

# 《有机污染化学》

## 图书基本信息

书名：《有机污染化学》

13位ISBN编号：9787040144710

10位ISBN编号：7040144719

出版时间：2004-7

出版社：高等教育出版社

作者：王连生

页数：915

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)

## 前言

13年前本人曾出版了一本《有机污染物化学》作为研究生的教学参考书，该书取材于1983年开始给研究生讲课的内容，几经修改、补充、完善，于1990年由科学出版社出版。值得欣慰的是该书被不少科研院所和高校作为研究生教材使用，并于1995年获教育部优秀教材一等奖，1998年又获科技进步二等奖（教材类），得到了国内同行们的认可。历经多年，随着环境科学的发展，深感该书的内容急需更新。经我校研究生院推荐，教育部组织专家评议，并由国务院学位委员会学科评议组召集人会议审定，将该书正式列为教育部推荐研究生教学用书，并提出了具体修改意见。为了写好这本书，我们还组织了国内有关专家召开了一次座谈会，邀请的专家包括大连理工大学陈景文教授、清华大学魏东斌博<sup>2</sup>、北京师范大学刘新会博<sup>——2</sup>、华南理工大学吴纯德博士、暨南大学钟萍博<sup>2</sup>、中科院南海研究所林志芬研究员等。专家们对该书的内容及章节结构都进行了具体论证，为该书撰写的框架奠定了基础。经讨论，决定将该书分为三部分，共二十五章。第一部分为有机污染物的环境行为，这是有机污染物的基础部分，主要内容包括有机物在环境中的迁移转化。所谓迁移，指污染物在环境中的物理过程，在此过程中，污染物的结构未发生变化，包括污染物的分配、溶解、挥发、吸附等过程；所谓转化，即有机物的生物化学过程，在此过程中，污染物的结构发生变化，包括光降解、水解、氧化还原和生物降解、富集等过程。主要阐明有机物在环境中的过程机制。在这一部分，作为案例，我们还将污染物在河流、湖泊、地下水的变化过程纳入其中，加入一些物理和数学模型，以便更深入地评价有机污染物在环境中的行为。第二部分是关于有机物结构—性质/活性相关。有机污染化学发展至今，已呈现出由描述性向推理性、由定性向定量、由宏观向微观发展的趋势，因而，对分子结构特征的定量描述并阐明生物、化学等过程的重要规律，自然成为有机污染化学基础研究的重要范畴。

# 《有机污染化学》

## 内容概要

《有机污染化学》为教育部研究生工作办公室推荐研究生教学用书。

《有机污染化学》分为三部分，共二十五章。第一部分系统阐述了有机污染物的环境过程机制（包括分配、吸附、生物富集等物理过程以及光降解、生物降解、氧化与还原等生物与化学过程）和迁移转化行为模型；第二部分主要介绍了有机污染物定量结构-活性关系的理论、实践及最新进展，内容包括分子拓扑学方法、量子化学方法、三维结构-活性关系方法、人工智能技术等理论及应用实践；第三部分对典型有机污染物如多环芳烃、多氯联苯与二噁英、环境内分泌干扰物等进行了分类介绍，并对化学品风险评价的理论与方法进行了系统地阐述。全书在介绍较成熟理论的基础上，着重介绍国内外有机污染化学领域的最新进展。

《有机污染化学》可作为高等院校的环境科学与工程、化学与化工、药物等专业研究生教材，也可供相关专业的科学研究人员和工程技术人员阅读，同时可为环境管理者提供参考。

## 书籍目录

第一部分 有机污染物的环境行为

第一章 有机污染物的溶解与分配

1.1 有机污染物在水中的溶解

1.1.1 水溶解度的定义

1.1.2 热力学因素

1.1.3 溶解过程的分子描述

1.1.4 影响溶解的因素

1.2 有机污染物水溶解度的估算方法

1.2.1 水溶解度和活度系数的测定方法与应用

1.2.2 估算方法概述

1.2.3 由KOW估算水溶解度

1.2.4 由分子结构估算水溶解度 (Irmann法)

1.3 有机污染物在有机相/水相之间的分配

1.3.1 有机溶剂-水分配系数

1.3.2 正辛醇/水分配系数

1.3.3 正辛醇/水分配系数的估算方法

1.4 有机污染物在多组份复杂体系的分配规律

1.4.1 前言

1.4.2 有机污染物在多组分有机相/水相之间的分配规律

1.4.3 混合有机污染物在有机相/水相之间的分配规律

习题参考文献

第二章 有机污染物的土壤/沉积物吸附机制

2.1 吸附过程的基本概念与原理

2.1.1 吸附的一般概念

2.1.2 扩散理论—Fick第一定律

2.1.3 平衡吸附模型

2.1.4 非平衡吸附模型

2.2 有机污染物的吸附/解吸机理

2.2.1 疏水性有机物的吸附机理

2.2.2 吸附过程中的分子间作用力

2.2.3 影响有机污染物吸附的因素

2.3 土壤/沉积物的吸附系数

2.3.1 土壤/沉积物的有机质-水分配系数

2.3.2 有机碳吸附系数

2.3.3 影响K和Koc值的因素

2.4 土壤/沉积物吸附系数的估算方法

2.4.1 估算方法综述

2.4.2 常见的估算方法

2.4.3 最适合估算方程的选择

习题参考文献

第三章 光解

3.1 引言

3.2 光化学基础

3.2.1 光物理和光化学

3.2.2 光化学基本定律

3.2.3 量子产率

3.3 有机污染物的光吸收

3.3.1 化学结构与光吸收

3.3.2 天然水体中有机化合物的光吸收

3.3.2.1 天然水体中的光衰减

3.3.2.2 有机污染物光吸收的特征速率

3.3.2.3 有机污染物在近表面光吸收的特征速率

3.3.2.4 有机污染物在充分混合水体中的光吸收特征速率

3.3.2.5 光屏蔽因子

3.4 有机污染物的直接光解

3.4.1 直接光解的反应速率常数

3.4.2 有机污染物的直接光解机理

3.5 有机污染物的间接光解

3.5.1 有机污染物的光敏化反应

3.5.2 DOM生成的有机自由基的性质

3.5.3 I型和II型光敏化机理的比较

3.6 有机污染物的光解研究方法

3.6.1 光化学实验方法

3.6.1.1 光源

3.6.1.2 狭光的获得方法

3.6.2 化学露光计法测定光解量子产率

3.6.2.1 露光计的制备

3.6.2.2 校正图的绘制

3.6.2.3 被测光源光强度的测定

习题参考文献

第四章 水解反应

4.1 简介

4.2 水解特性

4.2.1 水解机理

4.2.2 水解速率

4.2.3 水解速率的影响因素

4.2.4 水解速率的测定

4.3 部分有机物的水解反应

4.3.1 羧酸衍生物与碳酸衍生物的水解反应

4.3.2 磷酸酯和硫代磷酸酯的水解反应

4.4 水解速率常数的估算—定量结构-反应活性相关

4.4.1 Hammett方程

4.4.2 Taft方程

4.4.3 水解速率常数的估算

习题参考文献

第五章 有机污染物的氧化与还原

5.1 环境中的氧化反应

5.1.1 分子氧

5.1.2 过氧化氢及其衍生物

5.1.3 表面反应

5.1.4 热氧化

5.2 环境中的还原反应

5.2.1 概述

5.2.2 还原转化的途径

5.2.3 还原性脱氮

5.2.4 硝基芳烃的还原

5.2.5 芳香族偶氮的降解

5.2.6 N-亚硝胺的降解

5.2.7 亚砷的降解

5.2.8 醌的还原

习题参考文献

第六章 酸碱解离常数的估算及其应用

6.1 引言

6.2 酸碱强度

6.2.1 酸强度的标志  $pK_a$

6.2.2 碱强度的标志  $pK_b$

6.2.3 统一的  $pK_a$  标度

6.3 解离常数的估算方法

6.3.1 芳香酸  $K_a$  的估算

Hammett相关

6.3.2 处理其它芳香酸的基本步骤

6.3.3 脂肪酸  $K_a$  的估算—Taft相关

6.4 Lewis酸碱性指数

6.4.1 Lewis酸碱性指数的定义

6.4.2 Lewis酸碱性指数的定量化

6.4.2.1 定量方法

6.4.2.2 酸碱性指数物理意义

6.4.2.3 可靠性和有效性

6.5 Lewis酸碱性指数的应用

6.5.1 苯系理化参数估算

6.5.2 溶质氢键给体酸度的估算

6.5.3 芳香化合物的酸碱性与其溶剂/水分配系数的相关性

习题参考文献

第七章 生物降解

7.1 引言

7.1.1 微生物的一些重要概念

微生物相互作用及微生物生态学

7.2 生物降解原理

7.2.1 水解谷胱甘肽催化烷基卤化物的生物水解反应

酯的酶促水解反应

7.2.2 生物氧化反应

7.2.3 生物还原反应

醇脱氢酶的生物还原反应

带有还原性金属酶的生物还原反应

7.2.4 含碳基团和水的加成

富马酸根加成羧化作用

双键的水合作用

7.3 微生物降解速率常数

7.3.1 基质的生物有效性和摄取动力学

7.3.2 微生物的生长：Monod种群生长动力学

7.3.3 酶：Michaelis-Menten 酶动力学估算

Michaelis-Menten情况下的生物转化速率

7.4 微生物降解速率常数的测定

7.4.1 实验方法与分析技术对于测定速率的影响

7.4.2 不同有机物的生物降解速率常数

7.4.3 实验结果外推到现场条件

7.5 取代芳烃微生物降解的历程和途径

7.5.1 取代芳烃的好氧生物降解

7.5.2 取代芳烃的厌氧生物降解

习题参考文献

第八章 生物富集

8.1 引言

8.2 生物富集机理与模型

8.2.1 疏水模型

8.2.2 鱼体富集动力学模型

8.2.3 生物膜的透过机理

8.2.4 生物组织中化合物的富集机理

8.3 影响生物富集的因素

8.3.1 生物富集与生物类脂物含量

8.3.2 生理因素

8.3.3 空间障碍

8.3.4 生物转化

8.3.5 物种

8.3.6 环境条件

8.3.7 生物可利用性

8.3.8 污染物的性质

8.3.9 生物富集的平衡时间

8.4 BCF的估算方法

8.4.1 由辛醇-水分配系数估算BCF

8.4.2 由水溶解度估算BCF

8.4.3 由土壤吸附分配系数估算BCF

8.4.4 由分子连接性指数估算BCF

8.4.5 由碎片常数估算BCF

8.4.6 估算值与测定值差异的来源

8.5 BCF的快速测定方法

习题参考文献

第九章 有机物污染物

迁移转化模型9.1 模型基础9.1.1有机物迁移-平流和扩散9.1.2迁移过程的数学描述9.1.3物质的质量守恒方程(高斯定理和Fick第二定律)9.1.4环境中其它随机迁移过程9.2 时空模型及求解9.2.1一维扩散模型9.2.2一维水平对流/扩散/反应方程9.2.3模型的数值解9.3 不同边界条件的下的迁移模型9.3.1瓶颈边界9.3.2屏障边界9.3.3扩散边界9.4 不同环境系统下的化合物迁移转化模型9.4.1河流9.4.2湖泊与水库9.4.3地下水习题参考文献第二部分 有机物结构-性质-活性相关第十章 有机污染物的结构-性质与活性10.1 有机污染物的结构-性质/活性关系10.1.1 结构-性质/活性关系的含义10.1.2 定量结构-活性关系的发展10.1.3 结构-活性关系模型的构建10.1.4 有机污染物的分子结构表征10.1.5 结构-活性关系的研究方法10.2 有机污染物的毒性效应10.2.1 典型有机物毒性反应类型10.2.2 典型有机物的分子毒性机制10.2.3 典型有机物的遗传毒性10.3 复合污染物的联合作用与结构-活性关系10.3.1联合作用的概念及类型10.3.2复合污染物联合作用的识别10.3.3 复合污染物联合作用机理10.3.4 混合有机化合物定量结构-活性关系习题参考文献第十一章 多元统计在QSAR中应用11.1 QSAR模型的矩阵表示11.2 多元线性回归(MLR)法构建QSAR模型11.2.1 回归系数的计算11.2.2 回归系数的置信区间11.3 QSAR模型质量评价11.3.1 几个基本概念11.3.2 模型估计能力11.3.3 模型稳定性11.3.4 模型预测能力11.4 最佳子集回归11.5 主成分回归(PCR)法11.5.1 PCR基本原理11.5.2 从PCR模型到MLR模型11.6 模式识别概论11.6.1 模式与模式识别11.6.2 数据预处理11.6.3 相似系数11.6.4 距离11.7 线性学习机(LLM)11.8 K-最近邻法(KNN)11.9 SIMCA方法11.9.1 对训练集中每一类建立主成分模型11.9.2 未知样本测试11.10 聚类分析-系统聚类方法11.10.1 基本原理11.10.2 类间距离的定义与系统聚类方法习题参考文献第十二章 分子连接性与电拓扑状态12.1 分子连接性12.1.1 简单分子连接性指数12.1.2 价分子连接性指数12.1.3 分子连接性指数的物理意义12.1.4 分子连接性指数在QSPR/QSAR中的应用12.2 电拓扑状态12.2.1 电拓扑状态指数12.2.2 电拓扑状态指数的应用习题参考文献第十三章 色谱保留与QSAR13.1 引言13.2 色谱保留指数13.2 气相色谱13.3 高效液相色谱13.4 薄层色谱和纸色谱13.3 色谱保留指数的预测13.2.1分子连接性指数预测分子保留指数13.3.2 TLSE模型预测色谱保留13.4 色谱保留指数预测化合物的理化性质13.4.1色谱保留与辛醇-水分配系数13.4.2色谱保留与水溶解度13.4.3色谱保留与土壤(沉积物)吸附系数( $K_{oc}$ )13.4.4色谱保留与生物富集系数(BCF)13.5 色谱保留预测化合物生物活性习题参考文献第十四章 量子化学在定量结构-性质/活性相关研究中的应用14.1 引言14.2 量子化学理论及描述符14.2.1 分子轨道理论方法14.2.2 量子化学计算方法14.2.3 量子化学描述符14.3 量子化学描述符在定量结构-性质/活性相关研究中的应用14.3.1 应用量子化学描述符预测化合物的理化性质14.3.2 应用量子化学描述符预测有机污染物的生物活性14.3.3 量子化学描述符与溶剂化效应的相关性14.4 量子化学在有机污染物定量结构-性质/活性相关研究中的展望习题参考文献第十五章 人工神经网络与遗传算法在QSAR中的应用15.1 人工神经网络的构造和功能15.1.1人工神经网络基本结构15.1.2人工神经元的功能函数15.1.3 BP型神经网络15.2 人工神经网络在QSAR中的应用实例15.2.1 ANN在格式识别/定性分类中的应用15.2.2 ANN对理化性质和生物活性的定量预测15.3 遗传算法基本原理与算法实现15.3.1遗传算法基本原理15.3.2遗传算法的算法实现15.4 遗传算法在QSAR中的几个应用实例15.4.1遗传算法在QSAR变量筛选中的应用15.4.2遗传算法在复杂QSAR模型训练中的应用15.4.3遗传算法在QSAR研究中的其它应用习题参考文献第十六章 三维定量结构-活性相关16.1 引言16.2 三维定量结构-活性相关方法16.2.1 分子形状分析16.2.2 距离几何分析16.2.3 比较分子力场分析16.2.4 比较分子相似性指数分析16.3 三维定量结构-活性相关在环境科学中的应用16.3.1 卤代芳香族化合物在底泥中吸附行为的三维定量结构-活性相关研究16.3.2 硝基芳香族化合物对斜生栅列藻急性毒性的三维定量结构-活性相关研究16.3.3 有机磷酸酯化合物对家蝇急性毒性的三维定量结构-活性相关研究习题参考文献第三部分 典型有机污染物与生态风险评价第十七章 多环芳烃17.1 引言17.2 多环芳烃的命名17.3 多环芳烃的来源17.3.1大气中的多环芳烃17.3.2水中的多环芳烃17.3.3土壤和沉积物中的多环芳烃17.3.4矿物中的多环芳烃17.3.5煤氢化产物17.3.6有机物的热解和燃烧17.3.7燃料中的多环芳烃17.4 多环芳烃的理化性质17.5 多环芳烃的致癌活性17.6 多环芳烃的致癌机理17.6.1多环芳烃的细胞、亚细胞结合17.6.2多环芳烃的代谢17.6.3多环芳烃的致癌理论17.7 多环芳烃的分离与富集17.7.1 大气飘尘中多环芳烃的分离和富集17.7.2 水样中多环芳烃的分离和富集17.7.3 土壤和沉积物中多环芳烃的富集17.7.4 食品、鱼等中的多环芳烃的分离17.7.5 烟草及烟草焦油中多环芳烃的富集17.7.6 煤液化油中多环芳烃的富集17.7.7 煤焦油及大气飘尘中含氮多环芳烃的分离与富集17.7.8 石油中杂环PAH的分离与富集17.7.9 石油中碱性组分的分离与富集17.7.10 烟草烟雾冷凝物中含氮PAH的富集17.7.11 燃起发生器焦油

中含硫PAH的富集17.7.12 合成燃料中PAH及杂环PAH的分离与富集习题参考文献第十八章 有机金属化合物18.1 引言18.2 环境中有机金属化合物的形成机理18.3 环境中的有机汞化合物18.3.1 有机汞化合物的应用18.3.2 无机汞的甲基化18.3.3有机汞在环境中的迁移和转化18.3.4有机汞的生物活性18.4 环境中的有机锡化合物18.4.1 有机锡化合物的应用18.4.2 无机锡的甲基化18.4.3 有机锡在环境中的迁移和转化18.4.4 有机锡化合物的生物效应18.5 环境中的有机铅化合物18.5.1 有机铅化合物的应用18.5.2 无机铅的甲基化18.5.3 环境中有机铅的迁移和转化18.5.4有机铅的摄入和生物效应习题参考文献第十九章 酚类化合物19.1 引言19.2 环境中酚类化合物的来源19.3 酚的物理、化学及生物行为19.3.1 酚的吸附19.3.2 酚的挥发19.3.3 酚的化学氧化和水解19.3.4 酚的光解19.3.5 酚的生物转化19.3.5.1 氯酚的微生物降解机制19.3.5.2 五氯酚土壤环境中的降解19.3.5.3 五氯酚在生物体内的降解代谢19.4 酚类化合物在环境中的残留19.4.1 酚在大气和水中的残留19.4.2 酚在沉积物中的残留19.4.3 酚在水生植物和无脊椎动物体内的残留19.4.4 酚在鱼体内的残留19.5 酚类化合物的毒性19.5.1 酚对水生植物和无脊椎动物的毒性19.5.2 酚对鱼的毒性19.5.3 酚对人类健康的影响19.6 酚类化合物的分析19.6.1 4-氨基安替比林比色法(4-AAP) 19.6.2 EPA604法习题参考文献第二十章 硝基芳烃和芳胺20.1 来源20.1.1 硝基芳烃的来源20.1.2 芳胺的来源20.2 物理化学性质20.2.1 硝基芳烃的主要物化性质20.2.2 芳胺的主要物化性质20.3 毒性20.3.1 硝基芳烃的毒性20.3.2 芳胺的毒性20.4 降解行为20.4.1 硝基芳烃的降解20.4.2 芳胺的降解20.5 小结习题参考文献第二十一章 多氯联苯与二噁英类物质21.1 多氯联苯21.1.1 多氯联苯的分子结构与命名21.1.2 多氯联苯的理化性质21.1.3 多氯联苯的生产、应用与排放21.1.4 多氯联苯的环境行为21.1.5 多氯联苯的环境残留水平与人类暴露21.2 多氯代二噁英21.2.1二噁英的结构与性质21.2.2二噁英的环境来源21.2.3二噁英的环境残留21.2.4 二噁英的环境行为21.2.5 二噁英的食品污染21.3 多氯联苯与二噁英的毒性效应21.3.1多氯联苯与二噁英的毒性效应21.3.2 二噁英类物质的分子毒性机理21.3.3 二噁英类物质的等价毒性系数方法习题参考文献第二十二章 石油烃类污染物22.1 石油烃类的大气污染22.2 石油烃类的地表水与海洋污染22.2.1非生物过程22.2.2生物过程22.2.3石油在地表水环境中归趋的分析研究实例22.3 石油烃类的土壤和地下水污染22.3.1石油烃类物质进入土壤环境的途径及存在状态22.3.2石油烃类污染物对土壤生态环境的危害22.3.3石油烃类污染物在土壤中的迁移转化习题参考文献第二十三章 有机农药23.1 引言23.2 农药对大气的污染23.2.1 大气中的农药来源23.2.2 农药进入大气的方式23.2.3 农药在大气中的行为23.3 水环境中的农药23.3.1 地面水中农药的来源23.3.2 影响农药进入水环境的因素23.3.3 地面水中农药的生态意义23.4 土壤中的农药23.4.1 土壤中农药的来源23.4.2 土壤中农药的残留23.4.3 影响土壤中农药残留的因素23.5 有机氯农药23.5.1 DDT及其类似物23.5.2 林丹23.6 有机磷农药23.6.1 磷酸衍生物23.6.2 硫代磷酸衍生物23.6.3 二硫代磷酸衍生物23.6.4 膦酸类的衍生物23.7 有机氮农药23.7.1 西维因23.7.2 涕灭威23.7.3 氯苯胺灵23.7.4 苯菌灵习题参考文献第二十四章 环境内分泌干扰物质(EDCs) 24.1 环境中的内分泌干扰物质24.1.1 环境内分泌干扰物质的含义24.1.2内分泌干扰性物质的环境来源24.1.3 环境内分泌干扰物质的分类24.2 环境内分泌干扰物质的生态与健康效应24.2.1 对内分泌系统的影响24.2.2 对生殖和发育的影响24.2.3 对肿瘤发生的影响24.2.4 对神经系统的影响24.2.5 对免疫系统的影响24.2.6 其它影响24.2.7 影响毒性效应的因素24.3 环境内分泌干扰物质的分子毒性机理24.3.1 雌激素受体作用机理24.3.2 雄性激素受体拮抗作用机理24.3.3 其它受体作用机理24.3.4 干扰细胞信号传递途径24.3.5 干扰胚胎发育过程的基因表达24.4 环境分泌干扰物质的鉴别与筛选24.4.1 内分泌干扰活性的评价方法24.4.2 环境内分泌干扰物质的结构-活性关系24.4.3 环境内分泌干扰物质的综合筛选与评价习题参考文献第二十五章 有毒化学品的风险评价25.1 风险评价概述25.1.1 基本概念25.1.2 学科领域与应用范围25.1.3 预测性风险评价与回顾性风险评价25.2 风险评价与风险管理25.2.1 前言25.2.2 风险评价与风险管理过程25.3 暴露评价25.3.1 暴露评价的内容25.3.2 有机污染物的环境过程25.3.3有机污染物迁移、转化与归宿分析25.3.4 暴露途径分析25.3.5 影响暴露的因素25.3.6 暴露计算25.4 效应评价25.4.1 生态效应评价25.4.2 毒理学效应评价25.4.3 剂量-效应关系评价25.4.4 流行病学数据的应用25.5风险表征25.5.1 概述25.5.2 定性的风险表征25.5.3定量的风险表征25.5.4 不确定性分析习题参考文献

# 《有机污染化学》

## 版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)