

37 种脂肪酸甲酯的色谱分离及 QSRR 研究

李 焕, 李美萍, 张生万*

(山西大学生命科学学院, 山西太原 030006)

摘 要:采用气相色谱-氢火焰离子化检测器(GC-FID),对常见的 37 种脂肪酸甲酯在 Rtx-wax 石英毛细管色谱柱上的分离条件进行了系统的研究,同时采用 Steric and Electronic Descriptors(SEDs)表征其分子结构信息,运用多元线性回归(Multiple Linear regression, MLR)建立了脂肪酸甲酯分子结构参数与其气相色谱保留时间的定量结构-色谱保留相关(Quantitative Structure Retention Relationship, QSRR)模型。并采用留一法(Leave-One-Out, LOO)交互检验(Cross-Validation, CV)和外部验证的方法对该模型的稳定性和预测能力进行了评价,其预测值、留一法(Leave-One-Out, LOO)交互检验预测值和外部样本预测值的相关系数 R 、 R_{CV} 、 Q_{ext}^2 分别为 0.9990、0.9951、0.9995。结果表明,所建模型具有良好的稳定性和预测能力,为脂肪酸的分离、检测及结构表征提供了一条新途径。

关键词:脂肪酸, Steric and Electronic Descriptors(SEDs), 定量结构-色谱保留相关(QSRR), 色谱保留时间

Study on chromatographic separation and quantitative structure-retention relationship of 37 fatty acid methyl esters

LI Huan, LI Mei-ping, ZHANG Sheng-wan*

(School of Life Science, Shanxi University, Taiyuan 030006, China)

Abstract: Separation condition of the common 37 fatty acid methyl esters was researched in Rtx-wax quartz capillary chromatographic column by using gas chromatography-hydrogen flame ionization detector (GC-FID). Meanwhile, the Steric and Electronic Descriptors (SEDs) were used to characterize molecular structures of fatty acid methyl esters, and then the model of quantitative structure retention relationship (QSRR) for above-mentioned 37 compounds was established through multiple linear regression (MLR). And the estimated stability and generalized ability of the model were strictly analyzed by both internal and external validation. The correlation coefficient (R), leave-one-out (LOO) cross validation (CV) and Q_{ext}^2 for the established model were 0.9990, 0.9951 and 0.9995, respectively. Results indicated that this model was good for stability and predictability. The proposed model could provide a new approach to separation, detection and structure characterization of fatty acids.

Key words: fatty acids; Rtx-wax quartz capillary chromatographic column; Steric and Electronic Descriptors (SEDs); quantitative structure-chromatographic retention related (QSRR); Chromatographic retention time

中图分类号: TS222

文献标识码: A

文章编号: 1002-0306(2013)19-0049-05

脂肪酸作为人体的必需营养素之一,在整个生命过程中起着至关重要的作用。随着生活水平的提高,人们对健康越来越重视,因此,业内专家和科研人员对膳食脂肪酸的研究也越来越多。目前,脂肪酸的检测方法最常用的是气相色谱^[1-3]和气相色谱-质谱联用^[4-5]。采用气相色谱检测,需要标准品对样品进行定性;采用气质联用分析时,需要人工检索解析,操作麻烦耗时,且费用较高。而定量结构-色谱保留相关(Quantitative Structure-Retention Relationships, QSRR)的研究主要是建立化合物分子结构参数和色谱保留值之间的定量关系,对选择分离条件、预测保留时间和探索色谱保留机理有着重要的意义。建立有效的脂肪酸甲酯化合物 QSRR 模

型可以节省大量的人力财力,同时对脂肪酸的分析工作具有一定的指导意义。由于油脂中脂肪酸组成复杂,且结构相似,对分离柱的要求就相对较高。目前,应用较为广泛的是涂渍极性固定相的色谱柱,如聚乙二醇或氰丙基聚硅氧烷固定相。尤其是对组分较多的脂肪酸甲酯混合样品的分离,一般选用柱长较长的脂肪酸甲酯分析专用色谱柱,如 OmegawaxTM 柱(聚乙二醇)和 SP-2560(强极性氰丙基聚硅氧烷)等,此类柱子价格昂贵,且应用范围较窄。本文以 37 种脂肪酸甲酯混标准品为研究对象,选用 30m 长的 Rtx-wax 石英毛细管色谱柱作为分离柱,采用气相色谱-氢火焰离子化检测器(GC-FID)对其色谱分离条件进行选择,最终确定了一种分离效果较好的色谱条件。在该分离条件下,选用同一根色谱柱,通过气相色谱-质谱联用仪(GC-MS)对 37 种脂肪酸甲酯做定性分析,确定了 37 种脂肪酸甲酯在 Rtx-wax 色谱柱上的出峰顺序。在此实验基础上,采用 Steric and Electronic Descriptors(SEDs)表征脂肪酸甲

收稿日期: 2013-03-05 * 通讯联系人

作者简介: 李焕(1987-),女,在读硕士研究生,研究方向:食品化学。

基金项目: 国家自然科学基金(31171748);山西省研究生优秀创新项目(20123015)。

表1 SEDs 参数名称及其简写

Table 1 SEDs parameter names and their abbreviations

描述符名称	简写	描述符名称	简写	描述符名称	简写
Connolly Solvent-Excluded Volume	SEV	Ovality	Ovality	Wiener Index	Windx
Connolly Molecular Area	MS	Total Energy	Tote	HOMO Energy	Homo
Connolly Accessible Area	SAS	Dipole Length	DPLL	LUMO Energy	Lumo
Principal Moment of Inertia-X	PMIX	Electronic ENE	ElcE	Molecular Weight	MW
Principal Moment of Inertia-Y	PMIY	Total Connectivity	TCon	Cluster Count	ClsC
Principal Moment of Inertia-Z	PMIZ	Exact Mass	Mass	Shape Attribute	ShpA
Molecular Topological Index	TIndx	Balaban Index	BIndex	Shape Coefficient	ShpC
Total Valence Connectivity	TVCon	Diameter	Diam	Sum of Degrees	SDeg
Repulsion Energy	NRE	Radius	Rad	Sum of Valence Degrees	SVDe

酯的三维分子结构信息,运用 SPSS(version 16.0)软件进行逐步回归分析,得到预测脂肪酸甲酯色谱保留时间的定量结构-色谱保留相关(QSRR)模型,同时采用留一法(Leave-One-Out, LOO)交互检验(Cross-Validation, CV)和外部验证的方法对所建模型的稳定性和预测能力进行分析和验证,均取得了较好的结果。本工作希望可以为脂肪酸的分析鉴定工作提供一条新途径。

1 材料与方法

1.1 材料与仪器

37 种脂肪酸甲酯混标标准品 上海安谱科学仪器有限公司;正己烷 纯度 $\geq 95.0\%$,色谱纯,天津市光复精细化工研究所。

GC/MS 联用仪 型号 7890A/5975C,附 FID 检测器,美国 Agilent 公司。

1.2 实验方法

1.2.1 脂肪酸甲酯混标溶液的制备 将 25mg 的 37 种脂肪酸甲酯混标标准品溶于 2.00mL 正己烷溶剂,在样品瓶中密封,冷藏待用。

1.2.2 GC/MS 测定条件 色谱条件:色谱柱:Rtx-wax 石英毛细管色谱柱(30m $\times$ 0.25mm $\times$ 0.5 μ m);进样口温度:250 $^{\circ}$ C;柱流量:0.60mL/min;升温程序:50 $^{\circ}$ C 保持 2min,以 5 $^{\circ}$ C/min 升到 140 $^{\circ}$ C,保持 10min,再以 1 $^{\circ}$ C/min 升到 160 $^{\circ}$ C,保持 10min,再以 1 $^{\circ}$ C/min 升到 180 $^{\circ}$ C,保持 10min,再以 1 $^{\circ}$ C/min 升到 200 $^{\circ}$ C,保持 10min,再以 1 $^{\circ}$ C/min 升到 220 $^{\circ}$ C,保持 10min,然后以 2 $^{\circ}$ C/min 升到 230 $^{\circ}$ C,保持 30min;检测器(FID)温度:250 $^{\circ}$ C;检测器气体:氢气 40mL/min,空气 450mL/min,尾吹氦气 30mL/min;进样量:0.2 μ L;分流比:10:1。

质谱条件:电子轰击离子源;离子源温度 230 $^{\circ}$ C;电子能量 70eV;质量扫描范围 m/z 15~500;接口温度为 280 $^{\circ}$ C,四极杆温度为 150 $^{\circ}$ C。

1.3 SEDs 参数计算方法

本文采用 Steric and Electronic Descriptors (SEDs) 参数来表征脂肪酸甲酯的分子结构信息,该参数能够全面反映三维分子结构的大小、形状、对称性、拓扑特性及电荷情况等,具体的 SEDs 参数见表 1^[6-7]。SEDs 参数由能量最小的分子计算获得,先利

用 ChemDraw Ultra(version 8.0)软件勾画脂肪酸甲酯的分子骨架,然后在 Chem3D Ultra(version 8.0)软件中,采用 MM2 方法和 MOPAC 软件包进行分子最小能量优化,最后计算出 37 种脂肪酸甲酯的 SEDs 参数。

2 结果与讨论

2.1 气相色谱分离条件的选择

由于待分离的 37 种脂肪酸甲酯存在多种异构体,在选择色谱柱时,应综合考虑脂肪酸甲酯的碳原子数、不饱和度以及双键的位置等多个因素。对于同分异构体及碳数相同、双键个数不同的物质,在非极性柱上很难分开;另外考虑到脂肪酸甲酯分析专用柱多为极性固定相,因此,本实验选用强极性的 Rtx-wax(聚乙二醇)色谱柱分离 37 种脂肪酸甲酯。又由于待分离的 37 种物质,沸程较宽,且有些化合物的沸点比较接近,故采取多步程序升温的方法,且升温速率尽量小,以便沸点接近的化合物能够很好的分离;同时对载气流速进行考察,最终确定的同时分离 37 种脂肪酸甲酯的色谱条件如 1.2.2 节中所述,在此条件下,达到了较好的分离效果,且峰形较好。得到的 37 种脂肪酸甲酯的气相色谱图见图 1。

2.2 SEDs 参数与脂肪酸甲酯气相色谱保留时间的相关性研究

2.2.1 模型建立 本文中用于建模的 37 个脂肪酸甲酯的气相色谱保留时间均来自于笔者实验所得。

首先计算出 37 个样本的 SEDs 参数,借助多元线性回归(MLR)方法对 37 个脂肪酸甲酯的 SEDs 参数和 $t_{R(\text{exp})}$ 进行相关性研究,采用 SPSS(version 16.0)软件进行逐步回归分析,筛选出最优变量。建立定量结构-保留关系(QSRR)模型,采用留一法(LOO)交互检验(CV)对所建模型进行验证,观察模型相关系数(R)、标准偏差(SD)、留一法(Leave-One-Out, LOO)交互检验相关系数(R_{CV})、标准偏差(SD_{CV})随引入变量数的增加而变化的情况。为控制模型稳定性和消除变量间共线性的影响,对每步变量进行方差膨胀因子(VIF)^[8]计算。 $VIF = (1 - R^2)^{-1}$,式中 R 为某自变量与其它变量相关程度(经自由度校正)。VIF 值为 1.0,表示各变量间无相关性;VIF 值在 1.0~10.0 之间,表示变量间无明显共线性,相关方程

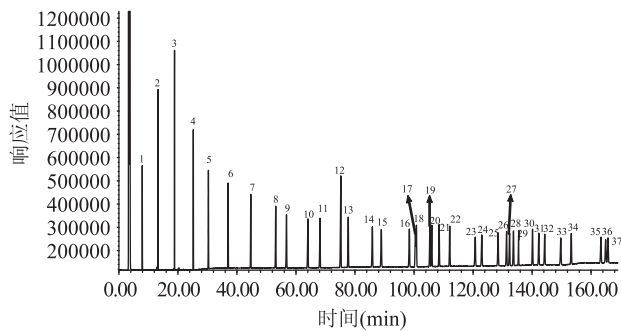


图1 37种脂肪酸甲酯的气相色谱图

Fig.1 GC chromatogram of 37 fatty acid methyl esters

注:1.丁酸甲酯,2.己酸甲酯,3.辛酸甲酯,4.癸酸甲酯,5.十一烷酸甲酯,6.十二烷酸甲酯,7.十三烷酸甲酯,8.十四烷酸甲酯,9.顺-9-十四烯酸甲酯,10.十五烷酸甲酯,11.顺-10-十五烯酸甲酯,12.棕榈酸甲酯,13.棕榈油酸甲酯,14.十七烷酸甲酯,15.顺-10-十七烯酸甲酯,16.硬脂酸甲酯,17.反油酸甲酯,18.油酸甲酯,19.反亚油酸甲酯,20.亚油酸甲酯,21.γ-亚麻酸,22.a-亚麻酸,23.二十烷酸甲酯,24.二十碳烯酸甲酯,25.二十碳二烯酸甲酯,26.n6-二十碳三烯酸甲酯,27.二十一烷酸甲酯,28.花生四烯酸甲酯,29.n3-二十碳三烯酸甲酯,30.二十碳五烯酸甲酯,31.山嵛酸甲酯,32.芥酸甲酯,33.二十二碳二烯酸甲酯,34.二十三烷酸甲酯,35.二十四烷酸甲酯,36.二十二碳六烯酸甲酯,37.二十四碳烯酸甲酯。

可接受。逐步回归分析及变量膨胀因子(VIF)计算结果见表2。

从表2中可以看出,逐步回归分析中,当选用变量TVcon、SVDe、Windex、Bindex、MW建模时,相关系数R最大,标准偏差SD最小;且留一法交互检验过程中,同样是选入变量TVcon、SVDe、Windex、Bindex、MW建模时,R_{CV}值最大,SD_{CV}值最小。而为了保证模型稳定性及消除变量共线性,要求模型中各变量VIF不大于10,满足这一条件的有模型2和模型6,其中模型2中的R、SD、R_{CV}和SD_{CV}均较大,综合分析,最终以模型6为最佳模型。所见QSRR模型如M1:

$$t_R = 0.116TVcon + 0.483SVDe + 0.980Windex - 0.395Bindex \quad (M1)$$

$$N = 37, m = 4, R = 0.9990, SD = 2.2795, F = 3712.6633$$

交互检验: $R_{CV} = 0.9951, SD_{CV} = 4.9251, F_{CV} = 789.1953$

其中,N为回归样本数,m为变量个数,R为相关系数,SD为标准误差,F为Fisher检验值,R_{CV}、SD_{CV}、F_{CV}分别为留一法交互检验的相关系数、标准误差和Fisher检验值。

模型M1的相关系数R=0.9990,留一法(LOO)交互检验(CV)的相关系数R_{CV}=0.9951,与建模时的相关系数R很接近,二者均接近1,说明所建模型的稳定性较好^[9]。建模时引入的变量参数及保留时间见表3。另外使用模型M1对37种脂肪酸甲酯的气相色谱保留时间进行预测,并将预测值对实验值的相关情况及残差分布散点图分别绘于图2、图3中。

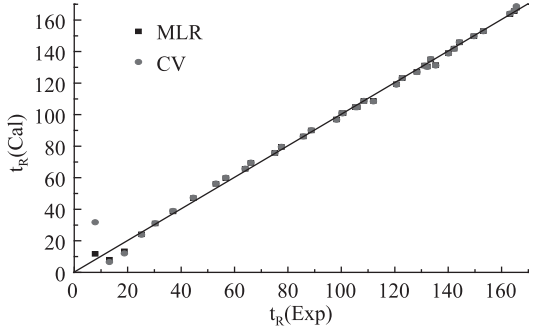


图2 MLR模型预测值、留一法交互检验预测值与实验值相关性

Fig.2 Plot of estimated values, observed ones of Leave-One-Out, LOO and observed ones

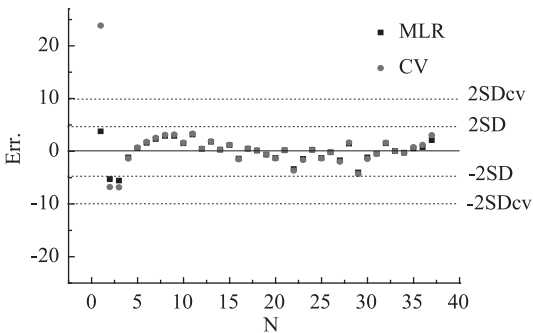


图3 MLR模型预测值、留一法交互检验预测值的误差分布

Fig.3 Plot of Err EST vs. N

从图2中可以看出,模型预测值与实验值符合的较好,留一法交互检验的预测值与实验值的线性

表2 逐步回归及变量膨胀因子值

Table 2 The results of stepwise regression and VIF

模型	VIF 值						R	SD	F	R _{CV}	SD _{CV}	F _{CV}
	Rad	TVCon	SVDe	Windex	Bindex	MW						
1	1.000	-	-	-	-	-	0.9760	10.1675	713.0780	0.9701	11.4110	550.9503
2	1.9936	1.9936	-	-	-	-	0.9900	6.6893	847.1220	0.9839	8.4863	519.9420
3	18.7617	1.9600	17.4825	-	-	-	0.9960	4.0897	1530.240	0.9890	7.1981	486.5081
4	21.0970	2.5138	18.1159	3.4758	-	-	0.9980	2.8419	2385.7670	0.9955	4.7813	837.7690
5	45.6621	3.9185	22.9885	6.3573	16.3934	-	0.9990	2.2922	2937.4761	0.9950	5.0160	608.4542
6	-	2.3935	6.5876	5.6370	7.4738	-	0.9990	2.2795	3712.6633	0.9951	4.9251	789.1953
7	-	4.8948	13.7741	6.3573	18.1160	35.9712	0.9995	1.4180	7680.7630	0.9990	2.3520	2790.3350

表3 模型中引入的变量及37种脂肪酸甲酯保留时间(t_R)的实验值、预测值

Table 3 The introduced variables and observed values and predicted ones of 32 kinds of fatty acid methyl esters

序号	组分名	TVcon	SVDe	Windex	Bindex	t_R (min)		
						Exp.	Cal.	Err.
1	丁酸甲酯	0.0416667	22	50	4150	7.886	11.6323	3.7463
2	己酸甲酯	0.0208333	26	110	15660	13.254	7.9603	-5.2937
3 *	辛酸甲酯	0.0104167	30	206	44820	18.828	13.2504	-5.5776
4	癸酸甲酯	0.00520833	34	346	106775	25.209	24.0431	-1.1659
5	十一烷酸甲酯	0.00368285	36	435	156616	30.335	30.9235	0.5885
6 *	月桂酸甲酯	0.00260417	38	538	223499	37.028	38.6060	1.5780
7	十三烷酸甲酯	0.00184142	40	656	311446	44.681	46.9917	2.3107
8	肉豆蔻酸甲酯	0.00130208	42	790	425061	53.116	56.0001	2.8841
9 *	肉豆蔻烯酸甲酯	0.00086806	44	790	425061	56.780	59.6692	2.8892
10	十五烷酸甲酯	0.00092071	44	941	569577	64.071	65.5600	1.4890
11	十五烯酸甲酯	0.00061381	46	941	569577	66.183	69.3184	3.1354
12 *	棕榈酸甲酯	0.00065104	46	1110	750888	75.161	75.6041	0.4431
13	棕榈油酸甲酯	0.00043403	48	1110	750888	77.660	79.4257	1.7657
14	十七烷酸甲酯	0.00046036	48	1298	975591	85.791	86.0640	0.2730
15 *	十七烯酸甲酯	0.0003069	50	1298	975591	88.807	89.9302	1.1232
16	硬脂酸甲酯	0.00032552	50	1506	1251030	98.261	96.8668	-1.3942
17	油酸甲酯	0.00021701	52	1506	1251030	100.317	100.7645	0.4475
18 *	反油酸甲酯	0.00021701	52	1506	1251030	100.645	100.7645	0.1196
19	亚油酸甲酯	0.00014468	54	1506	1251030	105.332	104.6877	-0.6443
20	反亚油酸甲酯	0.00014468	54	1506	1251030	105.984	104.6877	-1.2963
21 *	γ -亚麻酸甲酯	0.000096451	56	1506	1251030	108.463	108.6278	0.1648
22	α -亚麻酸甲酯	0.000096451	56	1506	1251030	112.035	108.6278	-3.4072
23	花生酸甲酯	0.00016276	54	1986	1987427	120.646	119.1737	-1.4723
24 *	二十碳烯酸甲酯	0.00010851	56	1986	1987427	122.863	123.1095	0.2465
25	二十碳二烯酸甲酯	0.000072338	58	1986	1987427	128.364	127.0581	-1.3059
26	n6-二十碳三烯酸甲酯	0.000048225	60	1986	1987427	131.226	131.0151	-0.2109
27 *	二十一烷酸甲酯	0.00011509	56	2260	2467140	132.232	130.4900	-1.7420
28	花生四烯酸甲酯	0.00003215	62	1986	1987427	133.546	134.9778	1.4318
29	n3-二十碳三烯酸甲酯	0.00048225	60	1986	1987427	135.342	131.3199	-4.0221
30 *	二十碳五烯酸甲酯	0.000021434	64	1986	1987427	140.126	138.9442	-1.1818
31	山嵛酸甲酯	0.00008138	58	2558	3035173	142.248	141.7711	-0.4769
32	芥酸甲酯	0.000054254	60	2558	3035173	144.248	145.7260	1.4780
33 *	二十二碳二烯酸甲酯	0.000036169	62	2558	3035173	149.660	149.6872	0.0272
34	二十三烷酸甲酯	0.000057545	60	2881	3703176	153.198	152.8932	-0.3048
35	二十四烷酸甲酯	0.00004069	62	3230	4483778	163.207	163.7188	0.5117
36 *	二十二碳六烯酸甲酯	0.0000071445	70	2558	3035173	164.803	165.5627	0.7597
37	二十四碳烯酸甲酯	0.000027127	64	3230	4483778	165.600	167.6832	2.0832

注：“*”测试集样本。

相关性较好,具体表现为图2中样本均匀分布在过原点的45°直线周围。图3显示,模型预测值误差大多数点均匀分布在 $\pm 2SD$ 之间,留一法交互检验预测值误差基本上均匀分布在 $\pm 2SD_{CV}$ 之间。

2.2.2 模型验证 在定量构效关系的研究中,对所建模型的外部预测能力和真实有效性进行验证是非常重要的部分。目前广泛使用的一种模型验证方法是留一法(LOO)交互检验(CV)。然而 Tropsha 等人^[10]的研究结果表明:模型的外部预测能力与 R_{cv} 值的大小并没有明显的相关性,而是采用外部样本(即测试集)预测值的相关系数 Q_{ext}^2 来衡量:

$$Q^2_{ext} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_{tr})^2} \quad \text{式(1)}$$

式中: y_i 为测试集中样本的实验值; $\bar{y}_i$ 为测试集样本的预测值; $\bar{y}_{tr}$ 为训练集样本实验值的平均值。

为了验证模型对外部样本的预测能力,将上述37个样本分为两组,按照大约三分之一的样本作为测试集,大约三分之二作为训练集,从第一号样本开始,每隔2个取一个样本作为测试集,这样得到25个样本作为训练集(Training Set),12个样本作为测试

集(Test Set)。测试集样本在表3中用“*”号标出。对训练集中的25个样本建模,采用逐步回归进行变量筛选,结合变量的方差膨胀因子VIF值,筛选出四个最优变量(TVcon、SVDe、Windex、Bindex),借助多元线性回归建立如下QSRR模型(M2):

$$t_R = 0.137TVcon + 0.493SVDe + 1.019Windex - 0.431Bindex \quad (M2)$$

$N = 25$, $m = 4$, $R = 0.9990$, $SD = 2.3923$, $F = 2361.3933$

交互检验: $R_{CV} = 0.9943$, $SD_{CV} = 5.5598$, $F_{CV} = 433.1412$

采用上述12个外部样本(测试集)对所建模型的外部预测能力进行检验,利用公式(1)计算得到 $Q_{ext}^2 = 0.9995$,进一步表明模型具有良好的稳定性和预测能力。

2.2.3 模型分析 脂肪酸甲酯的定量结构-色谱保留相关模型如M1所示。该模型中引进的四个变量分别为Windex、Bindex、SVDe、TVcon。由此可知该类型脂肪酸甲酯的气相色谱保留时间与Windex、Bindex、SVDe、TVcon有关。

Windex指数是分子骨架中各碳原子间距离总和,其值随分子的增大而增加,随分子的分化程度增加而减小。Windex值的大小反映了溶质分子与固定相作用时色散力强弱的信息。Windex值越大,溶质与固定相之间的色散力越大,保留时间越长,即Windex与脂肪酸甲酯的气相色谱保留时间呈正相关。

Bindex指数是建立在分子图的距离矩阵基础上而构造产生的,对不饱和键给予区分,反映了分子的大小和形状等结构信息^[11]。从表3中可见,随着碳数的增多保留时间基本呈上升趋势,其原因是溶质分子碳原子数越多,与固定相接触面积越大,色散力越大;当碳链相同时,Bindex值是相同的,但保留时间却随着饱和度的增大而增大。其原因可能是在不饱和程度增大的过程中,虽然极化力和诱导力是增大的,但因C=C相对于C-C来说,键长缩短,导致色散力减小。综合多种因素的共同影响,模型中Bindex系数为负值是可以理解的。

SVDe为溶质分子中所有原子点价之和^[12],包含了溶质分子与固定相作用时色散力和诱导力的信息,溶质分子色谱保留时间随其SVDe值的增大而增大,这与模型中SVDe的系数为正值是一致的。

TVCon反映分子的电子结构信息^[13-15]。TVCon值越小,表明分子不饱和度越大,诱导力和取向力随之增大,溶质分子的色谱保留时间也就越长。模型中,TVCon系数最小,表明TVCon对脂肪酸甲酯的色谱保留时间贡献较小,并不是主要的影响因素。

在所建模型M1中,Windex系数最大,说明该极性固定相上,分子体积对脂肪酸甲酯化合物色谱保留时间的影响起主要贡献。1、2、3号化合物由于结构简单,分子体积小,在极性固定相上的误差较大是正常的。

3 结论

对于37种脂肪酸甲酯的分离,通常使用脂肪酸

甲酯分析专业色谱柱,这类色谱柱价格昂贵,普通实验室不易实现。本工作选用30m长的Rtx-wax石英毛细管色谱柱,就能对37种脂肪酸甲酯取得较好的分离效果。Rtx-wax在一定程度上可以取代脂肪酸甲酯分析专用色谱柱,避免使用价格昂贵脂肪酸甲酯分析专用色谱柱,大大节约了实验成本,实际应用性较强。QSRR研究结果表明,SEDs参数可以较好地表征脂肪酸甲酯类化合物的分子结构特征,采用SEDs建立的QSRR模型具有较好的稳定性和预测能力,可以较好地预测该类化合物的气相色谱保留时间,该方法为植物油脂中脂肪酸的分析工作提供了一定的理论依据。

参考文献

- [1] 刘飞.气相色谱法同时测定食品中34种脂肪酸[J].福建分析测试,2010,19(3):15-20.
- [2] 李丹华,朱圣陶.气相色谱法测定常见植物油中脂肪酸[J].粮食与油脂,2006(8):46-48.
- [3] 杨培慧,郑志雯,赵秋香,等.食用植物油脂肪酸的高分辨气相色谱分析[J].中国油脂,2003,28(7):48-50.
- [4] 李高阳,丁霄霖.亚麻籽油中脂肪酸成分的GC-MS分析[J].食品与机械,2005,21(5):30-32.
- [5] 何志勇,夏文水.两种不同橄榄核仁油中脂肪酸组成的GC/MS分析[J].食品科学,2006,27(3):188-190.
- [6] 刘晓华,高子桑,王连生,等.多氯联苯的气相色谱相对保留时间和理化性质预测模型[J].环境化学,2007,26(2):184-191.
- [7] 李小林,荆国华,周作明,等.多环芳烃沸点和辛醇/水分配系数的QSPR研究[J].计算机与应用化学,2010,27(4):528-532.
- [8] Sutter J M, Peterson T A, Jurs P C. Prediction of gas chromatographic retention indices of alkylbenzenes[J]. Analytica Chimica Acta, 1997, 342: 113-122.
- [9] Nakajima N, Lay C, Du H B, et al. Prediction of gas chromatographic retention times of carbazoles in light cycle oil[J]. Energy Fuels, 2006, 20(3): 1111-1117.
- [10] Tropsha A, Gramatica P, Gombar V K. The importance of being earnest: Validation is the absolute essential for successful application and interpretation of QSPR models[J]. QSAR & Combinatorial Science, 2003, 22(1): 69-77.
- [11] 孟繁宗. 不饱和烃的QSPR研究[J]. 计算机与应用化学, 2004, 21(4): 645-649.
- [12] Kier L B, Hall L H. Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research[M]. New York: Academic Press, 1976: 18.
- [13] Hall L H, Kier L B. Issues in representation of molecular structure—The development of molecular connectivity[J]. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 2001, 20: 4-18.
- [14] Mu L L, He H M. QSPR study of standard absolute entropies for gaseous organic compounds using novel molecular connectivity indexes and Ring parameter[J]. Thermochimica Acta, 2011, 526: 99-106.
- [15] Vyas V K, Joshi G, Namdeo B, et al. Exploring structure indenture of some aminopyrazolopyridine ureas as potent VEGFR/PDGFR multitargeted kinase inhibitors: A QSAR approach[J]. Indian Journal of Chemistry, 2011, 50(B): 858-867.