

DOI: 10.7524/j.issn.0254-6108.2019021501

周伟, 张跃恒, 高丹, 等. 503 种储运过程常见化学品的安全管控浓度的计算——基于化学品对藻类的环境风险评价[J]. 环境化学, 2020, 39(1): 207-219.

ZHOU Wei, ZHANG Yueheng, GAO Dan, et al. Calculation of safety-controlled concentration of 503 common chemicals in storage and transportation process: Based on the environmental risk assessment of algae by chemicals[J]. Environmental Chemistry, 2020, 39(1): 207-219.

503 种储运过程常见化学品的安全管控浓度的计算 ——基于化学品对藻类的环境风险评价*

周 伟¹ 张跃恒² 高 丹² 林志芬^{2**} 印春生^{1**}

(1. 上海海洋大学海洋生态与环境学院, 上海, 201306;

2. 污染控制与资源化研究国家重点实验室, 同济大学环境科学与工程学院, 上海, 200092)

摘 要 化学品在提高人们生活水平的同时会对生态环境, 对化学品进行环境风险评价可有效地避免这一不利影响. 本文通过对商值法进行逆向推导的方法, 根据化学品对藻类的急性毒性 EC_{50} , 通过相关公式计算出了两个评价指标, 即慢性无可见有害作用水平 NOAEL 和预测无效应浓度 PNEC, 最终推导出 503 种化学品的安全管控浓度 $C_{控}$. 系列化学品的 $C_{控}$ 不仅能够直接为企业提供可参照的化学品环境暴露管控标准, 还能为企业的化学品科学管理工作提供数据支撑和决策支持.

关键词 商值法, 慢性 NOAEL, PNEC, 安全管控浓度 $C_{控}$.

Calculation of safety-controlled concentration of 503 common chemicals in storage and transportation process: Based on the environmental risk assessment of algae by chemicals

ZHOU Wei¹ ZHANG Yueheng² GAO Dan² LIN Zhifen^{2**} YIN Chunsheng^{1**}

(1. College of Marine Science, Shanghai Ocean University, Shanghai, 201306, China;

2. State Key Laboratory of Pollution Control and Resource Reuse, College of Environmental Science and Engineering, Tongji University, Shanghai, 200092, China)

Abstract: Chemicals can promote people's living quality but also do harm to ecological environment simultaneously. However, the adverse impacts produced could be monitored by means of environmental risk assessment. In this paper, we determined the safety control concentrations ($C_{control}$) of 503 compounds by calculating no observed adverse effect level (NOAEL) and predicted no-effect concentration (PNEC) from EC_{50} in acute toxicity test, according to the reverse derivation of the risk quotients method (RQ). $C_{control}$ can not only provide enterprises with the available

2019 年 2 月 15 日收稿 (Received: February 15, 2019).

* 同济大学污染控制与资源化研究国家重点实验室自主研究 (重点) 项目 (PCRRK16007), 国家自然科学基金 (21377096, 21577105, 21777123), 上海市科学技术委员会科研计划课题 (17DZ1200103, 14DZ2261100) 和环境化学与生态毒理学国家重点实验室开放基金课题 (KF2016-11) 资助.

Supported by the State Key Laboratory of Pollution Control and Resource Reuse Foundation (PCRRK16007), the National Natural Science Foundation of China (21377096, 21577105, 21777123), the 111 Project, Science & Technology Commission of Shanghai Municipality (17DZ1200103, 14DZ2261100) and State Key Laboratory of Environmental Chemistry and Ecotoxicology (KF2016-11).

* ** 通讯联系人, E-mail: lzhifen@tongji.edu.cn; Tel: 021-61900333, E-mail: csyin@shou.edu.cn

Corresponding author, E-mail: lzhifen@tongji.edu.cn; Tel: 021-61900333, E-mail: csyin@shou.edu.cn

environmental control standards but also provides support to scientific management on chemicals in enterprises.

Keywords: risk quotient, chronic NOAEL, PNEC, safety control concentration C_{control} .

化学品在生产、运输、储存和使用的过程中,不合理的使用和低效监管可能会造成化学品安全事故的发生,从而使生态环境受到威胁.如 1984 年印度帕博尔农药厂爆炸事故和 1986 年切尔诺贝利核电站泄漏事件^[1].因此,为了规避上述不利影响,及时鉴别化学品可能存在的环境生态风险.化学品对环境最大无危害的安全管控浓度的提出将非常重要.

目前较为世界各国认可的化学品环境风险评价方法是美国科学院提出的“危害鉴别—剂量-效应关系评价—暴露评价—风险特征分析”四步法^[2-3].其中,风险特征分析是研究的重点,它是在前期研究的基础上,估算污染物对人体(或其它生物体)造成毒性危害的程度与概率.风险特征分析法主要有商值法(risk quotients, RQ)、概率风险评价法和统计分析法等,其中商值法(risk quotients, RQ)是环境风险特征分析所使用的主流方法^[4-5].商值法又称比率法,它是指环境中实际检测的或由模型估算出的污染物的浓度与表征该物质的安全控制浓度的比值^[3,6].然而在实际应用中,该方法仅为化学品的管理提供环境风险评价指标,并没有办法直接为企业安全生产提供可参考的化学品环境管控浓度.所以本研究提出一种直接计算各个化学品环境管控浓度的方法,可以使企业在生产过程中及时获取相关化学品是否已经对环境造成了危险,以便做出迅速和有效地化学品管控调整措施.

本研究以工业中经常使用的系列化学品为研究对象,选用在水生生态系统中处于第一营养级,与其它水生生物密切相关,在维持水生生态系统的平衡和稳定方面发挥着重要作用,并对环境毒物较敏感的典型藻类为模型生物.以藻类的急性毒性数据 EC_{50} 作为环境风险评价的初级指标.并由慢性无可见有害作用水平(no-observed adverse effect level, NOAEL)和预测无效应浓度(predicted no-effect concentration, PNEC)推算出各个化学品的安全管控浓度 $C_{\text{控}}$.本文的研究可以为企业化学品在生产、运输、储存和使用过程中科学管理和决策提供直接数据支撑.

1 材料和方法(Materials and methods)

1.1 化学品和受试生物

所研究的化学品 503 种,为上海港城危险品物流有限公司所提供.所选用的模式生物藻类主要分为蓝藻、绿藻和硅藻三大类,涵盖原核生物和真核生物两类.分别为绿藻门(Chlorophyta)的栅藻(*Scenedesmus Meyen*)、小球藻(*Chlorella vulgaris*)、羊角月牙藻(*Selenastrum capricornutum*),蓝藻门(Cyanophyta)的螺旋鱼腥藻(*Anabaena sporoides*)、铜绿微囊藻(*Microcystis aeruginosa*),硅藻门(Bacillariophyta)的中肋骨条藻(*Skeletonema costatum*),具体信息见表 1.

1.2 慢性无可见有害作用水平(NOAEL)的推导方法

慢性无可见有害作用水平(NOAEL)是指受试生物不受受试样品毒害作用的最大染毒剂量或浓度.一般在规定的实验条件下直接获得,或在少数情况下根据急性毒性实验数据(如 EC_{50}),通过评价系数法外推获得.在本研究中,慢性 NOAEL 值采用系数外推法,以典型藻类最小的急性毒性数据 EC_{50} 除以一定的转换因子(conversion factor, CF)取得.其中,化学品对藻类的急性毒性结果(EC_{50})来源于美国生态毒理学数据库(Ecotoxicology Knowledgebase, ECOTOX, <http://cfpub.epa.gov/ecotox/>)和由软件 EPIWEB4.1 计算获得,NOAEL 计算公式如式(1)所示.

$$NOAEL = \frac{EC_{50}}{CF} \quad (1)$$

式中,NOAEL 为慢性无可见有害作用水平, EC_{50} 为系列化学品对藻类的急性毒性数据,CF 为转换因子.CF 的取值是根据 Kramer 等^[7]的研究得出的,他们在从化学品的急性毒性 EC_{50} 推算慢性 NOAEL 时,提出了 CF 的值应取 1.70×10^4 .随后通过分析 244 组相关数据,证明了 CF 取该值能够更准确地从急性毒性 EC_{50} 值推算出慢性 NOAEL 的值.因此本文将 CF 值确定为 1.70×10^4 .

表 1 503 种化学品对藻类的毒性数据
Table 1 Toxicity data of 503 chemicals to algae

序号 No.	名称 Name	CAS	栅藻 ^a <i>Scenedesmus meyen</i> EC ₅₀ / (mg·L ⁻¹)	小球藻 ^a <i>Chlorella vulgaris</i> EC ₅₀ / (mg·L ⁻¹)	丰角月牙藻 ^a <i>Selenastrum capricornutum</i> EC ₅₀ / (mg·L ⁻¹)	螺旋鱼腥藻 ^a <i>Anabaena sporoidea</i> EC ₅₀ / (mg·L ⁻¹)	铜绿微囊藻 ^a <i>Microcystis aeruginosa</i> EC ₅₀ / (mg·L ⁻¹)	中肋骨条藻 ^a <i>Skeletonema costatum</i> EC ₅₀ / (mg·L ⁻¹)	绿藻 ^b <i>Chlorophyta</i> EC ₅₀ / (mg·L ⁻¹)	NOAEL/ (mg·L ⁻¹)	PNEC/ (mg·L ⁻¹)	C _{crit} / (mg·L ⁻¹)
1	氨[液化的,含氨>50%]	7664-41-7		1.60×10 ⁻⁷					99.55	9.41×10 ⁻¹²	9.41×10 ⁻¹⁴	9.41×10 ⁻¹⁴
2	氯化锌	7646-85-7	9.00×10 ⁻²	7.10	5.20×10 ⁻²		4.00×10 ⁻⁴			2.35×10 ⁻⁸	2.35×10 ⁻¹⁰	2.35×10 ⁻¹⁰
3	辛烷异构体	111-65-9						1.00×10 ⁻³	1.07	5.88×10 ⁻⁸	5.88×10 ⁻¹⁰	5.88×10 ⁻¹⁰
4	锌粉	7740-66-6	5.00×10 ²	19.52	23.59		0.29	1.00×10 ⁻³		5.88×10 ⁻⁸	5.88×10 ⁻¹⁰	5.88×10 ⁻¹⁰
5	α-萘烯	7785-20-4	5.00×10 ²	3.42	2.75×10 ²		20.23	1.00×10 ⁻³		5.88×10 ⁻⁸	5.88×10 ⁻¹⁰	5.88×10 ⁻¹⁰
6	3-氯丙烯	107-5-1		19.52	2.75×10 ²	6.20	0.29	1.00×10 ⁻³		5.88×10 ⁻⁸	5.88×10 ⁻¹⁰	5.88×10 ⁻¹⁰
7	丙酮	67-64-1		7.00×10 ⁻²	7.20×10 ³					4.12×10 ⁻⁷	4.12×10 ⁻⁹	4.12×10 ⁻⁹
8	氯化铜	10125-13-0						1.00×10 ⁻²		5.88×10 ⁻⁷	5.88×10 ⁻⁹	5.88×10 ⁻⁹
9	硝酸铅	10099-74-8		2.15		15.00		1.10×10 ⁻²		6.47×10 ⁻⁷	6.47×10 ⁻⁹	6.47×10 ⁻⁹
438	硝酸胍	506-93-4							1.85×10 ⁷	1.09×10 ³	10.90	10.90

注:^a数据来源于美国生态毒理学数据库(Ecotoxicology Knowledge base, ECOTOX),^b数据来源于软件EPIWEB 4.1 计算。
Note:^a data were obtained from American ecotoxicology Knowledgebase, ^b data comes from calculation of software EPIWEB 4.1.

表 2 503 种化学品的安全管控浓度 $C_{\text{控}}$ 汇总
Table 2 Summary of the safety control concentration C_{control} for 503 chemicals

序号 No.	1	2	3	4	5	6	7	8	9					
名称 Name	氨[液化的, 含氨>50%]	氯化锌	辛烷异构体	锌粉	α-萘烯	3-氯丙烯	丙酮	氯化铜	硝酸铅					
CAS	7664-41-7	7646-85-7	111-65-9	7740-66-6	7785-20-4	107-5-1	67-64-1	10125-13-0	10099-74-8					
C _控 /(mg·L ⁻¹)	9.41×10 ⁻¹⁴	2.35×10 ⁻¹⁰	5.88×10 ⁻¹⁰	5.88×10 ⁻¹⁰	5.88×10 ⁻¹⁰	5.88×10 ⁻¹⁰	4.12×10 ⁻⁹	5.88×10 ⁻⁹	6.47×10 ⁻⁹					
序号 No.	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21		
名称 Name	百草枯水剂 [含量 4%—40%]	2-丙醇	乙醇[无水]	含乙醇饮料 [按体积比乙醇≥24%, 每一容器盛装>5 L的]	甲醇	丙烯酸[抑制了的]	艾氏剂可湿性粉剂[含量 7%—75%]	正戊烷	氯酸钠溶液	硝酸铬	五甲基庚烷	镍催化剂		
CAS	1910-42-5	67-63-0	64-17-5	64-17-5	67-56-1	107-02-8	309-00-2	7681-52-9	7681-52-9	13548-38-4	62199-62-6	7440-02-0		
C _控 /(mg·L ⁻¹)	6.47×10 ⁻⁹	6.47×10 ⁻⁹	7.65×10 ⁻⁹	7.65×10 ⁻⁹	1.47×10 ⁻⁸	2.12×10 ⁻⁸	3.82×10 ⁻⁸	5.59×10 ⁻⁸	5.59×10 ⁻⁸	6.18×10 ⁻⁸	6.53×10 ⁻⁸	6.65×10 ⁻⁸		
序号 No.	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35
名称 Name	镍催化剂	四聚丙烯	四氯乙烯	氯乙酸钠	六氯环戊二烯	次氯酸钙混悬液或水合物 [含水量 5.5%—10%]	己烷及其异构体	二硫化二甲苯	迭氮(化)钠	甲氧菊酯乳剂	高锰酸钾	蒺藜油烯	双戊烯	过氧化氢[含量 8%—20%]
CAS	7440-02-01	6842-15-5	127-18-4	3926-62-3	77-47-4	7778-54-3	110-54-3	624-92-0	26628-22-8	39515-41-8	7722-64-7	586-62-9	138-86-3	7722-84-1
C _控 /(mg·L ⁻¹)	7.35×10 ⁻⁸	8.06×10 ⁻⁸	1.18×10 ⁻⁷	1.35×10 ⁻⁷	1.41×10 ⁻⁷	1.53×10 ⁻⁷	1.76×10 ⁻⁷	1.88×10 ⁻⁷	2.05×10 ⁻⁷	2.21×10 ⁻⁷	2.65×10 ⁻⁷	2.84×10 ⁻⁷	3.07×10 ⁻⁷	3.29×10 ⁻⁷
序号 No.	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49
名称 Name	二氯异氰尿酸	过氧化氢 [20%≤含量≤60%]	过氧化氢 [含量>60%, 特许的]	1,2,3-三氯(代)苯	三唑酮	异佛尔酮二异氰酸酯	二氯甲烷	磷酸三甲苯酯	三(正)丁胺	亚氯酸钠	亚氯酸钠溶液 [含有效氯>5%]	2,4,4-三甲基-1-戊烯	二环己胺	2-氨基丙烷
CAS	2893-78-9	7722-84-1	7722-84-1	87-61-6	43121-43-3	4098-71-9	75-09-2	1330-78-5	102-82-9	7758-19-2	7758-19-2	25167-70-8	101-83-7	75-31-0
C _控 /(mg·L ⁻¹)	4.29×10 ⁻⁷	4.76×10 ⁻⁷	4.76×10 ⁻⁷	5.29×10 ⁻⁷	5.35×10 ⁻⁷	5.66×10 ⁻⁷	5.76×10 ⁻⁷	5.88×10 ⁻⁷	7.53×10 ⁻⁷	7.76×10 ⁻⁷	7.76×10 ⁻⁷	8.35×10 ⁻⁷	8.52×10 ⁻⁷	8.82×10 ⁻⁷
序号 No.	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63
名称 Name	松节油	1,2-二乙基苯	庚烷异构体	1,2-二氯苯	五氧化二砷 [非熔融的]	1,3-环辛二烯	4-氯苯胺	汽油[闪点<18℃]	过硫酸钾	亚硒酸盐类	溴甲烷	2,4-二氯-3,5-二甲苯基苯酚	4-氯苯酚	乙基苯
CAS	8006-64-2	135-01-3	142-82-5	95-50-1	1314-62-1	3806-59-5	106-47-8	8006-61-9	7727-21-1	10102-18-8	74-83-9	133-53-9	106-48-9	100-41-4
C _控 /(mg·L ⁻¹)	9.18×10 ⁻⁷	1.01×10 ⁻⁶	1.20×10 ⁻⁶	1.29×10 ⁻⁶	1.31×10 ⁻⁶	1.41×10 ⁻⁶	1.41×10 ⁻⁶	1.41×10 ⁻⁶	1.69×10 ⁻⁶	1.71×10 ⁻⁶	1.88×10 ⁻⁶	1.90×10 ⁻⁶	1.92×10 ⁻⁶	2.12×10 ⁻⁶

续表2

序号 No.	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77
名称 Name	三 亚 乙 基 四酸	甲 苯-2, 4-二 异氟酸酯	2-苯基丙烯	甲醛溶液	1-己烯	二甲 苯 异 构 体混合物	4-氯苯基氯	氯 甲 酸-2-乙 基己酯	氟代苯	2-氯硝基苯	萘	溴 苯	石油气[液化 的]	二聚环戊二烯
CAS	112-24-3	584-84-9	98-83-9	50-00-0	592-41-6	95-47-6	104-83-6	24468-13-1	462-06-6	88-73-3	91-20-3	108-86-1	68476-85-7	77-73-6
C _控 /(mg·L ⁻¹)	2.18×10 ⁻⁶	2.22×10 ⁻⁶	2.42×10 ⁻⁶	2.50×10 ⁻⁶	2.74×10 ⁻⁶	2.76v	3.32×10 ⁻⁶	3.60×10 ⁻⁶	3.93×10 ⁻⁶	4.06×10 ⁻⁶	4.07×10 ⁻⁶	4.12×10 ⁻⁶	4.14×10 ⁻⁶	4.22×10 ⁻⁶
序号 No.	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91
名称 Name	汽油	天然气[含甲 烷的; 压 缩 的]	1, 3-丁 二 烯 [抑制了的]	异 氟 酸 环 己酯	己 醇 丙 戊 醇	氟	六 亚 甲 基 二 异氟酸酯	二甲胺溶液	2, 4-二 硝 基 (苯) 醇[含 水 ≥15%]	3-氯苯胺	丙 氟 磷	2, 4-二 氨 基 甲 苯	四甲基硅烷	草牙平
CAS	8006-61-9	74-82-8	126-99-8	3173-53-3	39196-18-4	7782-39-0	822-06-0	124-40-3	51-28-5	108-42-9	55-91-4	95-80-7	75-76-3	50-31-7
C _控 /(mg·L ⁻¹)	4.66×10 ⁻⁶	4.69×10 ⁻⁶	4.75×10 ⁻⁶	4.75×10 ⁻⁶	4.76×10 ⁻⁶	4.87×10 ⁻⁶	5.11×10 ⁻⁶	5.29×10 ⁻⁶	5.41×10 ⁻⁶	5.58×10 ⁻⁶	5.59×10 ⁻⁶	5.61×10 ⁻⁶	5.74×10 ⁻⁶	5.88×10 ⁻⁶
序号 No.	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105
名称 Name	2-庚酮	樟脑油	六氟乙烷	三正丙胺	2-氯 甲 苯; 3- 氯 甲 苯; 4-氯 甲 苯	四氢噻吩	三氯甲苯	1-戊硫醇	2, 2, 4-三氯苯 乙 醇	2-氟甲苯	二氯化苄	正丁醛	氯化苄	正丁烷
CAS	76-22-2	21368-68-3	76-16-4	102-69-2	95-49-8	110-01-0	98-08-8	110-66-7	4252-78-2	95-52-3	98-87-3	123-72-8	100-44-7	106-97-8
C _控 /(mg·L ⁻¹)	5.89×10 ⁻⁶	5.89×10 ⁻⁶	5.96×10 ⁻⁶	6.09×10 ⁻⁶	6.26×10 ⁻⁶	6.33×10 ⁻⁶	6.51E-06	6.54×10 ⁻⁶	6.57×10 ⁻⁶	6.91×10 ⁻⁶	6.96×10 ⁻⁶	7.03×10 ⁻⁶	7.29×10 ⁻⁶	7.30×10 ⁻⁶
序号 No.	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	119
名称 Name	甲基苯	丙 基 三 氯 硅烷	苯(基)硫醇	丙醛	松油	2-苊醇	异丁烷	乙基己醛	1-氯-2-甲-基- 2-丙烯	甲基丙烯酸 正丁酯[抑制 了的]	乙 酸 乙 基 丁 酯	2-庚酮	异氟酸苯酯	1-溴丁烷
CAS	108-88-3	141-57-1	108-98-5	123-38-6	8002-09-3	507-70-0	75-28-5	123-05-7	563-47-3	97-88-1	10031-87-5	110-43-0	103-71-9	109-65-9
C _控 /(mg·L ⁻¹)	7.35×10 ⁻⁶	7.50×10 ⁻⁶	7.55×10 ⁻⁶	7.60×10 ⁻⁶	8.11×10 ⁻⁶	8.11×10 ⁻⁶	8.20×10 ⁻⁶	8.49×10 ⁻⁶	8.62×10 ⁻⁶	8.82×10 ⁻⁶	8.85×10 ⁻⁶	8.90×10 ⁻⁶	9.46×10 ⁻⁶	9.95×10 ⁻⁶
序号 No.	120	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130	131	132	133
名称 Name	三 甲 基 氯 硅烷	丙烯酸甲酯 [抑制了的]	特乐酚乳剂 [含量>50%]	二(正)丁胺	2-甲 基 四 氢 呋 喃	2, 3-二氯丙烯	二乙胺	二异丙胺	环己胺	二 异 丁 基 (甲) 醇	丙 烷	二硫化碳	甲 基 异 丙 基 苯	N, N-二 甲 苯 胺
CAS	75-77-4	96-33-3	1420-07-1	111-92-2	96-47-9	78-88-6	109-89-7	108-18-9	108-91-8	108-83-8	74-98-6	75-15-0	99-87-6	121-69-7
C _控 /(mg·L ⁻¹)	1.03×10 ⁻⁵	1.09×10 ⁻⁵	1.09×10 ⁻⁵	1.12×10 ⁻⁵	1.13×10 ⁻⁵	1.15×10 ⁻⁵	1.18×10 ⁻⁵	1.18×10 ⁻⁵	1.18×10 ⁻⁵	1.18×10 ⁻⁵	1.21×10 ⁻⁵	1.24×10 ⁻⁵	1.2×10 ⁻⁵	1.29×10 ⁻⁵
序号 No.	134	135	136	137	138	139	140	141	142	143	144	145	146	147
名称 Name	2-丁基硫醇	糠醛	丙烯	1, 3, 5-三 甲 基 苯	正庚醛	乙酸正戊酯	N, N-二 甲 基 环己胺	异 氟 酸 叔 丁 酯	异硫 氟 酸 叔 丙酯[抑制了 的]	吗 琳	氯 苯	二 甲 基 二 氯 硅 烷	乙 烯 [压 缩 的]	乙 烯 [液化的]
CAS	513-53-1	98-01-1	115-07-1	108-67-8	111-71-7	628-63-7	98-94-2	1609-86-5	1957-6-7	110-91-8	108-90-7	75-78-5	74-85-1	74-85-1
C _控 /(mg·L ⁻¹)	1.39×10 ⁻⁵	1.41×10 ⁻⁵	1.44×10 ⁻⁵	1.47×10 ⁻⁵	1.47×10 ⁻⁵	1.55×10 ⁻⁵	1.59×10 ⁻⁵	1.60×10 ⁻⁵	1.61×10 ⁻⁵	1.65×10 ⁻⁵	1.78×10 ⁻⁵	1.79×10 ⁻⁵	1.85×10 ⁻⁵	1.85×10 ⁻⁵

续表2

序号 No.	148	149	150	151	152	153	154	155	156	157	158	159	160	161
名称 Name	二氟氯乙烷	丙烯酸正丁酯[抑制了的]	苯乙烯[抑制了的]	1,2-二氯丙烷	三氧化(二)砷	1,2-二氯乙烯	二甲基砷酸钠	二甲基砷二乙基砷代砷酰氯	2-溴丙烷	1-氯丁烷	活性炭	氯乙烯[抑制了的]	3-溴-1-丙烯	丙二腈
CAS	75-68-3	141-32-2	100-42-5	78-87-5	1327-53-3	540-59-0	124-65-2	2524-4-1	75-26-3	109-69-3	7440-44-0	1975-1-4	106-95-6	109-77-3
C ₆₀ /(ng·L ⁻¹)	1.89×10 ⁻⁵	1.90×10 ⁻⁵	1.94×10 ⁻⁵	2.02×10 ⁻⁵	2.04×10 ⁻⁵	2.04×10 ⁻⁵	2.10×10 ⁻⁵	2.12×10 ⁻⁵	2.20×10 ⁻⁵	2.21×10 ⁻⁵	2.31×10 ⁻⁵	2.33×10 ⁻⁵	2.39×10 ⁻⁵	2.42×10 ⁻⁵
序号 No.	162	163	164	165	166	167	168	169	170	171	172	173	174	175
名称 Name	氯三氟乙烷	异丙醚	六氟丙烷	氯乙烷	N-甲基苯胺	2, 3-二甲(基)苯胺	1, 1, 1-三氟乙烷	4-二甲氨基吡啶	异丁基乙烯(基)醚[抑制了的]	苯酚	三氯化磷	正己醛	二(正)丙胺	碳酸(二)乙酯
CAS	75-88-7	108-20-3	116-15-4	75-00-3	100-61-8	87-59-2	420-46-2	1122-58-3	109-53-5	108-95-2	7719/12/2	66-25-1	142-84-7	105-58-8
C ₆₀ /(ng·L ⁻¹)	2.45×10 ⁻⁵	2.51×10 ⁻⁵	2.52×10 ⁻⁵	2.59×10 ⁻⁵	2.59×10 ⁻⁵	2.59×10 ⁻⁵	2.60×10 ⁻⁵	2.69×10 ⁻⁵	2.72×10 ⁻⁵	2.74×10 ⁻⁵	2.76×10 ⁻⁵	2.82×10 ⁻⁵	2.88×10 ⁻⁵	2.91×10 ⁻⁵
序号 No.	176	177	178	179	180	181	182	183	184	185	186	187	188	189
名称 Name	苯酚溶液	2-氯-4硝基苯胺; 4-氯-2-硝基苯胺	甲基三氯硅烷	乙酸正丁酯	正丁酸乙酯	3-三氟甲基苯胺	1-甲基戊醇	异丁烯酸乙酯[抑制了的]	2-乙烯基吡啶	丁烯二酸酐[顺式]	硫化钠[含结晶水≥30%]	咪唑	5-甲基-2-己酮	异佛尔酮二胺
CAS	108-95-2	121-87-9	75-79-6	123-86-4	105-54-4	98-16-8	626-93-7	97-63-2	100-69-6	108-31-6	7757-83-7	110-00-9	110-12-3	2855-13-2
C ₆₀ /(ng·L ⁻¹)	2.92×10 ⁻⁵	2.93×10 ⁻⁵	3.02×10 ⁻⁵	3.0×10 ⁻⁵	3.03×10 ⁻⁵	3.09×10 ⁻⁵	3.11×10 ⁻⁵	3.39×10 ⁻⁵	3.43×10 ⁻⁵	3.68×10 ⁻⁵	3.71×10 ⁻⁵	3.84×10 ⁻⁵	4.04×10 ⁻⁵	4.07×10 ⁻⁵
序号 No.	190	191	192	193	194	195	196	197	198	199	200	201	202	203
名称 Name	乙醇	苯基二甲胺	三氟氯乙烯[抑制了的]	二烯(基)胺	丙八氟环丁烷	乙硫甲威颗粒剂	唑啉	1,1-二氯乙烯	氯甲烷	甲基叔丁基醚	三乙胺	硼氢化钠	硼氢化钾	氮[压缩的]
CAS	1975/8/1	103-83-3	79-38-9	124-02-7	115-25-3	29973-13-5	91-22-5	75-38-7	74-87-3	1634-04-4	121-44-8	16940-66-2	13762-51-1	7727-37-9
C ₆₀ /(ng·L ⁻¹)	4.08×10 ⁻⁵	4.14×10 ⁻⁵	4.15×10 ⁻⁵	4.27×10 ⁻⁵	4.30×10 ⁻⁵	4.33×10 ⁻⁵	4.35×10 ⁻⁵	4.39×10 ⁻⁵	4.43×10 ⁻⁵	4.47×10 ⁻⁵	4.50×10 ⁻⁵	4.76×10 ⁻⁵	4.76×10 ⁻⁵	4.77×10 ⁻⁵
序号 No.	204	205	206	207	208	209	210	211	212	213	214	215	216	217
名称 Name	氮[液化的]	氮甲烷	四氯化硅	1-戊醇	正癸烷	六氟化硫	正戊醛	2-甲基吡啶	1,1-二氯乙烷	4-甲基-3-戊烯-2-酮	碘甲烷	2-氯吡啶	氮[压缩的]	氮[液化的]
CAS	7727-37-9	593-53-3	10026-04-7	71-41-0	124-18-5	2551-62-4	110-62-3	109-06-8	75-37-6	141-79-7	74-88-4	109-09-1	7782-44-7	7782-44-7
C ₆₀ /(ng·L ⁻¹)	4.77×10 ⁻⁵	4.92×10 ⁻⁵	5.01×10 ⁻⁵	5.22×10 ⁻⁵	5.24×10 ⁻⁵	5.30×10 ⁻⁵	5.31×10 ⁻⁵	5.35×10 ⁻⁵	5.39×10 ⁻⁵	5.49×10 ⁻⁵	5.57×10 ⁻⁵	5.59×10 ⁻⁵	5.62×10 ⁻⁵	5.62×10 ⁻⁵
序号 No.	218	219	220	221	222	223	224	225	226	227	228	229	230	231
名称 Name	N, N', N'-二甲基乙二胺	二氧化硅[压缩的]	二氧化硅和环氧乙烷混合物[含环氧乙烷>6%]	乙烷正丙酯	丙酸乙酯	乙炔[溶于介质的]	1,2-乙二胺	2-甲(苯)酚	2, 2-二氯乙醚	哌啶	亚磷酸	三氯化硼乙醚络合物	三氯硅烷	四氯甲烷
CAS	150-77-6	124-38-9	124-38-9	109-60-4	105-37-3	74-86-2	107-15-3	95-48-7	111-44-4	110-89-4	13598-36-2	109-63-7	10025-78-2	75-73-0
C ₆₀ /(ng·L ⁻¹)	5.68×10 ⁻⁵	5.81×10 ⁻⁵	5.81×10 ⁻⁵	5.83×10 ⁻⁵	5.83×10 ⁻⁵	5.85×10 ⁻⁵	5.88×10 ⁻⁵	5.88×10 ⁻⁵	5.92×10 ⁻⁵	6.35×10 ⁻⁵	6.45×10 ⁻⁵	6.47×10 ⁻⁵	6.55×10 ⁻⁵	6.55×10 ⁻⁵

续表2

序号 No.	232	233	234	235	236	237	238	239	240	241	242	243	244	245
名称 Name	乙酸异丙酯	氟化钾	氟化氢钠	四氯化硅	乙醚	氟化氢(无水)	丙烯酸乙酯[抑制了的]	丙烯酸乙酯[抑制了的]	甲硫醚	2-氟苯胺	原甲酸(三)乙酯	一氧化碳	氯化氢[无水]	盐酸
CAS	108-21-4	7789-23-3	1333-83-1	7803-62-5	60-29-7	7664-39-3	7664-39-3	140-88-5	75-18-3	348-54-9	122-51-0	630-08-0	7647-01-0	7647-01-0
C ₉₅ /(ng·L ⁻¹)	6.56×10 ⁻⁵	6.56×10 ⁻⁵	6.56×10 ⁻⁵	6.84×10 ⁻⁵	6.90×10 ⁻⁵	6.91×10 ⁻⁵	6.91×10 ⁻⁵	7.11×10 ⁻⁵	7.11×10 ⁻⁵	7.20×10 ⁻⁵	7.32×10 ⁻⁵	7.32×10 ⁻⁵	7.43×10 ⁻⁵	7.43×10 ⁻⁵
序号 No.	246	247	248	249	250	251	252	253	254	255	256	257	258	259
名称 Name	丙腈	异素威[含量>20%]	异素威[含量>20%]	3-异氰酸酯基丙基三乙氧基硅烷等	氯酸钠	二氯硅烷	四氢呋喃	甲苯基酸	环己酮	硝化纤维素[含氮≤12.6%,含醇≥25%]	N,N-二甲基丙胺	1,1-二乙氧基乙烷	1,2-环氧丁烷[抑制了的]	氯[液化的]
CAS	107-12-0	119-38-0	119-38-0	24801-88-5	7775-99-9	4109-96-0	109-99-9	1319-77-3	108-94-1	9004-70-0	926-63-6	105-57-7	106-88-7	7782-50-5
C ₉₅ /(ng·L ⁻¹)	7.51×10 ⁻⁵	7.53×10 ⁻⁵	7.53×10 ⁻⁵	7.68×10 ⁻⁵	7.82×10 ⁻⁵	8.00×10 ⁻⁵	8.02×10 ⁻⁵	8.06×10 ⁻⁵	8.08×10 ⁻⁵	8.12×10 ⁻⁵	8.48×10 ⁻⁵	8.58×10 ⁻⁵	9.02×10 ⁻⁵	9.07×10 ⁻⁵
序号 No.	260	261	262	263	264	265	266	267	268	269	270	271	272	273
名称 Name	三氯化硼	苯甲醚	正丁胺	4-氯-2-氨基(苯)酚	抗菌剂401	氯甲酸(正)丙酯	氯二甲甲烷	1,3-苯二酚	2-甲基烯丙醇	氯化钠	异丁酸	吡啶	异丁醛	三氯乙醛[无水的,抑制了的]
CAS	10294-34-5	100-66-3	109-73-9	95-85-2	682-91-7	109-61-5	75-45-6	108-46-3	513-42-8	7681-49-4	78-81-9	110-86-1	78-84-2	75-87-6
C ₉₅ /(ng·L ⁻¹)	9.14×10 ⁻⁵	9.53×10 ⁻⁵	9.58×10 ⁻⁵	9.85×10 ⁻⁵	9.99×10 ⁻⁵	1.02×10 ⁻⁴	1.03×10 ⁻⁴	1.05×10 ⁻⁴	1.06×10 ⁻⁴	1.06×10 ⁻⁴	1.08×10 ⁻⁴	1.09×10 ⁻⁴	1.09×10 ⁻⁴	1.10×10 ⁻⁴
序号 No.	274	275	276	277	278	279	280	281	282	283	284	285	286	287
名称 Name	2-甲基-2-丙醇	2-氯丙酸甲酯	氯甲酸异丙酯	硫磺	硫酸氢钠[含水≥25%]	氢碘酸	戊酰氯	硫酸(二)乙酯	氯甲酸烯丙(基)酯[含有稳定剂]	3-戊酮	2-戊酮	砷化氢	一氧化氮	氟[压缩的]
CAS	75-65-0	17639-93-9	108-23-6	7704-34-9	16721-80-5	10034-85-2	638-29-9	64-67-5	2937-50-0	96-22-0	107-87-9	7784-42-1	10102-43-9	7782-41-4
C ₉₅ /(ng·L ⁻¹)	1.15×10 ⁻⁴	1.15×10 ⁻⁴	1.15×10 ⁻⁴	1.17×10 ⁻⁴	1.17×10 ⁻⁴	1.19×10 ⁻⁴	1.21×10 ⁻⁴	1.24×10 ⁻⁴	1.25×10 ⁻⁴	1.30×10 ⁻⁴	1.30×10 ⁻⁴	1.31×10 ⁻⁴	1.31×10 ⁻⁴	1.32×10 ⁻⁴
序号 No.	288	289	290	291	292	293	294	295	296	297	298	299	300	301
名称 Name	2-丁烯醛[抑制了的]	乙酸乙烯酯[抑制了的]	双三乙氧基硅丙基胺	氯化亚砷	三氟甲烷	乙二醇乙醚	2-氯-3-氟吡啶	三甲基乙酞氯	4,6-二硝基-2-氨基苯酚钠[含水≥20%]	3-甲丁酮	基-2-丁酮	环戊酮	溴	磷酸[含量>30%]
CAS	123-73-9	108-05-4	13497-18-2	7719/9/7	75-46-7	110-80-5	6602-54-6	3282-30-2	10035-10-6	563-80-4	831-52-7	120-92-3	7726-95-6	13171-21-6
C ₉₅ /(ng·L ⁻¹)	1.33×10 ⁻⁴	1.34×10 ⁻⁴	1.34×10 ⁻⁴	1.36×10 ⁻⁴	1.37×10 ⁻⁴	1.38×10 ⁻⁴	1.40×10 ⁻⁴	1.45×10 ⁻⁴	1.45×10 ⁻⁴	1.46×10 ⁻⁴	1.50×10 ⁻⁴	1.51×10 ⁻⁴	1.54×10 ⁻⁴	1.65×10 ⁻⁴
序号 No.	302	303	304	305	306	307	308	309	310	311	312	313	314	315
名称 Name	甲基丙烯酸二甲氨基乙酯	3-氯-1,2-环氧丙烷	氯甲酸乙酯	氯乙酸甲酯	亚磷酸三甲酯	2-氨基吡啶	乙酸甲酯	3-氨基丙烯	二亚乙基三胺	2-丙烯-1-醇	(二)甲醚	亚硝酸钠	三聚乙醛	己酸
CAS	2867-47-2	106-89-8	541-41-3	96-34-4	121-45-9	504-29-0	79-20-9	107-11-9	111-40-0	107-18-6	115-10-6	7632-00-0	123-63-7	142-62-1
C ₉₅ /(ng·L ⁻¹)	1.65×10 ⁻⁴	1.69×10 ⁻⁴	1.98×10 ⁻⁴	1.98×10 ⁻⁴	2.00×10 ⁻⁴	2.00×10 ⁻⁴	2.02×10 ⁻⁴	2.03×10 ⁻⁴	2.03×10 ⁻⁴	2.05×10 ⁻⁴	2.05×10 ⁻⁴	2.13×10 ⁻⁴	2.16×10 ⁻⁴	2.19×10 ⁻⁴

续表2

序号 No.	316	317	318	319	320	321	322	323	324	325	326	327	328	329
名称 Name	硝酸	硝酸钠	硝酸钾	甲酸乙酯	四氯化硅	丁基磷酸	环氧乙烷	三氯化硼	氯甲基甲醚	1,1-二氯乙烯 [抑制了的]	亚磷酸三 乙酯	三异氰 尿酸	乙酸乙二 醇	黄磷
CAS	7697-37-2	7631-99-4	7757-79-1	109-94-4	7783-61-1	12788-93-1	75-21-8	7637/7/2	107-30-2	75-35-4	122-52-1	87-90-1	111-15-9	7723-14-0
C _容 /(ng·L ⁻¹)	2.20×10 ⁻⁴	2.20×10 ⁻⁴	2.20×10 ⁻⁴	2.21×10 ⁻⁴	2.26×10 ⁻⁴	2.27×10 ⁻⁴	2.35×10 ⁻⁴	2.37×10 ⁻⁴	2.39×10 ⁻⁴	2.41×10 ⁻⁴	2.51×10 ⁻⁴	2.55×10 ⁻⁴	2.56×10 ⁻⁴	2.59×10 ⁻⁴
序号 No.	330	331	332	333	334	335	336	337	338	339	340	341	342	343
名称 Name	磷化氢	红磷	丙烯酸异丁 酯[抑制了的]	异丁醚氯	硫酰氯	1,2-苯并异噻 唑啉-3-酮	1,2-苯并异噻 唑啉-3-酮	烯丙基缩水 甘油醚	三甲胺[无 水]	乙胺水溶液 [浓度 50%—70%]	2-丁酮	乙烯基乙 醚[抑制了的]	硫代乙酸	己二腈
CAS	7803-51-2	7723-14-0	97-86-9	79-30-1	2699-79-8	2634-33-5	2634-33-5	106-92-3	75-50-3	1975-4-7	78-93-3	109-92-2	507-09-5	111-69-3
C _容 /(ng·L ⁻¹)	2.59×10 ⁻⁴	2.59×10 ⁻⁴	2.60×10 ⁻⁴	2.63×10 ⁻⁴	2.63×10 ⁻⁴	2.71×10 ⁻⁴	2.71×10 ⁻⁴	2.75×10 ⁻⁴	2.75×10 ⁻⁴	2.82×10 ⁻⁴	2.94×10 ⁻⁴	2.94×10 ⁻⁴	3.03×10 ⁻⁴	3.07×10 ⁻⁴
序号 No.	344	345	346	347	348	349	350	351	352	353	354	355	356	357
名称 Name	碳酸(二) 甲酯	硝基甲烷	1,6-己二酸	1,6-己二酸	丙(酸)肝	硝化纤维素 溶液[含氮量 ≤12.6%,含 硝化纤维素 ≤55%]	硝化纤维素 [含氮量 ≥25%]	硝化纤维素 [含氮≤12. 6%,含增塑 物质≥18%]	氯甲酸甲酯	甲酸甲酯	氰化钠	氰化钾	乙醛衍	1,2-苯二酸
CAS	616-38-6	75-52-5	124-09-4	124-09-4	123-62-6	9004-70-0	9004-70-0	9004-70-0	79-22-1	107-31-3	143-33-9	151-50-8	107-29-9	95-54-5
C _容 /(ng·L ⁻¹)	3.07×10 ⁻⁴	3.21×10 ⁻⁴	3.32×10 ⁻⁴	3.32×10 ⁻⁴	3.38×10 ⁻⁴	3.41×10 ⁻⁴	3.41×10 ⁻⁴	3.41×10 ⁻⁴	3.77×10 ⁻⁴	3.93×10 ⁻⁴	4.04×10 ⁻⁴	4.04×10 ⁻⁴	4.06×10 ⁻⁴	4.16×10 ⁻⁴
序号 No.	358	359	360	361	362	363	364	365	366	367	368	369	370	371
名称 Name	甲酸水溶液	正丁腈	异丁腈	巯基乙酸	甲醇钠甲 醇溶液	丙酰氯	2,4-戊二酮	甲酸 甲酯	硫酸(二) 甲酯	二甲氧基 甲酯	2-巯基乙醇	4-甲 基-2- 戊酮	氯磺酸	二氧戊环
CAS	74-89-5	109-74-0	78-82-0	1968/11/1	124-41-4	1979/3/8	123-54-6	64-18-6	77-78-1	109-87-5	60-24-2	108-10-1	7790-94-5	646-06-0
C _容 /(ng·L ⁻¹)	4.26×10 ⁻⁴	4.26×10 ⁻⁴	4.29×10 ⁻⁴	4.35×10 ⁻⁴	4.35×10 ⁻⁴	4.45×10 ⁻⁴	4.56×10 ⁻⁴	4.75×10 ⁻⁴	4.84×10 ⁻⁴	5.14×10 ⁻⁴	5.30×10 ⁻⁴	5.76×10 ⁻⁴	5.80×10 ⁻⁴	5.99×10 ⁻⁴
序号 No.	372	373	374	375	376	377	378	379	380	381	382	383	384	385
名称 Name	2-呋喃甲醇	1,2-二甲氧基 乙烷	正丁硫醇	氧氯化磷	三氟乙硫氯	1,4-二氧杂环 己烷	二氧威乳剂 [含量>3%]	3-羟 基-2- 丁酮	2-羟基丙 酸乙酯	丁酸	氢氧 化钾 溶液	氢氧化钾	乙酐氯	N-甲基吗啉
CAS	97-99-4	110-71-4	109-79-5	10025-87-3	354-32-5	123-91-1	6988-21-2	513-86-0	687-47-8	107-92-6	1310-58-3	1310-58-3	75-36-5	109-02-4
C _容 /(ng·L ⁻¹)	6.03×10 ⁻⁴	6.21×10 ⁻⁴	6.28×10 ⁻⁴	6.62×10 ⁻⁴	7.18×10 ⁻⁴	7.26×10 ⁻⁴	7.45×10 ⁻⁴	7.80×10 ⁻⁴	7.83×10 ⁻⁴	7.94×10 ⁻⁴	8.05×10 ⁻⁴	8.05×10 ⁻⁴	8.25×10 ⁻⁴	8.73×10 ⁻⁴
序号 No.	386	387	388	389	390	391	392	393	394	395	396	397	398	399
名称 Name	甲基丙烯酸 [抑制了的]	异丁酸	氯乙酸酐	正硅酸乙酯	4-羟 基-2-戊酮	次氯酸盐溶 液[含有效氯 >5%]	丙烯酸胺	硼酸(三) 乙酯	乙酸乙酯	哌嗪	乙二 醇甲 醚	N,N-二甲 基 甲酰胺	正磷酸	丙烯酸[抑制了的]
CAS	79-41-4	79-31-2	541-88-8	1978-10-4	123-42-2	7790-92-3	1979-6-1	150-46-9	141-78-6	110-85-0	109-86-4	1968-12-2	7664-38-2	1979-10-7
C _容 /(ng·L ⁻¹)	8.82×10 ⁻⁴	8.93×10 ⁻⁴	9.46×10 ⁻⁴	9.74×10 ⁻⁴	9.85×10 ⁻⁴	1.04×10 ⁻⁴	1.27×10 ⁻⁴	1.42×10 ⁻⁴	1.47×10 ⁻⁴	1.52×10 ⁻⁴	1.60×10 ⁻⁴	1.60×10 ⁻⁴	1.66×10 ⁻⁴	1.77×10 ⁻⁴

1.3 系列化学品预测无效应浓度(PNEC)的推导方法

预测无效应浓度(PNEC)是指化学物质暴露在某生态系统中无危害的最高容许浓度.它的推导方法是采用评价因子法,通过在有限的实验室急性毒性数据(LC_{50} 或 EC_{50})和慢性毒性数据无观察效应浓度(NOEC)的基础上除以一定的评估系数获得的^[8,9].本研究中,利用推导出的NOAEL值除以一定的评价因子(assessment factor,AF),从而得到PNEC值,计算公式如(2)所示.

$$PNEC = \frac{NOAEL}{AF} \quad (2)$$

式中,PNEC为预测无效应浓度,AF为评价因子,由于只得到一种物种藻类的慢性毒性数据,根据王宏等^[9]关于推导 $PNEC_{water}$ 的推荐评价系数的研究,确定AF的值为100.

1.4 基于化学品环境风险安全管控浓度 $C_{控}$ 的计算方法

商值法(RQ)是指环境中实际监测的或由模型估算出的污染物的浓度(C_{EXP})与预测无效应浓度(PNEC)的比值,从而计算得到风险商值^[3,6].商值法的基本计算公式如公式(3)所示:

$$RQ = \frac{C_{EXP}}{PNEC} \quad (3)$$

$$C_{EXP}(C_{控}) = RQ \times PNEC \quad (4)$$

式中,RQ为风险表征系数或商值, C_{EXP} 为化学品的实际暴露浓度,PNEC为预测无效应浓度.根据综合污染指数的分级方法^[10-12],当RQ小于1时,认为该污染物对环境的危害性较小;当RQ等于1时,认为是该污染物会对环境产生危害的一个警戒线;当RQ大于1时,认为该污染物可能对环境产生危害.

在本研究中,将公式(3)进行逆运算,即获得公式(4).其中令 $RQ=1$,通过推导出的PNEC值以及公式(4),可计算出 C_{EXP} ,此时 C_{EXP} 即为相应化学品的安全管控浓度 $C_{控}$.当化学品实际的环境暴露浓度 C_{EXP} 小于 $C_{控}$ 时,则认为风险较小;当 C_{EXP} 等于 $C_{控}$ 时,则认为此时化学品的环境暴露浓度为化学品对环境生物有危害的一个警戒线;当化学品实际的环境暴露浓度 C_{EXP} 大于 $C_{控}$ 时,则认为存在风险.

2 结果与讨论(Results and Discussion)

2.1 系列化学品的慢性无可见有害作用水平(NOAEL)

采用公式(1),计算了各个化学品NOAEL值,获得的结果如表1所示.各个化学品的NOAEL值差别较大,其中最大的为硝酸胍,对应的NOAEL值为 $1.09 \times 10^3 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$;NOAEL值最小的为氨,对应的NOAEL值为 $9.41 \times 10^{-12} \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$.由于NOAEL是指受试生物不受受试样品毒害作用的最大染毒剂量或浓度.因此,可以初步确定硝酸胍对藻类的危险性相对较小,而氨对藻类的危害性较大.另外由于氯化锌、辛烷异构体、锌粉、 α -蒎烯等的NOAEL值都比较小,因此也需要加强对这些化学品的关注.

2.2 系列化学品的预测无效应浓度(PNEC)

采用公式(2),计算了各个化学品PNEC值,获得的结果如表1所示.各个化学品的PNEC值差别很大,其中PNEC值最大的为硝酸胍,对应的PNEC值为 $10.90 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$;其次为连二亚硫酸钠,对应的PNEC值为 $10.60 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$;PNEC值最小的为氨,对应的PNEC值为 $9.41 \times 10^{-14} \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$.由于PNEC是指化学物质暴露在某生态系统中无危害的最高容许浓度,选用的受试生物为水生生物藻类,因此推导出的PNEC值为各个化学品在水体环境中的最大无效应浓度.根据推导结果可以看出硝酸胍对水体环境的潜在危害较小,而氨对水体环境的潜在危害较大.

目前硝酸胍的环境风险评价主要体现在人体的健康方面中,如宋平因^[13]的研究发现,硝酸胍会对人的皮肤、眼睛、黏膜和上呼吸道有刺激作用,过量吸入可致死.而对水域生态环境的研究相对较少.在我国地表水环境标准中,硝酸胍的水体控制指标没有明确指出,但根据硝酸胍的化学特性,参比现行的GB3838—2002集中式生活饮用水地表水中规定的硝酸盐的标准限制,即 $10.00 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ ^[14].本研究计算出的硝酸胍的PNEC值为 $10.90 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$,这与集中式生活饮用水中硝酸盐的标准值十分接近.由此可见,计算结果可以为硝酸胍的环境风险评价提供数据支撑.

2.3 各个化学品安全控制浓度 $C_{\text{控}}$

采用公式(3)和(4),计算了各个化学品 $C_{\text{控}}$ 值,获得的结果如表 1 所示.各个化学品的 $C_{\text{控}}$ 值差别较大,其中 $C_{\text{控}}$ 值最大的为硝酸胍,对应的 $C_{\text{控}}$ 值为 $10.90\text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$; $C_{\text{控}}$ 值最小的为氨,对应的 $C_{\text{控}}$ 值为 $9.41\times 10^{-14}\text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$.由于 $C_{\text{控}}$ 是化学品对环境有危害的一个警戒值,因此当氨在环境中的实际浓度小于 $C_{\text{控}}$ 值 $9.41\times 10^{-14}\text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ 时,认为其对环境产生的风险较小,但在企业化学品的实际管理中依然需要进行实时监管;当氨在环境中的实际浓度大于 $C_{\text{控}}$ 值 $9.41\times 10^{-14}\text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ 时,认为其会对环境有危害,因此在企业的生产、实践等过程中应采取相应防范措施.从氨的理化性质来看,液氨为无色气体,有刺激性恶臭味,易溶于水且其水溶液呈碱性;遇热、明火,虽难以点燃,但氨和空气混合物达到 16%—25%(最易引燃浓度 17%)浓度范围遇明火会燃烧和爆炸,如有油类或其它可燃性物质存在,则危险性更高^[15].因此液氨在生产、运输和储存时因严格管理,以免发生安全事故.此类化学品主要包括氨、氯化锌、辛烷异构体、锌粉、 α -蒎烯、3-氯丙烯、丙酮、氯化铜等.

传统的化学品环境风险评价仅描述了化学品对环境导致风险的可能性大小,并不能为企业生产实践中化学品环境暴露浓度的控制提供直接数据支持.例如,在化学品生产、储运过程中,因管理、交通事故等造成化学品泄露时,可以将其环境暴露浓度与 $C_{\text{控}}$ 进行比较.如果大于 $C_{\text{控}}$ 值,则此时该化学品的环境暴露浓度可能会对生态环境造成危害,应及时处理.

3 结论 (Conclusion)

(1)通过比较 NOAEL 和 PNEC 值可以看出,各化学品对环境的潜在危害性大小不同.其中潜在危害最大的为氨,最小的为硝酸胍.毒性相对较大的还有氯化锌、辛烷异构体、锌粉、 α -蒎烯等,在化学品环境风险评价时需要给予密切关注.

(2)当化学品环境暴露浓度小于 $C_{\text{控}}$ 时,认为其对环境的潜在危害较小,但在企业化学品的实际管理中依然需要进行实时监管;当化学品的环境暴露浓度等于 $C_{\text{控}}$ 时,此时为化学品对环境有危害的一个警戒值;当化学品环境暴露浓度大于 $C_{\text{控}}$ 时,认为其对环境的潜在危害较大,此时应该采取相应防范措施.因此,通过 $C_{\text{控}}$ 来指导企业化学品的生产实践,可以较广泛地判定和处理多种化学品的安全事故的危害程度.

(3)本研究通过相关评价指标计算出的安全管控浓度 $C_{\text{控}}$,可以为企业化学品在生产、运输、储存和使用过程中科学管理和决策提供直接数据支撑.同时,在今后化学品的风险管控中,我们应该对化学品的环境暴露浓度进行实时监管,利用 $C_{\text{控}}$ 来预判化学品的环境危害性,这样可以很好降低风险发生的可能性.

参考文献 (References)

[1] 谢春庆.环境风险评价简介[J].四川环境, 1994,8(4): 65-69.
XIE C Q. A brief introduction to environmental risk assessment[J]. Sichuan Environment, 1994,18(4): 65-69 (in Chinese).

[2] POWER M, MCCARTY L S. Trends in the development of ecological risk assessment and management frameworks [J]. Human & Ecological Risk Assessment An International Journal, 2002, 8(1): 7-18.

[3] 雷炳莉,黄圣彪,王子健.生态风险评价理论和方法[J].化学进展, 2009,21(203): 350-358.
LEI B L, HUANG S B, WANG Z J. Theories and methods of ecological risk assessment[J]. Progress in Chemistry, 2009,21(203): 350-358 (in Chinese).

[4] O.O.P.P.Us Epa. Ecological Committee on FIFRA Risk Assessment Methods (ECOFRAM) Terrestrial Work Group Report: VI. Effects Assessment | Pesticides: Environmental Effects | US EPA[R].

[5] BRAIN R A, SANDERSON H, SIBLEY P K, et al. Probabilistic ecological hazard assessment: Evaluating pharmaceutical effects on aquatic higher plants as an example[J]. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2006, 64(2): 128-135.

[6] CVMP E. Guideline on environmental impact assessment for veterinary medicinal products phase II [R]. European Medicines Agency, Committee for Medicinal Products for Human Use, London, UK, 2004.

[7] KRAMER H J, DEN H W V, SLOB W. Conversion factors estimating indicative chronic no-observed- adverse-effect levels from short-term

- toxicity data[J]. Regul Toxicol Pharmacol, 1993,23(3): 249-255.
- [8] LIU N, WANG Y, YANG Q, et al. Probabilistic assessment of risks of diethylhexyl phthalate (DEHP) in surface waters of China on reproduction of fish[J]. Environmental Pollution, 2016, 213(213): 482-488.
- [9] 王宏,杨霓云,余若祯,等. 我国新化学物质生态风险评价数据外推技术探讨[J]. 环境科学研究, 2009,22(7): 805-809.
WANG H,YANG N Y,YU R Z, et al. Research on extrapolation techniques of eco-environment risk assessment for new chemicals in China [J]. Research of Environmental Sciences, 2009,22(7): 805-809 (in Chinese).
- [10] 邹乔,王瑶,杜显元,等. 内梅罗指数法在石油开采区土壤 PAHs 污染分级评价中的应用[J]. 安徽农业科学, 2011(12): 7350-7353.
ZOU Q,WANG Y,DU X Y, et al. Application of nemerow index method in grade evaluation of pahs pollution in the oilfield soils[J]. Journal of Anhui Agricultural Sciences, 2011(12): 7350-7353 (in Chinese).
- [11] 范瑜. 平均综合污染指数在地面水污染分级中的应用[J]. 江苏环境科技, 1999,14(3): 28-29.
FAN Y. Application of average comprehensive pollution index in surface water pollution classification[J]. Jiangsu Environmental Science and Technology, 1999,14(3): 28-29 (in Chinese).
- [12] 杨胜香,易浪波,刘佳,等. 湘西花垣矿区蔬菜重金属污染现状及健康风险评价[J]. 农业环境科学学报, 2012,31(1): 17-23.
YANG S X,YI L B,LIU J,et al. Heavy metals concentrations and health risk in vegetables grown on Mn and Pb/Zn mineland in huayuan county, west Hunan Province, China[J]. Journal of Agro-Environment Science, 2012,31(1): 17-23 (in Chinese).
- [13] 宋平因. 认识硝酸胍防范它爆炸[J]. 吉林劳动保护, 2012(3): 44.
SONG P N. Understanding guanidine nitrate and preventing it from exploding[J]. Jilin Labour Protection, 2012(3): 44(in Chinese).
- [14] 国家环境保护总局. GB3838—2002,地表水环境质量标准[S]. 2002.
State Environmental Protection Administration of China. GB3838—2002, Surface water environment quality standard [S]. 2002 (in Chinese).
- [15] 刘红艳,刘钢,魏铮.液氨环境风险评价[J]. 法制与社会, 2009(26): 372-373.
LIU H Y,LIU,WEI Z. A Environmental risk assessment of liquid ammonia[J]. Legal System and Society, 2009(26): 372-373 (in Chinese).