

关于多轮芳香烃(PAHs)II 系列的分子参数报告

Alan Rodgman(1),Patricia MARTIN(2),RajniGarg(3),Thomas A. Perfetti(4),

Carr J.Smith(2), Gerald A. Long(2),and Corwin Hansch(5),

(1)Consultant, Winston-Salem 北卡罗来纳州, 美国 27103

(2)Lorillard 烟草公司, Greensboro,北卡罗来纳州, 美国 27405

(3)Clarkson 大学, Potsdam, 纽约, 美国

(4)Perfetti & Perfetti, LLC, 烟草工业科学顾问 Winston-Salem, 北卡罗来纳州 美国

(5)Pomona 学院, Claremont, 加州, 美国

对多轮芳香烃(PAHs)的研究因其一直被视为卷烟主流烟气(MS)中(自 1950s 以来)以及存在于其它某些消费者可接触来源(食品, 饮料, 废气等等)中(自 1930s 以来)的潜在致癌因素而倍受关注。PAHs 及其潜在的生物活性一直是个活跃的研究领域。MS 是一种悬浮在气体(CO₂, CO, Nox 等)混合物和半挥发性混合物内的瞬间液体微滴(称为粒相物)的混合浮质。这类气体和许多半挥发性混合物被称为汽相物。PAHs 基本上属于粒相物组分并且都具极端憎水性。已发表过大量关于这类复杂混合物的生物学试验/活性的研究结果。如何确认那些引起关注的组分的结构上的定义, 是研究过程的一个重要步骤。在 2004 年第 58 届烟草科学研究大会上, 我们介绍了一系列(PAHs)的分子参数, 其首要部分包括萘和分核。完成了所有被选作研究的(PAHs)的分子参数计算。对一系列 MS PAHs (蒽, 菲及蒽), 提出了以下可能与生物活性有关的分子参数报告: 辛醇-水分解系数(ClogP)的十个对数的计算基础; 分子体积(MgVol); 计算摩尔折射率以及化合价电子的数量(NVE)。分子参数数据的采集将有助于进一步进行关于 MS PAHs 的结构-活性关系(QSAR)的定量研究。