

再悬浮持续时间对沉积物中PAHs释放的影响

冯精兰, 沈珍瑶, 牛军峰, 杨志峰*

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

* 联系人, E-mail: zfyang@bnu.edu.cn

2007-12-11 收稿, 2008-03-24 接受

国家重点基础研究发展计划(批准号: 2003CB415204)和国家自然科学基金(批准号: 40701166)资助项目

摘要 多环芳烃(polycyclic aromatic hydrocarbons, PAHs)是环境中广泛存在的一类有机污染物, 溶解度低, 疏水性强, 容易被颗粒物吸附, 并随其在沉积物中积累. 蓄积在沉积物中的 PAHs 在沉积物再悬浮过程中会重新释放进入水体, 造成二次污染. 为了考察再悬浮持续时间对沉积物中 PAHs 释放的影响, 采用沉积物再悬浮模拟装置在 0.2 和 0.5 N/m² 剪应力的水动力条件下对长江武汉段沉积物再悬浮过程中 PAHs 的释放进行了研究. 结果表明, 随着再悬浮过程的持续, 总悬浮颗粒物中 PAHs 浓度增加, 0.5 N/m² 下(37%) Σ PAHs 浓度增幅较 0.2 N/m² (30%)大, 菲及四环 PAHs 的增幅较其他 11 种 PAHs 大; 上覆水体 PAHs 浓度不断增高, 0.5 N/m² (50%)下 Σ PAHs 浓度增幅大于 0.2 N/m² (43%), 二环三环 PAHs (50%~88%) 增幅大于四环 PAHs 的增幅(20%~44%); 水体中 PAHs 浓度超过世界卫生组织规定的 PAHs 饮用水标准, 存在健康风险.

关键词

多环芳烃

长江

再悬浮

释放

再悬浮模拟装置

多环芳烃(polycyclic aromatic hydrocarbons, PAHs)是环境中广泛存在的一类有机污染物, 具有致癌性、致畸性、生殖毒性和免疫毒性. 由于溶解度低、疏水性强, 进入水体后容易被颗粒物吸附, 并随其在沉积物中积累, 使沉积物成为环境中PAHs的蓄积库. 蓄积在沉积物中的PAHs在一些过程中(例如: 沉积物再悬浮)会重新释放进入水体, 造成二次污染^[1]. 沉积物再悬浮由水流、波浪等自然因素, 拖网、疏浚等人为因素以及生物扰动等引起^[2-6], 广泛发生于河流环境系统中, 是沉积物中污染物释放的主要原因之一. 研究表明, 沉积物再悬浮过程导致水体污染物浓度急剧增加^[7-10], 例如, New York Bight中的PCBs在潮汐引起的再悬浮过程中浓度提高了10倍^[7], Hudson河口PCBs的再悬浮通量是包括废水、大气等PCBs输入量的2~100倍^[8]; PAHs在沉积物再悬浮过程中浓度增加了4倍^[9]; Schneider等^[10]最新研究表明, 沉积物再悬浮过程发生的2 h内释放了约22%的PCBs, 水动力条件作用的2 d内, 再悬浮颗粒物上约35%的PCBs解吸进入上覆水体. 此外, 沉积物再悬浮导致

大量颗粒物悬浮在水中, 极大地影响污染物在水体中释放的形式和规模, 成为影响污染物释放及其归宿的重要因素. 关于再悬浮过程导致水体沉积物中有毒有机物的释放, 国内外开展了较多的研究, 相关的工作成为了当前国际关注的重要前沿领域之一^[11-18]. 但是, 目前主要考察水动力条件(剪应力)对于有机污染物释放的影响, 对于其他因素, 例如再悬浮持续时间等还缺乏进一步的研究.

长江水系武汉段位于长江中游, 贯穿整个武汉市, 是该地区工农业生产和人民生活用水的主要来源, 保护水源的工作对流域居民健康和经济发展具有重要意义. 调查表明, 该江段有毒有机物种类繁多, PAHs是水体和沉积物中典型的有机污染物^[19]. 长江水流速快、波浪大, 沉积物易于发生再悬浮. 因此, 研究者探讨了PAHs在沉积物再悬浮过程中的释放行为, 考察了剪应力对再悬浮过程中PAHs释放的影响^[20]. 此外, 在研究过程中发现再悬浮持续时间对于PAHs释放存在影响, 且对不同剪应力再悬浮过程中PAHs释放的影响程度可能不同. 因此, 本研究着重

探讨沉积物中PAHs释放随再悬浮持续时间的变化,考察再悬浮持续对不同剪应力再悬浮过程中PAHs释放的影响,为河流水体中有毒有机物污染控制提供基础数据和理论依据。

1 材料与方 法

() 仪器和试剂. Waters1525 双泵高效液相色谱仪,配有 Waters474 扫描荧光检测器和 Waters2487 双波长紫外检测器, Varian PAHs 专用色谱柱(250 mm×4.6 mm, 5 μm); KQ502B 数控超声波清洗器; RV 05 basic 旋转浓缩蒸发器; TDL-5 台式离心机; Liqui TOC 分析测定仪; SALD-3001 激光粒度分析仪; Simplicity 185 超纯水系统。

16 种 PAHs 混合标样(PAH-Mix 9)购自 Dr. Ehrenstorfer 公司. 甲醇、正己烷、二氯甲烷、丙酮(Tedia, 美国)均为色谱纯. 无水硫酸钠、层析硅胶(200~300 目)为分析纯(使用前在马弗炉中 550 °C 烘焙 4 h, 放在干燥器中备用). 实验用水采用 Simplicity 185 超纯水系统处理。

() 样品采集. 实验沉积物样品采自长江水系武汉段干流, 在 2005 年 7 月用 Van Veen 抓斗式采样器(Eijkkamp, Netherlands)采集. 采集后的样品放置于洁净的不锈钢小桶中, 4 °C 下遮光保存到进行再悬浮模拟实验. 模拟实验用水采自沌口, 经 0.45 μm 醋酸纤维滤膜过滤, 4 °C 下遮光保存。

() 再悬浮模拟装置. 本研究中采用的组装的沉积物再悬浮模拟装置^[21](如图 1 所示), 其工作原理为: 穿孔板通过连接杆与变速电机相连, 并在电机的带动下在水体上下摆动, 在沉积物-水界面产生剪应力, 夹带沉积物进入水体, 产生再悬浮. 再悬浮模拟装置产生的剪应力大小与穿孔板的摆幅、频率及穿孔板距沉积物的高度有关. Tsai和Lick^[21]对该模拟装置进行了校正, 当穿孔板在距沉积物界面 5~7.5 cm 之间摆动, 产生 0.2 和 0.5 N/m² 剪应力所需的电机转速分别为 375 和 750 r/min. 该装置已被证实实验过程重现性好, 可进行不同强度再悬浮模拟以及不同性质沉积物再悬浮过程的比较, 并得到了较广泛的应用^[1,13,14,22]。

() 再悬浮模拟实验. 将采集的沉积物置于有机玻璃桶中, 高度为 10 cm. 缓慢注入水样避免引起再悬浮, 水样加入量为 1.4 L. 将有机玻璃桶置于再悬浮模拟装置中, 放下穿孔板, 穿孔板距离沉积物界

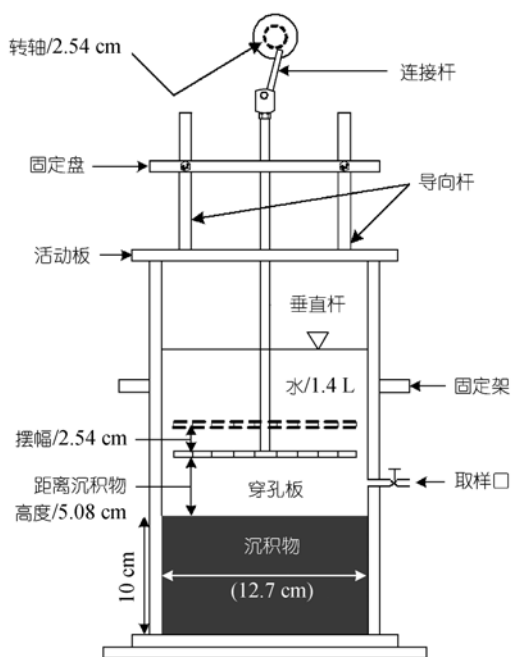


图 1 再悬浮模拟装置结构示意图

面 5.0 cm. 开启电机, 开始再悬浮模拟. 模拟剪应力选用 0.2 和 0.5 N/m²^[23], 再悬浮时间选定为 12 h, 定时取样, 取样量为 100 mL, 之后重新注入 100 mL 水样以维持水样体积保持恒定. 样品取出后, 立即用孔径为 1.2 μm 的微孔玻璃纤维滤膜(GF/C, Whatman, England)过滤, 分别收集悬浮颗粒物和水质。

测定不同剪应力下再悬浮不同时间悬浮颗粒物浓度、粒径分布, 水相及悬浮颗粒物中 PAHs 浓度, 同时测定沉积物中 PAHs 浓度、有机碳含量以及粒径分布。

() PAHs 分析. 取 70 mL 水样置于 250 mL 磨口锥形瓶中, 加入等体积二氯甲烷超声萃取 30 min, 静置 20 min. 用分液漏斗取出有机相, 旋转蒸发至约 0.5 mL, 加入 10 mL 甲醇溶剂置换, 旋蒸至近干, 以甲醇精确定容至 1.0 mL, 对 PAHs 进行 HPLC 分析。

将沉积物或滤膜置于 50 mL 聚四氟乙烯离心管中, 加入 30 mL 正己烷/丙酮混合溶液(1 : 1, 体积比)放置过夜. 超声(30 °C)萃取 1 h, 4000 r/min 离心 20 min, 萃取液旋蒸至约 1 mL, 过装有 1 g 无水硫酸钠和 2 g 硅胶的层析柱净化, 以 8 mL 正己烷预洗, 10 mL 正己烷/二氯甲烷混合溶液(1 : 1, 体积比)洗脱, 收集洗脱液旋蒸浓缩(30 °C)至干, 用甲醇精确定容到 1.0 mL, 用 HPLC 进行 PAHs 分析^[24]。

色谱条件: 柱温: 20 ; 流动相: 甲醇-水二元梯度; 流速: 1.0 mL/min; 进样量: 20 μ L; 检测器: 程序可变波长荧光检测器, 双波长紫外检测器.

水相及沉积物 PAHs 分析的质量控制包括方法空白、基质空白和基质加标回收率. 方法空白均无检出目标化合物. 通过加标回收实验, 水相 16 种 PAHs 的回收率和检测限分别为 60%~100%和 0.098~0.191 μ g/L; 沉积物中 16 种 PAHs 的回收率和检测限分别为 60%~110% (萘除外, 30 \pm 5%)和 0.34~4.05 μ g/kg.

() 颗粒物理化性质的测定. 称取一定量待测沉积物或悬浮颗粒物, 加入蒸馏水, 以 $(\text{NaPO}_3)_6$ 作为分散剂, 在超声波的作用下充分分散, 以 SALD-3001 激光粒度分析仪(测量范围 0.269~2000 μ m, 相对误差小于 3%)进行粒度分析.

沉积物或悬浮颗粒物研磨匀质后, 以过量 1.6% 盐酸酸化预处理除去 TIC(总无机碳), 60 干燥后用 TOC 仪进行总有机碳的测定.

2 结果与讨论

2.1 总悬浮颗粒物

在 0.2 和 0.5 N/m^2 剪应力作用下, 再悬浮过程中总悬浮颗粒物(TSS)随时间的变化如图 2 所示. 图 2 表明, 随着再悬浮过程的持续(3~12 h), TSS浓度略微降低, 且 0.5 N/m^2 剪应力的下降更明显. 这主要是随着再悬浮过程的进行, 沉积物的紧密性增加, 大粒径颗粒物发生再悬浮的难度增加, 且高剪应力对沉积物的压实作用更显著 [21]. 对再悬浮过程TSS进行粒径分析, 结果如表 1 所示(以 0.5 N/m^2 为例). 表 1 显示出随着再悬浮过程的持续, TSS中小粒径颗粒物(<25 μ m)的比例逐渐增加, 大粒径颗粒物(25~63 μ m)的比例逐渐减小, 证实了这一推论.

2.2 总悬浮颗粒物中 PAHs 浓度变化

不同剪应力作用下的再悬浮过程中, 不同时间 TSS 中 PAHs 浓度如图 3~5 所示. 图 3 表明, 0.5 N/m^2

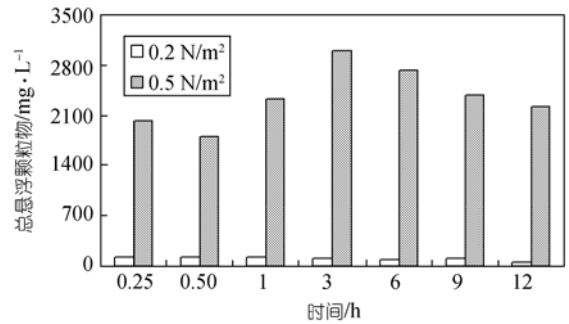


图 2 总悬浮颗粒物浓度随再悬浮持续时间的变化

剪应力条件下总悬浮颗粒物中 PAHs 的浓度低于 0.2 N/m^2 剪应力条件下, 这主要是由于高剪应力条件下, 更多大粒径、低 PAHs 含量的颗粒物被夹带, 使得 PAHs 浓度趋于下降 [17]. 对不同粒径沉积物中 PAHs 分布的研究也表明, 粒径 <25 μ m 颗粒物中 PAHs 浓度大于粒径 25~63 μ m 颗粒物 [25]. TSS 中 Σ PAHs 浓度随着再悬浮过程的持续不断增加. 在 0.2 N/m^2 剪应力下, Σ PAHs 浓度从 0.25 h 的 5408.68 μ g/kg, 增高到 1 h 的 6039.74 μ g/kg, 到 12 h 的 7878.70 μ g/kg; 0.5 N/m^2 剪应力下, Σ PAHs 浓度随时间变化的趋势相同, 从 0.25 h 的 1369.31 μ g/kg, 增高到 1 h 的 1665.39 μ g/kg, 到 12 h 的 2280.98 μ g/kg. 再悬浮经过 12 h 之后与 1 h 相比, 0.2 和 0.5 N/m^2 剪应力下 TSS 中 PAHs 浓度分别提高了 30% 和 37%, 0.5 N/m^2 增幅略高. TSS 中单种 PAHs 浓度随再悬浮持续时间的变化分别见图 4 和 5. 由图 4 和 5 可知, TSS 中不同 PAHs 增加程度不一致, 三环的菲及四环的荧蒽、芘、苯并[a]蒽、屈的浓度的增幅高于其他 11 种测定的 PAHs.

实验结果表明, 随着再悬浮过程的持续, TSS 中小粒径颗粒(<25 μ m)的比例逐渐增加, 大粒径颗粒(25~63 μ m)的比例逐渐减小. 且由以前的研究可知 [25], 沉积物中小于 25 μ m 颗粒 PAHs 浓度较 25~63 μ m 高. 对于 0.5 N/m^2 较 0.2 N/m^2 剪应力下 TSS 中 PAHs 浓度的增幅更大, 主要是因为 0.2 N/m^2 剪应力

表 1 总悬浮颗粒物粒径分布

| 粒径/ μ m | 0.25 h | 0.5 h | 1 h | 3 h | 6 h | 9 h | 12 h |
|-------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| > 63 | 4.95% | 2.84% | 0.44% | 0.32% | 0.02% | 0.01% | 0.00% |
| 25~63 | 10.99% | 11.29% | 8.94% | 7.07% | 3.54% | 2.82% | 2.34% |
| 25~1.2 | 70.40% | 70.77% | 74.89% | 75.91% | 79.70% | 79.12% | 77.85% |
| 1.2~0.45 | 6.76% | 8.12% | 8.56% | 9.26% | 9.15% | 10.19% | 11.26% |
| < 0.45 | 6.90% | 6.98% | 7.17% | 7.44% | 7.59% | 7.86% | 8.55% |

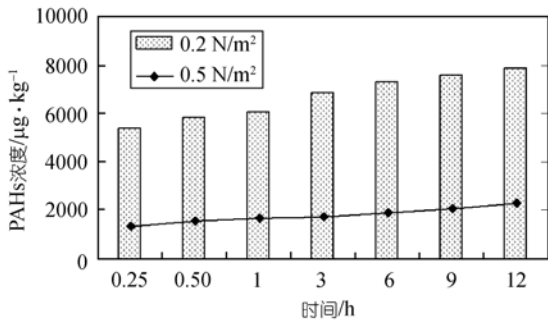


图3 总悬浮颗粒物中ΣPAHs的浓度随时间变化

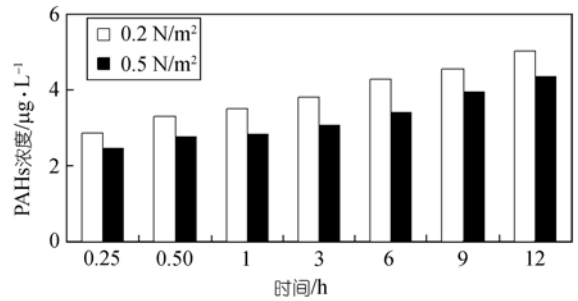


图6 水相中ΣPAHs随时间变化

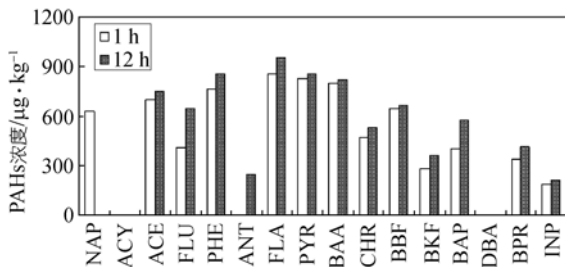


图4 水动力(0.2 N/m²)作用下总悬浮颗粒物中PAHs的浓度

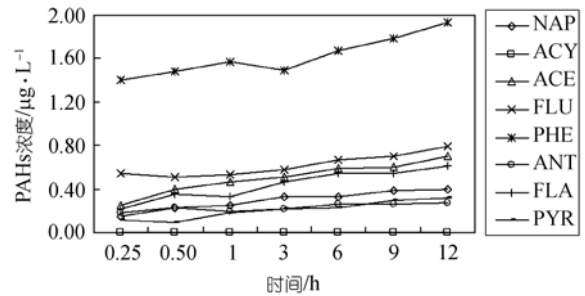


图7 水动力(0.2 N/m²)作用下水相 PAHs 浓度随时间变化

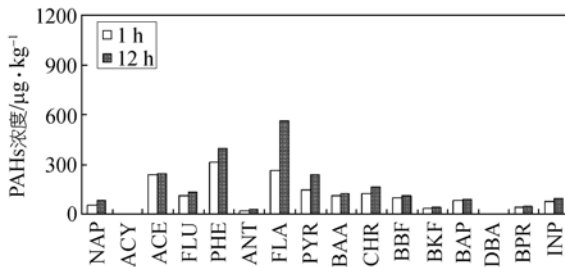


图5 水动力(0.5 N/m²)作用下总悬浮颗粒物中PAHs的浓度

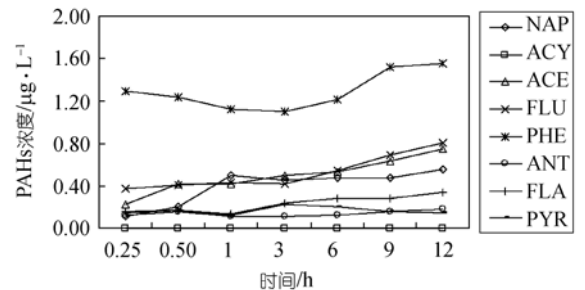


图8 水动力(0.5 N/m²)作用下水相中 PAHs 浓度随时间变化

下TSS粒径变化没有 0.5 N/m² 显著所导致 [21]。此外,菲及四环PAHs浓度随时间的增幅较其他PAHs大,则是由于小于 25 μm颗粒与 25~63 μm颗粒中菲及四环PAHs浓度差别较其他PAHs更大所造成 [25]。

2.3 上覆水体 PAHs 浓度变化

不同剪应力条件下再悬浮过程中,上覆水体 PAHs 浓度随时间的变化列于图 6~8。图 6~8 显示出,再悬浮过程中 PAHs 被迅速释放进入水体,一些低分子量, logK_{ow}<5 的 PAHs 在再悬浮过程发生 0.25 h 后,就从上覆水体检测到。且由图 6 可知,上覆水体 ΣPAHs 浓度随着再悬浮过程的进行持续增高,0.2 N/m² 剪应力下,从 0.25 h 的 3.05 μg/L 增高到 1 h 的 3.50 μg/L 到 12 h 的 5.01 μg/L,相比 1 h,再悬浮过程经过 12 h 之后 ΣPAHs 浓度提高了 43%; 0.5 N/m² 剪应力下,ΣPAHs 浓度从 0.25 h 的 2.45 μg/L 增高到 1 h 的 2.85

μg/L 到 12 h 的 4.27 μg/L,再悬浮过程经过 12 h 之后 ΣPAHs 浓度比 1 h 提高了 50%,增幅大于 0.2 N/m²。这主要由于高剪应力对 PAHs 解吸的促进作用更加明显,与 Latimer 等 [1] 研究沉积物再悬浮过程中 PCBs 的释放时,认为再悬浮加速了 PCBs 的解吸,且高剪应力的作用更显著的结论相一致。

上覆水体中不同 PAHs 的浓度随再悬浮过程持续的变化分别如图 7 和 8 所示。由图 7 和 8 可知,上覆水体 PAHs 浓度随再悬浮过程的持续而增高,且不同 PAHs 增幅不同。低分子量的萘、二氢萘、芴浓度随再悬浮持续增幅较大,再悬浮过程经过 12 h 后比 0.25 h 浓度提高了 50%~88%; 中等分子量的菲、蒽(三环)、荧蒽、芘(四环)浓度增幅较小,增大了 20%~44%。由于 TSS 中 PAHs 的解吸是上覆水体 PAHs 的主要来源 [20], 菲、蒽、荧蒽、芘的 logK_{ow} 值较萘、二

氢茛、芴的 $\log K_{ow}$ 大,限制了TSS中这些PAHs向上覆水体的释放。此外,直到再悬浮结束,高分子量, $\log K_{ow}>5$ 的PAHs, 在不同剪应力不同时间的再悬浮过程中, 其上覆水体浓度均低于检测限。这主要是由于高分子量PAHs较低的溶解度以及同TSS有机碳之间较强的相互作用^[26], 制约了其向水体的释放。

不同剪应力作用下, 随着再悬浮过程的持续, 水相中PAHs浓度持续增加, 0.2 和 0.5 N/m² 下浓度分别达到 3.05~5.01 $\mu\text{g/L}$ 以及 2.45~4.27 $\mu\text{g/L}$, 相差不大, 这主要是由于 0.5 N/m² 条件下悬起的颗粒物量远大于 0.2 N/m² 所致^[17]。不同剪应力条件下水相PAHs浓度均超过了世界卫生组织规定的PAHs饮用水标准(2 $\mu\text{g/L}$), 存在健康风险。对TSS粒径分布研究表明, 再悬浮过程不同时刻的TSS中 85%以上为小于 25 μm 的颗粒物, 且再悬浮过程上覆水体PAHs主要来自于

TSS 中 PAHs 的解吸。因此, 小于 25 μm 沉积物容易被“二次悬起”, 释放吸附的大量 PAHs, 存在较高的风险。

3 结论

本研究考察了再悬浮持续时间对沉积物中 PAHs 释放的影响, 结果表明: 随着再悬浮过程的持续, TSS 略微下降, TSS 中小粒径颗粒的比例逐渐增加, 大粒径颗粒的比例逐渐减小; TSS 中 PAHs 的浓度随时间而增大, 且 0.5 N/m² 下 TSS 中 Σ PAHs 浓度增幅(37%)较 0.2 N/m²(30%)大, 菲及四环的 PAHs 浓度的增幅较其他 11 种 PAHs 大; 水相 PAHs 浓度随再悬浮持续增加, 低分子量(二环三环) PAHs(50%~88%)浓度的增加幅度大于中等分子量(四环) PAHs (20%~44%)。

参考文献

- 1 Latimer J S, Davis W R, Keith D J. Mobilization of PAHs and PCBs from in-place contaminated marine sediments during simulated resuspension events. *Est Coast Shelf Sci*, 1999, 49(4): 577—595[doi]
- 2 Sanford L P. Wind-forced resuspension of upper Chesapeake Bay muds. *Estuaries*, 1994, 17(1B): 149—165[doi]
- 3 Arfi R, Guiral D, Bouvy M. Wind induced resuspension in a shallow tropical lagoon. *Est Coast Shelf Sci*, 1993, 36(6): 587—604[doi]
- 4 Schoellhamer D H. Anthropogenic sediment resuspension mechanisms in a shallow microtidal. *Est Coast Shelf Sci*, 1996, 43(5): 533—548 [doi]
- 5 Lewis M A, Weber D E, Stanley R S, et al. Dredging impact on an urbanized Florida bayou: effects on benthos and algal-periphyton. *Environ Pollut*, 2001, 115(2): 161—171[doi]
- 6 Tengberg A, Almroth E, Hall P. Resuspension and its effects on organic carbon recycling and nutrient exchange in coastal sediments: in situ measurements using new experimental technology. *J Exp Mar Biol Ecol*, 2003, 285-286: 119—142[doi]
- 7 Bohem P D. Coupling of organic pollutants between the estuary and Continental Shelf and the sediments and water column in the New York Bight region, Canadian. *Can Bull Fish Aquat Sci*, 1983, 40(S2): 262—276
- 8 Achman D R, Brownawell B J, Zhang L. Exchange of polychlorinated biphenyls between sediment and water in the Hudson River Estuary. *Estuaries*, 1996, 19(4): 950—965[doi]
- 9 Domagalski J L, Kuivila K M. Distribution of pesticides and organic contaminants between water and suspended sediment, San Francisco Bay, California. *Estuaries*, 1993, 16(3A): 416—426[doi]
- 10 Schneider A, Porter E, Baker A. Polychlorinated biphenyl release from resuspended hudson river sediment. *Environ Sci Technol*, 2007, 41(4): 1097—1103[doi]
- 11 Simpson S L, Apte S C, Batley G E. Effect of short-term resuspension events on trace metal speciation in polluted anoxic sediments. *Environ Sci Technol*, 1998, 32(5): 620—625[doi]
- 12 Alkhatib E, Castor K. Parameters influencing sediment resuspension and link to sorption of inorganic compounds. *Environ Monit Assess*, 2000, 65(3): 531—546[doi]
- 13 Cantwell M G, Burgess R M, Kester D R. Release and phase partitioning of metals from anoxic estuarine sediments during periods of simulated resuspension. *Environ Sci Technol*, 2002, 36(24): 5328—5334[doi]
- 14 Alkhatib E, Weigand K. Parameters affecting partitioning of 6 PCB congeners in natural sediment. *Environ Monit Asses*, 2002, 78(1): 1—17[doi]
- 15 Martino M, TuRner A, Nimmo M, et al. Resuspension, reactivity and recycling of trace metals in the Mersey Estuary, UK. *Mar Chem*, 2002, 77(2-3): 171—186[doi]
- 16 Achterberg E P, Braungardt C B, Herzl V M C, et al. Metal behavior in an estuary polluted by acid mine drainage: The role of particulate matter. *Environ Pollut*, 2003, 121(2): 283—292[doi]

- 17 Kim E H, Mason R P, Porter E T, et al. The effect of resuspension on the fate of total mercury and methyl mercury in a shallow estuarine ecosystem: A microcosm study. *Mar Chem*, 2004, 86(3-4): 121—137[[doi](#)]
- 18 Kalnejais L H, Martin W R, Signell R P, et al. Role of sediment resuspension in the remobilization of particulate-phase metals from coastal sediments. *Environ Sci Technol*, 2007, 41(7): 2282—2288[[doi](#)]
- 19 王彻华, 彭彪. 长江干流主要城市江段微量有机物污染分析. *人民长江*, 2001, 32(7): 20—36
- 20 Feng J L, Yang Z F, Niu J F, et al. Remobilization of polycyclic aromatic hydrocarbons during the resuspension of Yangtze River sediments using a particle entrainment simulator. *Environ Pollut*, 2007, 149(2): 193—200[[doi](#)]
- 21 Tsai C H, Lick W. A portable device for measuring sediment resuspension. *J Gt Lakes Res*, 1986, 12(4): 314—321
- 22 Cantwell M G, Burgess R M. Variability of parameters measured during the resuspension of sediments with a particle entrainment simulator. *Chemosphere*, 2004, 56(1): 51—58[[doi](#)]
- 23 Bokuniewicz H, McTiernan L, Davis W. Measurement of sediment resuspension rates in Long Island Sound. *Geo-Mar Lett*, 1991, 11(3-4): 159—161[[doi](#)]
- 24 Niu J F, Chen J W, Martens D, et al. Photolysis of polycyclic aromatic hydrocarbons adsorbed on spruce (*Picea abies* (L.) Karst.) needles under sunlight irradiation. *Environ Pollut*, 2003, 123(1): 39—45[[doi](#)]
- 25 冯精兰, 牛军峰. 长江武汉段不同粒径沉积物中多环芳烃(PAHs)的分布特征. *环境科学*, 2007, 28(7): 1573—1577
- 26 Chiou C T, McGroddy S E, Kile D E. Partition characteristics of polycyclic aromatic hydrocarbons on soils and sediments. *Environ Sci Technol*, 1998, 32(2): 264—269[[doi](#)]

《中国科学 B 辑: 化学》第 38 卷 第 4 期 目次

评述

- 阳离子- π 作用的研究进展 程家高 罗小民 闫秀花 李 忠 唐 赞 蒋华良 朱维良
 中药现代化研究与化学计量学 梁逸曾 易伦朝 许青松

论文

- 激发发射荧光二阶校正算法快速检测桔子中噻苯咪唑 王雪梅 吴海龙 聂瑾芳 李元娜 于永杰 俞汝勤
 分子动力学方法研究聚甲基乙烯基醚/水体系中氢键和准氢键的结构与分布 吴荣亮 吉 青 孔 滨 杨小震
 环糊精二聚体的分子动力学模拟与自由能计算 孙婷婷 蔡文生 邵学广
 耗散粒子动力学研究片状双层——囊泡转变 伍绍贵 郭洪霞
 蒙特卡洛交叉验证用于近红外光谱奇异样本的识别 刘智超 蔡文生 邵学广
 基于三维椭球模型的构象弹性理论 毛 伟 孔 滨 杨小震
 应用基于第一性原理的分子模拟方法预测小分子在多孔材料中的吸附 刘连池 傅 嘉 孙 淮
 A 型流感病毒 M2 通道蛋白开闭机制: His37 和 Trp41 间的氢键及阳离子- π 作用的计算研究
 程家高 朱维良 王岩丽 闫秀花 李 忠 唐 赞 蒋华良
 化学计量学-动力学分光光度法同时测定药物和人尿中诺氟沙星和利福平 王 勇 倪永年
 基于药效团的血管紧张素转换酶抑制肽的结构优化 王 伟 沈生荣 冯凤琴 何国庆 王占黎