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...、 K_w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 Koc、Kocv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 Koc、Kow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_{oc} 、 K_{ow} 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 Environment 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 (3): 40-44 (in Chinese)
- [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

 Deng H, Guo G X, Qiao M. Advances in the biological indicators for toxicity assessment of polycyclic aromatic hydro-

- carbons 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 $logK_{oc}$ vs. $logK_{ow}$ 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 JB, Li YF, Liu SL, 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 ◆