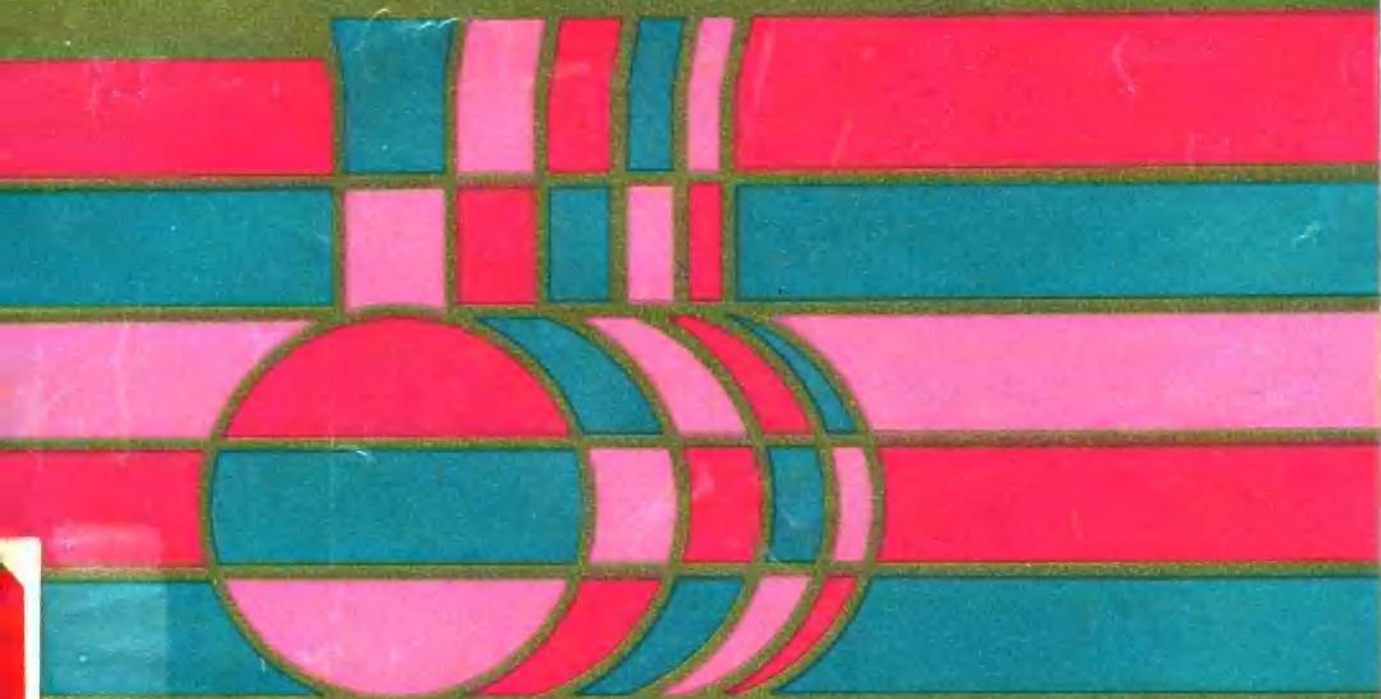


有毒化学品

研究与管理技术

国家环境保护局有毒化学品管理办公室 《上海环境科学》杂志社 编



上海科学普及出版社

51.198

有毒化学品研究与管理技术

国家环境保护局有毒化学品管理办公室 编
《上海环境科学》杂志社

上海科学普及出版社

(沪)新登字第 305 号

有毒化学品研究与管理技术

顾问 (以姓氏笔划为序):
刘培哲 刘静宜 陆福宽

编辑委员会 (以姓氏笔划为序)
王连生 任炳相 李文贞 李维刚
张宝真 罗秉钧 罗桂玲 赵振华
顾咏康 徐晓白 曹洪法 路振山
蔡道基

主编: 罗秉钧
副主编: 王连生 顾咏康
特约编辑: 胡真 任宇征 郝秀兰 任春
责任编辑: 朱先权

有毒化学品研究与管理技术

国家环境保护局有毒化学品管理办公室

《上海环境科学》杂志社

上海科学普及出版社出版

(上海曹杨路 500 号 邮政编码 200063)

新华书店上海发行所发行

上海科学普及出版社电脑照排部排版

上海市印刷七厂一分厂印刷

开本 787×1092 1/16 印张 25.25 字数 614000

1992 年 4 月第 1 版 1992 年 4 月第 1 次印刷

印数 1-3150

ISBN 7-5427-0508-3/TQ·1 定价: 22.00 元

要把控制有毒化学

品的经营摆上日程

世平一题

前 言

随着经济的发展,有毒化学品的生产种类日见其多,数量日见其大,对环境的影响日见其严重。加强对有毒化学品的管理,近些年来,已逐步成为环境保护工作的一项重要内容,并引起有关方面的关注。为推动我国有毒化学品管理工作的发展,提高技术支持水平与学术水平,总结我国在这方面已经取得的成果,中国环境科学学会和国家环境保护局有毒化学品管理办公室,于1990年10月在南京联合召开了第一届全国有毒化学学术研讨会。这次研讨会得到了全国环境部门、科研单位、高等院校和部队院所有关专家、学者的大力支持,共收到论文200多篇。经审核,选择了100多篇为大会交流论文。这些论文,涉及有毒化学品的环境行为、毒性与毒理、分析技术、风险评价技术、筛选与排序、管理法规和数据库,以及事故预测等有毒化学品研究与管理技术的各个方面,并对我国有毒化学品的研究工作,作了回顾与展望,对于我国现阶段的科研方向和管理措施,也提出了许多建设性的意见。

根据专家们的要求,现由国家环境保护局有毒化学品管理办公室和《上海环境科学》杂志社联合编辑,上海科学普及出版社出版会议论文集,定名为《有毒化学品研究与管理技术》。本书围绕为管理服务这一中心,选择了研讨会优秀论文80多篇。其中,有的是有毒化学品的性质、控制技术方面的科研论文,有的是有毒化学品现状的调查报告;有的则是对国外发展状况的综述,还有的是有关管理的政策、法规研究。这些论文,基本反映了我国在有毒化学品研究、管理方面的水平,是领导干部、管理人员、科研和教学人员,以及广大企事业单位环境工作人员的有价值的参考资料。

我们希望本书的出版,能引起社会各界对有毒化学品及其事故管理与处置的重视,进一步推动我国有毒化学品管理工作的开展,提高其技术水平与研究水平。限于时间和水平,本书难免存在不足之处,热诚欢迎广大读者批评、指正。

编 者

1991年9月30日

序

随着生产和科学技术的迅速发展，化学品的种类和数量也在惊人地递增着。一方面，各类化学品以其特有的性质和用途，正广泛地进入生产、经济和生活等各个领域，满足了人类社会的多种需要；另一方面，由于使用不当、管理不善，大量化学品，特别是有毒有害化学物进入环境，随之产生了难以预料的环境污染问题，对自然生态造成危害，对人体健康产生威胁。50年代以来，一些国家相继发生的许多严重公害事件，盖由此而来。据统计，目前进入环境的有毒化学品约有10000种；环境中存在的致癌、致畸各致突变的化学物质，达1000余种。因此，有毒化学品的管理及其事故的预防与处置，正日益引起国际社会的关注。

为加强对有毒化学品的管理，有效地控制化学品的污染，70年代以来，许多国家和国际组织纷纷建立了相应的管理机构，广泛开展有关的科学研究工作，并制定了一系列政策、法规和标准。如美国的《有毒物质控制法》、日本的《关于制造或进口新化学物质的通知书及有关命令》等。联合国环境规划署于1976年建立了“国际潜在有毒化学品登记中心(IRPTC)”，意为建立化学品信息交流的全球网络。国际化学安全规划处(IPCS)，也就化学品的毒理研究、风险评价、事故预测和应急措施等方面，组织了国际范围的技术合作。一些发达国家，从对污染源排放实行优先控制和对水环境实行优先监测的目标出发，提出了优先控制的污染物名单。如美国《清洁水法》中实施管理的129种优先污染物中，有毒有机物占114种；荷兰也公布了43种优先控制的污染物。与此同时，为支持这些法规的实施，许多国家在有毒化学品的测试、风险评价、毒性和毒理、筛选、事故预测和应急措施、信息系统等方面，开展了大量的研究工作，并取得了令人瞩目的成果。

在我国，1979年全国人大常委会通过的《环境保护法》(试行)第二十四条已经规定，“对有毒化学品必须严格登记和管理”。1985年国家科委发布的中国技术政策蓝皮书第8号《环境保护技术政策》中也规定，“研究和开发包装、集运、贮存和销毁有毒有害化学品的新技术、新方法，严格执行有毒有害化学品的登记管理制度”。1989年颁布的《环境保护法》第三十三条，再次重申“生产、储存、运输、销售、使用有毒化学品，……必须遵守国家有关规定，防止污染环境”。但我国是个发展中国家，工业的生产和管理都比较落后。而化学工业又是一个举足轻重的行业，化学品的产量和品种都相当多，且由于缺乏健全的管理制度和必要的技术措施，在生产、运输、贮存、销售、使用等各个环节上，都还存在不少问题。此外，到目前为止，我国还没有一个关于对有毒化学品进行全面管理的法规，因此，尚不可能实施有效的登记管理制度。同时，随着对外贸易的发展，进口化学品的种类和数量不断增加，特别是一些国外已禁用、限用、停销或安全性有争议的化学品，也未受到严格的限制而进入我国，以致造成向我国转移污染的局面。凡此种种，均表明，现在，我国亟需开展对有毒化学品生产、使用等的调查研究，制定对策，统一规划，加强管理。

目前，我们首先要加强法规建设。广泛收集、分析国外有关化学品管理的法规资料，吸取成功经验，尽快制定适合我国国情的化学品危险性评价程序和化学品管理登记制度，制定并实施我国的化学品管理法规。其次，研究、开发有毒化学品数据库，加强信息交流。充分利用全国各系统已建的数据库资料，同时，加强同IRPTC和IPCS的业务联系。第三，建立优先控制有毒化学品名单，进一步确定重点管理对象，制定相应的管理对

策和采取必要的控制手段。第四，加强为管理服务的科研工作，如开展复合化学品暴露效应的研究、化学品在生物体内的代谢转化行为的研究、提高分析测试水平的研究等，使我国在这一领域的科学研究，与实际需要及世界发展趋势相适应。

王扬祖

1991年9月20日

目 录

第一章 概 论

- 我国有毒化学品环境管理的探讨..... 罗秉钧 (1)
- 有毒化学品研究新趋势..... 王连生 (5)
- 有毒有机化合物环境转归和潜在毒性研究动态 徐晓白 (10)
- 有毒有机污染物环境风险性评价研究 戴树桂 游道新 鲍明亮 (14)
- 生态风险评价 (ERA)
- 环境风险评价中的新领域 沈英娃 曹洪法 (20)
- 对我国化学品安全性毒理学评价研究的展望 徐厚恩 (24)
- WHO 在 1990~1995 年期间有关潜在有毒化学品健康危险性
- 评价工作规划和我们的任务 李 铨 (26)
- 关于开展有毒化学品环境风险评价的探讨..... 吴俊民 王国平 佟世芳 (32)
- 多氯二苯并二噁啉和多氯二苯并呋喃的研究状况 金 南 (36)

第二章 环 境 行 为

- 污灌土壤中有有机污染物的行为及其毒性研究
- 杨桂芬 张丽珊 齐恩山 孙铁珩 (42)
- 稀土元素对生态环境的影响和归趋研究
- 稀土元素在鱼体中的生物富集作用
- 王晓蓉 涂 强 田笠卿 戴乐美 (48)
- 植物对土壤中多氯联苯的吸收及其分布..... 赵明亮 孟亚黎 (54)
- 灭幼脲Ⅲ号杀虫剂环境毒理行为研究
- 莫汉宏 杨克武 施国涵 安凤春 周振惠等 (60)
- 五氯酚在土壤中微生物降解的研究 刘宇兰 罗清修 宋冬林 (67)
- 芳烃混合物的溶解规律研究 汪小江 吴顺年 王连生 (70)
- 实验室人工组合水生微宇宙对铜的毒性反应 金洪钧 孙丽伟 杨 戎 (75)
- 涕灭威农药在水—土壤系统中环境行为的研究
- 莫汉宏 马瑞霞 施国涵 云兆青 安凤春等 (80)
- 农药在环境中降解及其潜在毒性 施国涵 (85)
- 农药杀虫双的光解和挥发研究..... 孔令仁 洪 晖 徐瑞薇 金 伟 (91)
- 杀虫双农药在土壤中行为的研究..... 徐瑞薇 胡钦红等 (97)
- ³⁵S-杀虫双在模拟水生生态系统中的生物吸收和消失
- 陈祖义 米春云 成 冰 (103)
- 苯硫基乙酸酯的水解及其线性自由能相关
- 余 刚 王连生 韩朔睽 张 正 (106)
- 苯、乙基苯和 1, 2, 3-三氯代苯的分配系数研究
- 金相灿 Steve Boyd (113)
- 甲基异柳磷等四种农药在土壤中的吸附特性
- 单正军 张爱云 朱忠林 蔡道基 (119)

甲基异柳磷等四种农药在环境中的化学行为研究

- 江希流 华晓梅 金 怡 蔡道基 (125)
拟菊酯类杀虫剂的光敏降解研究 岳永德 花日茂 (131)
活性污泥中微生物降解有毒有机物三丁基锡 田世忠 Y.K.Chau; D.Liu (138)

第三章 毒性与毒理研究

预测和鉴定致癌物的序贯试验方案及其应用

- 周宗灿 方积乾 王纪宪 傅娟龄 徐厚恩 (143)

- 农药安全评价程序及其毒理学试验的基本要求..... 王淑洁 (151)

- 有机毒物的鉴定 钟玉征 陈传钿 (154)

- 常用剧毒药品的性状及其危害..... 杨国璋 (158)

微生物降解除草剂氯磺隆、甲磺隆和丁草胺的毒性效应

- 马文漪 温晓艳 刘 方 陈俭霖 (160)

- 22种有毒有害化学物质的毒性和急救 陈丽惠 (164)

- 酞酸酯的潜在危害..... 赵振华 (169)

- 胼对大型水蚤的毒性..... 何世华 俞天骥 夏亚东 (173)

黑索金的亚急性毒性及其对中枢神经系统的毒理作用

- 赵淑杰 沈松筠 孙天佑 (176)

- SOS/Umu 原位法检测蚊香烟气的致遗传毒性 浦跃朴 张徐军 尹立红 (181)

- 钒的毒性及其环境卫生标准..... 孙棉龄 (186)

- 咪喃丹的环境毒理学研究 王 达 黄为群 徐 赫 王衡文 (191)

10种合成洗衣粉诱发华西大蟾蜍蝌蚪红细胞微核的研究

- 贺维顺 王蕊芳 张春芳 陈军建 (199)

- 凤眼莲对水体镉的吸收累积规律及镉的毒性作用 吴为中 丘昌强 (203)

第四章 分析技术

同位素稀释色谱质谱 (IDGC/MS) 法测定环境介质中的

- 重点有机污染物..... 黄达锋 (207)

- 多维气相色谱分析 TCDDs 和 PCBs 贾崇荣 邱月明 俞惟乐 (212)

- 分光光度法测定皮革、塑胶手套中微量五氯酚 陈敏芳 李永波 (218)

多次相平衡/液上色谱法的理论与实验

- 水中挥发物及其分配常数的测定 王永华 (220)

东湖及其自来水中非挥发性有机污染物的 GC-MS

- 鉴定和致突变性的研究..... 黄志丹 田世忠 邓南圣 张甲耀 赵丕虹等 (226)

- 苯并 (a) 芘标准物质的研究..... 孙 辰 孟明宝 韩永岐 全 浩 (231)

- 水中胼和甲基胼测定方法及其稳定性研究 冯翠玲 郑集声 (236)

气相色谱法测定水中亚微克/升级氯乙烯单体

- (VCM) 的方法研究..... 韩洪军 刘灿生 (241)

- 高效液相色谱法测定水中酞酸二正丁酯..... 范元中 吴增彦 孔福生 (245)

- 反相-高效液相色谱法测定蔬菜中灭幼脲 3 号的残留量 周振惠 徐正茵 (248)

- 脲类除草剂分配系数的测定 朱忠林 蔡道基 (252)

- 生物样品中甲基毒死蜱的气相色谱测定法..... 李 龙 宋瑞琨 贾永平 (257)

第五章 风 险 评 价

| | |
|------------------------------------|----------------------------|
| 试论化学品的接触评价 | 李哲 路振山 (260) |
| 化学品的免疫毒性检测方法及安全评价..... | 薛彬 (265) |
| 杀虫脒致癌的危险度评定..... | 薛寿征 汪敏 李枫等 (271) |
| 化学农药对环境安全性评价..... | 蔡道基 (275) |
| 一甲基胍安全性评价..... | 张宝真 俞天骥 夏亚东等 (280) |
| 克草胺对环境有益生物的安全评价..... | 陈锐 龚瑞忠 王珊玲等 (285) |
| LAS 对水生生物危险性评价的研究 | 周永欣 夏宜琤 谭渝云 孙美娟 邓家齐 (294) |
| 用环境归宿模型评价硝基苯排放到天然水体的环境风险性 | 戴树桂 鲍明亮 胡国臣 游道新 李晓昕 (298) |
| 二乙烯三胺在地面水中最高容许浓度的研究 | 夏亚东 郭绪益 闻思真 姚青光 李秀英等 (304) |
| 二噁啉类有机毒物对我国环境的潜在风险..... | 蒋可 (308) |
| 海洋生态毒理试验在有毒化学品登记、管理中的应用 | 周名江 吴玉霖 (312) |

第六章 筛选与排序

| | |
|---------------------------|-----------------------|
| 优先控制的有毒化学品筛选程序的研究 | 王维国 李新中 (318) |
| 我国潜在有毒化学品数据收集与筛选 | 杨友明 王家贞 郑辉 任宇征 (324) |
| 用模糊混合聚类法对重金属元素潜在毒性排序..... | 张维新 冯旅平 刘岗昕 (328) |
| 水中优先控制污染物黑名单及其特征..... | 傅德黔 孙宗光 周文敏 (337) |
| 长沙市优控有毒(害)化学品的筛选 | 秦梅玲 金至清 石碧澄 徐东慧 (341) |

第七章 管理及数据库

| | |
|---|---------------------------|
| 关于有毒化学品管理数据库..... | 翟军 (345) |
| 有毒化学品进口环境管理办法初探..... | 罗桂玲 罗秉钧 路振山 (349) |
| 化学毒物数据库(CTDB)系统..... | 钟明鼎 薛际深 滕美玲 李维刚 陈冀胜 (352) |
| 有毒化学品的环境污染控制对策探讨 | 孙淑均 陶甄 (354) |
| 重金属有毒化合物污染水环境的防治对策..... | 侯喜福 (357) |
| 试论制定有毒化学品管理法规的基本原则..... | 巫朗江 (360) |
| 潜在有毒化学品优先控制与行动报警系统总体方案研究 ——系统构成与数据需求 | 罗桂玲 (363) |
| 试论我国控制有毒化学品污染的可行对策..... | 王秀英 马景殷 杜春英 (367) |

第八章 事故风险及对策

| | |
|--------------------------------|---------------|
| 有毒化学品环境事故及开展应急监测的技术基础 | 胡望钧 方路乡 (370) |
| 化学突发事件的风险评估与预测..... | 胡德福 (374) |
| 有毒化学品事故预测与对策..... | 李维刚 (378) |
| 有毒化学品事故潜在危险区的确定 | 季成富 任炳相 (382) |
| 有毒化学品突发事故及其对策 | 何启泰 陈传钊 (387) |
| 有毒化学品事故对人类健康与环境的危害及应采取的对策..... | 徐丽娟 (391) |

第一章 概 论

我国有毒化学品环境管理的探讨

罗秉钧

(中国环境科学研究院)

一、有毒化学品污染已成为当今全球关注的环境问题之一

随着经济的发展和科学技术的进步,化学品的产量和品种都与日俱增。目前,化学品已约有一千万种,并且每年还有数千种新化学品进入市场。据1985年统计,仅有机化学品全世界年产量已达2.5亿吨。与1930年相比,增加了近250倍。化学品的增加,有力地促进了工农业的发展和人类生活水平的提高。但由于可观的生产量和使用量,加上使用不当、管理不善,使大量有毒有害化学品进入环境,又给人类带来了难以预料的公害问题。据有人测算,进入环境的有毒化学品约一万种;在环境中存在致癌、致畸和致突变的化学物质有上千种。世界卫生组织曾估计,大约60~90%的癌症,是由环境中的化学因素造成的。化学因素造成的污染及其影响,远比物理的污染和生物污染严重。尤其是近些年来,连续发生了多起震惊全球的突发性事故,给生态环境和居民健康带来了灾难性后果,更引起了国际社会对化学品安全问题的关注。

面对化学品污染的挑战,自70年代起,世界上许多国家及国际组织,都建立了相应的管理机构,制定了有关的法规和标准,明确了对有毒化学品污染实施有效控制的方针和政策。为了支持法规的实施,许多国家,尤其是发达国家,在化学品物化性质测定、毒理试验、风险评价、优先名单筛选、信息系统建立,事故预测和制定应急措施等诸方面,开展了大量工作。

化学品国际贸易额的急剧增长,使其对环境的污染,跨国越界。如何提高各国控制化学品公害的能力,并加强政府间的合作,已成为国际间共同关心的议题。交换化学品情报,已被公认是绝对必要的。1976年,联合国环境规划署(UNEP)建立了国际潜在有毒化学品登记中心(IRPTC)。十多年来,该中心为建立环境中化学品信息交流的全球网络和开展咨询服务做了大量工作。由联合国环境规划署、世界卫生组织和国际劳工组织联合组建的国际化学安全规划处(IPCS)是专门从事化学品工作的又一个国际性组织。该规划处建立后,就化学品的毒理研究、风险评价、事故预防及应急措施等多方面组织了国际间的合作,把世界化学品安全工作推进了一步。

总之,控制有毒化学品的污染,已是全球性的重大环境问题之一。有毒化学品管理的合作,也势在必行。

二、对有毒化学品实施环境管理也是我国的当务之急

我国是发展中的国家。与发达国家相比，工业生产虽有一定的差距，但化学品也约有四万种。其近年来产值占全国工业总产值的5%~8%。产品主要集中于化工部门，医药、冶金、轻工、石油等工业部门也生产相当数量的化学品。而近年来有较大发展的乡镇企业，也生产许多计划外的化学品。

面对如此大量的化学品的生产和使用，由于缺乏健全的管理法规和相应的管理技术手段，在生产、使用、运输、贮存等各个环节上，存在着极大的盲目性。尤其是农村中的土法生产，诸如土法炼汞，土法生产硫磺等，实际上是以资源的浪费、环境的污染、身体健康的损害，来达到致富的目的。面对供水水源严重污染，食品中有毒化学物质残留量超标，大面积农田绝收等情况，目前，却无法查清和追究实际上由有毒化学品所引起的这种环境危害和当事人的责任。

此外，进口化学品的品种和数量也在不断增加。我国进口十大类化学品的总金额，1987年就达到53亿美元。但是，除了对进口医药、农药、兽药建立了登记审批和试验制度外，对于其它化学品的进口，至今尚未建立包括考虑到环境污染因素在内的全面审批制度。加上进口权限下放，进口渠道增多，外汇来源甚广，致使某些易于污染环境而又难以治理的，甚至在出口国已禁用、限用或安全性有争议的化学品，未加严格限制地销入我国，使污染因素更加复杂。

可以预计，随着国民经济的发展，化学品的生产量、进口量必将有大幅度的增长；品种也将显著增加。因此，在我国，加强有毒化学品的管理已是当务之急。

三、登记管理是防止有毒化学品危害的重要措施

为了有效地控制有毒化学品的污染，防止其对人体的危害，借鉴国内、外已有的经验，对有毒化学品实行登记管理，是一项重要的措施。所谓“登记”，不是简单的“备案”或“通报”，而是指申请——评审——批准的全过程。通过这个过程，使化学品的管理部门对新化学品或首次进口的化学品的性质，有较全面的了解；对投放市场的化学品的数量与品种，有所掌握和控制；对经评审的化学品存在的潜在危险，作出评价；从而可以做出禁用、限用、进一步试验等控制决策，避免和减少对环境的污染。

下图是我国有毒化学品登记管理程序的研究方案示意。这个方案主要包括了以下四方面内容：

(一) 实行重点管理：对成千上万种有毒化学品，不可能一一加以管理，必须根据有毒化学品本身的物化性质、卫生毒理学试验数据、环境毒理学试验数据及人群接触水平等参数，建立起我国筛选系统，并以此筛选出优先管理化学品名单，经专家评审、政府批准，予以颁布。针对这个名单实行重点管理。优先管理化学品名单的筛选，则是以化学品调查与登记工作为基础。

(二) 实行登记制度：在新化学品投放市场前和国外化学品进口前，要求生产者或经营者必须向环保部门提出登记申请，同时提供进行风险评价的可靠资料，以便专家进行评审。登记、评审是必须履行的强制性措施。

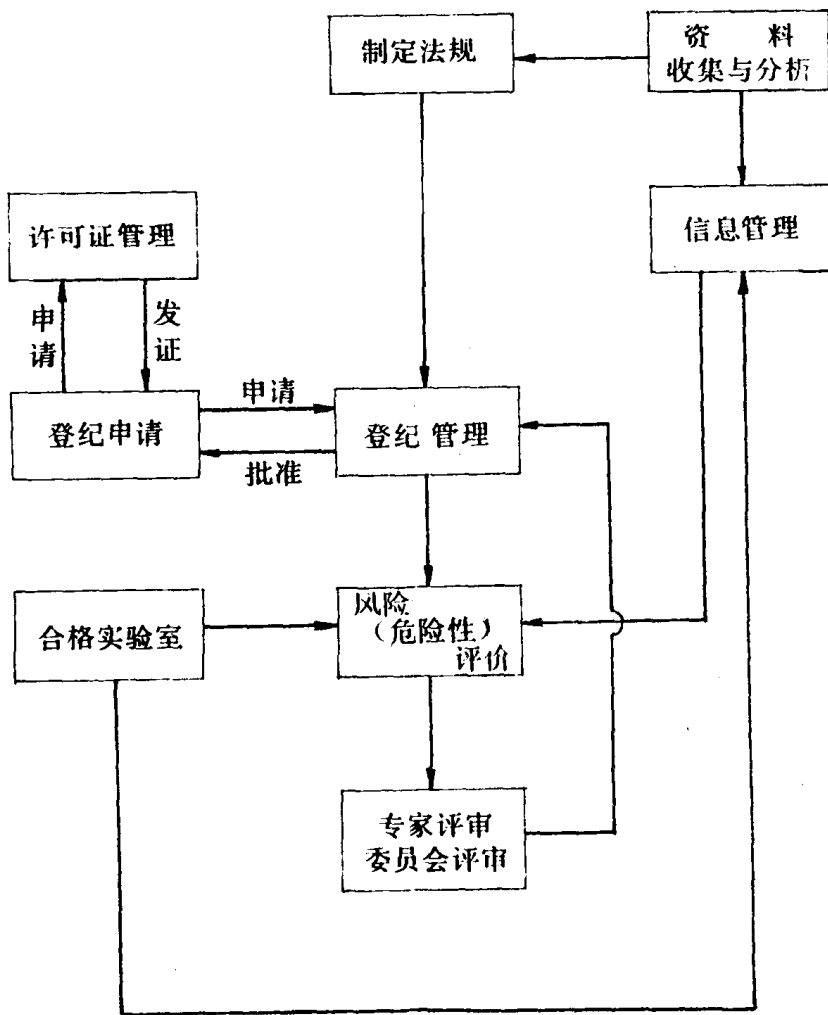


图1 有毒化学品登记管理程序方案

(三) 建立风险评价制度：这是对有毒化学品实施有效管理的技术保证。

(四) 实行许可证制度：除对新化学品和首次进口化学品投放市场前，在风险评价的基础上发放许可证外，对有毒化学品的生产、贮运、销售、使用以至废弃等各个环节，都应建立许可证制度。唯此，才能切实有效地对有毒化学品实行全过程控制。

四、必须重视法规建设

法规是实施管理的基础和依据。据了解，到目前为止，已有五十多个国家制定了化学品管理法规。明确了本国政府对有毒化学品实施管理的方针和政策。如美国的《有毒物质控制法》、日本的《关于制造或进口新化学物质的通知及有关命令》、德国的《化学品法》等。我们在着手制定单项的管理法规的同时，应当考虑到全面的管理法规的制定。这涉及化学品生产、贮运等方方面面，是一项艰巨、复杂的工作。因为就国产有毒化学品而言，要采取全面的控制，不仅要涉及到投入市场以后的各个环节，而且涉及到生产本身，影响到产品方向及企业的经济利益，关系到企业的“关、停、并、转”，关系到经济发展和

产业结构。这既有方针政策问题，又有社会实际问题，需要广泛的调查研究和多部门的协调。如能根据实际需要与可能，从单项法规入手，成熟一项，制定一项，试行一项；并在试行一段时间后，再予以修改、补充；最终形成一部化学品管理法。这将是实际而有效的方法。总之，抓紧法规建设，是有毒化学品管理工作的首要任务。

五、建立风险评价体系是执行法规的保证

对化学品的风险评价（危险性评价），是化学品管理的最重要的技术支持工作。其任务是，确定一种化学品通过生产（或进口）、贮运、使用乃至废弃而进入环境的过程中或进入环境后，对生态环境和人体健康所具有的潜在危险性，为管理决策提供科学依据。为了全面评价化学品，就要掌握评价所需的基础资料。在进行评审过程中或评审后，可能还要求申请者提供补充资料。为了获得、补充或验证进行风险评价所需的试验数据，就必须建立规范化的试验方法及具有合格条件的实验室。因此，还必须制定和完善化学品测试准则；研究和制定化学品风险评价程序；制定合格实验室技术标准及考核办法等。这里，既有制定法规标准的内容，又有大量的实验技术工作。所以，我们既要吸取国外的经验，考虑到国际上的共同性，又要从我国具体国情出发，做到切实可行。

众所周知，进行化学品的环境毒理学研究或卫生毒理学研究，都耗资较高。因此，加强信息交流，充分利用国内、外已有的数据，十分必要。目前，环保、卫生、化工、部队以及中科院系统，都建成了多个有毒化学品数据库。充分开发和使用这些数据库，对加速我国有毒化学品的风险评价，有着重要的意义。

六、加强宣传教育和技术培训

对于剧毒化学品，由于其急性毒理效应，早已引起人们的注意。但是对于潜在有毒化学品的危险性，还远未被广大群众所重视。因此，在化学品管理的起步阶段，通过电视、广播、报刊等媒介，加强科普宣传，提高全民尤其是各部门有关领导者的化学品管理意识和公众参与意识，十分重要，需要长期努力。与此同时，借助国际、国内的多方力量，就有毒化学品管理法规、有毒化学品风险管理、有毒化学品风险评价技术等举办多种类型的培训班、研讨班，加强对各级管理人员、技术人员的培训，加强学术交流，以提高有毒化学品管理的技术支持水平，保证有毒化学品管理的各项法规得以顺利实施，使我国的有毒化学品污染得以有效的控制。

有毒化学品研究新趋势

王连生

(南京大学环境科学系)

一、资料来源—数据库

有毒化学品每年都有成千上万的化合物出现,而且刊登在上万种杂志上。如何收集这些数据,从而避免不必要的重复试验,是一件非常有意义的工作。近年来,由于计算机的使用,利用数据库存储是一大发展,使有毒化学品评价开辟了一个新的里程碑。美国现有两个商业数据库,即系统开发公司(SDC)和洛克赫德信息系统(LIS)。它们都是由化学、生物、环境科学、能源、商业和社会科学中的数据库提供信息的。这是一种既快又简便的方法。只要输进一种特殊的编码,就可调拨所需的数据。表1提供了有关SDC和LIS商业数据库的介绍。由于数据库的应用,使化学品危险性评价展现了全新的面貌。不仅避免了大量不必要的重复劳动,也为国际间合作以及对数据进行综合概括提供了方便。

数据库用于化学品评价是近几年的事。不少问题尚处于探索阶段。对数据库的类型、结构及其在化学品评价中的应用等问题,都有待进一步的研究。

表1 SDC和LIS商业数据库介绍

| 名称 | 负责单位 | 课题范围 | 体系 |
|----------------|---------------|-----------|---------|
| AGRICOLA | 美国国家农业图书馆 | 农业 | SDC/LIS |
| APILIT | 美国石油研究所 | 石油冶炼 | SDC |
| APIPAT | 美国石油研究所 | 石油冶炼专刊 | SDC |
| APTIC | 环境保护局 | 大气污染 | LIS |
| BIOSIS | 生物科学信息服务部 | 生命科学 | SDC/LIS |
| CAS77/CAS727 | 化学文摘服务部 | 化学 | SDC/LIS |
| CIN | 化学文摘服务部 | 化学工业 | SDC/LIS |
| CHEMDEX | 化学文摘服务部 | 化学名称 | SDC/LIS |
| CLAIMS/CHEM | IFI/Plenum 数据 | 化学专刊 | LIS |
| COMPINDEX | 工程索引 | 工程 | SDC/LIS |
| ENVIROLINE | 环境信息中心公司 | 环境研究 | SDC/LIS |
| NTIS | 国家技术信息服务部 | 政府负责的研究领域 | SDC/LIS |
| POLLUTION | 剑桥科学摘要公司 | 污染物 | SDC/LIS |
| SAFETY SCIENCE | 剑桥科学摘要公司 | 卫生与防护 | SDC |
| ABSTRACTS | | | |
| SSIE | 英国科学家信息交换 | 当代科学研究 | SDC/LIS |

二、理化参数估算及测定方法研究

已知有机物理化参数有 50 余种。常见的有 26 种。正辛醇-水分配系数 (K_{ow})、水溶解度 (S_w)、生物富集因子 (BCF) 等参数, 是评价有机污染物对环境危害的重要因素。获得这些参数的主要方法是实验。因此, 研究这些理化参数的准确、灵敏的测定方法, 将具有非常重要的意义; 但由于实验条件的限制, 往往很难获得这些参数的准确数值, 所以, 通过化学结构和理化参数的相关, 来定量地估算其数值, 是目前该课题的研究前沿。表 2 列出了 26 种有机物理化参数, 图 1 列举了估算分配系数的有关途径。

表 2 26 种有机物理化参数 (* 为常见参数)

| | 参 数 | | 参 数 |
|------|----------------|-----|-------------|
| 1. | 正辛醇/水分配系数* | 14. | 蒸气压* |
| 2. | 在水中的溶解度* | 15. | 从水中挥发* |
| 3. | 在不同溶剂中的溶解度 | 16. | 从土壤中挥发* |
| 4. | 土壤/沉积物吸附系数* | 17. | 在大气和水中的解离系数 |
| 5. | 有机物在水生物中的富集系数* | 18. | 闪点 |
| 6. | 酸度常数* | 19. | 气、液、固密度 |
| 7. | 水解速率* | 20. | 表面张力* |
| 8. | 生物降解速率* | 21. | 与水的介面张力 |
| 9. | 光解速率* | 22. | 液体粘度 |
| 10. | 在大气中滞留时间* | 23. | 热容 |
| 11. | 活度系数* | 24. | 热导 |
| 12. | 沸点 | 25. | 偶极矩 |
| 813. | 蒸发热 | 26. | 折射指数 |

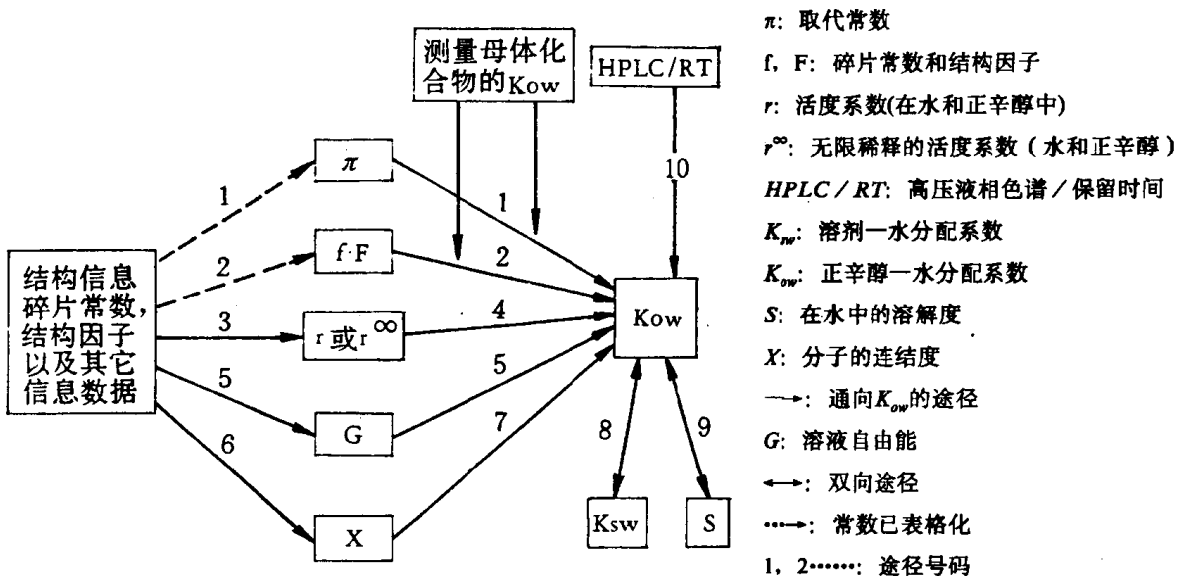


图 1 估算 K_{ow} 的方法

三、结构—活性相关

在化学品结构与活性的研究中，目前主要有两方面的方法，一是以分子式为基础，根据实验方法测得的参数与相应理化性质建立定量关系式，该法的缺点是，所用的参数大多是用实验测定的，手续麻烦，且由于分子本身的复杂性和周围环境的影响，使计算值与实验值存在一定的误差；另一是用量子力学的方法，对分子进行精确计算，以了解分子的全部信息，这是了解分子活性本质的好方法，但该方法计算繁琐复杂，并非具有普通基础的人所能掌握，而薛定谔方程的近似计算又会失去许多信息，使该法应用受到一定限制，因此，迄今此法尚未获得重大进展。

分子连接性方法是由 Kier 等人根据拓扑理论，在 Randic 的分子分枝拓扑基础上提出和发展起来的一种新方法。该方法能根据分子结构式的直观概念，对分子结构作定量描述，使分子间的结构差异实现定量化。

根据分子拓扑，就能把理化性质或生物活性的加和性和构成性，以分子连接性函数的方式译制出来。利用这种函数式，一方面可预测一些分子的未知性质，另一方面可根据需要，设计具有一定性质或活性的分子。前者在化学或环境科学研究领域中可用来评价和预测化合物的反应性和污染物的生态毒性，后者则在药物设计或合成方面具有指导作用。分子连接性方法由于具有方便、简单，所用指数并非依赖实验等优点，以及用分子连接性函数预测的某些理化性质其误差接近于实验误差，因此，在创建后的十多年时间里，已在多种研究领域中得到广泛的应用。大量的研究成果，也反过来进一步验证了分子连接性方法的应用价值和预测能力；作为一种新方法，得到了发展和完善。

四、复合化学品暴露效应的研究

尽管对环境中化学品的研究和控制都偏重于单个化合物，但人们在实际生活中是遭受复合化学品的暴露。大多数商业化学产品和几乎所有的污染物，都是复杂的混合物。考虑到混合物中单个组成之间对人体作用程度的差别，有必要建立预测混合物暴露的方法，以便对控制污染物的决策提供依据。为方便起见，把需要进行的研究分为两类：（1）环境中有毒化学品相互作用的研究；（2）环境中的化合物与其它媒介物，如食品和药物之间相互作用的研究。

有毒化学品能产生独自的、加和的、协同的或保护的作用。在某些情况下，复合化学品的毒性作用，不仅在程度上，而且在类型上都不同于这些化合物单独作用的总和。当然，在很多情况下，都是通过对单个化合物作用机理的研究，来预测复合化学品的作用的。因此，所得结果，将不尽符合于实际情况。

现在，人们已得到相当多的化学毒物的动物实验材料。有的研究可放大到人，以解释人体暴露于有毒化学品所产生的不同敏感性的原因。

今后的研究，不仅要着重于了解导致化学品相互作用的生物转化，还要着重了解化学品的吸收、分布及其它过程。

五、化学品在生物体内的代谢转化

在将结构—活性研究应用于生物学过程中，必须知道对生物影响起作用的是什么化