



# 新污染物筛查和评估系统方法

阮挺, 江桂斌\*

中国科学院生态环境研究中心, 环境化学与生态毒理学国家重点实验室, 北京 100085

\* 联系人, E-mail: [gbjiang@rcees.ac.cn](mailto:gbjiang@rcees.ac.cn)

## Systematic methodology for the screening and assessment of new pollutants

Ting Ruan & Guibin Jiang\*

State Key Laboratory of Environmental Chemistry and Ecotoxicology, Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100085, China

\* Corresponding author, E-mail: [gbjiang@rcees.ac.cn](mailto:gbjiang@rcees.ac.cn)

doi: [10.1360/TB-2023-1047](https://doi.org/10.1360/TB-2023-1047)

中国是世界工业品的重要生产基地, 且拥有高强度的农业和养殖业. 伴随着工业化和城镇化的持续推进, 在促进人与自然和谐共生大前提下, 有毒有害化学物质污染严重已成为制约我国社会经济保持高速增长的核心问题<sup>[1]</sup>. 在我国“十四五”规划和2035年远景目标纲要中, “重视新污染物治理”已明确成为国家未来发展的重大战略需求. 生态环境部指出, 开展新污染物治理需基于问题导向, 实施以有效防范新污染物环境与健康风险为核心的治理策略, 构建以精准筛查、科学评估和风险管控为主线的防控思路. 其中, “筛”和“评”是方法和基础, “控”是目的和手段, 前者决定后者的内容([https://www.mee.gov.cn/zcwj/zcjd/202111/t20211119\\_961028.shtml](https://www.mee.gov.cn/zcwj/zcjd/202111/t20211119_961028.shtml)).

以多种污染物共存、污染效应叠加为核心的环境污染行为和生态健康风险问题, 是全球环境科学和地球化学领域的研究前沿<sup>[2,3]</sup>. 经过充分的准备, 环境化学与生态毒理学国家重点实验室于2006年正式提出在环境介质中筛选和发现新型有机污染物的研究方向. 开展该方向的研究, 需回答下列关键科学问题: (1) 发展筛选理论, 指定识别策略——如何判断并锁定具有污染物特征的化合物结构? (2) 建立复杂介质微量分析方法——在缺乏标准品的条件下如何进行结构确定和浓度定量? (3) 确定污染物的环境化学行为——如何测试和确定疑似物的环境影响和归属?

经过十余年的探索实践, 我们在筛选识别策略和分析方法体系方面取得持续进展, 相继发展了“从物质到风险”和“从风险到物质”的研究策略(图1), 搭建了高通量多功能成组毒理学分析系统(Integrated Toxicity Analysis system, ITA), 并针对性地建立了评估潜在污染物环境行为能力的方法框

架<sup>[4]</sup>. 这些工作带动了环境中新污染物筛选与鉴定的研究, 成为全球新污染物研究的热点领域. 相关经验成果于2023年总结发表在*Chemical Reviews*<sup>[5]</sup>.

全球化学品种类繁多, 对其中潜在污染物的识别需总结有毒有害化学物质在物理化学特征上的共性特征, 即环境持久性(persistence, P)、长距离迁移能力(long-range transport, LRT)、生物累积性(bioaccumulation, B)和毒性(toxicity, T). 该归纳方法最早用于对具有持久性有机污染物特征化学品的识别, 国际政府组织已形成较为一致的判别标准, 有效地支持了对具有PBT特性化学品的风险评估和管理. 近年来, 随着仪器分析能力的提升, 监测污染物的范围得到有效拓展. 在新型环境污染物的广泛定义(如contaminants of emerging concern, CECs)中, 环境持久性(P)和毒性(T)仍是主要的判别标准.

污染物组成复杂、分子结构和行为效应差异显著, 综合应用多种技术方法是完成对研究对象“全覆盖”、实现新型污染物发现“必然性”的有效保证. “从物质到风险”和“从风险到物质”的研究策略在科学研究领域应用广泛, 同样适用于新污染物的识别和评估分析:

(1) 在定量-结构性质关系模型方法方面, 国内外相继形成了基于物理化学参数阈值判别、物理化学参数赋值加权评分、结构指纹相似度比对、深度卷积/图注意力神经网络模型的潜在污染物特性预测研究范式. 这些方法已成熟应用于未受关注特征官能团的识别、特定结构污染物环境行为的预测、危险化学品的环境风险管理、绿色替代技术的研发等领域.

(2) 在高分辨质谱非靶标分析方法方面, 当前技术进步主

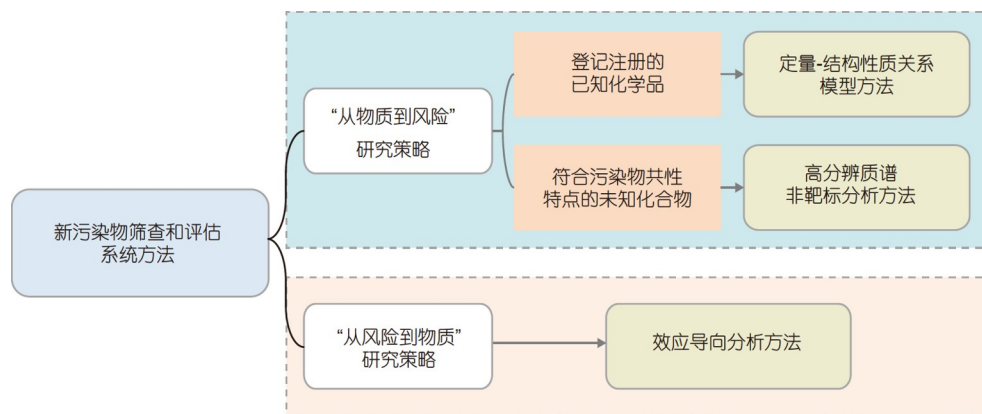


图 1 (网络版彩色)新污染物筛查和评估系统方法框架及其逻辑关系示意图

Figure 1 (Color online) Illustration of the methodological framework and its logical relationships for the screening and assessment of new pollutants

要集中在仪器设备的快速发展和信息处理工具的大量涌现,其核心和难点在于需综合掌握和协调设计包括质谱数据库建设、样品采集和前处理、仪器分析、数据挖掘、结构解析和质量控制等诸多工作流程,以确保关注适当范围的分析物,获得广泛的分子信息,并优先考虑主要的化学特征。该方法在从复杂环境介质中全面识别具有结构多样性的复合污染物组分、筛选确定优先控制污染物的研究中发挥着关键作用。

(3) 在效应导向分析方法方面,其以生物学监测为核心,配合多步分离纯化、物质表征、毒性确认流程,是系统性、准确鉴定环境和生物样本中毒性效应主要贡献物的有效方式。尤其是近年来高通量离体毒性测试技术的发展使得揭示复合污染物组成与非致死环境效应的关联成为可能,并有效拓展了毒性当量(toxic equivalent quantity, TEQ)和毒理学优先指数框架(toxicological priority index, ToxPi)等评估方法的应用域。

(4) 上述各研究方法并非独立存在,而是相互促进、融合并逐渐形成新的研究范式。例如,定量-结构性质关系模型能

够提供丰富的色谱、质谱行为(如保留时间指数、二级质谱碎片指纹等)预测结果,可有效解决当前非靶标分析研究中现有数据库参考物质信息不足的难点问题;在效应导向工作流程中引入更为先进的非靶标分析技术(如整合质谱特征、化学品毒性指纹、环境样本毒理学测量结果的“虚拟组分分馏”方法)可以显著扩大受监测化学品的范围,提高识别出主要效应贡献污染物的可能性。

化学品管理不当引发的环境释放是新污染物的主要来源<sup>[6]</sup>。考虑到未来全球化学品消费规模持续增加的趋势<sup>[7]</sup>和现有化学物质的全生命周期过程<sup>[8]</sup>,有毒有害化学物质的污染将是长期存在的环境问题,传统污染物将与新污染物并存、常规污染与痕量微污染并存。我国新污染物治理底数不清、科技支撑能力不足、风险防范和污染防治体系不够健全。持续深入发展和应用新污染物筛查和评估系统方法能够有效提升对我国新污染物组成分布、迁移转化和生态健康风险的准确理解;对于显著加强污染预防和政策管控、积极促进区域经济与生态环境的协调发展具有重要的现实意义。

## 推荐阅读文献

- 1 Wu F C, Liu Y, Zhao X L, et al. Strategic Study on the Development of the Discipline of Environmental Geosciences (in Chinese). Beijing: Science Press, 2021 [吴丰昌, 刘羽, 赵晓丽, 等. 环境地球科学学科发展战略研究报告. 北京: 科学出版社, 2021]
- 2 Escher B I, Stapleton H M, Schymanski E L. Tracking complex mixtures of chemicals in our changing environment. *Science*, 2020, 367: 388–392
- 3 Vermeulen R, Schymanski E L, Barabási A L, et al. The exposome and health: Where chemistry meets biology. *Science*, 2020, 367: 392–396
- 4 Jiang G B, Ruan T, Qu G B. Theory and Methodology for the Identification of Novel Organic Pollutants (in Chinese). Beijing: Science Press, 2019 [江桂斌, 阮挺, 曲广波. 发现新型有机污染物的理论与方法. 北京: 科学出版社, 2019]
- 5 Ruan T, Li P, Wang H, et al. Identification and prioritization of environmental organic pollutants: From an analytical and toxicological perspective. *Chem Rev*, 2023, 123: 10584–10640
- 6 Wang J Y, Wang Z Y, Chen J W, et al. Environmental systems engineering consideration on treatment of emerging pollutants and risk prevention and control of chemicals (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2022, 67: 267–277 [王佳钰, 王中钰, 陈景文, 等. 环境新污染物治理与化学品环境风险防控的系统工程. 科学通报, 2022, 67: 267–277]
- 7 United Nations Environmental Programme. Global Chemicals Outlook. 2nd ed. Geneva, 2019
- 8 Li L, Wania F. Occurrence of single- and double-peaked emission profiles of synthetic chemicals. *Environ Sci Technol*, 2018, 52: 4684–4693