

摩尔体积预测有机物水的溶解度和辛醇/水分配系数

王连生 赵元慧

高 鸿

(南京大学环境科学系)

(南京大学化学系, 南京, 210008)

摘 要

本文回归分析了26种317个固液化合物的摩尔体积和溶解度以及辛醇/水分配系数的相关性, 结果表明: 溶解度及辛醇/水分配系数和摩尔体积呈良好的线性相关, 讨论了回归系数, 并用摩尔体积估算了一些有机物的溶解度和辛醇/水分配系数, 并和其它估算方法进行了比较。

关键词: 溶解度, 辛醇/水分配系数, 摩尔体积

有机物在水中的溶解度和辛醇/水的分配系数是研究有机物在水中化学行为的一个重要参数, 用结构参数和相关性来估算溶解度和辛醇/水的分配系数的方法有许多^[1-11], 其中应用较广泛的是用分子的摩尔体积估算溶解度和辛醇/水的分配系数^[1-5]。

饱和水溶液中分子的自由能为:

$$\mu = \mu_w + kT \ln S \quad (1)$$

这里 S 为摩尔溶解度, μ_w 为在给定温度和1 atm下在1 mol/l水溶液中每个分子的标准自由能。当达到平衡时, 有机物在纯液体中的化学势和饱和水溶液中的化学势相等:

$$\mu_R = \mu_w + kT \ln S \quad (2)$$

μ_R 为纯液体分子的自由能。

当纯液体溶质向水中溶解时, 其 $\mu_w - \mu_R$ 之值与其同系物的分子表面积呈线性相关:

$$b_o(T)A_w(T) = -KT \ln S - C_o(T) \quad (3)$$

这里 $b_o(T)$ 和 $C_o(T)$ 在一定温度下为一常数, A_w 为分子在水中的表面积, 而分子的表面积和摩尔体积(MV)成正比, 所以, 对常温下是液体的溶质, 可用方程(4), 固体溶质, 可用方程(5)预测有机物水的溶解度和辛醇/水分配系数:

$$-\lg S = A_1(MV) + C_1 \quad (4)$$

$$-\lg S = A_2(MV) + B_2(T_m - 25) + C_2 \quad (5)$$

这里 T_m 为有机物的熔点(°C), 其它参数为常数。

本文用(4)和(5)对烷烃、烯烃、炔烃、醇、酮、醚、酯、卤代烷烃、卤代烯烃、取代芳烃、多环芳烃20种317个化合物的溶解度和辛醇/水分配系数进行了回归分析。

材 料 与 方 法

1. 溶解度和辛醇/水分配系数

有机物水的溶解度和辛醇/水分配系数取自文献[1—20], 测定方法见文献[12, 13],

2. 摩尔体积

从文献[21—24]查得20℃下有机物的密度、分子量和密度之比即为摩尔体积,或用比重瓶法测定物质的密度。

结 果 与 讨 论

溶解度、辛醇/水分配系数和摩尔体积的回归分析结果见表1,2和图1,从结果可以看出,溶解度、辛醇/水的分配系数和摩尔体积呈良好的线性相关。用方程(4),(5)估算的有机物溶解度、辛醇/水分配系数和测定值及文献[21]方法估算值相近,其中烷烃的误差较大一些,可能有两点原因:1.由于烷烃的溶解度较小,测定误差较大;2.文献[21]中用于回归分析的溶解度和辛醇/水分配系数大多为估算值,所以该法的估算误差也较大。

对于没有支链,结构有序的系列有机物,其分子量和摩尔体积成正比,所以用分子量估算系列有机物的溶解度和辛醇/水分配系数更简便、快速,结果见表2中的多氯联苯、对氨基苯甲酸酯、对羟基苯甲酸酯和图2.但对有支链的有机物,由于支链的影响,摩尔体积和分子量不成正比,用分子量估算有支链系列有机物的溶解度和辛醇/水分配系数会产生较大的误差.而摩尔体积可以反映结构的差异对分子体积的影响,用摩尔体积估算可以得到较理想的结果。

表1 有机物水的溶解度、辛醇/水分配系数和摩尔体积

Table 1 Aqueous solubility, octanol/water partition coefficients and molar volumes for organic chemicals

有 机 物		$-\lg S(\text{mol/l})$		$\lg K_{ow}$		MV (ml/mol)	M ^{mp} (°C) ^{d)}
		测定值	估算值	测定值	估算值		
烷 烃							
1	乙 烷	2.70	2.91	1.81	2.18	88.1	30.1
2	丙 烷	2.85	2.91	2.36	2.18	88.1	44.1
3	丁 烷	2.98	3.15	2.86	2.43	100	58.1
4	异丁烷	3.17	3.22	2.76	2.53	104	58.1
5	正戊烷	3.27	3.44	3.50	2.81	115	72.1
6	异戊烷	3.18	3.45	2.30	2.83	116	72.1
7	2,2-二甲基丙烷	3.34	3.57	3.11	2.98	122	72.1
8	正己烷	3.90	3.73	3.00	3.18	130	86.2
9	2-甲基戊烷	3.80	3.77	2.80	3.23	132	86.2
10	3-甲基戊烷	3.83	3.73	2.80	3.18	130	86.2
11	2,2-二甲基丁烷	3.67	3.80	3.82	3.25	133	86.2
12	正庚烷	4.53	4.06	3.50	3.61	147	100
13	2,2-二甲基戊烷	3.67	4.09	3.10	3.62	148	114
14	2,4-二甲基戊烷	4.39	4.11	3.10	3.66	149	114
15	正辛烷	5.24	4.40	4.00	4.01	163	114
16	2,2,4-三甲基戊烷	4.67	4.42	5.02 ^{b)}	4.06	165	114
17	2,2,5-三甲基戊烷	5.00 ^{a)}	4.73	4.63 ^{b)}	4.46	181	114
18	2-甲基庚烷	5.08 ^{a)}	4.40	3.91 ^{b)}	4.04	164	114
19	2,3-二甲基己烷	4.97 ^{a)}	4.32	3.82 ^{b)}	3.94	160	114
20	2,3,3-三甲基戊烷	5.08 ^{a)}	4.26	3.91 ^{b)}	3.86	157	114

续表

有 机 物	-lg S(mol/l)		lg K _{ow}		MV (ml/mol)	M	m p (°C) ^{d)}
	测定值	估算值	测定值	估算值			
21	正壬烷	5.81 ^{a)}	4.69	4.50 ^{b)}	4.42	179	128
22	2,2,3-三甲基己烷	5.48	4.59	4.23 ^{b)}	4.29	174	128
23	正癸烷	5.21	5.01	5.00 ^{b)}	4.82	195	142
24	2,2,3,3-四甲基己烷		4.83	4.64 ^{b)}	4.59	186	142
25	正十一烷		5.28	5.56 ^{b)}	5.22	211	156
26	正十二烷		5.64	6.00 ^{b)}	5.62	227	170
27	正十三烷	5.75	5.97	6.50 ^{b)}	6.05	244	184
28	正十四烷		6.28	7.00 ^{b)}	6.45	260	198
29	正十五烷	6.20	6.54	7.50 ^{b)}	6.78	273	212
30	正十六烷		6.92	8.00 ^{b)}	7.26	292	226
31	正十七烷		7.24	8.50 ^{b)}	7.68	309	240
32	正十八烷		7.60	9.00 ^{b)}	8.13	327	255
33	正十九烷		7.96	9.50 ^{b)}	8.59	345	269
34	正二十烷		8.19	10.00 ^{b)}	8.92	358	282
35	正二十一烷		8.52	10.50 ^{b)}	9.32	374	297
36	正二十二烷		8.84	11.00 ^{b)}	9.72	490	311
37	正二十三烷		9.15	11.50 ^{b)}	10.20	406	325
38	正二十四烷		9.45	12.00 ^{b)}	10.50	421	339
39	正二十五烷		9.90	12.50 ^{b)}	11.08	444	353
40	正二十六烷		10.16	13.00 ^{b)}	11.41	457	367
41	正二十七烷		10.47	13.50 ^{b)}	11.81	473	381
42	正二十八烷		10.78	14.00 ^{b)}	12.21	489	395
43	正二十九烷		11.12	14.50 ^{b)}	12.64	506	409
44	正三十烷		11.14	15.00 ^{b)}	12.66	507	423
45	正三十二烷		12.08	16.00 ^{b)}	13.87	555	451
46	正四十烷		14.66	21.00 ^{b)}	17.16	686	563

烯 烃

47	1-丁烯	2.50	2.23	1.59	1.32	94.0	56.1
48	2-甲基丙烯	2.43	2.23	0.64	1.32	94.0	56.1
49	1-戊烯	2.68	2.78	2.20	1.97	110	70.1
50	2-戊烯	2.54	2.71	2.20	1.89	108	70.1
51	3-甲基-1-丁烯	2.73	2.84	2.07 ^{b)}	2.05	112	70.1
52	2-甲基-1-丁烯	2.43 ^{a)}	2.71	2.07 ^{b)}	1.89	108	70.1
53	1-己烯	3.23	3.29	2.70	2.57	125	84.2
54	2-甲基-1-戊烯	3.03	3.22	2.61 ^{b)}	2.49	123	84.2
55	4-甲基-1-戊烯	3.24	3.36	2.50	2.65	127	84.2
56	顺-3-己烯	3.24 ^{a)}	3.26	2.70 ^{b)}	2.53	124	84.2
57	反-2-己烯	3.24 ^{a)}	3.26	2.70 ^{b)}	2.53	124	84.2
58	2,3-二甲基-1-丁烯	2.87 ^{a)}	3.26	2.41 ^{b)}	2.53	124	84.2
59	2-乙基-1-丁烯	3.03 ^{a)}	3.19	2.54 ^{b)}	2.45	122	84.2
60	1-庚烯	3.89 ^{a)}	3.80	3.20 ^{b)}	3.18	140	98.2
61	2-庚烯	3.82	3.77	3.20	3.13	139	98.2
62	2,3,3-三甲基-1-丁烯	3.40 ^{a)}	3.77	2.82 ^{b)}	3.13	139	98.2
63	1-辛烯	4.62	4.38	3.70	3.85	157	112
64	1-壬烯	5.23 ^{a)}	4.83	4.24 ^{b)}	4.38	170	126

续表

有 机 物	$-\lg S(\text{mol/l})$		$\lg K_{ow}$		MV (ml/mol)	M	m_p ($^{\circ}\text{C}$) ^{d)}
	测定值	估算值	测定值	估算值			
65 1-癸烯	5.94 ^{a)}	5.51	4.78 ^{b)}	5.18	190	140	
66 1-十二烯	7.33 ^{a)}	6.56	5.86 ^{b)}	6.43	221	168	

二烯烃

67 丙二烯		0.62		0.65	54.0	40.1	
68 1,2-丁二烯	1.86 ^{a)}	1.47	1.63 ^{b)}	1.37	80.0	54.1	
69 1,3-丁二烯	1.87	1.64	1.63	1.56	87.0	54.1	
70 2-甲基-1,3-丁二烯	2.03	2.12	2.05 ^{b)}	1.91	100	68.1	
71 1,2-戊二烯	2.21 ^{a)}	2.06	1.90 ^{b)}	1.86	98.0	68.1	
72 顺-1,3-戊二烯	2.21 ^{a)}	2.12	1.90 ^{b)}	1.91	100	68.1	
73 反-1,3-戊二烯	2.26 ^{a)}	2.15	1.90 ^{b)}	1.94	101	68.1	
74 1,4-戊二烯	2.09	2.22	1.90	1.99	103	68.1	
75 1,5-己二烯	2.69	2.74	2.40	2.43	119	82.1	
76 1,6-庚二烯	3.34	3.23	2.90	2.85	134	94.1	

炔 烃

77 1-丁炔	1.28	1.08	1.44 ^{b)}	1.48	83.0	54.1	
78 2-丁炔	0.820	0.90	1.44 ^{b)}	1.32	78.0	54.1	
79 1-戊炔	1.64	1.67	1.98	1.97	99.0	68.1	
80 2-戊炔	1.64	1.67	1.98 ^{b)}	1.97	99.0	68.1	
81 1-己炔	2.36	2.25	2.36	2.47	115	82.2	
82 1-庚炔	3.01	2.84	2.98	2.96	131	96.2	
83 1-辛炔	3.66	3.46	3.48	3.49	148	110	
84 1-壬炔	4.24	4.06	3.98	3.98	164	124	
85 1,6-庚二炔	1.75	2.14	2.46	2.37	92.4	124	
86 1,8-壬二炔	2.98	3.42	3.46	3.46	147	106	

环烷烃

87 环丙烷		1.26		1.08	54.0	42.1	
88 环戊烷	2.65	2.66	2.05	2.06	94.0	70.1	
89 环己烷	3.10	3.15	2.46	2.40	108	84.2	
90 甲基环戊烷	3.30	3.29	2.35	2.50	112	84.2	
91 环庚烷	3.50	3.60	2.87	2.72	121	98.2	
92 甲基环己烷	3.85	3.85	2.76	2.89	128	98.2	
93 环辛烷	4.15	4.06	3.28	3.04	134	112	
94 1,1-二甲基环戊烷	4.04 ^{a)}	3.92	3.07 ^{b)}	2.94	130	98.2	
95 1-顺-2-二甲基环己烷	4.04	4.31	3.06	3.21	141	112	
96 1-反-2-二甲基环戊烷	4.04 ^{a)}	3.96	3.07 ^{b)}	2.97	131	98.2	
97 1-反-3-二甲基环戊烷	4.04 ^{a)}	3.99	3.07 ^{b)}	2.99	132	98.2	
98 1-顺-2-二甲环戊烷	4.04 ^{a)}	3.82	3.07 ^{b)}	2.87	127	98.0	
99 1-顺-3-二甲基环戊烷	4.04 ^{a)}	3.99	3.07 ^{b)}	2.99	132	98.2	
100 乙基环戊烷	3.96 ^{a)}	3.85	3.00 ^{b)}	2.89	128	98.2	
101 1,1,2-三甲基环戊烷	4.31 ^{a)}	4.48	3.28 ^{b)}	3.34	146	112	
102 1,1,3-三甲基环戊烷	4.31 ^{a)}	4.48	3.28 ^{b)}	3.34	146	112	
103 1,1-二甲基环己烷	4.31 ^{a)}	4.13	3.28 ^{b)}	3.29	144	112	

续表

有 机 物	$-\lg S(\text{mol/l})$		$\lg K_{ow}$		MV (ml/mol)	M	m_p ($^{\circ}\text{C}$) ^{d)}
	测定值	估算值	测定值	估算值			
104 反-1,3-二甲基环己烷	4.31 ^{a)}	4.38	3.28 ^{b)}	3.26	143	112	
105 乙基环己烷	4.47 ^{a)}	4.34	3.41 ^{b)}	3.24	142	112	
106 丙基环己烷	5.13 ^{a)}	4.94	3.95 ^{b)}	3.65	159	120	
107 环癸烷	5.71 ^{a)}	5.08	4.42 ^{b)}	3.75	163	140	

环烯烃

108 环戊烯	2.11	1.98	1.75	1.76	88.0	68.1	
109 环己烯	2.59	2.45	2.16	2.14	101	82.1	
110 环庚烯	3.16	2.99	2.57	2.58	116	96.2	
111 1-甲基环己烯	3.27	3.09	2.57	2.67	119	96.2	
112 1,4-环己二烯	2.06	2.19	1.49 ^{b)}	1.94	94.0	80.1	
113 4-乙基环己烯	3.34	3.49	2.57 ^{b)}	2.99	130	108	
114 环庚三烯	2.17	2.51	1.05 ^{b)}	2.20	103	92.2	

醇

115 1-丁醇	-0.026	-0.35	0.84	0.45	91.0	74.1	
116 2-丁醇	-0.39	-0.31	0.61	0.49	92.0	74.1	
117 2-甲基-1-丙醇	-0.098	-0.24	0.61	0.56	94.0	74.1	
118 1-戊醇	0.59	0.23	1.34	1.04	108	88.2	
119 3-甲基-1-丁醇	0.51	0.26	1.14	1.08	109	88.2	
120 2-甲基-1-丁醇	0.46	0.23	1.14	1.04	108	88.2	
121 2-戊醇	0.28	0.26	1.14	1.08	109	88.2	
122 3-戊醇	0.21	0.19	1.14	1.01	107	88.2	
123 3-甲基-2-丁醇	0.21	0.23	1.14	1.04	108	88.2	
124 2-甲基-2-丁醇	0.23	0.26	0.89	1.08	109	88.2	
125 2,2-二甲基-1-丙醇	0.30	0.26	1.36	1.08	109	88.2	
126 1-己醇	1.21	0.84	1.84	1.67	126	102	
127 2-己醇	0.87	0.84	1.61	1.67	126	102	
128 3-己醇	0.80	0.80	1.61	1.63	125	102	
129 3-甲基-3-戊醇	0.39	0.77	1.39	1.59	124	102	
130 2-甲基-2-戊醇	0.51	0.70	1.39	1.53	122	102	
131 2-甲基-3-戊醇	0.70	0.77	1.67	1.60	124	102	
132 3-甲基-2-戊醇	0.71	0.70	1.67	1.53	122	102	
133 2,2-二甲基-1-丁醇	1.04	0.74	1.57	1.56	123	102	
134 3,3-二甲基-1-丁醇	0.50		1.57		119	102	
135 2,3-二甲基-2-丁醇	0.37	0.74	1.17	1.56	123	102	
136 3,3-二甲基-2-丁醇	0.64	0.84	1.19	1.67	126	102	
137 2-甲基-1-戊醇	1.05 ^{a)}	0.73	1.78	1.56	123	102	
138 4-甲基-1-戊醇	0.99	0.84	1.78	1.67	126	102	
139 4-甲基-2-戊醇	0.81	0.87	1.67	1.70	127	102	
140 2-乙基-1-丁醇	1.21	0.74	1.78	1.56	123	102	
141 环己醇	0.42	0.093	1.43	0.90	104	100	
142 1-庚醇	1.81	1.38	2.34	2.22	142	116	
143 2-庚醇	1.55		2.31 ^{b)}		145 ^{c)}	116	
144 3-庚醇	1.39	1.35	2.31	2.19	141	116	

续表

有 机 物	$-\lg S(\text{mol/l})$		$-\lg K_{ow}$		MV (ml/mol)	M	m_p (°C) ^{d)}
	测定值	估算值	测定值	估算值			
145	4-庚醇	1.39	1.38	2.31	2.22	142	116
146	2-甲基-2-己醇	1.07	1.42	1.84	2.26	143	116
147	5-甲基-2-己醇	1.38	1.42	2.19	2.26	143	116
148	3-甲基-3-己醇	0.98	1.35	1.87	2.19	141	116
149	2-甲基-3-己醇	1.32		2.19		139 ^{c)}	116
150	2,2-二甲基-1-戊醇	1.52		2.39		145 ^{c)}	116
151	2,4-二甲基-1-戊醇	1.60	1.56	2.19	2.39	147	116
152	4,4-二甲基-1-戊醇	1.55		2.39		145 ^{c)}	116
153	2,3-二甲基-2-戊醇	0.91		2.27		135 ^{c)}	116
154	2,4-二甲基-2-戊醇	0.93	1.42	1.67	2.25	143	116
155	3-乙基-3-戊醇	0.83	1.25	1.87	2.08	138	116
156	2,2-二甲基-3-戊醇	1.16	1.35	2.27	2.19	141	116
157	2,3-二甲基-3-戊醇	0.84	1.25	1.67	2.08	138	116
158	2,4-二甲基-3-戊醇	1.22	1.32	2.31	2.15	140	116
159	1-辛醇	2.35	1.89	2.84 ^{b)}	2.74	157	130
160	2-辛醇	2.07	2.30	2.84	2.81	159	130
161	2-乙基-1-己醇	2.17		2.84		163 ^{c)}	130
162	1-壬醇	3.00	2.55	3.57	3.33	174	144
163	2-壬醇	2.74	2.50	3.36	3.37	175	144
164	3-壬醇	2.66	2.50	3.36	3.37	175	144
165	4-壬醇	2.59	2.47	3.36	3.33	174	144
166	5-壬醇	2.49	2.44	3.36	3.30	173	144
167	2,6-二甲基-4-庚醇	2.51	2.92	3.13	3.47	178	144
168	1-癸醇	3.70	3.43	4.01	3.92	191	158
169	2-十一醇	2.94	3.62	4.42	4.51	208	172
170	1-十二醇	4.80	3.97	5.06	4.86	218	186
171	1-十四醇	4.52	4.39	6.11	4.99	224	214
172	1-十五醇	5.84	5.70	6.64	6.21	260	228
173	1-十六醇	7.00	7.03	7.17	7.47	297	242
174	1-十八醇	8.40	8.55	8.22	8.61	333	271

酮

175	2-丁酮	-0.68	-0.34	0.29	0.19	89.0	72.1
176	2-戊酮	0.17	0.23	0.79	0.70	106	86.1
177	3-戊酮	0.23	0.23	0.79	0.70	106	86.1
178	3-甲基-2-丁酮	0.12	0.25	0.59	0.73	107	86.1
179	2-己酮	0.78	0.79	1.29	1.21	123	100
180	3-己酮	0.83	0.79	1.29	1.21	123	100
181	3-甲基-2-戊酮	0.67	0.79	1.09	1.21	123	100
182	4-甲基-2-戊酮	0.71	0.85	1.09	1.27	125	100
183	4-甲基-3-戊酮	0.81	0.82	1.09	1.24	124	100
184	2-庚酮	1.42	1.39	1.79	1.76	141	114
185	4-庚酮	1.44	1.29	1.79	1.67	138	114
186	2,4-二甲基-3-戊酮	1.30	1.39	1.39	1.76	141	114
187	5-壬酮	2.57	2.46	2.79	2.73	173	142

续表

有 机 物	-lgS(mol/l)		-lgKow		MV (ml/mol)	M	mp (°C) ^{d)}
	测定值	估算值	测定值	估算值			
醚							
188 甲醚		-1.03		0.47	70.0	46.1	
189 乙基甲基醚	-0.628 ^{a)}	-0.485	0.26	0.76	85.0	60.1	
190 乙醚	0.0630	0.206	1.03	1.12	104	74.1	
191 丙基甲基醚	0.372	0.0605	1.03	1.05	100	74.1	
192 异丙基甲基醚	0.0280	0.133	0.83	1.08	102	88.1	
193 丁基甲基醚	0.992	0.716	1.53	1.40	118	88.1	
194 异丁基甲基醚	0.899	0.825	1.33	1.45	121	88.1	
195 仲丁基甲基醚	0.734	0.679	1.33	1.38	117	88.1	
196 叔丁基甲基醚	0.210		1.06		102 ^{c)}	88.1	
197 丙基乙基醚	0.662	0.716	1.53	1.40	118	88.1	
198 异丙基乙基醚	0.554	0.788	1.33	1.44	120	88.1	
199 丙醚	1.32	1.48	2.03	1.80	139	102	
200 异丙醚	1.31 ^{a)}	1.55	1.90 ^{b)}	1.84	141	102	
201 异丙基丙基醚	0.0280	0.133	0.83	1.08	102	102	
202 丁醚	2.77	2.61	2.27	2.39	170	130	
酯							
203 甲酸乙酯	-0.076	-0.36	0.23	0.14	80.0	74.1	
204 甲酸丙酯	0.49	0.15	0.73	0.64	97.0	88.1	
205 乙酸甲酯	-0.51	-0.39	0.23	0.11	79.0	74.1	
206 乙酸乙酯	0.04	0.18	0.73	0.68	98.0	88.1	
207 乙酸丙酯	0.73	0.91	1.23	1.39	122	102	
208 乙酸异丙酯	0.51	0.76	1.03	1.24	117	102	
209 乙酸丁酯	0.69	1.12	1.73	1.69	132	116	
210 乙酸异丁酯	1.24	1.25	1.53	1.72	133	116	
211 丙酸甲酯	0.094	0.12	0.73	0.61	96.0	88.1	
212 丙酸乙酯	0.79 ^{a)}	0.70	1.27 ^{b)}	1.18	115	102	
213 丙酸丁酯	1.31 ^{a)}	1.73	1.81 ^{b)}	2.20	149	130	
214 丁酸甲酯	0.78	0.69	1.23	1.15	114	102	
215 丁酸乙酯	1.27	1.12	1.37	1.61	132	116	
216 丁酸丙酯	1.91	1.73	2.23	2.20	149	130	
217 丁酸丁酯	2.28 ^{a)}	2.21	2.77 ^{b)}	2.68	165	144	
218 丁酸戊酯	2.83 ^{a)}	2.73	3.31 ^{b)}	3.19	182	158	
219 戊酸乙酯	1.77	1.70	2.23	2.17	148	130	
220 己酸乙酯	2.36	2.21	2.73	2.68	165	144	
221 庚酸乙酯	2.74	2.76	3.23	3.22	183	158	
222 辛酸乙酯	3.39	3.21	3.73	3.67	198	172	
223 壬酸乙酯	3.80	3.73	4.23	4.18	215	186	
224 癸酸乙酯	4.10	4.24	4.73	4.68	232	200	
卤代烷烃							
225 氯甲烷	0.89	0.42	0.94	1.06	55.0	50.5	
226 二氯甲烷	0.63	0.74	1.26	1.32	64.0	84.9	
227 三氯甲烷	1.16	1.31	1.97	1.78	80.0	119	

续表

有 机 物	-lgS(mol/l)		-lgK _{ow}		MV (ml/mol)	M	mp (°C) ^{d)}
	测定值	估算值	测定值	估算值			
228	四氯甲烷	2.29	1.87	2.64	2.24	96.0	154
229	氯乙烷	1.05	1.02	1.39	1.55	72.0	64.5
230	1,1-二氯乙烷	1.26	1.45	1.79	1.90	84.0	99.0
231	1,2-二氯乙烷	1.06	1.24	1.48	1.72	78.0	99.0
232	1,1,1-三氯乙烷	2.27	2.01	2.47	2.36	100	133
233	1,1,2-三氯乙烷	1.47	1.76	2.07	2.15	93.0	133
234	1,1,2,2-四氯乙烷	1.76	2.18	2.36	2.50	105	168
235	六氯乙烷		2.47		2.73	113	127
236	1-氯丙烷	1.53	1.59	1.89	2.01	88.0	78.5
237	2-氯丙烷	1.36	1.66	1.69	2.07	90.0	78.5
238	1,2-二氯丙烷	1.63 ^{a)}	1.94	2.02	2.30	98.0	113
239	1,3-二氯丙烷	1.61	1.84	2.28	2.22	95.0	113
240	1,2,3-三氯丙烷	1.92 ^{a)}	2.23	2.25 ^{b)}	2.36	106	147
241	1-氯丁烷	2.14	2.15	2.39	2.47	104	92.6
242	2-氯丁烷	2.00	2.19	2.19	2.50	105	92.6
243	溴甲烷	0.50 ^{a)}	0.49	1.09	1.12	57.0	94.9
244	三溴甲烷	1.92	1.55	2.38	1.99	87.0	252
245	溴乙烷	1.06	1.13	1.63 ^{b)}	1.64	75.0	109
246	溴丙烷	1.73	1.70	2.10	2.10	91.0	123
247	2-溴丙烷	1.63	1.80	1.90	2.18	94.0	123
248	1,3-二溴丙烷	2.08	2.08	2.70	2.42	102	202
249	溴丁烷	2.37	2.26	2.60	2.56	107	137
250	2-溴丁烷	2.43	2.33	2.40	2.62	109	137
251	2-溴戊烷	2.89	2.89	2.90	3.07	125	151
252	氟乙烷	0.45 ^{a)}	0.85	1.05 ^{b)}	1.41	67.0	48.0
253	2-氟丙烷	1.11	1.48	1.59 ^{b)}	1.93	85.0	80.0
254	碘甲烷	1.00	0.70	1.50	1.27	62.0	142
255	碘乙烷	1.60	1.34	2.00	1.81	81.0	156
256	碘丙烷	2.29	1.91	2.50	2.27	97.0	170
257	碘丁烷	2.96	2.51	3.00	2.76	114	184
258	二氯二氟甲烷	1.71 ^{a)}	1.70	2.08	2.10	91.0	120
259	三氯氟甲烷	2.09	1.73	2.53	2.13	92.0	137
260	三氟溴甲烷	1.34 ^{a)}	1.84	1.78 ^{b)}	2.22	95.0	130
261	二氯氟甲烷	1.32 ^{a)}	1.29	1.76 ^{b)}	1.64	75.0	103

卤代烯烃

262	氯乙烯	1.36	1.66	1.23	1.63	69.0	62.5
263	1,1-二氯乙烯	2.38	2.06	2.12	1.96	80.0	96.9
264	1,2-反式二氯乙烯	2.20	1.95	2.08	1.87	77.0	96.9
265	三氯乙烯	2.08	2.42	2.42	2.56	90.0	131
266	四氯乙烯	2.92	2.87	2.88	2.61	120	166
267	1,3-反式二氯丙烯	1.61	2.46	2.02	2.29	91.0	111
268	六氯丁二烯	5.12	5.29	4.78	4.57	168	261
269	六氯环戊二烯	5.18	4.99	4.00	4.33	160	273

续表

有 机 物	-lgS(mol/l)		-lgK _{ow}		MV	M	mp (°C) ^{d)}
	测定值	估算值	测定值	估算值 (ml/mol)			
烷基苯							
270 苯	1.64	1.71	2.13	2.16	89.0	78.1	
271 甲苯	2.20	2.23	2.69	2.67	106	92.1	
272 乙苯	2.80	2.75	3.15	3.17	123	106	
273 邻二甲苯	2.72	2.69	3.15	3.11	121	106	
274 间二甲苯	2.73	2.72	3.20	3.14	122	106	
275 对二甲苯	2.73	2.75	3.15	3.17	123	106	
276 正丙苯	3.30	3.23	3.68	3.64	139	120	
277 异丙苯	3.34	3.24	3.68	3.64	139	120	
278 1,2,-3三甲苯	3.29 ^{a)}	3.08	3.65 ^{b)}	3.50	134	120	
279 1,2,4-三甲苯	3.32	3.18	3.65	3.59	137	120	
280 1,3,4-三甲苯	3.29 ^{a)}	3.18	3.65 ^{b)}	3.59	137	120	
281 1,3,5-三甲苯	3.09	3.23	3.42	3.64	139	120	
282 正丁基苯	3.60	3.75	4.18	4.15	156	134	
283 异丁基苯	3.69 ^{a)}	3.73	4.05	4.12	155	134	
284 1,2,4,5-四甲苯		3.61	4.00		151 ^{c)}	134	
285 戊基苯	4.36 ^{a)}	4.28	4.72 ^{b)}	4.65	173	148	
286 己基苯	4.88 ^{a)}	4.90	5.24		193 ^{c)}	162	
287 庚基苯	5.41 ^{a)}	5.28	5.78 ^{b)}	5.63	206	176	
288 辛基苯	5.94 ^{a)}	5.97	6.30		228 ^{c)}	190	
289 壬基苯	6.45 ^{a)}	6.26	6.84 ^{b)}	6.58	238	204	
290 癸基苯	6.98 ^{a)}	7.07	7.35		264 ^{c)}	218	
291 十一烷基苯	7.52 ^{a)}	7.79	7.89 ^{b)}	8.07	288	232	
292 十三烷基苯	8.59 ^{a)}	8.28	8.97 ^{a)}	8.54	304	260	
293 十七烷基苯	10.75 ^{a)}	10.29	11.13	10.50	370	330	

氯代苯

294 六氯苯	7.76	8.07	6.42	6.72	138	285	231
295 五氯苯	5.65	5.36	5.69	5.25	136	250	86.0
296 1,2,4,5-四氯苯	5.56	5.17	5.05	4.12	116	216	115
297 1,2,3,5-四氯苯	4.79		5.05		138 ^{c)}	216	47.0
298 1,2,4-三氯苯	3.57	3.63	4.02	4.06	125	181	53.0
299 1,2,3-三氯苯	3.76		4.27		121 ^{c)}	181	63.0
300 1,3,5-三氯苯	4.44		4.27		125 ^{c)}	181	
301 1,2-二氯苯	3.01	2.94	3.55	3.39	113	147	
302 1,3-二氯苯	3.08	2.99	3.38	3.45	114	147	
303 1,4-二氯苯	3.21	3.73	3.59	3.93	118	147	
304 氯苯	2.35	2.31	2.81	2.78	102	113	
305 1,2,4,5-四溴苯	6.98	6.61	6.01	5.71	128	394	182
306 1,2,3-三溴苯	5.03	4.34	4.98	4.25	118	315	87.0
307 1,2,4-三溴苯	4.50		4.98		136 ^{c)}	315	44.0
308 1,3,5-三溴苯	5.60		4.98		126 ^{c)}	315	122
309 1,2-二溴苯	3.50	3.40	4.07	3.84	121	236	

续表

有 机 物	-lgS(mol/l)		-lgK _{ow}		MV (ml/mol)	M	mp (°C) ^{d)}
	测定值	估算值	测定值	估算值			
310	1,3-二溴苯	3.38	3.40	3.75	3.84	121	236
311	1,4-二溴苯	4.07	4.91	4.07	4.81	125	236
312	溴苯	2.64	2.48	2.99	2.95	105	157
313	1,2-二氟苯	2.00	2.07	2.59	2.56	98.0	115
314	1,3-二氟苯	2.00	2.07	2.58	2.56	98.0	115
315	1,4-二氟苯	1.97	2.36	2.58	2.84	103	115
316	氟苯	1.79	1.84	2.27	2.33	94.0	96.0
317	1,2,3-三碘苯	6.18		5.86		141 ^{c)}	456
318	1,2,4-三碘苯	5.93		5.85		145 ^{c)}	456
319	1,3,5-三碘苯	6.85		5.85		131 ^{c)}	456
320	1,2-二碘苯	4.24	3.96	4.65	4.35	130	330
321	1,3-二碘苯	4.57	4.42	4.64	4.70	134	330
322	1,4-二碘苯	5.25		4.64		119 ^{c)}	330
323	碘苯	2.95	2.82	3.36	3.28	111	204
324	2-溴氯苯	3.19	3.17	3.83	3.61	117	192
325	3-溴氯苯	3.21	3.17	3.83	3.61	117	192
326	4-溴氯苯	3.63	4.23	3.83	4.29	122	192
327	2-碘氯苯	3.54	3.46	2.54	3.89	122	238
328	4-碘氯苯	4.03	4.32	4.12	4.47	127	238
329	2-溴碘苯	3.83		4.36		129 ^{c)}	283
330	4-溴碘苯	4.56		4.36		120 ^{c)}	283

卤代酚

331	五氯酚	4.28	4.32	5.04	5.09	135	266	191
332	2,4,6-三氯酚	2.39	2.40	3.72	3.54	130	198	69.5
333	2,4-二氯酚	1.55	1.59	2.88	2.83	118	163	45.0
334	对氯酚	1.12	1.08	2.39	2.35	105	129	43.5
335	间氯酚	1.18	0.82	2.15	2.13	102	129	33.5
336	邻氯酚	0.65	0.66	2.17	2.00	101	129	
337	对碘酚	1.83		2.91		105 ^{c)}	220	93.5
338	对溴酚	1.37	0.99	2.59	2.22	95.0	174	64.0
339	间溴酚	1.25		2.63		113 ^{c)}	174	33.0
340	对氟酚	1.16		1.77		96.0 ^{c)}	112	48.0
341	间氟酚	1.65		3.01		123 ^{c)}	112	40.0
342	酚	0.047	0.45	1.46	1.77	89.0	94.1	43.0

多环芳烃

343	1,2-二氢化茈	3.03	3.36	3.57	3.36	123	118	
344	萘	3.61	4.23	3.38	3.58	125	128	80.2
345	1-甲基萘	3.71	3.71	3.86	3.90	139	142	
346	2-甲基萘	3.75	3.90	3.86	3.99	141	142	34.6
347	1,4-二甲基萘	4.14	3.88	4.38	4.17	147	156	
348	1,3-二甲基萘	4.29	4.03	4.42	4.40	154	156	
349	1,5-二甲基萘	4.68		4.38		146 ^{c)}	156	82.0
350	2,3-二甲基萘	4.72	5.20	4.38	4.66	155	156	102

续表

有 机 物	-lgS(mol/l)		-lgK _{ow}		MV (ml/mol)	M	mp (°C) ^{d)}
	测定值	估算值	测定值	估算值			
351 2,6-二甲基萘	4.89		4.38		140 ^{c)}	156	110
352 1-乙基萘	4.16	4.06	4.39	4.44	155	156	
353 1,4,5-三甲基萘	4.92	4.36	4.90	4.91	169	170	
354 α-氯萘	4.38	3.65	4.38	3.80	136	162	
355 联苯	4.35	4.59	4.03	4.33	148	154	71.0
356 苣	4.59	5.02	4.03	4.50	151	154	96.0
357 芴	4.93	5.04	4.18	4.19	138	116	116
358 芘	6.18	6.09	4.88	4.94	159	202	156
359 蒽	8.06	8.00	5.91	5.89	179	228	255
360 菲	8.80	8.50	6.50	6.23	187	252	277
361 苯并(a)芘	7.82		6.50		205 ^{c)}	252	179
362 苯并(a)芴	6.68		5.57		171 ^{c)}	216	183
363 苯并(b)芴	7.28		5.57		172 ^{c)}	216	205
364 三亚苯	6.73	7.08	5.45	5.60	175	228	199
365 并四苯	6.69		5.91		156 ^{c)}	128	357
366 蒽	6.38	6.60	4.54	4.45	139	178	216
367 2-甲基蒽	6.69		5.15		160 ^{c)}	192	209
368 9-甲基蒽	5.87		5.15		171 ^{c)}	192	81.5
369 萤蒽	5.90	5.49	5.22	4.92	162	202	111
370 9,10-二甲基蒽	6.57		5.69		171 ^{c)}	256	182
371 苯并(a)蒽	7.21		5.91		207 ^{c)}	228	160
372 9,10-二甲基 -1,2-苯并蒽	6.63		6.95		214 ^{c)}	256	122
373 菲	5.15	5.76	4.63	4.61	168	178	101
374 1-甲基菲	5.90		5.08		169 ^{c)}	192	123
375 2-甲基菲	4.93	4.95	5.24		176 ^{c)}	192	55.5
376 3-甲基菲	5.45		5.15		182 ^{c)}	192	65.0
377 苯并(9,10)菲	6.73		5.45		164 ^{c)}	228	199

邻苯二甲酸酯

378 邻苯二甲酸二甲酯	1.59	1.53	0.57	-0.015	100	194	
379 邻苯二甲酸二乙酯	2.40	2.85	2.47	3.33	198	222	
380 邻苯二甲酸二丁酯	4.33	3.68	5.56	5.61	265	278	
381 邻苯二甲酸二辛酯	5.12	5.30	9.87	9.54	380	391	
382 邻苯二甲酸二壬酯		5.98	11.15 ^{b)}	11.28	431	419	

多氯联苯^{c)}

383 联苯	4.35	4.25	4.10	4.14		154	71.0
384 2-CBP	3.66	4.84	4.56	4.64		189	34.0
385 3-CBP	4.73	4.83	4.72	4.63		189	25.0
386 4-CBP	5.27	4.91	4.69	4.69		189	77.7
387 2,2'-CBP	5.17	5.52	5.02	5.20		223	61.0
388 2,4'-CBP	5.20	5.47	5.15	5.16		223	
389 2,4'-CBP	5.07	5.49	5.15 ^{b)}	5.19		223	43.0
390 2,5-CBP	5.59	5.47	5.18	5.16		223	

续表

有 机 物	-lgS(mol/l)		-lgK _{ow}		MV (ml/mol)	M	mp (°C) ^{d)}
	测定值	估算值	测定值	估算值			
391	4,4'-CBP	6.44	5.63	5.28	5.29	223	149
392	2,2',5-CBP	5.60	6.15	5.64	5.73	257	44.0
393	2',3,4-CBP	6.52	6.16	5.74 ^{b)}	5.74	257	60.0
394	2,4,4'-CBP	6.00	6.16	5.74	5.73	257	57.0
395	2,4,5-CBP	6.45	6.19	5.77	5.76	257	78.0
396	3,4,4'-CBP	7.23	6.21	5.90	5.77	275	88.0
397	2,2',3,3'-CBP	6.93	6.89	6.82 ^{b)}	6.34	292	121
398	2,2',3,5-CBP	6.23	6.79	6.54 ^{b)}	6.26	292	47.0
399	2,2',4,4'-CBP	6.63	6.78	6.26 ^{b)}	6.25	292	41.0
400	2,2',5,5'-CBP	6.80	6.24	6.26	6.29	292	87.0
401	2,3',4,4'-CBP	6.70	6.89	6.54 ^{b)}	6.35	292	128
402	2,3',4,5-CBP	7.18	6.85	6.39	6.30	292	92.0
403	2,3',4',5-CBP	6.85	6.86	6.39	6.31	292	104
404	3,3',4,4'-CBP	6.22	6.96	6.52	6.39	292	180
405	2,2',3,4,5-CBP	7.52	7.49	7.13 ^{b)}	6.84	326	100
406	2,2',3,4,5'-CBP	7.86	7.57	6.85	6.84	326	112
407	2,2',3,4,6-CBP	7.43	7.49	6.85 ^{b)}	6.76	326	100
408	2,2',4,5,5'-CBP	7.50	7.46	6.85	6.80	326	77.0
409	2,3,4,5,6-CBP	7.68	7.52	6.85	6.86	326	124
410	2,2',3,3',4,4'-CBP	8.91	8.21	7.44	7.43	361	150
411	2,2',3,3',4,5-CBP	8.63	8.12	7.44 ^{b)}	7.37	361	85.0
412	2,2',3,3',4,5,6-CBP	8.60	8.14	7.44 ^{b)}	7.39	361	100
413	2,2',4,4',5,5'-CBP	8.48	8.14	7.44	7.37	361	103
414	2,2',4,4',6,6'-CBP	8.60	8.16	7.12	7.39	361	114
415	2,2',3,4',5,5',6-CBP	8.90	8.84	7.93	7.95	395	149
416	2,2',3,3',4,4',5,5'- CBP	9.20	9.51	8.68	8.50	430	159
417	2,2',3,3',5,5',6,6'- CBP	9.38	9.51	8.42	8.50	430	162
418	2,2',3,3',4,4',5,5',6- CBP	9.61	10.21	9.14	9.08	464	206
419	十氯联苯	10.49	10.99	9.60	9.72	499	305

对胺基苯甲酸酯^{c)}

420	对胺基苯甲酸甲酯	1.60	1.67	1.12	1.19	151	112
421	对胺基苯甲酸乙酯	1.99	1.88	1.65	1.61	165	89.0
422	对胺基苯甲酸丙酯	2.33	2.27	2.18	2.09	179	74.0
423	对胺基苯甲酸丁酯	2.76	2.59	2.70	2.55	193	56.0
424	对胺基苯甲酸戊酯	3.35	3.19	3.23	3.12	207	52.0
425	对胺基苯甲酸己酯	3.95	4.05	3.76	3.79	221	61.0
426	对胺基苯甲酸庚酯	4.60	5.02	4.20	4.51	235	75.0
427	对胺基苯甲酸辛酯	5.40	5.62	4.81	5.08	249	71.0
428	对胺基苯甲酸壬酯	6.00	6.20	5.34	5.67	263	69.0
429	对胺基苯甲酸癸酯	7.80	7.20	6.92	6.37	277	82.0

续表

有 机 物	$-lg S(\text{mol/l})$		$-lg K_{ow}$		MV (ml/mol)	M	mp ($^{\circ}\text{C}$) ^{d)}
	测定值	估算值	测定值	估算值			
对羟基苯甲酸酯 ^{e)}							
430 对羟基苯甲酸甲酯	1.82	1.82	1.66	1.66		152	131
431 对羟基苯甲酸乙酯	2.22	2.22	2.10	2.19		166	116
432 对羟基苯甲酸丙酯	2.59	2.59	2.71	2.71		180	96.0
433 对羟基苯甲酸丁酯	2.89	2.89	3.24	3.24		194	68.0

a) 辛醇/水分配系数值用文献[21]碎片法估算；

b) 溶解度值用文献[21]回归方程估算；

c) 摩尔体积值用已知的溶解度和辛醇/水分配系数，用方程(4, 5)估算；

d) 没有熔点值的有机物，其熔点小于25 $^{\circ}\text{C}$ ；

e) 溶解度和辛醇/水分配系数的估算值是用分子量代替摩尔体积估算的

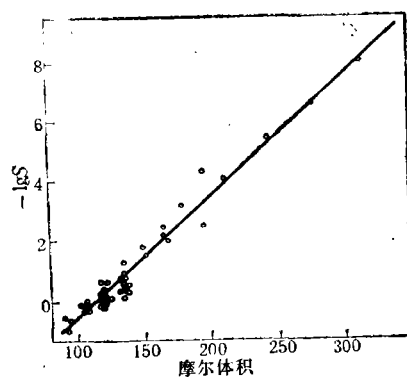


图 1 54个醇类化合物溶解度和摩尔体积的相关性

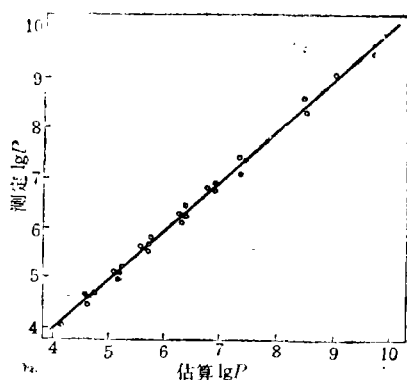
Fig.1 Relationship between solubility ($-\lg S$) and molar volume (MV) for 54 alcohols图 2 分子量估算27个多氯联苯辛醇/水分配系数 ($\lg P$)值Fig.2 Calculation of octanol/water partition coefficients ($\lg P$) by molecular weight for 27 polychlorinated biphenyls

表 2 回归分析有机物水的溶解度, 辛醇/水分配系数

Table 2. Regression analysis for aqueous solubility, octanol/water partition coefficients of organic chemicals

有机物类别	溶 解 度					辛醇/水分配系数				
	A	B	C	r	n	A	B	C	r	n
烷 烃	0.0197	0	1.18	0.973	20	0.0251	0	-0.0858	0.857	16
烯 烃	0.0341	0	-0.973	0.967	10	0.0403	0	-2.45	0.937	8
二 烯 烃	0.0326	0	-1.14	0.976	5	0.0274	0	-0.827	0.990	4
炔 烃	0.0366	0	-1.95	0.966	9	0.0309	0	-1.09	0.995	7
环 烷 烃	0.0351	0	-0.639	0.995	7	0.0245	0	-0.247	0.931	7
环 烯 烃	0.0360	0	-1.19	0.932	8	0.0292	0	-0.812	0.999	3
醇	0.0340	0.0152	-3.44	0.982	59	0.0347	-0.00539	-2.707	0.981	57
酮	0.0333	0	-3.31	0.987	13	0.0302	0	-2.50	0.985	13
醚	0.0364	0	-3.58	0.967	12	0.0193	0	-0.879	0.947	12
酯	0.0303	0	-2.78	0.989	18	0.0299	0	-2.26	0.995	18
卤代烷烃	0.0353	0	-1.52	0.909	28	0.0287	0	-0.515	0.904	30
卤代烯烃	0.0366	0	-0.870	0.984	8	0.0297	0	-0.413	0.976	8
烷基苯	0.0306	0	-1.01	0.986	11	0.0297	0	-0.480	0.989	11
卤代苯	0.0578	0.0179	-3.59	0.972	26	0.0555	0.00946	-2.88	0.958	26
卤代酚	0.0382	0.0143	-3.20	0.967	8	0.0360	0.0113	-1.64	0.969	8
多环芳烃	0.0216	0.0149	0.708	0.954	20	0.0336	0.00284	-0.766	0.944	20
邻苯二甲酸酯	0.0134	0	0.187	0.964	4	0.0341	0	-3.34	0.988	4
多氯联苯*	0.0186	0.00135	1.31	0.958	37	0.0155	0.00107	1.71	0.997	27
对羟基苯甲酸酯*	0.0487	0.0201	-7.44	0.987	10	0.0430	0.00792	-5.99	0.987	10
对羟基苯甲酸酯*	0.0371	0.00775	-4.64	1.00	4	0.0373	0.0000746	4.02	1.00	4

* 用分子量代替摩尔体积进行回归分析

参 考 文 献

- [1] Lande S S, Banerjee S, 1981. Predicting Aqueous Solubility of Organic Nonelectrolytes from Molar Volume. *Chemosphere*, 10(7): 751-759
- [2] Nirmalikhandan N N, Speece R E, 1988. Prediction of Aqueous Solubility of Organic Chemicals Based on Molecular Structure. *Environ. Sci. Technol.*, 22(3): 328-338
- [3] Hermann R B, 1972. Theory of Hydrophobic Bonding. I. The Correlation of Hydrocarbon Solubility in Water with Solvent Cavity Surface Area. *J. Phys. Chem.*, 76(19): 2754
- [4] Mackay D, Bobra A, Shiu W Y, 1980. Relationship between Aqueous Solubility and Octanol-Water Partition Coefficients. *Chemosphere*, 9(11): 701-711
- [5] Yalkowsky S H, Valvani S C, 1980. Solubility and Partitioning I: Solubility of Nonelectrolytes in Water. *J. Pharm. Sci.*, 69(8): 912-922
- [6] Karickhoff S W, 1981. Semi-Empirical Estimation of Sorption of Hydrophobic Pollutants on Natural Sediments and Soils. *Chemosphere*, 10(8): 833-846
- [7] Mackay D, Mascarenhas R, Shiu W Y et al., 1980. Aqueous Solubility of Polychlorinated Biphenyls. *Chemosphere*, 9(5-6): 257-264
- [8] Amidon G L, Yalkowsky S H, Leung S, 1974. Solubility of Nonelectrolytes in Polar Solvents I: Solubility of Aliphatic Alcohols in Water. *J. Pharm. Sci.*, 63(12): 1858
- [9] Valvani S C, Yalkowsky S H, Amidon G L, 1976. Solubility of Nonelectrolytes in Polar Solvents II. Refinements in Molecular Surface Area Computations. *J. Pharm. Chem.*, 80(8): 829-835
- [10] Leo A, Hansch C, Priscilla Y C, 1976. Dependence of Hydrophobicity of Apolar Molecules on Their Molecular Volume. *J. Medicinal Chem.*, 19(5): 611-615

- [11] Hansch C et al., 1968, The Linear Free-Energy Relationship between Partition Coefficients and Aqueous Solubility of Organic Liquids, *J. Organic. Chem.*, 33(1): 347—370
- [12] 王连生, 徐良基, 田立卿等, 1989, 有机酸碱类污染物溶解度的测定及估算, *环境科学学报*, 9(2): 129
- [13] 王连生, 汪小江, 许鸥泳等, 1986, 高效液相色谱法测定多环芳烃化合物辛醇/水的分配系数及其对水溶解度的估算, *环境科学学报*, 6(4): 491—497
- [14] 叶常明, 1985, 水污染动力学与数学模式, *环境科学丛刊*, 6(4,5): 148—167
- [15] Ellgehausen H et al., 1981, Reversed-Phase Chromatography as a General Method for Determining Octanol-1/Water Partition Coefficients, *Pestic. Sci.*, 12(2): 219—227
- [16] Chiou C T, Schmedding D W, Manes M, 1982, Partiting of Organic Compounds in Octanol-Water Systems, *Environ. Sci. Technol.*, 16(1): 4—10
- [17] Banerjee S, Yalkowsky S H, Valvani S C, 1980, Water Solubility and Octanol/Water Partition Coefficients of Organics, Limitations of the Solubility-Partition Coefficient Correlation, *Amer. Chem. Soc.*, 14(10): 1227—1229
- [18] Woodburn K B, Doucette W J, Andren A W, 1984, Generator Column Determination of Octanol/Water Partition Coefficients for Selected Polychlorinated Biphenyl Congeners, *Environ. Sci. Technol.*, 18(6): 457—459
- [19] Bailey R A, Skeaff J M, 1979, Solubility of Sulfides in Sodium polysulfide Melts, *Amer. Chem. Soc.*, 24(2): 126—129
- [20] Bruggeman W A, et al., 1982, Relationship with Hydrophobicity as Measured by Aqueous Solubility and Octanol-Water Partition Coefficient, *J. Chromatogr.*, 238(2): 335—346
- [21] Lyman W J, Reehl W F, Rosenblatt D H, 1982, Handbook of Chemical Property Estimation Methods, New York, McGraw-Hill Book Company
- [22] Reid R C, Prausnitz J M, Poling B E, 1987, The Properties of Gases and Liquids, New York, McGraw-Hill Book Company
- [23] Weast R C et al., 1985 CRC Handbook of Chemistry and Physics, Florida: Boca Ration
- [24] 中国医药公司上海化学试剂采购供应站, 1984, 试剂手册, 上海科学技术出版社

1990年10月24日收到,

PEEDICTING AQUEOUS SOLUBILITY AND OCTANOL/ WATER PARTITION COEFFICIENTS OF ORGANIC CHEMICALS FROM MOLAR VOLUME

Wang Liangsheng Zhao Yuanhui

(Department of Environmental Science, Nanjing University, Nanjing, 210008)

Gao Hong

(Department of Chemistry, Nanjing University)

ABSTRACT

Correlation equations relating aqueous solubility and octanol/water coefficients to molar volume were derived by regression analysis for 20 chemical classes which included 317 organic chemicals. Good correlation was found between aqueous

solubility, octanol/water partition coefficients with molar volumes. Correlation coefficients were discussed. Aqueous solubility and octanol/water partition coefficients were estimated with molar volume and compared with the values from other estimation methods.

Keywords: solubility, octanol/water partition coefficient, molar volume

书 评

评《现代毛细管柱气相色谱法》一书

吴采樱、曾昭睿编著的《现代毛细管柱气相色谱法》一书包括：绪论、基础理论、毛细管技术、柱子的质量评价、仪器、毛细管柱进样、分离条件的优化选择、定性和定量、毛细管柱色谱联用技术、毛细管柱色谱在不同领域中的应用和毛细管柱在其它色谱领域中的应用共11章。

这本书是我国学者自己编写的第一本毛细管气相色谱的专著，反映了这一领域国内外近期发展的概况。资料新颖、内容全面，是一本为国内学习毛细管气相色谱各层次人员的好书。该书有以下三个特点。

1. 内容比较全面，对近年毛细管色谱发展中的一些重要课题，如进样技术、联用技术都做了阐述。

2. 书中引用了大量国内外的研究工作，特别是列举了GC在各领域应用的例子，很有参考价值。

3. 最后一章还把近年发展起来的几个新领域，如CSFC, CHPLC, HPCZE (MECC), PyGC做了简单介绍，使人耳目一新。

吴采樱、曾昭睿编著的《现代毛细管柱气相色谱法》是对国内色谱工作者的一大贡献，是一本好的教材，可供大专院校师生选用，也可供科研、厂矿实验室从事色谱分析的人员参考，特此推荐。

北京理工大学教授 傅若农

1991年9月29日