

水质转化的现代科学与技术

——兼谈环境水化学实验室的科研方向——

汤 鸿 霄

(中国科学院生态环境研究中心, 北京, 100085)

摘 要

本文综述了当前环境水化学的发展趋势及其中若干部分的研究动态与方向, 例如: 化学形态分布、酸化与风化、表面络合、沉积物质量评价、生态毒理、水陆交错带、水处理中的絮凝、膜分离、化学氧化、生物氧化和水质模式等。阐述了作者的若干观点及对环境水化学实验室近期研究方向的一些看法。

关键词: 环境水化学, 水质转化。

1. 环境水化学

天然水体的水质污染和各种用水废水的水质净化一向是环境保护的主要内容。当水资源缺乏而水量供应出现危机时, 水质问题就变得更为重要。水体的污染防治和水处理重复使用都会实际增加可利用水量, 并都依赖于复杂的水质转化过程。要深入了解和高效实现这些过程, 就必须研究水质转化的基本规律, 掌握其现代科学与技术。

水质的含义通常有两个方面, 其一指水的性质, 即水与其中杂质所共同构成的综合特性; 另一指水的质量, 即人类现代生产与生命保健对水质特性所要求的水平。历来对水质的研究主要在化学领域中进行, 因而学科的发展首先综合成为环境水化学。水化学常被理解为水的化学, 实际上更确切的含义应是水质转化的学科, 它研究天然环境和人工强化条件下各种水质转化过程的科学与技术原理。

随着对水质问题日益深入的探索, 其涉及学科已远不限于化学, 而是结合着许多学科领域及各门工程工艺技术, 趋向于形成一门独立的环境水质学科^[1]。

水化学这一学科的主要奠基者, 应认为是W Stumm, 他在此领域中作了广泛深入研究, 得到多方面的规律性新观点, 并综合成完整的体系, 把水化学提高到理论化学的层次。1970年他著作出版“水化学——天然水体化学平衡导论”一书, 集合与深化了他本人及许多研究者的研究成果, 成为把物理化学原理实用于天然水化学的系统专著, 并且把人工水处理过程也包容在内, 全面论述了水质转化过程的规律。1981年他又发表了修订二版, 内容更加丰富, 成为环境科学领域中的经典著作, 不久将会发表其修订三版, 将成为水化学90年代的代表性著作。在此期间, 他还集合众多学者先后主编了“湖泊化学过程”(1985), “水质界面化学”(1987), “水质化学动力学”(1990)等书, 著作了“固-水界面化学”(1992), 合著了德文的“水化学”(1991), “水体生态系统”(1988)等书。同一类型各有特色的著作还有F M M Morel的“水质化学原理”(1983), J F Pankow的“水质化学概念”等书。与这一系列专著同时, 当然还有众多学者发表

了许多其他水化学著作和难以数计的大量研究论文,举行了多次国际学术会议,建立起学派和学术活动网。因而从七十年代以来,水化学成为环境科学中十分活跃的热点之一,目前仍在迅速地向纵深方向发展,形成日益独立的一门应用化学学科。

W Stumm在“Water Chemistry”这一通用名词的基础上创作了“Aquatic Chemistry”这一专用名词,并已得到公认。其确切含义应是水质体系的化学,中文名词或可译为“水质化学”或“水体化学”,但也不易通用。我们建议定名为“环境水化学”或“环境水质学”,兼顾环境科学领域和水化学、水质学的学科方向。陈静生先生曾主编“水环境化学”一书,似可理解为水环境的化学,即侧重于地学特色。我们翻译了W Stumm的水化学修订二版,编写了“环境水化学纲要”,并筹建了国家重点级的“环境水化学实验室”。目前,在我国有许多学者都从事着环境水化学或环境水质学的科学技术研究工作,发表了大量成果,这一学科在我国取得迅速进展是可以期待的。

本文限于篇幅不可能详细论述环境水化学当前研究进展的全部内容,只能选择其中较为突出的若干热点加以概括介绍,并且结合简述环境水化学实验室一些近期研究方向布局,藉以表示我们对水质转化现代科学技术发展趋势的一些认识。

2. 水质形态分布鉴定

水体污染物的形态分布对水质迁移转化及生态毒性效应的重要性已为环境学者所公认,但这一问题尚远未达到基本解决。实际上,它几乎渗透在环境水质的许多难题深入探索中,从鉴定手段、标准操作甚至分类方法都还存在不少争论意见。

水质形态可以包括:化合态、价态、结构态和结合态等方面^[2],其中最具环境特色的是结合态,目前在研究和鉴定方法上争论最多的也是结合态。这是因为水中痕量污染物例如重金属、农药、化学品等大部分都与其他物质结合存在,但其自由离子或游离单体却往往是毒性最强的部分,因而其总体形态分布和结合态的稳定性及生物可利用性就成为研究重点。

形态分布的研究方法时常也就是环境问题的基本方法,即:现场采样鉴定、模拟实验测定、理论模式计算和这三类方法的综合运用,采用各种现代仪器辅助前处理手段进行分析鉴定。以重金属为例,主要是应用各种物理、化学分离程序后以原子吸收光谱和极谱法等进行鉴定。目前,重金属的形态分析在水相主要有Batley及Florence提出的多级分离阳极溶出极谱法,在沉积物固相则有Tessier提出而Forstner改进的逐级连续提取法。这两类方法在操作上都要求较高而且分类较繁,较适合于科学研究而难于推广作为一种推断生物可利用性的常规方法。

阳极溶出极谱法是重金属测定中能够反映某些形态因素的方法,目前一般认为它所测定的金属不稳定态在反应速度与平衡常数上与生物膜较相似,因而可近似当作具有生物毒性的部分。基于这一概念,我们曾提出利用阳极溶出法把重金属形态经一般操作划分为生物直接可用态、间接可用缓冲态和难利用惰性态三类的方案^[3],目前仍在研究试验中。各种重金属形态的分类法对照可见表1,各类并非完全相应的,互有交叉。

此外,有机物形态鉴定,颗粒物界面形态鉴定等方法也在利用各种现代仪器发展中。总之,水质形态分析目前已不单纯是经典的分析化学方法,而是密切结合污染物迁移转化过程及生物毒性效应而进行的。

3. 水体酸化及矿物风化

表 1 重金属形态分类法

Table 1 Speciation classification methods of heavy metals

多级分离阳极溶出法	逐级连续提取法	理论模式计算法	直接阳极溶出法
• 自由离子 • 不稳定无机络合物 • 不稳定有机络合物 • 稳定无机络合物 • 稳定有机络合物 • 不稳定无机吸附物 • 不稳定有机吸附物 • 稳定无机吸附物 • 稳定有机吸附物 • 颗粒物	• 水可溶态 • 离子可交换态 • 碳酸盐结合态 • 铁锰氧化物结合态 • 有机物-硫化物结合态 • 残余态	• 自由离子 • 无机络合物 • 有机络合物 • 吸附物 • 沉淀物 • 惰性物	• 生物直接可利用态 • 生物间接可用缓冲态 • 生物难利用惰性态

酸雨和酸性矿水造成的环境酸化已是全球性的问题。酸雨涉及到大气、土壤、水体、生态等全方位，是多学科综合研究的科技领域。酸雨水化学在国外有大量研究，是酸雨研究中的重要方面^[4]。这本是很自然的，因为酸雨从形成、沉降、渗流径流，一直到水体酸化，全程中都存在水溶液化学过程，而且水体是酸沉降的最终归宿及环境效应的指示象征。但这一重要环节在我国却尚未得到应有的重视，似是由于我国还没有酸化到严重程度的湖泊。然而根据我们对西南地区水体酸化容量的调查计算，其酸化趋势尚是可以察觉的。因此，加强反映我国特点的水体酸化模式及发展趋势预测的研究应是刻不容缓的。

天然水体的酸雨水化学研究可包括有以下几方面内容：

(1) 过程与效应：水体接受酸沉降后水质组成产生的相应转化过程如离子组成及形态、缓冲容量及临界负荷、金属的溶出及形态、沉积物的风化、生物生态效应，等等。

(2) 计算定量模式：在小规模流域中综合各过程及各环境因素构成整体的计算模型与模式。现有的常用模式有：Henriksen, Trickle-down, Birkenes, MAGIC, ILWAS, PULS, RAINS等许多种，往往与所在地区环境条件有密切关系。

(3) 区域划分及趋势预测：在大面积区域或全国国土按照一定的指标分类和计算方法、模式进行水体分类分区，结合酸沉降负荷、土壤特征、地质特征等综合评价预报发展前景。常需依赖于已有的大量水质、水文、气象、土壤、地质、森林复盖等资料进行。

目前，需要建立适合我国水体环境特点的酸雨水化学体系和模式，这方面的研究工作尚处于初期阶段。

矿物风化是水质形成的重要环节，在酸性矿水和酸雨效应中都涉及酸化条件下的矿物风化。水体沉积物在酸化影响下会加速其风化过程，因而风化速率影响着水体对酸沉降的长期缓冲能力和水质的稳定性。根据近年来水质界面化学的研究结果，矿物风化溶解速度以界面反应为速度限定步骤，建立了表面络合动力学模式，而水中质子酸化和各种配体均会加速矿物风化。因此，目前对矿物风化的研究应该结合表面络合理论进行^[5]。

4. 颗粒物表面吸附

环境微量污染物在固/液界面的吸附与解吸是水化学中的重要部分。自从表面络合理论逐步成熟与推广以来,表面吸附已从用几种吸附等温线归纳实验数据的经验方法阶段进展到建立机理模型和定量模式并与溶液化学组成统一体系的理论验证阶段。目前研究的重点是应用于天然吸附剂时的各种复杂问题^[62]。

表面络合原理在计算电荷影响时因对双电层结构的处理方式不同而先后提出各种计算模式,主要有恒定容量模式、扩散层模式和三层模式。目前虽然并未统一认识,但三类模式在处理实验数据时都能达到同等的效果,而理论上的差异一时又难于确证,因而在不同范围内各自都有应用推广,在实用化过程中所遇到的难题反而是类似的。

天然颗粒物作为吸附剂是多种组分的复合体,各组分对金属或有机物有不同的吸附强度及表面络合常数,即使同一种组分例如腐植质也会含有多种基团而有不同的吸附位。因此,对单纯的氧化物或氢氧化物吸附剂建立起来的表面络合模式,如何有效地应用于多组分多级吸附位的天然吸附剂,是当前环境水化学着重研究的难题。此外,吸附剂的浓度效应,表面三元络合物,表面水解及表面沉淀,高分子有机物的吸附,以及吸附动力学等方面都在研究发展中。就其总体而言,基本上都属于天然颗粒物吸附模式的实用化问题。

表面络合模式的计算由于把电荷效应作为校正值而变得较为繁杂,除了用图解法可以处理简单体系外,目前主要采用计算机程序按化学平衡模式处理。先后发展了许多可以计算各种表面络合模式的程序,例如REDEQL, MINEQL, MINTEQ, MICROQL, SURFEQL, HYDRAQL等等,各有特色及改进版本,并已逐步发展为窗口式界面。

由于在我国对表面络合有关的研究工作开展不多,因此首先需要加深理论认识并且明确测定和计算方法,进而结合我国环境实际状况把这一领域的研究工作提高到当前国际上发展的层次。

5. 沉积物质量评价

水体污染研究中逐渐发现大量有毒有害污染物结合在悬浮颗粒物上迁移,最终以水底沉积物为归宿,并且蓄积在沉积物中的污染物有再次释放出来成为二次污染源的潜在危险。因而近数十年来对污染沉积物的研究和评价一直是水体环境关注的重点领域。很明显,仅仅依据水体中上层水质状况和水质标准并不能反映和评价整个水体的现状和预测未来状况,所以制订出一套可以实用的沉积物污染质量标准是十分必要的。从七十年代起,国际上一直围绕着拟定沉积物质量基准进行大量研究,美国环保局广泛组织众多学者开展这一工作。然而,由于这一问题十分复杂,几乎涉及到环境水质科学及生物生态学的全方位,十几年来发表了不少研究报告,但尚未能制订出统一的沉积物质量评价标准,目前尚处于多种推荐方法比较检验的阶段。

根据1992年9月美国环保局沉积物监督技术委员会发表的“沉积物分类方法概览”中归纳提出了十二种沉积物质量评价方法^[7]。诸如:(1)沉积物整体毒性法;(2)沉积物加入污染物毒性法;(3)孔隙水毒性法;(4)平衡分配法;(5)生物组织残余量法;(6)淡水底栖无脊椎动物群落结构与机能法;(7)海洋底栖群落结构法;(8)沉积物质量三合一法;(9)表观效应阈值法;(10)国际联合委员会沉积物评价法;(11)海洋挖掘沉积物试验法(绿皮书法);(12)国家现状与趋势研究计划评价法,等等。目前比较

受到重视的是其中的平衡分配法和沉积物质量三合一法, 但距离得出统一的综合意见和制订出可以实施的法定标准, 尚有相当过程。

水体沉积物的潜在危险评价和确定基准值是一项极为综合的研究。其中涉及现场调查和样品采集, 实验室中沉积物与污染物的分析鉴定, 化学形态分布鉴定, 吸附与释放模拟实验, 生物检验, 毒性效应实验, 化学平衡模式、动态模式和生态模式计算, 等等环节。若欲订出当地容许标准, 则尚需涉及经济与法律、政策等问题。在我国沉积物研究方面虽然在各个环节和不同水体都分别进行过一定工作, 但把这些环节综合起来按一定程序得到可实施的结果尚没有完成过。

6. 水生生态毒理

生态毒理学^[8]研究污染物对生物种群和群落的毒性效应, 包括污染物的传送途径与对环境的相互作用, 因而与一般的生物毒理学有所区别。它除在核酸、细胞、生物种水平上研究毒性效应外, 更着重研究在种群、群落等生态系统水平上的生态效应, 研究它们在结构与机能上所产生的变化。因此, 对污染物传送途径和环境因素、流量等也必须有所了解, 可见它的研究领域是相当广泛的, 与整个水质转化学科有密切关系。

目前水生生态毒理的研究主要集中在两个方面: 一为污染物生物蓄积过程及数量, 一为污染物对生态系结构和机能的影响效应。

生物蓄积首先是要确定某种污染物在溶液相与生物相之间的分配系数。对于生态系则有众多的物种和不同的种群、群落, 分配系数各不相同, 而对某一物种体内则若干器官各有不同的蓄积量。调查测定各蓄积库的含量和它们之间的相互关系, 从而建立起营养途径及营养网络例如食物链网, 这是一类十分繁重的现场及实验室研究。若进一步探讨生物摄取污染物的途径和机理, 就需研究诸如细胞外分泌物、外细胞壁、原生质等生物高分子层次上污染物的作用过程, 是更微观的工作, 甚至延伸到核酸、基因、自由基等层次。

污染物对生物种群的影响可有不同程度, 例如: 急性毒性致死, 慢性损伤累积致死, 非致死的生理和形态损伤, 非致死的行为变化, 可测定的生化改变等等。宏观上则由死亡率、繁殖率、迁移率等来统计。对生态系则观测其种群的消长、生物多样性的变化等, 得到生物毒性的定性和定量的判断, 从而拟定出控制的指标和标准。

在理论上, 生态毒理或污染生态学已有一套比较完整的概念和方法, 但到目前能够全面评价和剖析一个生态系统的研究成果尚不多见。一般常是应用实地观测、分析鉴定、模拟实验、模式计算等方法, 解决宏观或微观上的某一方面问题。当然, 探索的方面越多, 其结果将会越综合, 越接近真实状况。

7. 水陆交错带

水陆交错带是指天然水体与陆地的相邻地区, 例如海岸、河口、河岸、湖畔、湿地、沼泽等。它们本是地理景观的特殊地带, 介于两种截然不同的地理环境之间的过渡区域。因而在生态系上也是介于水生与陆生两类生态群落交错的过渡区域, 有一定的特殊性。近年来, 在地理学、生态学和环境科学领域中都把水陆交错带作为一种专门系统加以研究。

从环境水化学的观点看, 这一水域环境自也有特殊性, 具有特定的水质转化过程。不过至今尚没有作为一个领域, 专门进行研究, 我们只对其特色提出以下设想。

(1) 非点源及点源污染物的阻留区域: 地面径流冲刷和地下渗流推移的非点源污染物进入水体前将先经过交错带, 点源排放的污染物在某些条件下也会先经过过渡区(例如排入湖泊的河网区)。在此区域中各种污染物如氮磷营养物、有机有毒物、重金属等将由沉积、过滤、植物吸取等作用而阻留下来, 形成首先遭受污染的地带。也可能成为水体的二次污染源。当然, 利用措施得当, 也可能成为水体污染的保护区。

(2) 环境化学条件剧烈变化的区域: 水陆交错与丰枯水期交替的环境将造成氧化与还原性环境在空间与时间上交替出现的局面。污染物的浓缩与稀释也会形成溶解沉淀及其他可逆化学反应的双向变化, 在化学反应过程上有其特殊性。

(3) 界面反应过程显著的区域: 土壤、悬浮物、沉积物和水溶液交错混杂的环境中, 吸附、凝聚和絮凝等界面物理化学过程, 不论是在沉淀中或过滤中都起着关键作用, 这对于痕量污染物尤其重要。

(4) 光化学反应值得重视的区域: 交错带应属于浅层水体区域, 阳光照射所达深度和能量输入吸收的程度将高于一般水体。光催化氧化及界面催化对有机物降解的作用将有可能达到可加利用的程度。

总之, 水陆交错带在环境水化学中也是一个有特色而值得研究的范畴。

8. 水体自净和水质处理

天然水体中的水质转化过程实际上就是污染物的自然净化过程, 只当污染物的排放负荷超过了水体自净能力, 或社会对水质的要求日益提高时, 人类才建立起各种水质处理设施。即使如此, 水处理工程中使用的各种单元过程绝大部分都仍是对自然过程的模拟, 从古老的沉淀、过滤到近代的生物氧化、离子交换以及膜分离, 很少例外。因此, 现代水处理技术仍是利用各种条件加以人工强化的天然净化过程, 水质转化过程的原理是相通的。所以, 环境水化学应包括天然水体及人工强化水处理体系两个方面的各种过程研究, 并以建立水质控制的高效实用技术为目标。

水质评价和水质控制是水质科学发展的动力, 水处理技术的高效化对水质转化过程理论的深化有很大的推动作用。传统的水处理过程常是在规模巨大的土建构筑物中完成的, 在城市规模集中的水处理厂中这是不可避免的。然而近代水处理技术中另一种发展趋势也是显著的, 这就是水处理设施的高效化、中型化和工业化, 应用现代高效技术, 在金属结构的反应器内实现高速的水质转化过程, 并有可能利用电、磁、光辐射等高新技术。这两类水处理设施将会在不同条件下并行综合运用, 而后者或许有更大的发展前途。本文后述的几种技术就是以高效工业化水处理过程为发展方向的。

9. 絮凝和絮凝剂

水处理混凝过程是混和、凝聚、絮凝等作用的总称, 缺乏严格区分定义, 暂以絮凝称之。絮凝是普遍应用于各种水处理过程的前处理环节, 一定程度上决定后续分离过程的水质。絮凝过程的效能首先决定于絮凝剂, 其次是絮凝工艺设施和操作程序。

目前的絮凝剂已经进入高分子时代, 传统的硫酸铝、氯化铁将逐步被种类繁多的有机和无机高分子絮凝剂所代替。各类有机高分子絮凝剂的商品牌号不下数百种, 絮凝效果远胜于传统絮凝剂, 更强力的品种仍在研制, 但因其价格及毒性问题, 始终未能成为絮凝剂中的主流。继之而兴起的是无机高分子絮凝剂, 它实际是加工预制的铝盐和铁盐, 在概念和作用原理上有所革新, 使其效能较传统絮凝剂有显著提高而价格远低于有

机絮凝剂，但到目前为止，其效能尚不能与有机品相比。当前的絮凝剂的发展趋势是研制复合品种，铝盐与铁盐复合、有机与无机复合、其他成分如硫、磷、镁、硅等的复合，层出不穷，尚在探索中^[9]。

对絮凝形态和作用机理的研究也是围绕着高效絮凝剂的研制和应用进行。不同观点的争论验证，新的观测方法与仪器的使用，定量计算模式的探索，都推动着絮凝技术的进展。针对不同水质，从药剂的选择匹配到操作设施的优化和投加量的最经济方案，都是在现场实施运行方面的研究，同样在进行中。

10. 高分子膜分离

膜分离是现代高技术之一，有多方面的广泛应用，水处理技术是其中重要的一环。水处理中应用的各种膜分离有精密过滤（MF）、超滤（UF）、反渗透（RO）、渗析、离子交换（IE）、生物反应（MBR）等等，用于各种水质转化过程。其中超滤膜分离用压较低，适用性较广。MBR则是生物反应器与超滤膜的配套设施，其分设式是反应器出水利用膜分离，而合设式则是生物反应即在膜上进行同时又经膜透过滤，是发展中的新型水处理单元^[10]。

膜分离的关键环节是膜材料和组件。膜材料用多种高分子聚合物，从醋酸纤维素到高分子电解质，种类及配方很多。组件则从管式到中空纤维，型式结构各有不同。根据处理水质及应用条件，对膜组件提出多种性能要求，因而制膜及组装是首要的复杂技术。它本身虽并非水处理过程，但与水质转化需求的功能密切相关。从水化学的观点出发深入探讨膜组件与水中杂质相互作用的机理，同时结合运行时的条件要求和影响因素，解决防污染、消除浓差极化等问题，是进一步提高膜分离技术的必由之路。新型的无机膜、液膜、生物膜等也是值得重视的发展动向。

11. 化学氧化和光氧化

利用化学的氧化剂或还原剂对水中有机或无机污染物进行氧化或还原反应，使达到无害化，在水质控制中得到广泛应用。为了加强效果，特别是对于难降解的或高浓度的有机废水，常需施加人工强化条件或投加催化剂。化学氧化过程时常在催化剂参与下达到高效能和低能耗。

对高浓有机废水的湿式氧化是近代技术之一，但因需在高温高压条件下进行而难以更大范围推广。目前其发展方向就是选择高效的催化剂，在低温低压甚至常温常压下达有机废物的无机化。另一种合理方案是把湿式氧化作为生物氧化的前处理，把难降解或高浓的有机物预加转化，大大减轻生物氧化的负荷。

近年来兴起的对光氧化的研究是在天然水体中开始的。在观察中发现某些在生物氧化中难以降解的残余有机物，在自然条件的阳光照射下反而得到氧化降解，从而引起深入探讨和应用的兴趣。目前认为，水体中光氧化的效果可因颗粒物的界面催化而显著提高，因而界面催化光氧化成为热点，利用半导体催化剂是当前的方向之一^[11]。可以设想，若以某些种天然颗粒物作为界面催化剂，充分利用阳光及自然环境，把天然条件与人工强化条件有机地结合起来，有可能实行难降解有机有毒物的低能耗光氧化降解过程。

12. 生物氧化反应器

应用微生物对有机污染物进行氧化降解，这初始的概念是来自对自然环境中生化过

程的模仿,也是一种仿生学。随着生化处理技术的发展,目前的各种生化构筑物无论在理论和设计上,还是在实际效能上,已远远超过自然过程,成为有机污染物净化十分广阔的领域。目前,生物氧化技术发展的着眼点,一为深入了解有机污染物的化学结构与特性,一为提高微生物的选择性及功能,一为改进生化反应构筑物的效能。

对难降解的有机污染物进行化学结构的分类和对比,从而探索其结构与官能团对生物降解的耐受性和规律,寻求最佳的氧化条件,这是目前从化学角度提高生物处理效能的方向。另外一种新的趋势是应用遗传工程及基因工程的方法,选择和改造细菌的基因强构,加强细菌的选择性和特异功能。这代替着传统的筛选和驯化菌种的方法,吸引着许多微生物学者和基因工程学者从事这一方向的研究。

以化工反应器的原理和方法为基础,把大型的生化处理构筑物改造为中小型的生物反应器,以求达到高速高效及工业化。不论是好氧过程或厌氧过程,都可以用各种人工结化手段提高反应动力学效率,再配合絮凝、膜超滤等过程加强其分离效果,沿这一方向的发展有可能完全改变生物处理的传统形式,达到进一步的现代工业化。

13. 水质模式和系统工程

天然水体的水质定量模式及计算机程序主要分为两大类,即化学平衡模式和稳态动态模式,当前的难题是把这两种模式有机地结合成为一个整体。

化学平衡模式是以热力学为基础,主要通过计算及部分实验的方法,得到平衡状态下污染物的化学形态分布。目前这类模式的计算机程序已有数十种,并且有比较完全的平衡常数数据库,近年来更发展成为应用鼠标或菜单式界面,使用比较方便。现在应用较广的例如把MINEQL的计算方法和WATEQ的数据库合成的MINTEQ系列和用于地球化学和地质学方面的PHREEQE等等^[12]。

稳态和动态模式是计算天然水体流动状态下污染物的扩散迁移及浓度分布,其计算机模式种类更多,针对不同水体、不同污染物、不同计算目的而建立各种通用和专用模式,例如EXAMS, WASP, QUAL等等。在若干动态模式中也加入了化学因素,但至今尚没有能把化学形态和水质条件与动态模式满意地融合起来,而只是把两类模式交替计算。欲得到综合结果尚需在化学动力学和数学方法上深入探索,这是水质模式研究的前沿课题。

地理信息系统(GIS)是把数据库、计算程序和图象化等功能综合起来的软件系统,在环境水化学中也有着十分广泛的用途。

水质转化过程偏重于微观的研究,水质模式则用系统工程的方法加以宏观综合,二者良好地结合达到实用化,应该成为环境水化学总的目标,对天然水体和水处理工艺中都是如此。

环境水化学当前的发展重点仍如笔者曾指出的,可归纳为“三微”和“三模”,即:微量痕量物质,微观形态分布,微细颗粒界面;过程机理模型,定量计算模式,环境实验模拟。

综上所述,水质转化的现代科学与技术有十分广泛深入的内容,本文只选择其中若干部分粗略地发表一些议论,也反映出环境水化学实验室近期研究工作的基本思路。笔者限于认识水平,谬误难免,敬希讨论指正。

参 考 文 献

- [1] 汤鸿霄, 1993. 环境水质学的进展(上). 环境科学进展, 1(1):25—41
- [2] 汤鸿霄, 1982. 水污染化学的形成和发展. 环境化学, 1(2):93—101
- [3] Tang H X et al., 1987. Proceedings of the International Symposium on River Pollution and Management. Part 2, pp546—557
- [4] Schnoor J L, Stumm W, 1985. in "Chemical Processes in Lakes", pp311—338, John Wiley & Sons
- [5] Stumm W 1992. Chemistry of the Solid/Water Interface. John Wiley & Sons
- [6] 汤鸿霄, 1993. 环境水质学的进展(下). 环境科学进展, 1(2):1—13
- [7] USEPA, 1992. Sediment Classification Methods Compendium
- [8] Boudou A, Ribeyre F ed., 1989. Aquatic Ecotoxicology. CRC Press
- [9] 汤鸿霄, 1990. 无机高分子絮凝剂的基础研究. 环境化学, 9(3): 1—12
- [10] 吉野善弥主编, 1988. 高机能水处理剂. 日本粉体工业技术协会
- [11] Zepp R G, Wolfe N L, 1987. in "Aquatic Surface Chemistry", ed. Stumm W, pp423—451, John Wiley & Sons
- [12] Bassett R L, Melchior D C, 1990. in "Chemical Modeling of Aqueous Systems II", pp1—15, ACS

1993年4月20日收到。

MODERN SCIENCE AND TECHNOLOGY FOR WATER QUALITY TRANSFORMATION

Tang Hongxiao

(Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese
Academy of Sciences, Beijing, 100085)

ABSTRACT

A review over the environmental aquatic chemistry on the selected aspects including the chemical speciation, acidification and weathering, surface complexation, sediment criterion, aquatic ecotoxicology, ecotone, flocculation and flocculants, membrane technology, bioractor and water quality modelling. The author's ideas and research topics of State Key Laboratory of Environmental Aquatic Chemistry are included.

Keywords, aquatic chemistry, water quality transformation.