

Method and application of risk assessment  
for environmental chemicals

# 环境化学物质 风险评估方法与应用

刘征涛 孟 伟 等编著



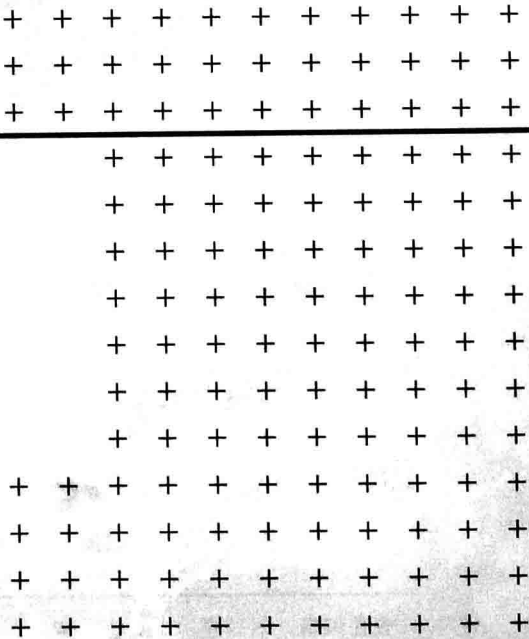
化学工业出版社



Method and application of risk assessment  
for environmental chemicals

# 环境化学物质 风险评估方法与应用

刘征涛 孟 伟 等编著



化学工业出版社  
· 北京 ·



本书共分5章，主要介绍了化学物质生态风险评估方法、化学物质健康风险评估方法、我国环境化学物质风险管理评审、环境化学物质风险评估应用，以及环境物质风险评估试验方法及应用等内容，以期对我国化学品风险评估技术方法的研究和建立提供技术支撑和参考依据。

本书具有较强的技术性和参考价值，可供环境工程、化学工程等领域的工程技术人员、科研人员和管理人员参考，也供高等学校环境工程、化学工程专业及相关专业师生参阅。

图书在版编目(CIP)数据

环境化学物质风险评估方法与应用/刘征涛等编著.  
北京:化学工业出版社,2015.6  
ISBN 978-7-122-23485-8

I. ①环… II. ①刘… III. ①化学物质-环境质量评价-  
风险评价-评估方法 IV. ①X820.4

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 070725 号

---

|          |          |
|----------|----------|
| 责任编辑:刘兴春 | 装帧设计:孙远博 |
| 责任校对:吴 静 |          |

---

|                                                                              |
|------------------------------------------------------------------------------|
| 出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)                                      |
| 印 刷:北京云浩印刷有限责任公司                                                             |
| 装 订:三河市瞰发装订厂                                                                 |
| 787mm×1092mm 1/16 印张12 <sup>3</sup> / <sub>4</sub> 字数283千字 2015年8月北京第1版第1次印刷 |

---

|                                                                |
|----------------------------------------------------------------|
| 购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899           |
| 网 址: <a href="http://www.cip.com.cn">http://www.cip.com.cn</a> |
| 凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。                                     |

---

# 《环境化学物质风险评估方法与应用》

## 编著者名单

|     |     |     |     |
|-----|-----|-----|-----|
| 刘征涛 | 孟 伟 | 王晓南 | 周俊丽 |
| 杨霓云 | 余若祯 | 王 宏 | 方 征 |
| 闫振广 | 王一喆 | 王婉华 | 李炳伟 |

产业经济快速发展的同时，在生产、生活中不断出现的大量化学物质不仅可带来促进社会发展的正效应，也可能在环境中引发对自然生态系统和人体健康的危害性影响，因此加强对环境中化学物质的安全性管理越来越受到重视。化学物质的环境风险管理，国际上主要从关注化学品的物理—化学特征属性引发的环境危害性，发展到当前美国、欧盟等发达国家或组织同时关注化学物质对环境中的生态系统与人体健康的危害性及实际暴露过程的风险评估与监管。为加强我国环境中化学物质的风险管理，进一步学习国际上对环境中化学物质风险管理的先进技术与方法理念，促进环境保护的技术管理与时俱进地健康发展，我国化学物质的环境风险管理应适时从传统的化学品理化特性的环境危害性识别管理，发展到目前如欧盟国家相关化学物质风险管理 REACH 法规的先进水平，即要综合考虑化学物质对环境生态系统与人体健康的危害性及其暴露途径、水平、过程等系统的环境风险评估基础上的环境风险管理。

我国化学物质的环境风险管理工作起步较晚，相关化学物质环境安全性的风险评估技术方法研究基础较为薄弱，本书主要集成承担的环保公益项目“新化学物质风险评估技术体系研究”的研究成果，结合国内外有关化学品风险评估技术方法的先进经验，探索适合我国国情的化学物质的环境风险评估技术方法，为我国化学物质的环境风险管理工作提供技术支持。

环境中化学物质的风险评估技术方法需要一个逐渐发展并不断完善的阶段，当前一般认为由化学物质的危害识别、影响评估（剂量—效应评估）、暴露评估和风险表征四个部分组成化学物质的环境风险评估过程，通常还需经过风险分类、风险效益分析、风险减低措施及实施、风险监测检验与审查评价等环境风险管理阶段来完成化学物质的环境风险管理全过程。

化学物质的环境风险评估是在一定环境暴露条件下，化学物质对生态系统或人体健康产生不利或有害影响的概率进行估计并定性或定量地表征评价。本书共分 5 章，主要介绍了环境中化学物质的风险评估技术方法及可供应用于我国化学品环境风险管理评审工作的建议规范与案例。第 1 章介绍了化学物质生态风险评估的基本技术方法，主要从化学物质生态危害性识别技术指标、生态毒理学剂量—效应评估推算、生态暴露评估模型方法、风险表征方法等方面进行阐述；第 2 章介绍化学物质健康风险评估技术方法，主要从化学物质人体健康危害性识别指标、剂量—效应推算方法、人体健康暴露评估模型、健康风险表征等方面进行阐述；第 3 章主要对可应用于我国化学物质风险管理的专家评审技术规范进行了介绍；第 4 章主要结合化学物质风险评估技术的案例分析，对可应用于我国环境化学物质的风险评估方法进行了应用性阐述；第 5 章介绍一些基础性的化学物质生态风险评估的具体试验方法及其应用，主要适用于现阶段我国环境化学物质风险评估中的一些基本的生态毒理学剂量—效应关系的评估分析。

本书所述环境化学物质风险评估技术方法，可为我国开展化学物质的环境风险评估和风险管理工作提供技术支持，也可为高等学校、科研院所等从事相关专业学习和研究工作的师生、科研人员提供技术参考。

限于时间与作者编著水平，书中不足和疏漏之处在所难免，恳请读者多提宝贵意见。

**编著者**

**2015 年 3 月**

**第 1 章 化学物质生态风险评估方法 ..... 1**

1.1 化学物质危害性识别 ..... 2

1.1.1 理化特性识别指标 ..... 2

1.1.2 生态毒理学识别指标 ..... 10

1.1.3 环境危害性分类 ..... 22

1.2 生态风险剂量—效应评估方法 ..... 22

1.2.1 国外剂量—效应评估方法 ..... 22

1.2.2 我国化学物质剂量—效应评估方法 ..... 30

1.3 生态暴露评估方法 ..... 44

1.3.1 生态释放估算 ..... 46

1.3.2 环境分配与降解 ..... 47

1.3.3 生态暴露效应推算 ..... 54

1.4 生态风险表征 ..... 82

1.4.1 风险表征方法 ..... 82

1.4.2 风险表征分析 ..... 85

1.4.3 风险表征结论 ..... 86

1.5 生态风险不确定性分析 ..... 86

1.5.1 风险不确定性识别 ..... 87

1.5.2 风险不确定性分类 ..... 88

1.5.3 不确定性定性评估 ..... 90

**第 2 章 化学物质健康风险评估方法 ..... 93**

2.1 健康危害性识别 ..... 93

2.1.1 国内外健康危害识别指标分析 ..... 93

2.1.2 推荐健康危害识别指标及分级 ..... 96

2.1.3 化学物质健康危害性分类 ..... 101

2.2 健康风险剂量—效应评估方法 ..... 101

2.2.1 阈值效应剂量—效应评估及 DNEL 推导 ..... 101

2.2.2 非阈值效应剂量—效应评估及 DMEL 推导 ..... 103

2.2.3 剂量—效应评估终点 ..... 104

2.3 健康暴露评估方法 ..... 104

2.3.1 职业健康暴露评估 ..... 104

2.3.2 消费者暴露评估 ..... 107

2.4 健康风险表征 ..... 114

2.4.1 健康风险表征步骤 ..... 114

2.4.2 健康风险表征方法 ..... 114

|                             |            |
|-----------------------------|------------|
| <b>第 3 章 我国环境化学物质风险管理评审</b> | <b>123</b> |
| 3.1 我国化学物质环境风险管理评审需求        | 123        |
| 3.2 我国化学物质环境风险管理评审程序        | 125        |
| 3.3 我国化学物质环境风险管理评审规范        | 125        |
| 3.3.1 资料完整性审查               | 125        |
| 3.3.2 申报数据质量评估              | 126        |
| 3.3.3 风险评估过程中对数据的评估         | 127        |
| 3.3.4 风险评估报告审查              | 132        |
| 3.3.5 环境风险管理措施适当性审查         | 132        |
| 3.3.6 评审结论的确定               | 133        |
| 3.4 我国化学物质环境风险管理评审专家库建设     | 133        |
| 3.4.1 评审专家队伍系统组成            | 133        |
| 3.4.2 评审专家技术专业组成            | 133        |
| 3.4.3 评审专家行业组成              | 133        |
| 3.4.4 评审专家管理类组成             | 133        |
| 3.4.5 评审任务分解                | 134        |
| <b>第 4 章 环境化学物质风险评估应用</b>   | <b>135</b> |
| 4.1 危害识别                    | 135        |
| 4.1.1 物质的理化性质               | 135        |
| 4.1.2 健康毒理学特性               | 135        |
| 4.1.3 生态毒理学特性               | 136        |
| 4.1.4 生态效应——降解与蓄积           | 136        |
| 4.1.5 物质分类                  | 136        |
| 4.2 剂量—效应评估                 | 137        |
| 4.2.1 推算预测无效应浓度             | 137        |
| 4.2.2 主要环境介质 PNEC           | 137        |
| 4.3 环境暴露评估                  | 138        |
| 4.3.1 一般信息                  | 138        |
| 4.3.2 环境释放途径                | 138        |
| 4.3.3 环境归趋与分布               | 139        |
| 4.3.4 暴露场景信息                | 139        |
| 4.3.5 生命周期释放估计              | 141        |
| 4.3.6 暴露估计                  | 141        |
| 4.4 环境风险表征                  | 147        |
| 4.4.1 地表水                   | 147        |
| 4.4.2 沉积物                   | 147        |
| 4.4.3 污水处理厂微生物系统            | 147        |
| 4.5 土壤                      | 148        |
| 4.6 环境风险评估结论                | 148        |



|                                    |            |
|------------------------------------|------------|
| <b>第 5 章 环境物质风险评估试验方法及应用 .....</b> | <b>149</b> |
| 5.1 大型溞繁殖试验方法与应用 .....             | 149        |
| 5.1.1 大型溞繁殖试验方法 .....              | 149        |
| 5.1.2 大型溞繁殖试验应用 .....              | 155        |
| 5.2 大型溞急性活动抑制试验方法与应用 .....         | 158        |
| 5.2.1 大型溞急性活动抑制试验方法 .....          | 158        |
| 5.2.2 大型溞急性活动抑制试验应用 .....          | 162        |
| 5.3 藻类生长抑制试验方法与应用 .....            | 163        |
| 5.3.1 藻类生长抑制试验方法 .....             | 163        |
| 5.3.2 藻类生长抑制试验应用 .....             | 173        |
| 5.4 鱼类急性毒性试验方法与应用 .....            | 178        |
| 5.4.1 鱼类急性毒性试验方法 .....             | 178        |
| 5.4.2 鱼类急性毒性试验应用 .....             | 182        |
| 5.5 蚯蚓急性毒性试验方法与应用 .....            | 183        |
| 5.5.1 蚯蚓急性毒性试验方法 .....             | 183        |
| 5.5.2 蚯蚓急性毒性试验应用 .....             | 186        |
| 5.6 快速生物降解试验方法与应用 .....            | 188        |
| 5.6.1 快速生物降解试验方法 .....             | 188        |
| 5.6.2 快速生物降解试验应用 .....             | 190        |
| <b>参考文献 .....</b>                  | <b>194</b> |

# 第 1 章 化学物质生态风险评估方法

环境中化学物质的生态风险评估一般涵盖化学物质生命周期中涉及的生产、进口、加工、使用、储运和处置等过程中对水体、沉积物、土壤、大气和生物体等环境介质或要素的安全性风险评估。环境化学物质主要指可进入环境生态系统中，有特定分子标识的有机或无机物质。目前我国环境化学品管理实践中分现有化学物质和新化学物质两类，其中已列入《中国现有化学物质名录》为现有化学物质，尚未列入的为新化学物质。化学物质的环境风险评估通常是对确定的化学物质暴露于一定的环境介质或要素中时，分析实际暴露程度或过程与可能产生的暴露结果之间的关系，主要估测或评价可能对自然生态系统或人体健康等要素产生的危害负效应，并对负效应的可能性——风险进行科学定性或定量表征的过程。

国际上较成熟的化学物质生态风险评估技术指南文件主要有：美国环境保护局（EPA）1998 年出版的生态风险评价指南（EPA/630/R-95/002F），欧盟委员会 2003 年出版的风险评估技术指南文件（TGD），2006 年 12 月欧洲议会与欧盟委员会出台了关于化学物质注册、评估与授权的法规（REACH 法规）等。美国 EPA 开展化学物质环境管理法规的工作，主要始于《有毒物质控制法》（TSCA，1976 年），针对环境化学物质的风险评估，于 1992 年发布的《暴露评价技术导则》中详细论述了化学物质进入人体的途径以及如何开展人体暴露评估的详细指导；1998 年发布了针对环境化学物质的生态风险评估技术文件《生态风险评估指南》。

欧盟的化学物质风险管理法规主要在基于《关于协调成员国法律、法规和行政规章有关危险物质分类、包装和标识的理事会指令》（67/548/EEC，1967 年）的基础上，于 1979 年发布的《关于对有关危险物质分类、包装和标签的法律、法规和管理条例的协调和统一指令》（79/831/EEC），规定生产企业要对所产新化学物质的可能或潜在的健康与环境风险影响进行预评估和通报。2003 年出版了现有化学物质与新化学物质风险评估工作的技术指南（TGD，第二版），对如何进行化学物质风险评估给出了详细的技术方法和指导；该指南适用于欧盟成员国以及其他关注于化学物质安全的国家或组织，如经济合作与发展组织（OECD）、联合国国际化学物质安全规划署（IPCS）等机构。2006 年 12 月欧洲议会与欧盟委员会出台了关于化学物质注册、评估与授权的法规（REACH 法规），该法规对与欧洲化学物质管理相关的各个方面都给出了详细的规定，其中化学物质安全评估（CSA）中列出了有关化学物质风险评估的系列参考指导文件。比较分析发达国家如美国和欧盟的化学物质环境风险评估技术文件，显示目前欧盟国家的环境化学物质风险管理工作的实施，更具体地体现在化学物质进入环境生命周期的全过程评估监控，技术指导文件较详细易操作。考虑我国当前有关化学物质的环境风险评估与管理技术基础较薄弱，故推荐以欧盟风险评估技术体系文件为基本参考，同时吸收其他发达国家的经验，建立符合我国国情的环境化学物质的风险评估技术方法。

现阶段，考虑到一方面水环境既是环境中污染物质的主要汇集处，又可能是新污染物的来源处，水环境污染应首先被重视；且国内外在化学物质的生态风险评估领域，无论危害识别还是暴露及效应评估，均在水环境研究方面技术较为成熟。另一方面我国有关环境化学物质的生态风险评估工作刚起步，基础较薄弱，因此推荐化学物质的生态风险评估可学习 OECD 组织等欧、美发达国家的成功经验，目前着重关注化学物质对地表水环境的风险评估，兼顾陆生环境的风险评估。

环境化学物质风险评估基本技术路线如图 1-1 所示。

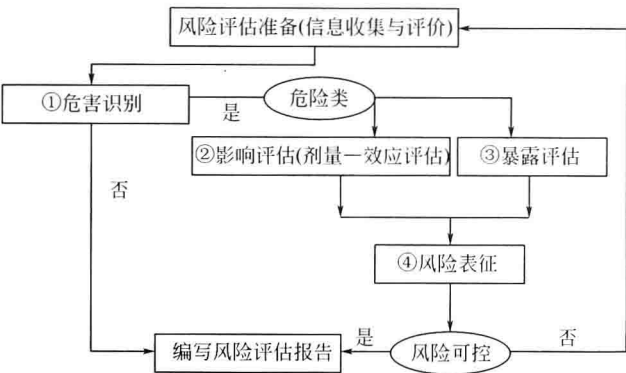


图 1-1 环境化学物质风险评估基本技术路线

## 1.1 化学物质危害性识别

环境风险评估包括危害识别、暴露评估、影响评估（剂量—效应评估）、风险表征的四个阶段，其中危害识别是第一个阶段，也是最基础的一个步骤。化学物质的危害识别即对有一定分子结构的化学物质，由于其固有特性可能产生的不良生态或人体健康负效应的判别。通常针对申报的化学物质，通过可以参考利用的物质固有的物理—化学特性及相关环境毒理学数据，识别出应关注的环境危害性影响。

### 1.1.1 理化特性识别指标

#### 1.1.1.1 国内外理化性质指标

经济合作与发展组织（OECD）《OECD 化学品测试准则》被世界多国采用为开展化学物质测试的指导性文件，经过多次修订、补充，环境中化学物质理化特性的测试准则已由最初的 16 项增加到了目前的 22 项。相关欧盟国家出台的 REACH 法规，包括 19 项化学物质理化特性的测定方法。在此之前，欧盟有关化学物质理化特性测试主要参照《OECD 化学品测试准则》执行。

美国环保局现有的化学物质物理化学性质测试指南是由美国环境保护局的污染防治、杀虫剂和有毒品办公室（OPPTs）提出，主要用于杀虫剂和有毒物质的理化性质的检测，目前共有特性指标 25 项。

我国在化学物质的环境风险特性检测方面，1990 年由国家环境保护局组织相关人员，主要依据 OECD 的《化学品测试准则》及美国 EPA 的相关技术方法文件编著发布了《化学品测试准则》，其中包括 16 项化学物质理化特性的测试方法，该书在我国的环境

境化学品风险评估检测实践中发挥了较好作用。2004（第1版）年及2011年（第2版）国家环境保护部化学品登记中心又编著出版了《化学品测试方法》，对原《化学品测试准则》中的内容进行了一些修订补充，如将16项理化特性测试方法增加到了第1版20项，第2版23项。该书中的方法修补也采用了OECD《化学品测试准则》、国际标准化组织（ISO）及美国环保局等机构的一些新增补的化学物质测试方法。当然，我国修补版的《化学品测试方法》书中也有一些生物学效应测试方法的操作科学性表述可能没有原文表述的准确清晰，有待再版提高。针对化学物质和工业用化学物质的理化性质测试，我国于2008年发布了一系列新国标，包含了密度、蒸汽压、水溶性、辛醇—水分配系数、闪点、粒径、可燃性、爆炸性、自燃性等理化性质。国内外化学物质理化参数选择的差异比较如表1-1所列。

#### 1.1.1.2 主要理化性质参数

化学物质因生产和生活过程中的大量接触和使用而不断进入人类的周围环境，在自然生态环境中，化学物质可能引起对包括人类在内的生态系统中的各类生物体产生有害的负作用效应。这种环境化学物质对生态系统产生的危害效应，主要来源于化学物质在环境各类相关介质及对目标生物的暴露浓度、作用方式、时空过程等因素，在物质作用过程中，很大程度上取决于目标化学物质的物理化学特性，或是反映化学物质理化特性的各种表征参数。通常这些参数可大概表述物质在环境介质中的释放（或排放）、迁移、降解（生物降解和非生物降解）、转化、蓄积（生物体和非生物介质中的积累）等特性。

##### （1）释放

化学物质的物理相状态、相对分子质量、蒸汽压、水/脂溶解度、密度、熔点、沸点、燃点、颗粒物粒度等可用于评估化学物质在环境中释放的程度或可能性。

##### （2）迁移

蒸汽压、水溶解度、吸附/解吸、液/固体挥发性、配合物形成能力、液/固体密度、颗粒物粒度分布、液体黏度及水溶液表面张力等特性可用来估计化学物质排放到环境以后，在空气、水和土壤等环境介质中的迁移分布状况。

##### （3）降解与蓄积

化学物质的辛醇/水分配系数、氧化—还原电位、水中离解常数、积累系数、半衰期、降解速率等参数，可用于估测表征化学物质在环境介质中的蓄积和降解等生态效应指标。

除上述指标外，化学物质的一些理化特性参数如熔点、辛醇—水分配系数等在风险评估中较重要，一般包括熔点、辛醇/水分配系数、水溶解度、土壤/沉积物吸附系数、亨利定律常数（H）、蒸汽压、水解作用、光解作用。

##### （1）熔点

熔点可以指示物质的液态溶解性，也可估计物质在水相中的分布。对于非离子型有机化合物，熔点也能够指示人体通过皮肤吸收、呼吸或采食等途径接触化学物质，产生暴露风险的可能性。

表 1-1 国内外化学物质主要理化性质参数及其申报需求比较

| 序号 | 理化特性    |                                                        | 美国 EPA | 欧盟 | OECD | 中国 |
|----|---------|--------------------------------------------------------|--------|----|------|----|
|    | 中文      | 英文                                                     |        |    |      |    |
| 1  | 颜色      | colour                                                 | ✓      |    |      |    |
| 2  | 物理状态    | physical state                                         | ✓      |    |      |    |
| 3  | 气味      | odor                                                   | ✓      |    |      |    |
| 4  | 热稳定性    | stability to normal and elevated temperatures          | ✓      |    | ✓    | ✓  |
| 5  | 氧化/还原   | oxidation/reduction; chemical incompatibility          | ✓      | ✓  | ✓    |    |
| 6  | 燃烧性     | flammability                                           | ✓      | ✓  |      | ✓  |
| 7  | 爆炸性     | explosibility                                          | ✓      | ✓  |      | ✓  |
| 8  | 储存稳定性   | storage stability                                      | ✓      |    |      |    |
| 9  | 可混溶性    | miscibility                                            | ✓      |    |      |    |
| 10 | 腐蚀特征    | corrosion characteristics                              | ✓      |    |      |    |
| 11 | 击穿电压    | dielectric breakdown voltage                           | ✓      |    | ✓    |    |
| 12 | pH 值    | pH                                                     | ✓      |    | ✓    |    |
| 13 | 紫外/可见吸收 | UV/visible adsorption                                  | ✓      |    | ✓    | ✓  |
| 14 | 黏度      | viscosity                                              | ✓      |    | ✓    | ✓  |
| 15 | 熔点      | melting point/melting range                            | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |
| 16 | 沸点      | boiling point/boiling range                            | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |
| 17 | 密度      | density/relative density/bulk density                  | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |
| 18 | 水中的解离常数 | dissociation constants in water                        | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |
| 19 | 粒径      | particle size, fiber length, and diameter distribution | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |

续表

| 序号               | 理化特性                  |                                                                               | 美国 EPA | 欧盟 | OECD | 中国 |
|------------------|-----------------------|-------------------------------------------------------------------------------|--------|----|------|----|
|                  | 中文                    | 英文                                                                            |        |    |      |    |
| 20               | 分配系数(正辛醇/水,摇瓶法)       | partition coefficient(n-octanol/water), shanke flask method                   | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |
| 21               | 分配系数(正辛醇/水,动力柱法)      | partition coefficient(n-octanol/water), generator column method               | ✓      |    |      |    |
| 22               | 分配系数(正辛醇/水,液相色谱估算法)   | partition coefficient(n-octanol/water), estimation by liquid chromatography   | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |
| 23               | 分配系数(正辛醇/水,慢速搅拌法)     | partition coefficient(n-octanol/water), slow-stirring method                  |        |    | ✓    |    |
| 24               | 水溶性,柱洗提法,摇瓶法          | water solubility: column elution method; shake flask method                   | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |
| 25               | 水溶性,动力柱法              | water solubility: generator column method                                     | ✓      | ✓  |      |    |
| 26               | 蒸汽压                   | vapor pressure                                                                | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |
| 27               | 表面张力                  | surface tension                                                               | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |
| 28               | 自燃温度                  | auto-ignition temperature                                                     | ✓      | ✓  |      | ✓  |
| 29               | 闪点                    | flash-point                                                                   | ✓      | ✓  |      | ✓  |
| 30               | 脂溶性                   | fat solubility                                                                | ✓      |    | ✓    | ✓  |
| 31               | 固体和液体的自燃性             | pyrophoric properties of solids and liquids                                   |        | ✓  |      | ✓  |
| 32               | 聚合物的平均相对分子质量和相对分子质量分布 | number-average molecular weight and molecular weight distribution of polymers |        | ✓  | ✓    | ✓  |
| 33               | 聚合物的低相对分子质量           | low molecular weight content of polymers                                      |        | ✓  | ✓    |    |
| 34               | 聚合物在水中的溶解/析出特性        | solution/extraction behavior of polymers in water                             |        | ✓  | ✓    | ✓  |
| 35               | 土壤和污泥表面的吸附系数          | adsorption coefficient (Koc) on soil and on sewage sludge                     |        | ✓  | ✓    |    |
| 36               | 吸附/解吸                 | adsorption/desorption                                                         | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |
| 37               | 与 pH 值有关的水解作用         | hydrolysis as a function of pH                                                | ✓      | ✓  | ✓    | ✓  |
| 38               | 在水中形成配位化合物的能力         | complex formation ability in water                                            |        |    | ✓    |    |
| 理化特性测试项数         |                       |                                                                               |        |    |      |    |
| 化学物质申报登记理化性质需求项数 |                       |                                                                               |        |    |      |    |
|                  |                       |                                                                               | 31     | 23 | 25   | 23 |
|                  |                       |                                                                               | 19     | 18 | /    | 18 |

## (2) 辛醇/水分配系数

通常生物体（包括各种生物组织、器官、皮肤、细胞及生物大分子等）本身可看成是亲水性和疏水性组分的结合体，而正辛醇/水体系中的正辛醇和水可相对分别代表生物体的疏水相组分和亲水相组分。因此，正辛醇/水分配系数（ $K_{ow}$ ）是代表化学物质产生多种生物活性作用（如毒性、积累、降解、迁移等）的一个重要参数而被应用于环境化学物质的多种生态效应的模式估算。

## (3) 水溶解度

水溶解度（ $S_w$ ）是影响化学物质生物可利用性和环境行为的重要理化性质之一，对化学物质在环境中的迁移、吸附、富集以及毒性都有较大影响。

## (4) 土壤/沉积物吸附系数

一般有机碳—水分配系数（ $K_{oc}$ ）也可称作土壤/沉积物吸附系数，常用来表征化学物质分配吸附或吸着在土壤或沉积物表面的趋势。有机化合物在土壤或沉积物中的吸着行为常存在两种机制：分配作用和吸附作用，通常认为土壤或沉积物对非离子化合物的吸着主要是溶质的分配过程，即非离子有机化合物可通过溶解分配到土壤或沉积物有机质中，经过一定时间达到分配平衡并完成吸附过程。

## (5) 亨利定律常数（H）

亨利定律常数（H）提供了化学物质在水和空气相之间分布的量值，通常通过蒸汽压和水溶解度这两个独立测定的参数来进行估算。

## (6) 蒸汽压

蒸汽压一般可指示某种物质转化成气态的挥发性，可以用来估算环境中化学物质的蒸发速率，因此在化学物质的环境暴露的气态传递评价中具有重要作用。

## (7) 水解作用

水解作用，即化学物质在水中反应发生分解反应，主要可在水中产生原化学物质分子的某些化学官能基团的变化、异构化作用、酸化作用等。水解通常用物质消解速率常数和半衰期（化学物质水解后浓度降低为最初浓度 1/2 所需要的时间）来表示。通常较易与水作用的小官能基团，如卤甲酸基、酰卤基、小分子烷基氧化物、羟卤基、环氧化物、氮氧基等容易发生水解作用。

## (8) 光解作用

直接的光解作用一般是指化学物质在吸收太阳辐射后发生的光化学分解反应，它可以发生在水体或空气中；间接的光解作用是指化学物质吸收太阳光将能量传递给其他物质而发生的光化学反应。通常速率常数和半衰期提供了水体和空气中光化学转化的信息，可以根据吸化学物质收光谱数据来估算该物质直接光解作用的速率，物质在光化学作用中，光能的吸收主要能产生分子内部结构的基团重排、异构化、氧化—还原反应等分子结构变化。

熔点可以提供有机物在水中溶解性的有用信息，而有机物的熔点和水溶解度由该化学物质的分子间力的强度所决定；若固体分子间作用力较强，则熔点可能较高，化合物分子在水中的溶解度较低。因此，一般非离子有机物固体的熔点可以在一定程度上用来指示水溶解度，且非离子固体的水溶解度在很大程度上依赖于水温、熔点以及固体溶化时

产生的摩尔热。一般关注的常是那些在 100℃ 以下熔化的化学物质，因为这些化学物质更易挥发；而在 150℃ 以上才能熔化的固体常具有较高的沸点，因此并不会大量挥发。聚合物和其他一些结构复杂的大分子化合物由于有较高的相对分子质量，通常具有低的挥发性，只是在加热时才分解。有文献报道利用熔点和总分子表面积来准确定量估算多氯联苯类化合物的水溶解度，还有学者通过利用熔点和正辛醇/水分配系数来准确定量估算液体或结晶有机非电解质的水溶解度，有时化学物质的熔点还可以结合其他一些分子的物理化学性质来用定量构效 (QSAR) 模式估算非离子固体物质的水溶解度等 (Yalkowsky 等, 1979)。

一般  $\lg K_{ow}$  值较高的化学物质由于低亲水性，更容易吸附在土壤或沉积物的有机质上；而  $\lg K_{ow}$  值较低的化合物不易吸附在土壤或沉积物上，通常其更易分配进入环境水体中。研究中可以利用  $\lg K_{ow}$  来定量估算土壤/沉积物吸附系数 (Lyman et al., 1982) 和化学物质在废水处理中的定量去除率。由于正辛醇/水分配系数是某种化学物质在正辛醇和水中的摩尔浓度平衡比，因此常用来估算水中溶解度 (Kenaga 等, 1980)。对于非离子有机化合物，通常是  $\lg K_{ow}$  越高，水溶解度越低。

化学物质的沸点能够指示某种物质的挥发性，它可以用来估算蒸汽压，而蒸汽压在环境暴露评估中很重要，若无法获得化学物质蒸汽压的测定数据，那么测得的沸点数据可以用来有效估算物质的蒸汽压值。

水溶解度是水解过程的一个重要限制因子，通常化学物质的水溶性越好，则水解越快；有时低水溶解度的物质，尽管其分子结构中具有可水解取代基团也可能实际水解作用较慢；分子结构较相似的两种化学物质其水解的半衰期可能相差较大，可能与物质的水溶解度有关，也可能依赖于实际环境暴露的 pH 值和温度。有时在缺乏实验数据的情况下，可根据化学物质的分子结构、理化性质，并与已知水解速率的相似物质比较，可进行定量或半定量估算目标化学物质的水解速率 (Mabey and Mill 1978; USEPA 1986)。一般当在相同的温度和其他相同的物理状态下，测定获得某化学物质的蒸汽压和水溶解度时，则可以用蒸汽压和水溶解度的比值来计算亨利定律常数，亨利定律常数是化学物质在气相和水相分配的重要指标。

化学物质的物理化学特征指标参数已在环境风险评估中被广泛应用，实践中当短期内无法获得化学物质的物理化学性质测定值时，可采用一些原本来自同系列物质（一般指具不同官能团或取代基团而母体相似的化合物的实验获得的经验性物质分子构效模式（如定量结构—活性相关 QSAR、定量结构—性质相关 QSPR、结构—活性关系 SAR 等）进行化学物质的理化特性、生物活性（毒性）等估算，一般计算值可作为初筛性快速评估使用。然而，虽然许多不断发展的模型估算方法有良好的预测性，但应注意到任何经验相关性估算模型方法都可能与实际暴露场景或理论过程有一定程度的不确定性误差，因此，科学准确的化学物质的生物—物理化学特性参数的获得不能仅以模式估算来代替实际的测定数值。

#### 1.1.1.3 理化指标筛选

##### (1) 理化指标筛选原则

环境中化学物质的风险评估应依据实际环境暴露特征，针对不同的风险评估目标对象，合理选择理化参数。一般遵循如下的原则。



- ① 用来确定或提供目标化学物质的成分和物质鉴定的支持信息 如颜色、气味、物理状态、熔点、沸点、密度、溶解度、蒸汽压、pH 值等。
- ② 用于鉴别目标化学物质可能对环境中人体健康产生危害的信息 如氧化性、燃烧性、爆炸性。
- ③ 直接用于生态风险评估的参数 在不同生态环境区划范围内，进行暴露评估时必须了解化学物质的物理化学性质，如环境蒸汽压、水中的溶解度、土壤吸附/解吸系数等。
- ④ 生态风险评估中相关试验时必须掌握的目标化学物质理化特征的资料 有时目标化学物质的一些理化参数作为基础性数据，对于生态风险评估中开展一些相关特性的分析是必要的依据，如为测试某化学物质在水中非生物和生物降解时所需的该物质在水中的溶解度数据，物质的正辛醇/水分配系数可作为基础依据来确定是否要进行生态系统中鱼类、哺乳动物及植物的毒理学研究。
- ⑤ 为风险评估中其他试验选择最佳条件提供指导性信息 如通过测定目标化学物质的紫外—可见吸收光谱，可以提供该化学物质易于在自然环境中发生光化学降解的波长范围等参数信息。

(2) 理化性质指标

根据环境化学物质风险评估需求和理化性质筛选原则，推荐识别筛选出适用于当前我国环境风险评估的化学物质理化指标见表 1-2。

表 1-2 理化性质指标识别及测试方法

| 序号 | 危害性指标    | 推荐标准试验方法                                              | 在风险评估中作用                    |
|----|----------|-------------------------------------------------------|-----------------------------|
| 1  | 熔点       | 化学品测试方法 102                                           | 表征水溶性                       |
| 2  | 沸点       | 化学品测试方法 103                                           | 表征挥发性                       |
| 3  | 相对密度     | 化学品测试方法 109<br>GB/T 22230—2008                        |                             |
| 4  | 蒸汽压      | 化学品测试方法 104<br>GB/T 22228—2008<br>GB/T 22229—2008     | 表征挥发性                       |
| 5  | 表面张力     | 化学品测试方法 115                                           | 表征状态                        |
| 6  | 水溶性      | 化学品测试方法 105<br>GB/T 21845—2008<br>GB/T 22227—2008     | 表征生物可吸收性及环境行为，<br>如水解性、吸附性等 |
| 7  | 脂溶性      | 化学品测试方法 116                                           | 表征生物可吸收性                    |
| 8  | pH 值     |                                                       | 表征氧化还原特性                    |
| 9  | 辛醇/水分配系数 | 化学品测试方法 107,117<br>GB/T 21852—2008<br>GB/T 21853—2008 | 表征生物活性，土壤/沉积物吸<br>附性        |
| 10 | 闪点       | GB/T 5208—2008<br>GB/T 21775—2008                     | 表征燃烧性                       |