Acta Scientiae Circumstantiae

陈望香,朱润良,葛飞,等.2011.应用多元线性溶剂化能关系研究有机膨润土的吸附特征[J].环境科学学报 31(5):1019-1025

Chen W X , Zhu R L , Ge F , et al. 2011. Investigation on the sorptive characteristics of organobentonites using a linear solvation energy relationship [J]. Acta Scientiae Circumstantiae 31(5):1019–1025

应用多元线性溶剂化能关系研究有机膨润土的吸附 特征

陈望香,朱润良*,葛飞,王通,朱门君,刘汉阳,夏燕

湘潭大学环境科学与工程系,湘潭 411105

收稿日期:2010-07-30 修回日期:2010-09-10 录用日期:2010-09-13

摘要:以十六烷基三甲基溴化铵(CTMAB) 制备的有机膨润土为代表,设置有机膨润土中 CTMAB 的负载量为 1.0 倍的阳离子交换量(CEC), 测试了其吸附酚类、胺类、硝基类等 25 种有机物的有机碳标化的吸附系数(K_{oc})值.在此基础上,运用多元线性回归方法得到了有机膨润土吸 附有机物的多元线性溶剂化能关系(LSER)模型,以明确各种作用因素对有机膨润土吸附性能的相对贡献.结果表明,有机膨润土吸附有机 物的多元 LSER 模型为: $\log K_{oc} = 1.886E - 0.625S + 0.525A - 2.223B + 2.332V + 0.427$,表明在该有机膨润土 - 水吸附体系中,过剩摩尔折射 率(E)、氢键酸(A)和生成孔穴(V)作用对有机物在有机膨润土上的吸附为正贡献,而偶极(S)和氢键碱(B)作用为负贡献,这与土壤有机质 - 水吸附体系中各作用项的贡献相同,说明有机膨润土与土壤有机质有相似的吸附特征.以上5种作用对有机膨润土吸附 25 种有机物的贡 献分别为: $e \times E(43\% \sim 93\%)$, $s \times S(-48\% \sim -13\%)$, $a \times A(0 \sim 24\%)$, $b \times B(-75\% \sim -11\%)$, $v \times V(62\% \sim 115\%)$,其中,生成孔穴 作用对吸附过程起主导作用.

关键词: CTMAB; 有机膨润土; 吸附; 线性溶剂化能关系(LSER); 有机物

文章编号: 0253-2468(2011) 05-1019-07 中图分类号: X53 文献标识码: A

Investigation on the sorptive characteristics of organobentonites using a linear solvation energy relationship

CHEN Wangxiang , ZHU Runliang^{*} , GE Fei , WANG Tong , ZHU Menjun ,LIU Hanyang , XIA Yan Department of Environmental Science & Engineering , Xiangtan University , Xiangtan 411105 Received 30 July 2010; received in revised form 10 September 2010; accepted 13 September 2010

Abstract: In this paper , cetyltrimethylammonium bromide (CTMAB) modified organobentonite was selected as the representative of organobentonites. The cetyltrimethylammonium bromide loading amount was equal to 1.0 CEC. Values of the organic-carbon-based partition coefficient (K_{oc}) for 25 organic compounds (including phenols , amines , nitro , etc.) on this organobentonite were calculated. The linear solvation energy relationship model for the organic compounds adsorption by organobentonites was obtained by multilinear regression analysis to clarify the role of various factors on the adsorption of organobentonites. The results show that LSER equation could be described as $\log K_{oc} = 0.427 + 1.886E - 0.625S + 0.525A - 2.223B + 2.332V$, which shows that the excess molar refraction term ($e \times E$) , hydrogen-bond acidity term ($a \times A$) and cavity formation term ($v \times V$) play a positive role in the sorption of organic compounds from water to organobentonites , while the polarity and polarizability term ($s \times S$) and hydrogen-bond basicity term ($b \times B$) play a negative role. This is in accordance with the sorption of organic compounds from water to soil organic matter (SOM) , and it indicates that the sorptive characteristics of organobentonite have similarity to those of SOM. The overall contributions of the five terms to the sorption of the 25 organic compounds on organobentonites were calculated as: $e \times E (43\% \sim 93\%)$, $s \times S (-48\% \sim -13\%)$, $a \times A (0 \sim 24\%)$, $b \times B (-75\% \sim -11\%)$, $v \times V (62\% \sim 115\%)$. The cavity formation term plays a dominant role in the sorption process.

Keywords: CTMAB; organobentonite; sorption; linear solvation energy relationship(LSER); organic compounds

1 引言 (Introduction)

机污染控制领域有着广阔的应用前景,并可作为有机废水处理的吸附剂(Zhu et al., 1997; Yang et al., 2003)、垃圾填埋场防渗衬里(Lo et al.,

有机膨润土对有机污染物吸附性能良好,在有

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(No. 20907038);湖南省教育厅基金资助项目(No. 09C949);湖南省环境友好催化与绿色化工工艺科 技创新团队项目

Supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 20907038), the Scientific Research Fund of Hunan Provincial Education Department (No. 09C949) and the Environmentally Friendly Catalysis and Green Chemical Process Project of Technology Innovation Team of Hunan Province

作者简介: 陈望香 (1985—),女,E-mail: cwangxiang@163.com; * 通讯作者(责任作者),E-mail: zhurunliang@ gmail. com Biography: CHEN Wangxiang (1985—), female, E-mail: cwangxiang@163.com; * Corresponding author, E-mail: zhurunliang@ gmail. com 阳离子表面活性剂插层的膨润土是最常见的 一类有机膨润土.一般认为,表面活性剂烷基链可 以在膨润土层间形成有机相,通过分配作用吸附有 机物(Smith et al.,1995; Zhu et al.,2007).但也 有研究表明,对于这类纳米级厚度的有机相,其对 有机物的吸附性能受烷基链排列模式的影响(Zhu et al.,2008;朱建喜等,2003),此外,膨润土硅氧 烷表面也可以影响吸附过程(Zhu et al.,2003; Chen et al.,2005).由于有机膨润土层间域结构复 杂,目前对其吸附特征的认识还不够清楚,因而对 于如何提高其吸附性能仍没有明确的方法.

近年来,线性溶剂化能关系(Linear Solvation Energy Relationship,LSER)已广泛用于研究有机物 在土壤有机质(SOM)(Nguyen et al.,2005; Zhu et al.,2005)和活性碳(Shin et al.,2009)等吸附剂 上的吸附行为,其优点在于LSER 能从分子间作用 力角度描述有机化合物在吸附剂上的吸附特征 (Tian et al.,2004; Nguyen et al.,2005). Tian 等 (2004)将LSER 用于有机膨润土吸附挥发性有机气 体的研究中,结果显示,色散力是影响有机膨润土吸 附性能的最关键因素.但是,有机膨润土水相吸附远 比气相吸附复杂,水分子会对吸附过程产生影响,一 方面它会影响有机膨润土结构,另一方面水分子与 有机物也存在各种相互作用.目前,还鲜有采用 LSER 研究有机膨润土水相吸附有机物的报道.

因此,本研究选择十六烷基三甲基溴化铵 (CTMAB)改性的膨润土为有机膨润土代表,测试 其对酚类、胺类、硝基类等25种有机物的吸附性能, 并计算吸附系数.在此基础上,运用多元线性回归 方法得到有机膨润土吸附有机物的LSER模型,进 而明确各种作用因素对有机膨润土吸附性能的相 对贡献.以期为明确有机膨润土吸附特征提供新信 息,并为预测有机膨润土吸附性能提供依据.

- 2 实验部分 (Experimental)
- 2.1 实验材料和仪器

钙基膨润土取自内蒙古自治区,其阳离子交换 容量(CEC)为1.08 mmol·g⁻¹,有机碳含量0.04%. CTMAB 和实验所用的 25 种有机物(表 1) 均为分析 纯. 所选化合物包括酚类、胺类、硝基类等水体常见 有机污染物.

仪器: TOC-V CPH 型总有机碳测定仪(日本 Shimadzu 公司)、D/Max 2550 型 X 射线衍射仪(日 本 Rigaku 公司)、GC-14C 型气相色谱仪(日本 Shimadzu 公司)、UV1100 型紫外-可见分光光度计 (上海天美科学仪器有限公司)、ZD-85 型气浴恒温 振荡器(江苏金坛市科析仪器有限公司)、CT15RT 型高速冷冻离心机(上海天美科学仪器有限公司).

2.2 有机膨润土的制备

将研磨过 100 目筛的膨润土原土加入到 CTMAB 溶液中,60 ℃下恒温搅拌6h,然后在60 ℃烘箱中 陈化 12h;蒸馏水抽滤洗涤多次后60 ℃烘干,粉碎 过 100 目筛,制得有机膨润土.制备过程中膨润土与 水的质量比为 1:10,CTMAB 用量为膨润土 CEC 的 1.0 倍.有机膨润土的有机碳含量为 20.5%.

2.3 吸附性能的测定

称取 0.1 ~0.2 g 有机膨润土于 25 mL 玻璃管 中,加入 0~200 mg·L⁻¹有机化合物,用带特隆垫 片的盖子密封,25 ℃下振荡至吸附平衡(10 h).离 心后移取上清液,测定有机物的剩余浓度,并计算 吸附量,绘制等温吸附曲线.根据等温吸附曲线斜 率计算得到有机物的吸附系数(K_d),即有机物在有 机粘土上的浓度与其在水中浓度的比值.同时,根 据有机膨润土的有机碳含量(f_{oc}),计算有机碳标化 的吸附系数($K_{oc} = K_d / f_{oc}$).

试验 中 有 机 物 的 初 始 浓 度 均 不 超 过 200 mg•L⁻¹,以便使有机物在膨润土上的吸附量保持在 较低水平.将吸附有机物前后的有机膨润土进行 X-射线衍射表征,结果表明,吸附有机物后有机膨润 土底面间距无显著变化,这表明有机物吸附不会对 有机膨润土结构产生大的影响.

2.4 线性溶剂化能方法

线性溶剂化能方法(LSER) 主要由 Kamlet、 Taft、Abraham 等提出来(Blum *et al.*, 1990). LSER 的基本形式为:

 $\log K = c + e \times E + s \times S + a \times A + b \times B + v \times V(1)$ 式中, *K*为分配系数,本研究中即为 K_{oc} ; *E*为过量 摩尔折射率(excess molar refraction),反映的是溶质 与吸附剂之间的色散力和诱导力作用; *S*为偶极和 极化(polarity and polarizability),反映的主要是溶质 与溶剂/吸附剂之间的偶极-偶极作用力,也包含了 少量的诱导力作用(与 $E \equiv @$); A 为氢键酸性 (hydrogen-bond acidity),反映溶质形成氢键时提供 H 能力或接受电子能力; B 为氢键碱性(hydrogenbond basicity),反映溶质形成氢键时接受 H 能力或 提供电子能力; V 用于表征化合物的分子体积 (molecular volume),表示溶质在溶剂/吸附剂中形 成孔穴过程的各种作用; $e_{s,a,b,v}$ 和 c 为回归系 数,用于描述在该分配/吸附体系中,体系两相对 溶质各作用项作用能力的差异(Wang *et al.*,2002; Valkó *et al.*,2001).

所有统计分析均在 SPSS16.0 软件上进行,化 合物的疏水性参数-辛醇水分配系数 logK_{ow}由 KOWWIN 1.67 软件预测得到.

方程中参数间的共线性用变异膨胀因子(VIF) 评价(McClelland *et al.*,2000; 戴家银等,2002),稳健性采用修正的 Jackknife 法评价(Wei *et al.*,2001).

- 3 结果 (Results)
- 3.1 有机物等温吸附曲线及吸附系数 在实验浓度范围内,25 种有机物的等温吸附

```
曲线均表现为线性,图1给出了其中5种代表性有
机化合物的等温吸附曲线.将等温吸附曲线进行线
性回归,得到了25种有机物的K_{d}值,并进一步计
算了其\log K_{oc}值,所得结果见表1.由表1可知,25
种有机物的\log K_{oc}值均大于其\log K_{ow}.
```



图1 有机膨润土对有机物的等温吸附曲线

Fig. 1 Sorption isotherms of organic compounds on organobentonites

Table 1 The calculated $\log K_{ow}$ and $\log K_{oc}$ values of the organic compounds and the interaction terms of LSER									
化合物	logK	${ m log}K_{ m oc}$			LSER				
	10grt _{ow}	实验值	预测值	残差	$e \times E$	$s \times S$	$a \times A$	$b \times B$	$v \times V$
苯酚	1.51	2.83	2.85	-0.02	1.52	-0.56	0.32	-0.67	1.81
对氯苯酚	2.16	3.70	3.48	0.22	1.73	-0.68	0.35	-0.44	2.09
邻硝基苯酚	1.91	2.93	3.16	-0.23	1.97	-0.66	0.03	-0.82	2.21
间硝基苯酚	1.91	3.40	3.54	-0.14	1.98	-0.98	0.41	-0.51	2.21
对硝基苯酚	1.91	3.43	3.44	-0.01	2.02	-1.08	0.43	-0.58	2.21
间苯二酚	1.03	2.88	2.88	-0.00	1.85	-0.63	0.58	-1.29	1.94
对苯二酚	1.03	2.80	2.91	-0.11	1.89	-0.63	0.61	-1.33	1.94
2 ゟ―二甲酚	2.61	3.44	3.36	0.08	1.62	-0.49	0.20	-0.87	2.46
2 4-二氯酚	2.80	4.05	3.95	0.10	1.81	-0.53	0.28	-0.42	2.38
2-萘酚	2.69	4.54	4.72	-0.18	2.87	-0.68	0.32	-0.89	2.67
苯胺	1.08	2.64	2.56	0.08	1.80	-0.60	0.14	-1.11	1.90
对氯苯胺	1.72	3.62	3.29	0.33	2.00	-0.71	0.16	-0.78	2.19
邻硝基苯胺	2.02	3.72	3.46	0.26	2.23	-0.86	0.16	-0.80	2.31
间硝基苯胺	1.47	3.12	3.36	-0.24	2.26	-1.07	0.21	-0.78	2.31
对硝基苯胺	1.47	3.38	3.22	0.16	2.30	-1.19	0.22	-0.84	2.31
苯甲酰胺	0.74	2.40	2.39	0.01	1.87	-0.94	0.26	-1.49	2.27
N-甲基苯胺	1.62	3.06	3.02	0.04	1.79	-0.56	0.09	-0.96	2.23
N ,N-二甲基苯胺	2.17	3.26	3.22	0.04	1.80	-0.53	0.00	-1.04	2.56
1-萘胺	2.25	4.57	4.39	0.18	3.15	-0.79	0.11	-1.27	2.76
萘	3.17	4.28	4.47	-0.19	2.53	-0.58	0.00	-0.44	2.53
硝基苯	1.81	2.71	2.83	-0.12	1.64	-0.69	0.00	-0.62	2.08
苯甲醇	0.92	2.32	2.47	-0.15	1.51	-0.54	0.17	-1.24	2.15
苯甲醛	1.71	2.48	2.51	-0.03	1.55	-0.63	0.00	-0.87	2.03
甲苯	2.54	2.98	2.93	0.05	1.13	-0.33	0.00	-0.31	2.01
对硝基甲苯	2.36	3.05	3.15	-0.10	1.64	-0.69	0.00	-0.62	2.40

表 1 有机化合物的 $\log K_{ow}$ 和 $\log K_{oc}$ 值及吸附过程 LSER 各作用项的计算值

3.2 模型的建立

研究表明,有机物疏水性参数 $\log K_{ow}$ 是影响其 吸附性能的重要因素之一(Liu *et al.*, 2005; 王斌 等,2007). 根据表1数据,考察了有机物 $\log K_{oc}$ 与 $\log K_{ow}$ 之间的关系. 经线性回归分析,建立的关系 式为:

 $\log K_{oc} = 1.883 + 0.737 \log K_{ow}$ (2) (*n* = 25, $R_{adj}^2 = 0.520$, SE = 0.433, *F* = 27.007, *p* = 0.000)

式中,n为样本容量; R_{adj}^2 为调整可决系数;SE为标 准偏差;F为F-检验值;p为检验的显著性水平.

结果显示, logK_{oc}和 logK_{ow}之间表现出线性关系. 这表明疏水效应对有机膨润土吸附有机物有一 定影响,但有机膨润土与有机物之间的相互作用也 对吸附过程产生影响.

LSER 模型充分考虑了吸附质-吸附剂和吸附 质-水之间的相互作用,能更好地描述影响吸附过 程的各相关因素. 根据 25 种有机物的 $\log K_{ac}$ 值以及 有机物的 $E_{S}_{A}_{B}_{V}$ 值,采用多元线性回归方法, 建立了有机膨润土吸附有机物的 LSER 关系式: $\log K_{ac} = 0.427 + 1.886E - 0.625S + 0.525A -$

2. 223B + 2.332V (3) (n = 25, $R_{adj}^2 = 0.923$, SE = 0.173, F = 58.828, p = 0.000)

从调整可决系数 R_{adj}^2 可以看出,该回归方程能 较好地描述有机化合物的 $\log K_{ac}$ 值与其 LSER 描述 符之间的关系.根据方程(3)计算了各有机物的 $\log K_{ac}$ 预测值,结果见表1.预测值与实验值的相关 分析如图2所示,显示该方程能较好地预测各有机 物在有机膨润土上的吸附系数.



3.3 模型检验

为了检验模型的多重共线性,表2给出了各变 量之间的相关矩阵及变异膨胀因子 VIF 值. 由表2 可知,方程(3)中自变量间只有 E = V之间有显著 的相关性(r = 0.690,p = 0.000).这与所选择有机 物是芳香化合物有关,双键越多,溶质的体积越 大,存在的相关性就显著(Vitha *et al.*,2006; Gritti *et al.*,2001).此外 模型中各因子的变异膨胀系数 VIF 值均小于 5.0,表明参数间无显著共线性,方 程(3)可以接受. 同时,对残差进行检验(图3)预 测值与实验值的残差大部分均匀分配在 ±0.3 范 围,表明残差基本成正态分布,模型对数据的拟合 效果较好.

表2 方程(3)参数间的自相关系数矩阵及参数的变异膨胀因子 (VIF)

Table 2 Correlation coefficient matrix and the variance inflation factors of equation (3)

	Ε	S	Α	В	V	VIF 值
Ε	1.000					2.869
S	0.458	1.000				1.398
A	0.089	0.277	1.000			1.416
В	0.192	0.070	0.236	1.000		1.109
V	0.690	0.163	-0.293	0.009	1.000	2.581



Fig. 3 Residual analysis of equation (3)

为了识别"异常值",进一步检验方程(3)的稳 健性,选择修正的 Jackknife 法,由于样本容量小于 30,属于小样本,故使用逐一剔除法.对模型(3)重 复进行 25 次回归,得到 25 个 R_{adj}^2 .这 25 个 R_{adj}^2 均 在 0.910~0.940 之间波动,呈现良好的正态分布 (图 4),其平均值为 0.923,与模型(3)的 0.923 极 其吻合.说明样本中不存在对模型(3)有显著影响 的"异常值"模型具有可接受性的总体稳健性.





Fig. 4 The frequency distribution of adjusted correlation coefficients square in equation (3) using the leave-oneout method

4 讨论 (Discussion)

有机膨润土对水中有机物的吸附性能取决于 水相和有机膨润土对有机物作用的相对强弱.以上 LSER 回归方程(3)可以直接反应出水和有机膨润 土对有机物作用的差异及其来源.该方程反映出在 水-有机膨润土体系中,有机膨润土吸附有机物的主 要驱动力来自于色散力和诱导力作用(*E*)、氢键酸 作用(*A*)及形成孔穴作用(*V*);而偶极作用(*S*)和氢 键碱作用(*B*)则对吸附过程起负作用.这表明在水 - 有机膨润土体系中,有机膨润土与有机物之间有 更强的色散和诱导作用力,有机膨润土能提供更强 的氢键碱作用.与之相对的是,水相与有机物之间 其有更强的偶极和极化作用,且水相能提供更强的 氢键酸作用.此外还可以看出,在有机膨润土中形 成孔穴所需自由能低于在水相中形成孔穴所需自 由能.

根据水和有机膨润土的结构特征,可以初步解 释以上 LSER 回归结果,并分析有机膨润土各组分 对吸附过程的贡献.水分子属于强极性分子,与有 机分子作用时可提供较强的氢键酸(氢原子)、氢键 碱(氧原子)及偶极作用.有机膨润土层间域为弱极 性的疏水环境,与有机分子可能发生作用的组分主 要有硅氧烷表面、表面活性剂烷基链和带正电的基 头.硅氧烷表面与有机分子发生范德华作用力,而 其氧原子可以提供氢键碱(Sposito *et al.*,1999),烷 基链与有机分子之间主要是色散力和诱导力,表面 活性剂带电基头与有机分子之间可发生较强的偶 极作用力.

与强极性的水分子相比,疏水的有机膨润土与 有机物之间具有较强的色散和诱导作用力(正 e 值)及较弱的偶极/极化作用(负 s 值).氢键酸贡献 是因为硅氧烷表面氧原子可以提供大量氢键碱,与 有机分子的氢键酸形成氢键.由于有机膨润土各组 分难以提供氢键酸而水分子的氢原子可以提供氢 键酸,因此,吸附过程氢键碱项为负贡献.水分子 之间有很强的氢键作用,所以,在水相中形成孔穴 时需要消耗大量的自由能,这也是有机分子疏水效 应的根源.而有机膨润土烷基链之间以及烷基链与 硅氧烷表面之间的作用力主要是范德华作用力,因 此.在有机膨润土层间形成孔穴所消耗自由能相对 较小,所以,吸附过程中形成孔穴作用相为正贡献. 此研究结果再次证明了硅氧烷表面在阳离子表面 活性剂改性有机膨润土吸附过程中也能产生贡献.

根据有机物的 LSER 参数以及上面 LSER 回归 方程,可以计算 25 种有机物吸附过程中各作用项 的值,具体结果见表 1. 可见吸附过程 $e \times E$ 和 $v \times V$ 作用项是主要驱动力,而 $s \times S$ 和 $b \times B$ 项为主要阻 力项; $a \times A$ 项对吸附过程的影响相对较小. 在此基 础上,本文计算了各作用项对吸附的相对贡献: $e \times E(43\% ~ 93\%)$, $s \times S(-48\% ~ -13\%)$, $a \times A$ (0 ~ 24%), $b \times B(-75\% ~ -11\%)$, $v \times V(62\%$ ~115%). 形成孔穴作用属于典型分配作用,这表 明分配作用在有机膨润土吸附水相有机物过程中 起主导作用.

Nguyen 等(2005) 报道了 SOM 从水中吸附有机 物的 LSER 方程式:

 $\log K_{oc} = (0.14 \pm 0.10) + (1.10 \pm 0.10) E - (0.72 \pm 0.14) S + (0.15 \pm 0.15) A - (1.98 \pm 0.14) B + (2.28 \pm 0.14) V$ (4)

对比 SOM-水体系和有机膨润土-水体系可知, 吸附过程 $E \setminus A$ 和 V 均为正贡献, 而 S 和 B 项则均为 负贡献 ,表明 SOM 和有机膨润土对有机物具有相似 的吸附特征. 但两者也有差异,后者有更大的 $e \cdot s \cdot$ a 和 v 值,表明有机膨润土对有机物有更强的色散 和诱导力、偶极作用、氢键碱作用,以及在有机膨润 土上形成孔穴所需自由能更小; 而前者的 b 值更 大,表明 SOM 对有机物有更强的氢键酸作用.

5 结论 (Conclusions)

LSER 模型可用于预测有机膨润土的吸附性能

1023

和揭示有机膨润土的吸附特征.本研究中建立的 LSER 方程有较好的可决系数,经检验模型稳定性 好,可用于预测有机物的 logK_{ac}值.同时,该 LSER 方程揭示了有机膨润土吸附有机物的贡献来自于 形成孔穴作用、色散力作用和氢键酸作用,而氢键 碱作用和偶极作用则为负贡献.有机膨润土与土壤 有机质对有机物的吸附特征相似,这也表明有机膨 润土是一种弱极性的吸附剂,疏水效应对吸附过程 有重要作用,有机膨润土从水相中吸附有机物主要 为分配作用.

责任作者简介:朱润良(1979—),副教授,硕士生导师,英 国皇家学会研究学者(Royal Society Research Fellow).研究 方向为环境污染控制材料和污染物的界面过程. E-mail: zhurunliang@gmail.com.

参考文献(References):

- Blum D J W, Speece R E. 1990. Determining chemical toxicity to aquatic species [J]. Environmental Science & Technology, 24 (3): 284–293
- Brixie J M , Boyd S A. 1994. Treatment of contaminated soils with organoclays to reduce leachable pentachlorophenol [J]. Journal of Environmental Quality , 23(6): 1283–1290
- Chen B L , Zhu L Z , Zhu J X. 2005. Configurations of the bentonite– sorbed myristylpyridinium cation and their influences on the uptake of organic compounds [J]. Environmental Science & Technology , 39(16): 6093-6100
- 戴家银,陈玲,赵建夫.2002.应用线性溶剂化能参数预测多氯有 机物的分配性质[J].中国环境科学,22(4):329-333
- Dai J Y , Chen L , Zhao J F. 2002. Prediction of partition property of polychlorinated organic compounds using linear solvation energy parameter [J]. China Environmental Science , 22(4): 329–333 (in Chinese)
- Gritti F, F lix G, Achard M F, et al. 2001. Laterally attached liquid crystalline polymers as stationary phases in reversed-phase highperformance liquid chromatography: V. Study of retention mechanism using linear solvation energy relationships [J]. Journal of Chromatography A, 922(1/2): 51–61
- 韩丽荣,鲁安怀,郑红,等.2001. 有机膨润土吸附垃圾渗滤液中部 分的研究[J]. 环境化学,20(5):460-465
- Han L R , Lu A H , Zheng H , et al. 2001. The properties for organobentonites to adsorb phenol from refuse percolate [J]. Environmental Chemistry , 20(5): 460–465 (in Chinese)
- Liu G S , Yu J G. 2005. QSAR analysis of soil sorption coefficients for polar organic chemicals: Substituted anilines and phenols [J]. Water Research , 39(10): 2048–2055
- Lo I M C , Yang X Y. 2001. Laboratory investigation of the migration of hydrocarbons in organobentonite [J]. Environmental Science & Technology , 35(3): 620-625

- McClelland H E , Jurs P C. 2000. Quantitative structure-property relationships for the prediction of vapor pressures of organic compounds from molecular structures [J]. Journal of Chemical Information and Computer Science ,40(4): 967–975
- Nguyen T H , Goss K U , Ball W P. 2005. Polyparameter linear free energy relationships for estimating the equilibrium partition of organic compounds between water and the natural organic matter in soils and sediments [J]. Environmental Science & Technology ,39 (4): 913–924
- Shin Y H, Gschwend P M. 2009. Evaluating activated carbon-water sorption coefficients of organic compounds using a linear solvation energy relationship approach and sorbate chemical activities [J]. Environmental Science & Technology ,43(3): 851–857
- Smith J A , Galan A. 1995. Sorption of nonionic organic contaminants to single and dual organic cation bentonites from water [J]. Environmental Science & Technology , 29(3): 685-692
- Sposito G , Skipper N T , Sutton R , et al. 1999. Surface geochemistry of the clay minerals [J]. Proceedings of the National Academy of Science of the United States of American ,96(7): 3358–3364
- Tian S L , Zhu L Z , Shi Y. 2004. Characterization of sorption mechanisms of VOCs with organobentonites using a LSER Approach [J]. Environmental Science & Technology , 38(2): 489-495
- Valkó K , Espinosa S , Du C M , et al. 2001. Unique selectivity of perfluorinated stationary phases with 2 , 2 , 2-trifluoroethanol as organic mobile phase modifier [J]. Journal of Chromatography A , 933(1/2): 73-81
- Vitha M , Carr P W. 2006. The chemical interpretation and practice of linear solvation energy relationships in chromatography [J]. Journal of Chromatography A , 1126(1/2): 143–194
- Wang A S , Carr P W. 2002. Comparative study of the linear solvation energy relationship , linear solvent strength theory , and typicalconditions model for retention prediction in reversed-phase liquid chromatography [J]. Journal of Chromatography A , 965 (1/2): 3–23
- 王斌,余刚,黄俊,等. 2007. QSAR/QSPR 在 POPs 归趋与风险评价 中的应用[J]. 化学进展,19(10): 1612–1619
- Wang B , Yu G , Huang J , et al. 2007. Application of QSAR/QSPR in fate evaluation and risk assessment of POPs [J]. Progress in Chemistry , 19(10) : 1612–1619 (in Chinese)
- Wei D B , Zhang A Q , Wu C D , et al. 2001. Progressive study and robustness test of QSAR model based on quantum chemical parameters for predicting BCF of selected polychlorinated organic compounds(PCOCs) [J]. Chemosphere , 44 (6) : 1421–1428
- Yang L Y , Zhou Z , Xiao L , et al. 2003. Chemical and biological regeneration of HDTMA-modified montmorillonite after sorption with phenol [J]. Environmental Science & Technology , 37 (21): 5057–5061
- Zhu D Q, Pignatello J J. 2005. A concentration-dependent multi-term linear free energy relationship for sorption of organic compounds to soils based on the hexadecane dilute-solution reference state [J]. Environmental Science & Technology, 39(22): 8817–8828

朱利中,陈宝梁. 1998. 有机膨润土在废水处理中的应用及其进展

[J]. 环境科学进展,6(3):53-61

- Zhu L Z , Chen B L. 1998. Advances in application of organobentonites in wastewater treatment [J]. Advances in Environmental Science , 6(3): 53-61 (in Chinese)
- Zhu L Z , Chen B L. 2003. Interactions of organic contaminants with mineral-adsorbed surfactants [J]. Environmental Science & Technology , 37(17): 4001-4006
- Zhu L Z , Li Y M , Zhang J Y. 1997. Sorption of organobentonites to some organic pollutants in water [J]. Environmental Science & Technology , 31(5): 1407–1410

朱建喜,何宏平,郭九皋,等.2003.不同链长烷基季铵离子在蒙脱

石层间域内排列方式的对比[J]. 矿物学报,23(3): 193-198

- Zhu J X, He H P, Guo J G, et al. 2003. Comparative study on the aggregation of different long-chain alkylammonia in montmorillonite [J]. Acta Mineralogica Sinica, 23(3): 193–198 (in Chinese)
- Zhu R L , Zhu L Z , Xu L H. 2007. Sorption characteristics of CTMAbentonite complexes as controlled by surfactant packing density [J]. Colloids and Surfaces A ,294(1/3): 221-227
- Zhu R L , Zhu L Z. 2008. Thermodynamics of naphthalene sorption to organoclays: Role of surfactant packing density [J]. Journal of Colloid and Interface Science , 322(1): 27–32