

# 利用反相高效液相色谱法测定硝基多环芳 烃的正辛醇-水分配系数和水溶解度\*

余 刚\*\* 徐晓白\*\*\*

(中国科学院生态环境研究中心, 北京100085)

**摘要** 用反相高效液相色谱法测定了15种致突变硝基多环芳烃的正辛醇-水分配系数和水溶解度, 所得结果分别与摇瓶法和动态联柱法测定值相符较好。

**关键词** 硝基多环芳烃, 高效液相色谱, 正辛醇-水分配系数, 水溶解度

## 0 前 言

在研究化学品在环境中的迁移、转化、归趋和进行安全性评价时需要用到许多理化参数, 正辛醇-水分配系数 ( $K_{ow}$ ) 和水溶解度 ( $S$ ) 是这些性质中最基本和最重要的。经济合作与发展组织 (OECD) 在最初的化学品测试指南中规定用摇瓶法测定正辛醇-水分配系数和水溶解度<sup>[1]</sup>。在1987年新通过了用高效液相色谱 (HPLC) 法测定  $K_{ow}$  的试验指南, 其原理是当物质通过反相色谱柱 ( $C_{18}$ ) 时, 在流动相与固定相之间进行分配, 物质的亲水性越大, 流出速度越快, 利用容量因子的对数与分配系数的对数成正比这一关系, 求出正辛醇-水分配系数<sup>[2]</sup>。HPLC 法并不是用来取代传统的摇瓶法, 而是对摇瓶法的补充与完善。该法比摇瓶法操作简单, 且不要求待测物质具有较高的纯度, 因此得到了较广泛的运用。

硝基多环芳烃 ( $NO_2$ -PAHs) 因具有直接致突变性、潜在致癌性以及环境中较为广泛的存在而引起人们的关注<sup>[3-4]</sup>。本文用 HPLC 法测定了15种  $NO_2$ -PAHs 化合物的正辛醇-水分配系数和水溶解度。所得结果与摇瓶法和联柱法测定值相符较好。

## 1 实验部分

用甲醇配制  $NO_2$ -PAHs 化合物的标准溶液, 分别在 HPLC 上测定化合物的保留时间  $t_R$ 。

收稿日期: 1993-05-03

\* 本工作得到国家自然科学基金资助

\*\* 现在清华大学环境工程系工作;

\*\*\* 通讯联系人

• 178 •

色谱条件：日本岛津公司 LC-5A，配 SPD-1 型紫外检测器，Waters 745B 积分仪。ODS Zobax C<sub>18</sub> 柱，流动相为甲醇/水 (75 : 25)，流速：1.0 mL/min，紫外检测器波长：254 nm。

NO<sub>2</sub>-PAHs 样品购自美国 Aldrich 等公司，纯度在 97—99% 之间。甲醇、硫脲为分析纯试剂，前者使用前经过重蒸。水为二次蒸馏水。

## 2 结果与讨论

### 2.1 容量因子的计算

化合物的容量因子 ( $k$ ) 定义为：

$$k = \frac{t_R - t_0}{t_0}$$

式中  $t_R$ 、 $t_0$  分别为化合物和硫脲（在 C<sub>18</sub> 柱上不滞留的物质）的保留时间。利用实验测得的  $t_R$  和  $t_0$  求得化合物的容量因子及其对数值（见表 1）。

表 1 NO<sub>2</sub>-PAHs 化合物的 HPLC 容量因子

编 号	化 合 物	容 量 因 子 ( $k$ )			Log $k$
		1	2	均值	
1	5-硝基-1, 2-二氢茚	1.84	1.90	1.87	0.272
2	1-硝基萘	1.59	1.58	1.59	0.201
3	2-硝基萘	1.80	1.80	1.80	0.255
4	2-硝基联苯	1.30	1.30	1.30	0.114
5	3-硝基联苯	2.87	2.87	2.87	0.458
6	4-硝基联苯	2.69	2.69	2.69	0.430
7	4,4'-二硝基联苯	1.53	1.53	1.53	0.185
8	2-硝基芴	3.49	3.58	3.54	0.549
9	2,7-二硝基芴	2.09	2.04	2.04	0.314
10	3-硝基-9-芴酮	1.96	1.96	1.96	0.292
11	9-硝基蒽	4.11	4.11	4.11	0.614
12	3-硝基荧蒽	8.93	8.93	8.93	0.919
13	4-硝基荧蒽	8.93	8.93	8.93	0.919
14	1-硝基芘	8.83	8.87	8.85	0.947
15	3-硝基芘	8.58	8.58	8.58	0.934

### 2.2 利用容量因子测定正辛醇-水分配系数

表 2 列出了用摇瓶法<sup>[5]</sup>测得的部分 NO<sub>2</sub>-PAHs 化合物的正辛醇-水分配系数值。以 Log  $K_{ow}$  对 Log  $k$  作图（图 1），发现二者具有较好的线性关系，进行回归分析得到以下相

表 2 NO<sub>2</sub>-PAHs 化合物的容量因子、分配系数和水溶解度值

编号	化合物	Log k	Log K <sub>ow</sub>		Log S		熔点 (°C)
			摇瓶法 <sup>[5]</sup>	HPLC法	联柱法 <sup>[6]</sup>	HPLC法	
1	5-硝基-1,2-二氢茛	0.272	3.22	3.24	/	1.145	39
2	1-硝基萘	0.201	2.98	3.05	0.963	1.137	60
3	2-硝基萘	0.255	3.07	3.20	0.966	0.866	79
4	2-硝基联苯	0.114	/	2.82	/	/	/
5	3-硝基联苯	0.458	3.69	3.74	/	0.414	62
6	4-硝基联苯	0.430	/	3.67	0.090	-0.001	113
7	4,4'-二硝基联苯	0.185	3.20	3.01	-0.650	-0.485	233
8	2-硝基芴	0.549	3.99	3.99	-0.666	-0.741	156
9	2,7-二硝基芴	0.314	/	3.36	/	-1.811	334
10	3-硝基-9-芴酮	0.292	3.32	3.30	-0.631	-0.759	231
11	9-硝基蒽	0.614	4.21	4.16	-0.943	-0.823	146
12	3-硝基荧蒽	0.919	/	4.98	-1.710	-1.784	159
13	4-硝基荧蒽	0.919	/	4.98	-1.539	/	/
14	1-硝基芘	0.947	5.06	5.06	-1.928	-1.803	153
15	3-硝基芘	0.934	/	5.02	-1.670	/	/

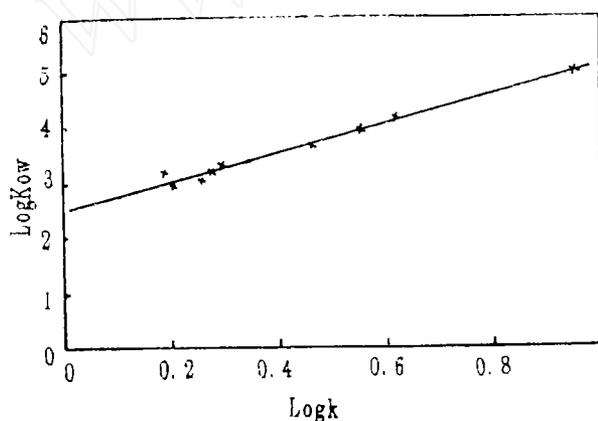


图 1 正辛醇-水分配系数与容量因子之间的线性关系

关方程:

$$\text{Log } K_{ow} = 2.691 \text{ Log } k + 2.510 \quad (R = 0.991, S = 0.096, n = 9)$$

利用该方程间接测得的 Log K<sub>ow</sub> 值亦列在表 2 中, 与摇瓶法测定值对比, 二者相符较好。

### 2.3 利用容量因子测定水溶解度

表 2 同时列出了用动态联柱法<sup>[6]</sup>测得的部分 NO<sub>2</sub>-PAHs 化合物的水溶解度值。在我们

前面的研究中发现,  $\text{Log } K_{ow}$  与  $\text{Log } S$ 、熔点( $\text{mp}$ ) 之间具有较好的线性关系, 而  $\text{Log } K_{ow}$  与  $\text{Log } k$  之间又存在着以上关系. 在  $\text{Log } S$  与  $\text{Log } k$  和  $\text{mp}$  之间进行回归分析得到以下方程:

$$\text{Log } S = -2.741 \text{ Log } k - 0.0096(\text{mp} - 25) + 2.025 \quad (R = 0.990, S = 0.164, n = 9)$$

利用上式间接测得的水溶解度数据也列在表 2, 与联柱法测定值相比, 同样相符较好.

感谢生态环境研究中心姚渭溪副教授对工作的支持.

### 参 考 文 献

- 1 OECD, Chemical Testing programme. 1981; 107
- 2 Kitano, Masaru. Environmental Technology in Japan, 1987; 10; 38
- 3 Pitts J N et al, Toxicol Let. 1977; 1; 65
- 4 金祖亮等. 有毒有机物环境行为和生态毒理论文集. 徐晓白等编. 中国科学技术出版社, 1990; 143
- 5 余刚等. 环境化学. 待发表, 1993
- 6 Yu Gang et al, Chemosphere. 1992; 24 (12): 1699

## Application of HPLC Method for partition Coefficient and Solubility Determinations of Nitro-PAHs

Yu Gang Xu Xiao-bai

(Research Center for Eco-environmental Sciences, Academia, Sinica)

**Abstract** The n-octanol/water partition coefficients and solubilities of 15 mutagenic nitrated polycyclic aromatic hydrocarbons are determined by HPLC method. The results well agree with those determined by dynamic couple-column technology and shake flask method.

**Key words** nitrated polycyclic aromatic hydrocarbons, high performance liquid chromatography, n-octanol/water partition coefficient, water solubility