

邻苯二甲酸酯类化合物正辛醇-水分配系数的 QSPR 研究

隆兴兴, 牛军峰*, 史姝琼

(北京师范大学环境学院水环境模拟国家重点实验室, 北京 100875)

摘要: 采用 PM3 算法计算邻苯二甲酸酯类化合物(PAEs)的量子化学参数, 应用偏最小二乘(PLS)算法建立了 PAEs 的正辛醇-水分配系数(K_{ow})的定量结构-性质相关(QSPR)模型. 模型的结果表明, 用量子化学参数建立的 QSPR 模型相关性显著, 具有较好的稳健性和预测能力, 因此, 利用该模型可对其他 PAEs 分子的 $\lg K_{ow}$ 值进行初步预测. 模型的结果表明, 影响 $\lg K_{ow}$ 的主要量子化学参数是分子总能量 TE 、相对分子质量 M_r 、平均分子极化率 α 和分子生成热 ΔH_f . $\lg K_{ow}$ 随着 M_r 和 α 的增大而增大, 随着 TE 和 ΔH_f 的增大而减小.

关键词: 邻苯二甲酸酯(PAEs); 定量结构-性质相关(QSPR); 正辛醇-水分配系数(K_{ow}); PM3 算法; 偏最小二乘(PLS)

中图分类号: X131 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2006)11-2318-05

Research on Quantitative Structure-Property Relationships for *n*-Octanol/ Water Partition Coefficients of Phthalic Acid Esters

LONG Xing-xing, NIU Jun-feng, SHI Shu-qiong

(The State Key Laboratory of Water Environment Simulation, School of Environment, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

Abstract: Quantum chemical parameters based on the PM3 method were calculated for phthalic acid esters (PAEs). Using partial least squares (PLS) algorithm, a quantitative structure-property relationships (QSAR) model for the *n*-octanol/ water partition coefficients (K_{ow}) of PAEs was developed. The result indicates that the model has a good stability and predicting ability. It can be concluded from this study that the main factors affecting $\lg K_{ow}$ of PAEs are total energy (TE), relative molecular weight (M_r), average molecular polarizability (α) and standard heat of formation (ΔH_f). The $\lg K_{ow}$ values increase with increasing M_r and α values. In contrast, increasing TE and ΔH_f values leads to the decrease of $\lg K_{ow}$.

Key words: phthalic acid esters (PAEs); quantitative structure-property relationship (QSPR); *n*-octanol/ water partition coefficients (K_{ow}); PM3; partial least squares (PLS)

邻苯二甲酸酯类化合物(phthalic acid esters, PAEs)主要用作增塑剂及农药、涂料、印染、化妆品和香料等的生产, 是一类典型的环境内分泌干扰物^[1,2]. 近年来, 随着工业的生产, 塑料垃圾大量增加, 进入环境中的 PAEs 广泛存在于大气、水体、土壤和生物体中, 成为全球性最普遍的污染物之一^[3~6]. 1979 年, 有 5 种 PAEs 被列入美国环境保护局“优先污染物”的清单^[7]; 此外, 目前也已经有 3 种 PAEs 被列入中国环境“优先污染物”的“黑名单”.

正辛醇-水分配系数(K_{ow})是衡量有机污染物脂溶性大小的参数, 研究表明, 有机物的 K_{ow} 与水溶解度、生物富集系数以及沉积物、土壤的吸附系数都有很好的相关性, 这使得 K_{ow} 成为评价有机污染物环境行为的一个重要的理化参数. 传统测定 K_{ow} 的摇瓶法、慢搅拌法和产生柱法虽然简单易行, 但测定化合物费时, 而且对高脂溶性的化合物测定误差较大; 采用反相液相色谱间接测定 K_{ow} 的方法虽然

快速、准确, 但是要求参考物的 K_{ow} 测定值必须准确, 否则可能造成测定疏水性较强的 PAEs 的 K_{ow} 值误差较大^[8,9]; 因此建立 PAEs 的定量结构-性质相关(quantitative structure-property relationships, QSPR)模型显得尤为必要, 可靠稳定 QSPR 模型的建立能够对未知化合物进行较好的预测, 并有助于对分配机理的解释^[10~13]. 在半经验分子轨道算法中, 由 PM3 算法^[14] 计算得到的分子结构参数, 如分子生成热(ΔH_f), 比 AM1 算法计算得到的结果更接近实验结果^[15], 而 MNDO 算法将原子间的距离近似等于它们的范德华半径之和导致过高的估计了核-核排斥能^[16], 因此, 本研究应用 PM3 算法对 PAEs

收稿日期: 2005-12-27; 修订日期: 2006-03-07

基金项目: 国家重点基础研究发展规划(973)项目(2003CB415204); 国家教育部留学回国人员科研启动基金项目

作者简介: 隆兴兴(1984~), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为有机污染物的环境行为.

* 通讯联系人, E-mail: junfeng@bnu.edu.cn

的分子结构参数进行全优化计算. 在进行 PAEs 的 $\lg K_{ow}$ 的 QSPR 研究时, 偏最小二乘 (partial least squares, PLS) 算法^[17] 可以最大限度地表征自变量和因变量, 并可以避免自变量之间的信息重叠和共线性等问题, 而且能在一定程度上保证模型的外推预测能力, 因此, 本研究采用 PLS 算法建立 PAEs 的 $\lg K_{ow}$ 的 QSPR 模型.

1 材料与方法

1.1 研究对象

研究对象为 21 种 PAEs, 分别为邻苯二甲酸二甲酯 (Dimethyl phthalate, DMP)、邻苯二甲酸二乙酯 (Diethyl phthalate, DEP)、邻苯二甲酸二烯丙酯 (Diallyl phthalate, DAP)、邻苯二甲酸二丙酯 (Dipropyl phthalate, DPP)、邻苯二甲酸二正丁酯 (Di-*n*-butyl phthalate, DnBP)、邻苯二甲酸二异丁酯 (Diisobutyl phthalate, DIBP)、邻苯二甲酸丁基苄基酯 (Butylbenzyl phthalate, BBP)、邻苯二甲酸二己酯

(Dihexyl phthalate, DHP)、邻苯二甲酸二正辛酯 (Di-*n*-octyl phthalate, DnOP)、邻苯二甲酸丁基-2-乙基己基酯 (Butyl-2-ethylhexyl phthalate, BOP)、邻苯二甲酸(2-乙基己基)酯 [Di(2-ethylhexyl) phthalate, DEHP]、邻苯二甲酸二异辛酯 (Diisooctyl phthalate, DIOP)、邻苯二甲酸二异壬酯 (Diisononyl phthalate, DINP)、邻苯二甲酸二异癸酯 (Diisodecyl phthalate, DIDP)、邻苯二甲酸二(十一烷基)酯 (Diundecyl phthalate, DUP)、邻苯二甲酸二(十三烷基)酯 (Ditridecyl phthalate, DTDp)、邻苯二甲酸二正戊酯 (Di-*n*-amyl phthalate, DnAP)、邻苯二甲酸二苯基酯 (Diphenyl phthalate, DPhP)、邻苯二甲酸二庚酯 (Diheptyl phthalate, DHeP)、邻苯二甲酸二正壬酯 (Di-*n*-nonyl phthalate, DnNP)、邻苯二甲酸二癸酯 (Didecyl phthalate, DDP), 所研究的 21 种 PAEs 列于表 1 中. 其中前 16 种 PAEs 的 $\lg K_{ow}$ 值取参考文献[8]中推荐值.

1.2 性质参数和结构参数

表 1 PAEs 的正辛醇-水分配系数 (K_{ow}) 和部分量子化学参数

Table 1 K_{ow} values to PAEs and part of the quantum chemical parameters

编号	化合物 简称	$\lg K_{ow}$ (实验值)	$\lg K_{ow}$ (预测值)	SE _{Pred} ¹⁾	残差 ²⁾	部分量子化学参数			
						TE	M_r	α	ΔH_f
1	DMP	1.61	1.53	±0.17	0.08	-2 514.111	194.187	91.779	-154.056
2	DEP	2.38	2.52	±0.15	-0.14	-2 813.176	222.240	108.410	-164.508
3	DAP	3.23	2.41	±0.15	0.82	-3 048.293	246.262	126.861	-114.614
4	DPP	3.27	3.38	±0.13	-0.11	-3 111.960	250.294	124.035	-168.482
5	DnBP	4.45	4.42	±0.11	0.03	-3 411.405	278.347	135.332	-187.714
6	DIBP	4.11	4.40	±0.11	-0.29	-3 411.377	278.347	134.921	-187.061
7	BBP	4.59	4.82	±0.10	-0.23	-3 734.847	312.365	164.458	-145.878
8	DHP	6.3	6.34	±0.09	-0.04	-4 009.577	334.455	163.831	-209.589
9	DnOP	8.06	8.26	±0.11	-0.20	-4 607.770	390.562	192.315	-231.952
10	BOP	6.28	5.94	±0.09	0.34	-4 008.565	334.455	164.233	-186.258
11	DEHP	7.5	8.22	±0.10	-0.72	-4 607.642	390.562	193.171	-229.007
12	DIOP	8	8.23	±0.11	-0.23	-4 607.718	390.562	192.292	-230.750
13	DINP	9	9.21	±0.12	-0.21	-4 906.866	418.615	206.264	-243.141
14	DIDP	10.3	10.15	±0.14	0.15	-5 205.914	446.669	220.129	-253.204
15	DUP	11.5	11.12	±0.16	0.38	-5 505.035	474.723	234.833	-264.937
16	DTDp	13.4	13.04	±0.21	0.36	-6 103.221	530.830	263.147	-287.155
17	DnAP	5.62 ^[18]	5.38	±0.10		-3 710.491	306.401	149.542	-198.639
18	DPhP	4.53 ^[19]	4.10	±0.12		-3 947.473	330.423	161.656	-191.758
19	DHeP	6.87 ^[20]	7.21	±0.10		-4 308.329	362.508	180.983	-212.829
20	DnNP	8.60 ^[20]	9.21	±0.12		-4 906.857	418.615	206.314	-242.921
21	DDP	8.83 ^[18]	10.17	±0.14		-5 205.948	446.669	220.578	-253.984

1) SE_{Pred}: 预测值标准误差; 2) 残差 = $\lg K_{ow}$ (实验值) - $\lg K_{ow}$ (预测值)

采用 MOPAC (6.0) 软件中的 PM3 算法, 计算得到了 PAEs 的量子化学参数. 根据线性溶剂化能相关模型, 有机物在正辛醇-水两相的分配性质还与

氢键的形成能力、原子的静电荷有关^[21], 因此, 本研究也将 ϵ_a 、 ϵ_b 、 q^- 等参数加入到所选参数中, 其中 $\epsilon_a = 0.01(E_{LUMO} - E_{HOMO(H_2O)})$ 、 $\epsilon_b = 0.01(E_{LUMO(H_2O)} -$

$E_{\text{HOMO}}^{[21]}$, $E_{\text{LUMO}(\text{H}_2\text{O})}$ 是水分子最低未占据分子轨道能, $E_{\text{HOMO}(\text{H}_2\text{O})}$ 是水分子最高占据分子轨道能, 所选取的 17 种量子化学参数列于表 2 中。

表 2 描述 PAEs 化合物的量子化学参数

Table 2 List of molecular structural descriptors of PAEs

描述符	描述意义
M_r	相对分子质量
ΔH_f	分子生成热
TE	分子总能量
EE	电子能量
CCR	分子核-核排斥能
E_{HOMO}	分子最高占据轨道能
$E_{\text{HOMO}-1}$	分子次最高占据轨道能
E_{LUMO}	分子最低未占据轨道能
$E_{\text{LUMO}+1}$	分子次最低未占据轨道能
Q_H^+	分子中 H 原子所带最大正电荷
Q_C^-	分子中 C 原子所带最负电荷
Q_O^-	分子中 O 原子所带最负电荷
μ	平均分子偶极矩
α	平均分子极化率
ϵ_a	氢键给体能力
ϵ_b	氢键受体能力
q^-	分子中原子的最负静电荷

1.3 统计分析

采用 SIMCA (6.0) 软件进行 PLS 分析, 在进行 PLS 分析时, 当其中 1 个 PLS 主成分交叉验证的 Q^2 值(当前 PLS 主成分所能解释的因变量的总方差的比例) 大于程序缺省设置的显著性水平限时, 即认为该主成分有意义. Q_{cum}^2 为所提取的所有 PLS 主成分所能解释的因变量的总方差比例, 当 Q_{cum}^2 大于 0.5 时, 即认为所建的模型具有较好的预测能力. 所得模型采用 PLS 主成分数(A)、 Q_{cum}^2 、实测值与预测值的相关系数(R)和模型的显著性水平(p)等参数来表征. 除了 PLS 分析中预测值的标准误差(SE_{pred})外, 同时采用标准误差(SE)评价模型的预测精度. SE 由下式计算得到:

$$SE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n [\lg K_{\text{ow}}(\text{实测值})_i - \lg K_{\text{ow}}(\text{拟合值})_i]^2}{n - A - 1}} \quad (1)$$

式中: n 为模型中化合物的数目.

2 结果与讨论

在 PLS 分析中, 用 VIP(variable importance in the projection) 表征模型中自变量的相对重要性的大小, 当 VIP 大于 1 时即认为该自变量对因变量的贡献较大. 以 17 种量子化学参数为自变量, 16 种

PAEs 的 $\lg K_{\text{ow}}$ 值为因变量, 进行 PLS 分析, 分析过程中逐步累计剔除 VIP 最小的自变量, 直至 Q_{cum}^2 、实验值和预测值的相关系数 R 达到最大, 显著性水平 p 达到最小. 根据以上的分析方法, 得到 PAEs 的 $\lg K_{\text{ow}}$ 优化的 QSPR 模型, 模型中包含 TE 、 M_r 、 α 、 ΔH_f 4 个自变量, 其 VIP 值分别为 1.018、1.018、1.012、0.950. 其中, ΔH_f 的 VIP 值接近于 1, 因此对因变量也有一定的贡献.

在本研究所建立的模型中, $R_{X(\text{adj.})(\text{cum})}^2$ 和 $R_{Y(\text{adj.})(\text{cum})}^2$ 分别表示所提取的主成分所能解释的矩阵 X 和矩阵 Y 的方差的比例, Eig 为表征 PLS 主成分重要性大小的本征值. 模型的结果表明, 主成分个数 $A = 1$, $R_{X(\text{adj.})(\text{cum})}^2 = 0.952$, $R_{Y(\text{adj.})(\text{cum})}^2 = 0.988$, $Eig = 3.866$. 由此可看出所选取的 1 个主成分解释了自变量矩阵方差的 95.2%, 解释了因变量矩阵方差的 98.8%. 模型的 $O_{\text{cum}}^2 = 0.987$ (远大于 0.5). $SE = 0.370$, 表明所建立的 QSPR 模型具有较好的预测能力和较小的标准误差. $\lg K_{\text{ow}}$ 的预测值和实验值的相关关系如图 1 所示, 其相关系数 R 为 0.995, 显著性水平 $p < 0.0001$, 说明模型中 $\lg K_{\text{ow}}$ 的预测值和实验值的相关关系显著. 应用该模型对表 1 列出的其他 5 种 PAEs 的 $\lg K_{\text{ow}}$ 值进行了预测, 预测值列于表 1 中. 在表 1 中同时列出这 5 种 PAEs 的 $\lg K_{\text{ow}}$ 的实验值, 对这 5 种 PAEs 的 $\lg K_{\text{ow}}$ 的实验值与预测值进行比较, 发现其中 4 种 PAEs 的 $\lg K_{\text{ow}}$ 值相对误差较小, 而 DDP 的 $\lg K_{\text{ow}}$ 值相对误差稍大 (13.2%), 这可能由于不同文献中实验测定的差异导致了误差较大, 但与文献报道的实验值误差相比, 例如, Leyder 等^[22] 与 McDuffie^[23] 测定的 DnOP 的 $\lg K_{\text{ow}}$ 值分别为 5.22、8.06, 本文所预测的 DDP 的误差相对较小, 表明所建立的模型具有较好的稳定性和预测能力.

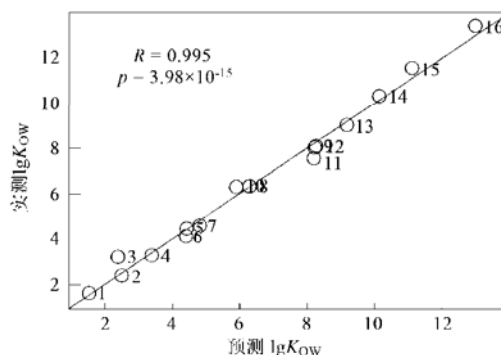


图 1 PAEs 的 $\lg K_{\text{ow}}$ 实验值与预测值的相关关系

Fig. 1 Plot of observed and predicted $\lg K_{\text{ow}}$ for PAEs

根据 PLS 分析后得到的各自变量的准回归系数和常数项, 得到模型的预测方程为:

$$\begin{aligned} \lg K_{ow} = & -6.691 + 9.093 \times 10^{-3} M_r \\ & - 8.500 \times 10^{-4} TE + 1.816 \times 10^{-2} \alpha \\ & - 1.716 \times 10^{-2} \Delta H_f \\ n = 16, Q_{cum}^2 = & 0.987, R = 0.995, \\ p = & 3.98 \times 10^{-15} \end{aligned} \quad (2)$$

在建立的 QSPR 模型中, 影响 $\lg K_{ow}$ 的主要量子化学参数是 TE 、 M_r 、 α 和 ΔH_f 。由式(2)中准回归系数的正负可以判断各个自变量对因变量的影响, PAEs 的 $\lg K_{ow}$ 值随着 M_r 和 α 的增大而增大, 随着 TE 和 ΔH_f 的增大而减小。模型中因变量 $\lg K_{ow}$ 与自变量 α 、 M_r 、 TE 和 ΔH_f 以及自变量之间的相关关系列于表 3 中。从表 3 可以看出, 这 4 个自变量与 $\lg K_{ow}$ 都有较显著的相关关系, 此外, 这 4 个自变量之间也有显著的相关关系。用简单的多元线性回归方法, 难以确定有重要影响的自变量, 而用 PLS 分析方法可以避免自变量间的共线性问题, 能够在自变量高度相关的条件下回归建模。在所建立的 QSPR 模型中, 选取的 1 个主成分包含的量子化学参数可能反映了分子类似的性质。模型中, α 、 M_r 、 TE 参数之间的相关关系显著, α 表示分子的平均极化率, 是指一个中性分子由于邻近的具有永久或暂时偶极的分子作用而产生偶极的能力, 它与分子的本征体积成正比^[24]。因此, 这 3 个量子化学参数在一定程度上可能反映了分子的体积性质, 即 PAEs 的分子体积越大, 越倾向于分配到弱极性的有机相(正辛醇相)中; 这是因为分子体积越大, 需要在溶剂中形成的空穴也越大, 为克服分子间内聚作用所需的能量也越大^[25], 正辛醇相分子间的内聚作用比水相弱的多, 因而, 体积(或 α)越大的化合物分子越容易分配到正辛醇相中。此外, 在对多氯有机物分配性质的研究中, 戴家银等^[26]得到分子 TE 值的增大导致 $\lg K_{ow}$ 值的减小, 这与本文的结论相一致。本文得到 ΔH_f 值越小的 PAE 分子越容易分配到正辛醇相中, 有关此方面的机理解释还有待于进一步研究。

表 3 因变量和部分量子化学参数的相关系数

Table 3 Correlation coefficients of dependent variable and some quantum chemical descriptors

	$\lg K_{ow}$	M_r	TE	α	ΔH_f
$\lg K_{ow}$	1				
M_r	0.995	1			
TE	-0.996	-1.000	1		
α	0.989	0.998	-0.997	1	
ΔH_f	-0.929	-0.919	0.923	-0.892	1

3 结论

应用 PM3 半经验轨道算法计算得到了不同分子结构 PAEs 的量子化学参数, 通过 PLS 分析对所采用的量子化学参数进行筛选, 建立了 PAEs 的 $\lg K_{ow}$ 的 QSPR 模型, 并对其它 5 种 PAEs 的 $\lg K_{ow}$ 值进行了初步预测。模型的 Q_{cum}^2 值为 0.987, $\lg K_{ow}$ 的预测值和实验值的相关系数 R 为 0.995, 说明建立的模型具有很好的稳健性和预测能力。影响 PAEs 的 $\lg K_{ow}$ 的主要因素是分子总能量 TE 、相对分子质量 M_r 、平均分子极化率 α 和分子生成热 ΔH_f 。 $\lg K_{ow}$ 随着 M_r 和 α 的增大而增大, 随着 TE 和 ΔH_f 的增大而减小, 所建模型有助于对 PAEs 在正辛醇-水体系中分配机理解释。

参考文献:

- [1] 李文兰, 季宇彬, 杨玉楠, 等. 邻苯二甲酸丁基苯酯的生殖毒性及其作用机制[J]. 环境科学, 2004, **25**: 1~5.
- [2] Fulcher S M, Willoughby C R, Heath J A, *et al.* Developmental toxicity of di-(C7-C9 alkyl) phthalate and di-(C9-C11 alkyl) phthalate in the rat[J]. *Reprod. Toxicol.*, 2001, **15**: 95~102.
- [3] 莫测辉, 蔡全英, 吴启堂, 等. 我国城市污泥中邻苯二甲酸酯的研究[J]. 中国环境科学, 2001, **21**(4): 362~366.
- [4] 蔡全英, 莫测辉, 李云辉, 等. 广州、深圳地区蔬菜生产基地土壤中邻苯二甲酸酯(PAEs)研究[J]. 生态学报, 2005, **25**(2): 283~288.
- [5] Yuan S Y, Liu C, Liao C S, *et al.* Occurrence and microbial degradation of phthalate esters in Taiwan river sediments[J]. *Chemosphere*, 2002, **49**: 1295~1299.
- [6] Mackintosh C E, Maldonado J, Hongwu J, *et al.* Distribution of phthalate esters in a marine aquatic food web: comparison to polychlorinated biphenyls[J]. *Environ. Sci. Technol.*, 2004, **38**: 2011~2020.
- [7] Keith L H, Telliard W A. Priority pollutants[J]. *Environ. Sci. Technol.*, 1979, **13**: 416~423.
- [8] Staples C A, Peterson D R, Parkerton T F, *et al.* The environmental fate of phthalate esters: a literature review[J]. *Chemosphere*, 1997, **35**(4): 667~749.
- [9] Finizio A, Vighi M, Sandroni D. Determination of n-octanol/water partition coefficient (K_{ow}) of pesticide: critical review and comparison of methods[J]. *Chemosphere*, 1997, **34**(1): 131~161.
- [10] Chen J W, Peijnenburg W J G M, Quan X, *et al.* Is it possible to develop a QSPR model for direct photolysis half-lives of PAHs under irradiation of sunlight? [J]. *Environ. Pollut.*, 2001, **114**: 137~143.
- [11] Chen J W, Quan X, Peijnenburg W J G M, *et al.* Quantitative structure-property relationships (QSPRs) on direct photolysis quantum yields of PCDDs[J]. *Chemosphere*, 2001, **43**: 235~241.

- [12] Niu J F, Yu G. Molecular structural characteristics governing biocatalytic oxidation of PAHs with hemoglobin[J]. Environ. Toxicol. Pharmacol. , 2004, **18**: 39~ 45.
- [13] Niu J F, Huang L P, Chen J W. Quantitative structure-property relationships on photolysis of PCDD/Fs adsorbed to spruce (*Picea abies* L. Karst.) needle surfaces under sunlight irradiation[J]. Chemosphere, 2005, **58**: 917~ 924.
- [14] Stewart J J P. Optimization of parameters for semiempirical methods. Method[J]. J. Comp. Chem. , 1989, **10**: 209~ 220.
- [15] 贡雪东,王剑,肖鹤鸣. 硝酸酯几何构型、生成热和电子结构的 PM3 研究[J]. 高等学校化学学报, 1994, **15**: 1817~ 1820.
- [16] 刘世熙, 栗巍, 曹槐, 等. 核酸四碱基体的量子化学计算方法比较[J]. 结构化学, 2001, **20**: 313~ 318.
- [17] Wold S, Sjöström M, Eriksson L. PLS-regression: a basic tool of chemometrics[J]. Chemom. Intell. Lab. Syst. , 2001, **58**: 109~ 130.
- [18] Ellington J J. Octanol/water partition coefficients and water solubilities of phthalate esters[J]. J. Chem. Eng. Data. , 1999, **44**: 1414~ 1418.
- [19] Parkerton T F, Konkel W J. Application of quantitative structure-activity relationships for assessing the aquatic toxicity of phthalate esters[J]. Ecotox. Environ. Safe, 2000, **45**: 61~ 78.
- [20] Cousins I, Mackay D. Correlating the physical-chemical properties of phthalate esters using the three solubility ' approach[J]. Chemosphere, 2000, **41**: 1389~ 1399.
- [21] Famini G R. Using theoretical descriptors in quantitative structure activity relationships: application to partition properties of alkyl(1-phenylsulfonyl) cycloalkane-carboxylates [J]. Chemosphere, 1997, **35**: 2417~ 2447.
- [22] Leyder F, Boulanger P. Ultraviolet absorption, aqueous solubility and octanol-water partition coefficients for several phthalates [J]. Bull. Environ. Contam. Tox. , 1983, **30**: 152~ 157.
- [23] McDuffie D. Estimation of octanol/water partition coefficients for organic pollutants using reverse-phase HPLC [J]. Chemosphere, 1981, **10**: 73~ 83.
- [24] Kaliszan R. Quantitative structure retention relationships[J]. Anal. Chem. , 1992, **64**: 619~ 630A.
- [25] 戴家银, 陈玲, 赵建夫. 应用线性溶剂化能参数预测多氯有机物的分配性质[J]. 中国环境科学, 2002, **22**(4): 329~ 333.
- [26] 戴家银, 韩朔睽, 王连生. 应用量子化学参数预测多氯有机物的分配性质[J]. 环境科学学报, 2000, **20**(6): 693~ 698.