

DOI: 10.7524/AJE.1673-5897.20210901001

李晨男, 于洋, 郑玉婷, 等. 基于 PMT 预测模型的农田持久性、可迁移性、毒性污染物筛选技术研究[J]. 生态毒理学报, 2022, 17(3): 121-128

Li C N, Yu Y, Zheng Y T, et al. Study on screening technology of persistent, mobile and toxic pollutants in farmland based on PMT prediction model [J]. Asian Journal of Ecotoxicology, 2022, 17(3): 121-128 (in Chinese)

基于 PMT 预测模型的农田持久性、可迁移性、毒性污染物筛选技术研究

李晨男^{1,2}, 于洋^{1,*}, 郑玉婷¹, 张丽丽¹, 林军¹, 于彩虹², 黄怡³, 王力明³

1. 生态环境部固体废物与化学品管理技术中心, 北京 100029

2. 中国矿业大学(北京)化学与环境工程学院, 北京 100083

3. 北京市污染源管理事务中心, 北京 100089

收稿日期: 2021-09-01 录用日期: 2021-12-04

摘要: PMTs(persistent, mobile and toxic compounds)是一类具有水相持久性和迁移性,且具有环境生物毒性的物质,其在环境中难降解或半衰期较长而且水溶性高,容易通过降水进入自然水体,在地下水及饮用水中持续累积,进而可能影响饮用水水质。本研究利用 PMT 预测软件结合名录比对法,开展农田中农药、酞酸酯、抗生素和激素等有毒有害物质的 PMT 属性的预测及验证。结果表明,模型预测结果具有较好的准确性,持久性(P)、可迁移性(M)、毒性(T)以及 PMT 的预测结果与已有数据相比一致率分别为 89.3%、89.3%、77.9% 和 70.5%。建立了包含 334 种化学物质的农田污染物初筛名单,并识别出 120 种农田 PMT 污染物。本研究建立的农田 PMT 污染物快速筛选方法及清单,可为我国进一步开展 PMT 类污染物研究提供一定参考。

关键词: 农田污染物; PMT 预测模型; 筛选技术; 污染物清单

文章编号: 1673-5897(2022)3-121-08 中图分类号: X171.5 文献标识码: A

Study on Screening Technology of Persistent, Mobile and Toxic Pollutants in Farmland Based on PMT Prediction Model

Li Chennan^{1,2}, Yu Yang^{1,*}, Zheng Yuting¹, Zhang Lili¹, Lin Jun¹, Yu Caihong², Huang Yi³, Wang Liming³

1. Solid Waste and Chemicals Management Center, Ministry of Ecology and Environment, Beijing 100029, China

2. School of Chemical and Environmental Engineering, China University of Mining and Technology, Beijing 100083, China

3. Beijing Municipal Pollution Source Management Center, Beijing 100089, China

Received 1 September 2021 accepted 4 December 2021

Abstract: PMTs (persistent, mobile and toxic compounds) are a kind of substances with water phase persistence and mobility and toxic effects in the environment. These substances are difficult to degrade or have a long half-life in the environment, and have high water solubility. They are easy to enter the natural water body through precipitation and continuously enrich in groundwater and drinking water, which may affect the quality of drinking water and cause serious harm. As the largest non-point source pollution industry in China, agriculture has a wide variety of

基金项目: 有机地球化学国家重点实验室开放基金课题(SKLOG2020); 国家重点研发计划(2016YFD0200208, 2017YFD0800701)

第一作者: 李晨男(1996—), 男, 硕士研究生, 研究方向为计算毒理学, E-mail: 18864830356@163.com

* 通讯作者(Corresponding author), E-mail: yuyang@meescc.cn

pollutants, including a large number of PMT pollutants. In order to quickly identify PMT pollutants from a large number of toxic and harmful substances in farmland, this study used the PMT prediction model software developed by the Solid Waste and Chemicals Management Center of Ministry of Ecology and Environment and combined with the directory comparison method to verify the prediction results and predict the PMT attributes of pesticides, phthalates, antibiotics, hormones and other toxic and harmful substances in farmland. The PMT model validation results show that the prediction results of the model have good accuracy. Compared with the existing data, the consistency rates of the prediction results of chemical substance persistence (P), mobility (M), toxicity (T) and PMT are 89.3%, 89.3%, 77.9% and 70.5% respectively. The preliminary screening list of farmland pollutants containing 334 chemical substances was established by database retrieval method, literature research method and directory comparison method. The preliminary screening list was screened by PMT prediction model combined with directory comparison method, and 120 kinds of farmland PMT pollutants were identified. The high-throughput rapid screening method of farmland PMT pollutants explored in this study can provide a reference for the screening of PMT pollutants in China.

Keywords: farmland pollutants; PMT prediction model; screening technology; pollutant list

改革开放以来,我国农业生产快速发展的同时产生了许多问题:农业生产与管理精细化水平低、农药化肥使用量高、畜禽激素抗生素滥用和农业面源污染问题严峻。据调查,目前我国农田污染物主要包括农药、农膜中的酞酸酯、畜禽抗生素和畜禽激素4类物质^[1-2]。有研究指出全球每年有560多万t(折纯量)农药进入农田,其中99%都散逸在土壤、大气和生物体内,这些农药会直接或通过食物链、食物网间接进入人体中对人体健康造成危害^[3-4]。农药的使用也会杀伤大量非靶标生物,致使害虫天敌及其他有益生物死亡,严重影响农田生态平衡。酞酸酯类物质会通过内分泌干扰作用影响人的生殖系统,造成无法生育、畸形儿等严重危害。陈玺等^[5]研究发现人体内含有高浓度的酞酸酯类残留,我国黄河流域、珠江流域都有该物质的检出。畜禽粪便中的激素,会通过施肥等方式进入农田。陈小桐等^[6]研究了辽宁省畜禽养殖业排放抗生素情况,发现畜禽粪污中39.34%的抗生素排入养殖废水,61.66%存在于畜禽粪便中。韩进等^[7]检测了市面上基于畜禽粪便制备的有机肥中4种雌激素含量,发现4种雌激素检出率分别为47.06%、11.76%、17.65%和5.88%,含量在11.00~298.52 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。Jin等^[8]指出一些典型PMTs(persistent, mobile and toxic compounds)在我国的各类食品、药品及部分环境介质中检出,例如三聚氰胺、莠灭净、甲基叔丁基醚和全氟烷酸化合物。其中,三聚氰胺常用于化肥组分,莠灭净是常用的除草剂,是典型的农田PMT污染物。

PMT类物质不仅具有持久性而且水溶性高,容

易通过降水等进入自然水体,在地下水和地表水中持续累积,进而可能影响饮用水水质,产生严重危害^[9]。Keighley等^[10]研究发现农田中一种常用的腹足动物杀虫剂四聚乙醛难以降解,具有迁移性,揭示了其在英国地下水和地表水中检测含量过高的原因。目前由于PMT类污染物对水质安全的威胁,开始受到各国的广泛关注。

德国环保部率先对欧盟REACH注册的化学药品中PMT类物质进行筛选管控^[11]。欧盟化学品管理局(ECHA)于2020年10月通过的化学品可持续发展战略^[12],将针对PMT和持久性极强和极易移动性物质(vPvM)制定新的危害标准并对CLP法规进行修订。国内也有学者开始关注PMT类污染物,例如Huang等^[13]对中国地表水、地下水和饮用水中检出的432种药物及个人护理产品类物质(pharmaceuticals and personal care products, PPCPs)进行筛选,结果表明有44.3%的PPCPs类物质符合或者根据证据的权重可能符合PMT/vPvM标准。但是目前我国对于PMTs的研究尚在起步阶段,也没有相关的管控措施与法规标准。如何对PMT类污染物进行筛选以便于从源头上进行管控非常重要。

本研究通过文献调研法、数据库检索法和名录对比法确定农田PMT污染物初筛名单,利用生态环境部固体废物与化学品管理技术中心开发的预测模型^[14]评估确定了农田PMT类污染物清单。研究建立的农田PMT类污染物快速筛选技术及清单,可为我国进一步开展PMT类污染物的研究与管控提供一定参考作用。

1 研究方法 (Research method)

1.1 模型判定方法 (Model construction method)

1.1.1 持久性(P)判定标准(Persistence (P) evaluation criteria)

生态环境部固体废物与化学品管理技术中心开发的 PMT 预测模型对于 P 的评估是以污染物的快速生物降解性作为判断依据。我国《新化学物质环境管理登记指南》(2020)^[15]中规定,快速生物降解结果可以作为判断持久性的依据,若物质不具有快速生物降解性,则判断其为潜在具有 P 的物质;否则判断其不具有 P。

1.1.2 迁移性(M)判定标准(Mobility (M) evaluation criteria)

M 是指化合物被释放到环境之后,具有从释放地点迁移至其他地点的潜力。2019 年 ECHA 在《PMT/vPvM 物质识别和评估指南和方法》^[16]中提出了 M 和高迁移性(vM)的标准。

水环境中 M 判定标准为:在 pH=4~9、12 °C 的环境水样中,化合物的水溶解度(SW) $\geq 150 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$,化合物吸附系数($\log K_{oc}$) ≤ 4.0 ;水环境中 vM 判定标准为:在 pH=4~9、12 °C 的环境水样中,化合物的 SW $\geq 150 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$;且 $\log K_{oc} \leq 3.0$ 。

PMT 预测模型中的 M 基于 $\log K_{oc}$ 判定,对于疏水性分子态有机物, $\log K_{oc}$ 可通过 $\log K_{ow}$ 估算^[17]:

$$K_{oc} = 0.35 K_{ow}$$

$$\log K_{oc} = \log K_{ow} - 0.456$$

式中: K_{oc} 为土壤/沉积物吸着系数,量纲为 1; K_{ow} 为辛醇水分配系数,量纲为 1。若物质 $\log K_{oc} < 4$,则判断其具有 M。

1.1.3 毒性(T)判定标准 (Toxicity (T) assessment criteria)

PMT 预测模型对于 T 的评估依据《化学品分类和标签规范 第 28 部分:对水生环境的危害》(GB 30000.28—2013)^[18]以及《持久性、生物累积性和毒性物质及高持久性和高生物累积性物质的判定方法》(GB 24782—2009)^[19]关于毒性物质的判别标准。若水生慢性 NOEC $< 0.01 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$,或水生急性 EC/L₅₀ $< 0.01 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$,则判断其为具有 T 的物质。

1.2 名录对比法 T 判定标准(List comparison method T judgement standard)

(1)具有致癌性、致突变性和生殖毒性物质(carcinogenicity, mutagenicity, toxic to reproduction, CMR)。致癌性判断依据来源于国际癌症研究机构

(IARC)^[20]2020 年公布的致癌物质清单,致突变性、生殖毒性判断依据来源于 ECHA 官方网站 C&L 数据库^[21]。(2)具有内分泌干扰类物质(endocrine disrupting chemicals, EDCs)。判断依据来源于日本环境厅《关于环境内分泌干扰物的战略计划》^[22]、美国环境保护局《内分泌干扰物筛查计划》^[23]、欧盟《欧盟高关注物质清单》(SVHC)^[24]、世界自然基金会(World Wide Fund for Nature or World Wildlife Fund, WWF)《环境中被报告具有生殖和内分泌干扰物清单》^[25]。

1.3 PMT 预测模型准确性验证方法(Accuracy verification method of PMT prediction model)

利用 PMT 预测模型对 Huang 等^[13]研究中所涉及的 432 种 PPCPs 物质快速预测,将预测结果结合名录对比法与文献数据相比较,来验证 PMT 模型的准确性。

1.3.1 P、M 验证方法(P and M verification methods)

利用 PMT 预测模型对 432 种 PPCPs 类物质的 P 和 M 进行预测。通过批量输入数据 CAS 号得出 P 和 M 的预测结果,然后与文献数据进行比对。

1.3.2 T 验证方法(T verification method)

利用 PMT 预测模型对 432 种 PPCPs 类物质的 T 进行预测。通过批量输入数据 CAS 号得出 T 的预测结果。同时,利用欧盟 CMR 类物质清单,欧盟高关注物质(SVHCs)清单,以及欧美与日本等 EDCs 类物质清单,对 432 种 PPCPs 类物质进行比较,依据比较结果判断是否为 T 类物质。

1.4 农田 PMT 污染物筛选方法(Screening method of farmland PMT pollutants)

1.4.1 初筛名单建立方法(Establishment method of preliminary screening list)

采用数据库检索法、文献调研法、名录对比法建立农田持久性、可迁移性、毒性污染物初筛名单,具体如下。(1)采用数据库检索法,收集中国农药信息网中登记的农药数据信息;(2)通过查询知网相关文献,收集农膜中酞酸酯类物质信息;(3)通过查询知网畜禽抗生素类化学物质相关文献以及国家发布的畜禽抗生素类化学物质名录,收集畜禽养殖使用的抗生素类化学物质;(4)通过查询知网畜禽激素类化学物质相关文献以及国家发布的畜禽激素类化学物质名录,收集畜禽养殖使用的激素类化学物质。

1.4.2 农田 PMT 污染物筛选方法(Screening method of farmland PMT pollutants)

利用模型预测法和名录对比法,建立农田 PMT

污染物筛选方法。P 和 M 使用模型预测法。毒性指标 T 利用模型预测法和名录对比法评估,具体同 1.3.2,将初筛名单中物质与其进行比较。结合模型筛选法与名录对比法结果,得出最终农田 PMT 类污染物清单。

2 结果与分析 (Results and analysis)

2.1 PMT 模型验证结果(PMT model verification results)

Huang 等^[13]研究的 432 种 PPCPs 中部分物质缺乏 M 和 T 的数据,本研究选取数据量较为完整的 335 种 PPCPs 类数据进行对比研究从而确定 PMT

预测模型的准确性。

P 模型预测结果与文献数据相比,335 个数据中有 299 种数据预测结果一致,占总数的 89.3%,36 个数据预测结果不同占比 10.7%。M 模型结果对比显示,299 种数据预测结果一致,占总数的 89.3%,36 个数据预测结果不同占总数的 10.7%。T 结合名录对比与模型预测得出的结果对比可知,261 个数据的结果一致,占总数的 77.9%,74 种数据结果不同,占总数的 22.1%。从 PMT 类物质判定结果看,236 个物质筛选结果相同,占总数的 70.5%,99 个筛选结果不同,占总数的 29.5%。验证结果如图 1 所示。

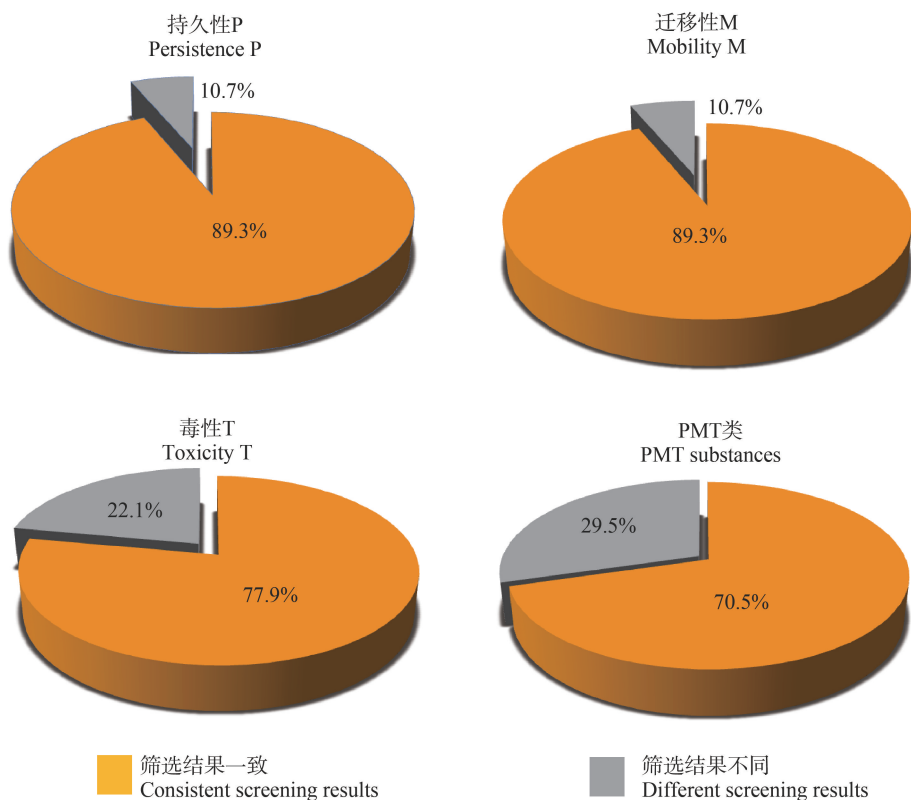


图1 PMT 预测模型准确性验证结果

Fig. 1 Accuracy verification results of PMT prediction model

可见,利用 PMT 筛选模型结合名录对比法所得的筛选结果与文献数据一致率较高,可以用来预测 PMT 污染物。其中,P 和 M 一致率比较高,都为 89.3%。T 的一致率也相对较高占 77.9%,但是不如 P 和 M。可能由于 PMT 预测模型对于 T 的预测是基于水生生物毒性与人体健康毒性,而文献对于 T 的界定没有包含水生生物毒性,导致存在一定的差异性,但预测结果的一致性在合理范围内。

2.2 农田 PMT 类污染物筛选结果(Screening results of farmland PMT pollutants)

2.2.1 确立初筛名单(Establish a preliminary screening list)

截至 2021 年 4 月 30 日,中国农药信息网登记在册的农药总共 42 365 条数据信息。排除部分生物农药、植物源农药和卫生用药,共计 32 145 种化学农药产品。通过查询农药的登记证号得到农药的

有效成分,去重处理,最终得到 298 种农药的有效成分信息。

调研中国知网科研文献 40 余篇,得到了农膜中的 15 种酞酸酯类污染物物质信息。根据我国原农业部第 1997 号公告《兽用处方药品种目录(第一批)》^[26]、第 2471 号公告《兽用处方药品种目录(第二批)》^[27]、农业农村部第 245 号公告《兽用处方药品种目录(第三批)》^[28]以及中国兽药信息网公示的信息,排除生物源抗生素,筛选出 11 种禽畜抗生素有效化学成分,纳入农田 PMT 污染物初筛名单。20 篇中文文献涉及 8 种畜禽抗生素,纳入农田 PMT 污染物初筛名单。

根据农业农村部第 176 号公告《禁止在饲料和动物饮用水中使用的药物品种目录》^[29]、第 193 号公告《食品动物禁用的兽药及其他化合物清单》^[30],筛选出 11 种禽畜激素有效化学成分纳入农田 PMT 污染物初筛名单;30 余篇中文文献涉及 5 种畜禽激素,纳入农田 PMT 污染物初筛名单。

将获得的 298 种农药有效成分、15 种酞酸酯类、19 种畜禽抗生素类和 16 种畜禽激素类化学物质汇总,去重处理,最终得到农田 PMT 类污染物初筛名单,共计 334 种污染物,如图 2 所示。

2.2.2 农田 PMT 类污染物筛选结果(Screening results of farmland PMT pollutants)

利用 PMT 预测得到 P 和 M 筛选结果。初筛名单中有 274 个物质预测可能具有 P,占总数的 81.7%,253 个预测可能具有 M,占总数 75.7%。

采用模型预测与名录对比法得到 T 筛选结果。PMT 预测结果显示,初筛名单中有 182 个数据可能符合 T 标准,占总数的 54.5%;名录对比法结果,有 30 个数据符合 T 标准,其中 16 种为 CMR 类物质,14 种为内分泌干扰类物质。

对农田 PMT 污染物初筛名单中的 334 种物质进行进一步筛选判定,最终有 120 种物质判断为可能具有 PMT 类污染物特性,如表 1 所示。其中,包括 110 种化学农药、5 种抗生素和 5 种激素;110 种化学农药包含 34 种杀菌剂、32 种杀虫剂和 42 种除草剂,如图 3 所示。

3 讨论 (Discussion)

PMT 预测模型验证结果表明,P、M、T 以及 PMT 的预测,与文献结果的一致率分别为 89.3%、89.3%、77.9%和 70.5%。

通过文献调研、数据库检索法和名录对比法,建

立 334 种农田污染物初筛名单,包括 298 种化学农药、15 种酞酸酯、19 种畜禽抗生素和 16 种畜禽激素。利用已验证的 PMT 模型结合名录对比法,初步筛选出 120 种可能为农田 PMT 污染物名单,涉及 34 种杀菌剂、32 种杀虫剂、42 种除草剂、5 种抗生素和 5 种激素。

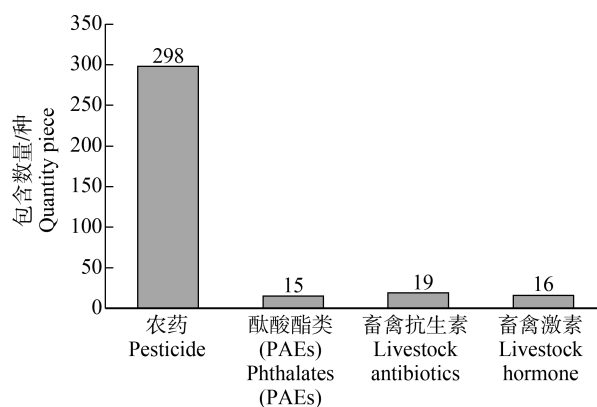


图2 农田初筛名单

Fig. 2 Farmland preliminary screening list

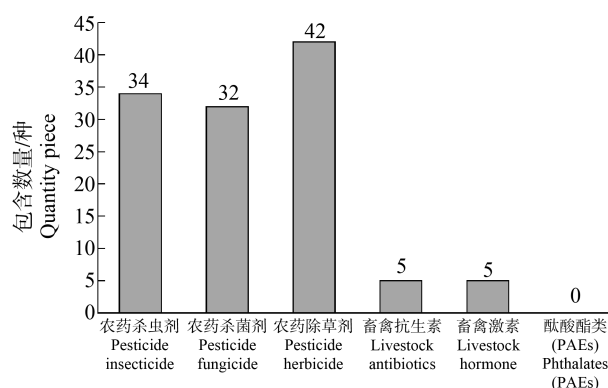


图3 农田 PMT 类污染物筛选结果

Fig. 3 Screening results of farmland PMT pollutants

筛选得到的农田 PMT 类污染物清单,不含初筛名单中的 15 种酞酸酯类物质。邹颖和刘宁^[31]提出酞酸酯类化合物易溶于脂肪和有机溶剂,不易溶于水,极易在生物体内富集而造成危害,不符合 M 指标,从另一个方面说明了模型预测与筛选结果的准确性。

目前,国内仅有 Huang 等^[13]对地下水、地表水中 PPCPs 类物质进行了 PMT 污染物筛选研究。本研究发现,农田污染物中涉及的 PMT 类物质种类众多、面广量大,对我国水质安全可能具有潜在风险。建议重视对该类污染物的筛选研究,并进行合理有效的管控。

表 1 农田 PMT 类污染物清单
Table 1 List of farmland PMT pollutants

CAS	物质名称 Substance name	类别 Category	CAS	物质名称 Substance name	类别 Category
94-75-7	2,4-滴丁酯 2,4-dibutyl ester	农药 Pesticides	101-21-3	马拉硫磷 Malathion	农药 Pesticides
94-74-6	2 甲 4 氯 2-methyl-4-chlorophenoxyacetic acid	农药 Pesticides	121-75-5	咪鲜胺 Prochloraz	农药 Pesticides
1897-45-6	百菌清 Chlorothalonil	农药 Pesticides	67747-09-5	噁菌环胺 Cyprodinil	农药 Pesticides
55-38-9	倍硫磷 Fenthion	农药 Pesticides	121552-61-2	噁菌酯 Azoxystrobin	农药 Pesticides
119446-68-3	苯醚甲环唑 Difenoconazole	农药 Pesticides	131860-33-8	灭草松 Triamecinolone	农药 Pesticides
73250-68-7	苯噻酰草胺 Mefenacet	农药 Pesticides	25057-89-0	灭菌唑 Triticonazole	农药 Pesticides
123312-89-0	吡蚜酮 Pymetrozine	农药 Pesticides	131983-72-7	灭线磷 Metronidazole	农药 Pesticides
60207-90-1	丙环唑 Propiconazole	农药 Pesticides	13194-48-4	扑草净 Prometrazine	农药 Pesticides
54965-21-8	丙硫唑 Propyl thiazole	农药 Pesticides	7287-19-6	噻草酮 Metribuzin	农药 Pesticides
39807-15-3	丙炔噁草酮 Propionoxazone	农药 Pesticides	21087-64-9	噻螨酮 Hexythiazox	农药 Pesticides
103361-09-7	丙炔氟草胺 Alachlor propargyl	农药 Pesticides	78587-05-0	噻嗪酮 Buprofezin	农药 Pesticides
77182-82-2	草铵膦 Glufosinate-ammonium	农药 Pesticides	69327-76-0	三氟羧草醚 Carboxytrifluoride	农药 Pesticides
1071-83-6	草甘膦 Glyphosate	农药 Pesticides	50594-66-6	三环唑 Tricyclazole	农药 Pesticides
112410-23-8	虫酰肼 Tebufenozide	农药 Pesticides	41814-78-2	三唑醇 Triadimefon	农药 Pesticides
35367-38-5	除虫脲 Diflubenzuron	农药 Pesticides	55219-65-3	三唑磺草酮 Triadimefon	农药 Pesticides
119-12-0	吡嗪硫磷 Pyridazinon	农药 Pesticides	128621-72-7	三唑磷 Triazophos	农药 Pesticides
115852-48-7	稻瘟酰胺 Pyrimidine	农药 Pesticides	24017-47-8	三唑酮 Triadimefon	农药 Pesticides
52-68-6	敌百虫 Trichlorfon	农药 Pesticides	43121-43-3	杀螺胺 Niclosamide	农药 Pesticides
709-98-8	敌稗 Dichloropropionanilide	农药 Pesticides	50-65-7	莎稗磷 Anilofos	农药 Pesticides
15299-99-7	敌草胺 Butachlor	农药 Pesticides	64249-01-0	双草醚 Bisoxymether	农药 Pesticides
2764-72-9	敌草快 Reglone	农药 Pesticides	125401-92-5	双氟磺草胺 Florasulam	农药 Pesticides
330-54-1	敌草隆 Diuron	农药 Pesticides	145701-23-1	双炔酰菌胺 Mandipropamid	农药 Pesticides
62-73-7	敌敌畏 Dichlorvos	农药 Pesticides	374726-62-2	水胺硫磷 Isocarbophos	农药 Pesticides
17109-49-8	敌瘟磷 Diphosphate	农药 Pesticides	24353-61-5	特丁津 Terbutylazine	农药 Pesticides
1918-16-7	毒草胺 Propachlor	农药 Pesticides	5915-41-3	特丁净 Terbutryn	农药 Pesticides
10605-21-7	多菌灵 Carbendazim	农药 Pesticides	886-50-0	肟菌酯 Trifloxystrobin	农药 Pesticides
84087-01-4	二氯喹啉酸 Quinclorac	农药 Pesticides	141517-21-7	戊菌唑 Penconazole	农药 Pesticides
333-41-5	二嗪磷 Diazinon	农药 Pesticides	66246-88-6	戊唑醇 Tebuconazole	农药 Pesticides
3347-22-6	二氰蒽醌 Dithianon	农药 Pesticides	107534-96-3	西草净 Simetryne	农药 Pesticides
76674-21-0	粉唑醇 Flutriafol	农药 Pesticides	1014-70-6	西玛津 Simazin	农药 Pesticides
2310-17-0	伏杀硫磷 Phoxim phosphide	农药 Pesticides	122-34-9	烯啶虫胺 Dinitridin	农药 Pesticides
120068-37-3	氟虫腈 Fipronil	农药 Pesticides	150824-47-8	烯啶醇 Diniconazole	农药 Pesticides
79622-59-6	氟啶胺 Fluazinam	农药 Pesticides	83657-24-3	辛菌胺醋酸盐 Octylamine acetate	农药 Pesticides
85509-19-9	氟硅唑 Flusilazole	农药 Pesticides	57413-95-3	辛硫磷 Phoxim	农药 Pesticides
142459-58-3	氟噻草胺 Fluthiachlor	农药 Pesticides	14816-18-3	亚胺硫磷 Iminophos	农药 Pesticides
66332-96-5	氟酰胺 Flutolanil	农药 Pesticides	732-11-6	氧乐果 Omethoate	农药 Pesticides
137-26-8	福美双 Thiram	农药 Pesticides	1113-02-6	叶菌唑 Metconazole	农药 Pesticides
32809-16-8	腐霉利 Pythil	农药 Pesticides	125116-23-6	乙草胺 Acetochlor	农药 Pesticides
95977-29-0	高效氟吡甲禾灵 Haloxyp-R-methyl	农药 Pesticides	34256-82-1	乙虫腈 Ethiprole	农药 Pesticides
28249-77-6	禾草丹 Thiobencarb	农药 Pesticides	181587-01-9	乙羧氟草醚 Ethyl carboxyfluorofen	农药 Pesticides
2212-67-1	禾草敌 Molinate	农药 Pesticides	77501-60-1	己唑醇 Hexazolyl alcohol	农药 Pesticides
94361-06-5	环丙唑醇 Cyclopropazole alcohol	农药 Pesticides	79983-71-4	异丙隆 Isoproturon	农药 Pesticides
99105-77-8	磺草酮 Sulfuron	农药 Pesticides	34123-59-6	异噁草松 Isoxapine	农药 Pesticides

续表1

CAS	物质名称 Substance name	类别 Category	CAS	物质名称 Substance name	类别 Category
2686-99-9	混灭威 Mixed methomyl	农药 Pesticides	81777-89-1	异菌脲 Iprodione	农药 Pesticides
15972-60-8	甲草胺 Alachlor	农药 Pesticides	36734-19-7	茚虫威 Indoxacarb	农药 Pesticides
5598-13-0	甲基毒死蜱 Chlorpyrifos methyl	农药 Pesticides	144171-61-9	莠灭净 Atrazine	农药 Pesticides
23564-05-8	甲基硫菌灵 Thiophanate methyl	农药 Pesticides	834-12-8	莠去津 Ametryn	农药 Pesticides
29232-93-7	甲基嘧啶磷 Methyl pyrimidine phosphorus	农药 Pesticides	1912-24-9	鱼藤酮 Rotenone	农药 Pesticides
88671-89-0	腈菌唑 Myclobutanil	农药 Pesticides	83-79-4	唑草酮 Oxazolidone	农药 Pesticides
113158-40-0	精噁唑禾草灵 Fenoxazole graminearum	农药 Pesticides	98967-40-9	唑啉磺草胺 Flumetsulam	农药 Pesticides
23103-98-2	抗蚜威 Pirimicarb	农药 Pesticides	7177-48-2	氨苄西林 Ampicillin	抗生素 Antibiotic
1563-66-2	克百威 Carbofuran	农药 Pesticides	73231-34-2	氟苯尼考 Florfenicol	抗生素 Antibiotic
133-06-2	克菌丹 Captan	农药 Pesticides	114-07-8	红霉素 Erythromycin	抗生素 Antibiotic
119738-06-6	喹禾糠酯 Quizalofop-P-tefuryl	农药 Pesticides	15318-45-3	甲砒霉素 Thiamphenicol	抗生素 Antibiotic
76578-14-8	喹禾灵 Quizalofop-ethyl	农药 Pesticides	61-33-6	青霉素 Penicillin	抗生素 Antibiotic
13593-03-8	喹硫磷 Quinothion	农药 Pesticides	57-63-6	17 α 炔雌醇 Ethinylestradiol	激素 Hormone
60-51-5	乐果 Dimethoate	农药 Pesticides	57-85-2	丙酸睾酮 Testosterone propionate	激素 Hormone
203313-25-1	螺虫乙酯 Spirotetramat	农药 Pesticides	50-27-1	雌三醇 Estriol	激素 Hormone
15545-48-9	绿麦隆 Chlortoluron	农药 Pesticides	1231-93-2	炔诺醇 Etnodiol	激素 Hormone
128639-02-1	氯苯胺灵 Chloranilin	农药 Pesticides	797-63-7	左炔诺孕酮 Levonorgestrel	激素 Hormone

本文是从管理角度出发,探究一种能够从大量化学物质中进行高通量快速筛选 PMT 污染物的技术。使用模型预测数据可以提高效率,但是缺点是存在不确定性。在这样的背景下,从管理的角度,笔者不希望在初筛的环节漏掉那些“可疑分子”,筛选原则基于的是最坏情况假设(the worse case)。因此,建模和筛查的思路较为保守,筛选结果说明 120 种物质可能具有 PMT 类污染物特性,但是最终判断是否具有 PMT 的特性,哪些是 vPvM 类污染物需要重点关注,需要进一步的数据支持。

本研究依托 PMT 预测模型,建立了一种农田 PMT 污染物高通量快速筛选方法。通过批量输入化学物质 CAS 号或者 Smiles 码,获得其 P、M 和 T 的数据,结合名录对比法就能够初步判断其是否为 PMT 类污染物。筛选过程快速高效且不局限于农田类 PMT 污染物筛选。希望本研究建立的筛选方法,能够为我国 PMT 类污染物筛选提供一定参考。

通讯作者简介:于洋(1982—),男,博士,高级工程师,主要研究方向为化学物质环境风险评估技术方法。

参考文献 (References):

[1] 林军, 于洋, 郑玉婷. 农田优先控制有毒有害污染物筛

选技术[M]. 北京: 中国农业科学技术出版社, 2020: 1-3

[2] 于洋. 蔬菜常用农药环境风险评估[M]. 北京: 中国农业科学技术出版社, 2021: 2-5

[3] 杨华伟. 浅谈农药的作用与危害[J]. 河南农业, 2019 (10): 25

Yang H W. On the role and harm of pesticides [J]. Agriculture of Henan, 2019(10): 25 (in Chinese)

[4] 于洋, 林军. 化学品环境管理的计算毒理学[M]. 北京: 中国农业出版社, 2021: 4-6

[5] 陈玺, 孙继朝, 黄冠星, 等. 酞酸酯类物质污染及其危害性研究进展[J]. 地下水, 2008, 30(2): 57-59

Chen X, Sun J C, Huang G X, et al. Advance of research on phthalate esters pollution and its harmfulness [J]. Ground Water, 2008, 30(2): 57-59 (in Chinese)

[6] 陈小桐, 安静, 杨合, 等. 辽宁省畜禽养殖业抗生素排放特征及减排路径分析[J]. 环境科学学报, 2021, 41(7): 2896-2904

Chen X T, An J, Yang H, et al. Analysis of antibiotics emission characteristics and reduction path of livestock and poultry industry in Liaoning Province [J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2021, 41(7): 2896-2904 (in Chinese)

[7] 韩进, 程鹏飞, 周贤, 等. 基于畜禽粪便的有机肥中雌激素污染特征[J]. 农业资源与环境学报, 2019, 36(5): 673-678

Han J, Cheng P F, Zhou X, et al. Characteristics of estro-

- gen contamination in organic fertilizers derived from livestock manures [J]. *Journal of Agricultural Resources and Environment*, 2019, 36(5): 673-678 (in Chinese)
- [8] Jin B, Huang C, Yu Y, et al. The need to adopt an international PMT strategy to protect drinking water resources [J]. *Environmental Science & Technology*, 2020, 54(19): 11651-11653
- [9] Jin B, Huang C, Yu Y, et al. The need to adopt an international PMT strategy to protect drinking water resources [J]. *Environmental Science & Technology*, 2020, 54(19): 11651-11653
- [10] Keighley N, Ramwell C, Sinclair C, et al. Highly variable soil dissipation of metaldehyde can explain its environmental persistence and mobility [J]. *Chemosphere*, 2021, 283: 131165
- [11] Berger U, Ost N, Sättler D, et al. Assessment of persistence, mobility and toxicity (PMT) of 167 REACH registered substances [R]. Berlin: Umweltbundesamt (UBA), 2018
- [12] 欧盟化学品管理局. 化学品可持续发展战略[EB/OL]. (2020-10-12) [2021-09-01]. <https://echa.europa.eu/hot-topics/chemicals-strategy-for-sustainability>
- [13] Huang C, Jin B, Han M, et al. The distribution of persistent, mobile and toxic (PMT) pharmaceuticals and personal care products monitored across Chinese water resources [J]. *Journal of Hazardous Materials Letters*, 2021, 2: 100026
- [14] 中国生态环境部固体废物与化学品管理技术中心. 农田有毒有害污染物信息查询系统: 2018SR1077987 [P]. 2018.09.01
- [15] 中国生态环境部. 新化学物质环境管理登记指南[EB/OL]. (2020-11-17) [2021-09-01]. http://www.mee.gov.cn/xxgk2018/xxgk/xxgk01/202011/t20201119_808843.html
- [16] European Commission. REACH: Improvement of guidance and methods for the identification and assessment of PMT/vPvM substances final report [EB/OL]. (2019-11-01) [2021-09-01]. <http://www.umweltbundesamt.de/publikationen>
- [17] Seth R, MacKay D, Muncke J. Estimating the organic carbon partition coefficient and its variability for hydrophobic chemicals [J]. *Environmental Science & Technology*, 1999, 33(14): 2390-239
- [18] 中国国家质量监督检验检疫总局, 中国国家标准化管理委员会. 化学品分类和标签规范 第28部分: 对水生环境的危害: GB 30000.28—2013[S]. 北京: 中国标准出版社, 2014
- [19] 中国国家质量监督检验检疫总局, 中国国家标准化管理委员会. 持久性、生物累积性和毒性物质及高持久性和高生物累积性物质的判定方法: GB/T 24782—2009[S]. 北京: 中国标准出版社, 2010
- [20] 国际癌症研究机构. 致癌物清单[EB/OL]. (2020-10-12) [2021-09-01]. <https://monographs.iarc.who.int/list-of-classifications>
- [21] 欧洲化学品管理局. C&L 数据库[EB/OL]. (2021-7-20) [2021-09-01]. <https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/cl-inventorydatabase>
- [22] 日本环境厅. 关于环境内分泌干扰物的战略计划[EB/OL]. (2016-06-01) [2021-09-01]. <http://www.env.go.jp/chemi/end/extend2016.html>
- [23] 美国环境保护局. 内分泌干扰物筛查计划[EB/OL]. (2013-06-14) [2021-09-01]. https://comptox.epa.gov/dashboard/chemical_lists/EDSPUOCtier-1-screening-under-endocrine-disruptor
- [24] 欧洲化学品管理局. 高关注物质清单(SVHC)[EB/OL]. (2021-7-20) [2021-09-01]. <https://echa.europa.eu/candidate-list-table>
- [25] 世界自然基金会(WWF). 环境中被报告具有生殖和内分泌干扰物清单[EB/OL]. [2021-09-01]. <http://www.greatlakes.nwf.org/cgi/lrmsapp/EDCList>
- [26] 中华人民共和国农业部. 中华人民共和国农业部公告第1997号[J]. 中华人民共和国农业部公报, 2013(10): 57-59
- [27] 中华人民共和国农业部. 中华人民共和国农业部公告第2471号[J]. 中华人民共和国农业部公报, 2016(12): 64
- [28] 中华人民共和国农业农村部. 中华人民共和国农业农村部公告第245号[J]. 中华人民共和国农业农村部公报, 2020(2): 120
- [29] 中华人民共和国农业农村部. 中华人民共和国农业农村部176号公告[EB/OL]. (2007-09-19) [2021-09-01]. http://www.moa.gov.cn/ztzl/ncpzxxz/flfg/200709/t200709-19_893060.htm
- [30] 中华人民共和国农业农村部. 中华人民共和国农业农村部193号公告[EB/OL]. (2019-07-12) [2021-09-01]. <http://www.jgj.moa.gov.cn/jyj/201907/t2019071263208-79.htm>
- [31] 邹颖, 刘宁. 酞酸酯类化合物的理化性质、环境行为及危害[J]. 养殖技术顾问, 2012(7): 237
- Zou Y, Liu N. Physical and chemical properties, environmental behaviors and hazards of phthalates [J]. *Technical Advisor for Animal Husbandry*, 2012(7): 237 (in Chinese)