

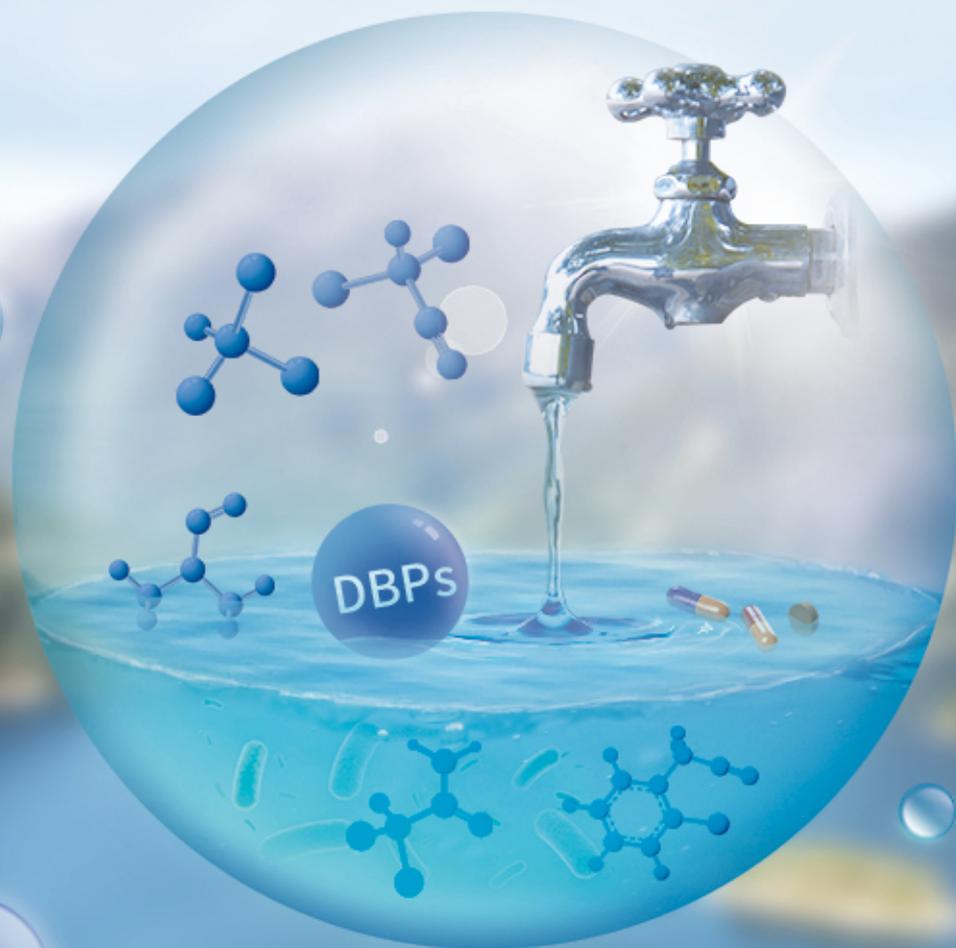
方知库
Eco-Environmental
Knowledge Web

环境科学

ENVIRONMENTAL SCIENCE

ISSN 0250-3301 CODEN HCKHDV
HUANJING KEXUE

饮用水中的消毒副产物及其控制策略
楚文海, 肖融, 丁顺克, 张瑞华



■ 主办 中国科学院生态环境研究中心
■ 出版 科学出版社



2021年11月

第42卷 第11期
Vol.42 No.11

目次

综述与专论

饮用水中的消毒副产物及其控制策略 楚文海, 肖融, 丁顺克, 张瑞华(5059)
生物炭吸附硫化氢机制与影响因素研究进展 徐期勇, 梁铭坤, 许文君, 黄丹丹(5086)

研究报告

1998~2016 中国八大经济区植被覆盖对 PM_{2.5} 浓度时空分布的影响 杨玉莲, 杨昆, 罗毅, 喻臻钰, 孟超, 李岑(5100)
COVID-19 疫情期间北京市两次重霾污染过程大气污染物演变特征及潜在源区分析 赵德龙, 田平, 周崑, 肖伟, 盛久江, 王飞, 杜远谋, 黄梦宇, 何晖, 丁德平(5109)

汾渭平原临汾市 2019 年春节期间大气污染特征与来源解析 刘威杰, 胡天鹏, 毛瑶, 许安, 苏业旺, 李星谕, 程铨, 石明明, 梁莉莉, 邢新丽, 张家泉, 祁士华(5122)

石家庄市大气污染物的季节性时空特征及潜在源区 聂赛赛, 王帅, 崔建升, 刘大喜, 陈静, 田亮, 贺博文, 沈梦宇(5131)

天津市冬季空气湿度对 PM_{2.5} 和能见度的影响 丁净, 唐颖潇, 郝天依, 姚青, 蔡子颖, 张裕芬, 韩素芹(5143)

承德市 PM_{2.5} 中碳质组分的季节分布特征及来源解析 贺博文, 聂赛赛, 王帅, 冯亚平, 姚波, 崔建升(5152)

中国生活源挥发性有机物排放清单 梁小明, 陈来国, 沈国锋, 卢清, 刘明, 陆海涛, 任璐, 孙西勃, 林奎, 梁明易, 叶代启, 陶澍(5162)

2011~2019 年中国工业源挥发性有机物排放特征 刘锐源, 钟美芳, 赵晓雅, 卢诗文, 田俊泰, 李银松, 侯墨, 梁小明, 黄皓旻, 范丽雅, 叶代启(5169)

基于 LHS-MC 青岛市工业源 VOCs 排放清单及不确定性 徐琬莹, 付飞, 吕建华, 李瑞凡, 邵蕊, 和慧, 李淑芬, 左华(5180)

典型橡胶制品业 VOCs 排放特征及对周边环境的影响 王海林, 辛国兴, 朱立敏, 薛松, 聂磊, 郝润(5193)

沈阳市不同功能区挥发性有机物分布特征及臭氧生成潜势 库盈盈, 任万辉, 苏枫棋, 于兴娜(5201)

天津城区夏冬季典型污染过程中 BTEX 变化特征及其健康风险评估 韩婷婷, 李颖若, 蒲维维, 姚青, 刘敬乐, 吴进, 张楠楠, 李梓铭, 马志强(5210)

郑州市大气氨排放清单及驱动力分析 计尧, 王琛, 卢轩, 张欢, 尹沙沙(5220)

基于 GAMs 模型分析成都市气象因子交互作用对 O₃ 浓度变化的影响 张莹, 倪长健, 冯鑫媛, 王式功, 张小玲, 张家熙, 李运超(5228)

长江干流表层水体悬浮物的空间变化特征及遥感反演 李建鸿, 黄昌春, 查勇, 王川, 尚娜娜, 郝维月(5239)

河北省夏季降雨溶解性有机物光谱特征的空间分布、来源解析及氮素响应 张紫薇, 周石磊, 陈召莹, 张甜娜, 董宛佳, 甄瑞晗, 张馨童, 姚波, 崔建升(5250)

城镇与城郊污染河道中 DOM 成分分布与影响因素 朱奔, 陈浩, 丁国平, 孙晓楠, 刘辉, 叶建锋(5264)

北京城市河流水和沉积物中微塑料的组成与分布 胡嘉敏, 左剑恶, 李頔, 谢珍雯, 陈磊(5275)

太湖西岸地表水中中性有机污染物非靶向筛查与生态风险评估 卢昕妍, 王菲, 张丽敏, 任晓鸣, 于南洋, 韦斯(5284)

河水-地下水交互带沉积物中抗生素和代谢产物提取方法优化及其分布特征 李玉琼, 童蕾, 严涵, 尤悦, 卢钰茜, 刘慧(5294)

白洋淀清淤示范区沉积物中抗生素和多环芳烃的分布特征与风险评估 王同飞, 张伟军, 李立青, 张美一, 廖桂英, 王东升(5303)

雄安新区唐河污水库残留污染物对地下水水化学动态的作用机制 张志雄, 王仕琴, 张依章, 冯文钊(5312)

基于时间序列模型的饮用水源地重金属健康风险分析与预测 姬超, 侯大伟, 谢丽, 孙华, 李发志, 周宇, 邓爱萍, 沈红军, 包广静, 王逸南(5322)

千河下游水体-沉积物重金属空间分布、风险及影响因素 高煜, 王国兰, 金梓函, 张军, 耿雅妮(5333)

巢湖流域丰水期可溶态重金属空间分布及污染评价 何苗, 刘桂建, 吴蕾, 齐翠翠(5346)

洪泽湖围网养殖对表层沉积物重金属含量影响与生态风险评估 訾鑫源, 张鸣, 谷孝鸿, 阚可聪, 毛志刚, 陈辉辉, 曾庆飞(5355)

成都市地表水天然水化学变化特征及影响因素 许秋瑾, 赖承钺, 丁瑶, 王照丽, 程中华, 于涛(5364)

雷州半岛地下水化学特征及控制因素分析 彭红霞, 侯清芹, 曾敏, 黄长生, 师环环, 皮鹏程, 潘羽杰(5375)

粤港澳大湾区陆源氮污染源结构与空间分布 董斯齐, 黄翀(5384)

红壤丘陵区小流域典型土地利用的面源氮磷输出特征 房志达, 苏静君, 赵洪涛, 胡炼, 李叙勇(5394)

减氮条件下不同施肥模式对稻田氮素淋溶流失的影响 姜海斌, 张克强, 邹洪涛, 马璞骏, 渠清博, 谷艳茹, 沈仕洲(5405)

互花米草入侵对胶州湾湿地土壤磷赋存形态的影响 沙梦乔, 柴娜, 赵洪涛, 刘春井, 丁文超, 谢文霞(5414)

基于 16S rRNA 高通量测序的北运河水体及沉积物微生物群落组成对比分析 彭柯, 董志, 邸琰蓉, 郭道宇(5424)

硅改性花生壳生物炭对水中磷的吸附特性 赵敏, 张小平, 王梁嵘(5433)

高锰酸钾改性柞木生物炭对 Pb(II) 的吸附特性 莫贞林, 曾鸿鹤, 林华, Asfandiyar Shahab, 石清亮, 张华(5440)

混合金属氧化物/碳复合材料的制备及其对 Pb(II) 的吸附性能 卢予沈, 宗莉, 于惠, 牟斌, 王爱勤(5450)

负载型钛凝胶的制备及其吸附去除三价砷的性能 孙晔洋, 周畅, 甘永海, 吴兵党, 张淑娟(5460)

一体式短程硝化-厌氧氨氧化工艺启动过程的亚硝酸盐调控 左富民, 郑蕊, 隋倩雯, 钟慧, 陈彦霖, 魏源送(5472)

生物炭和秸秆还田对紫色土旱坡地土壤团聚体与有机碳的影响 邓华, 高明, 龙翼, 赖佳鑫, 王莹燕, 王子芳(5481)

紫色土旱坡地不同坡位土壤有机碳组分含量对施肥管理的响应 徐曼, 余添, 王富华, 王丹, 王莹燕, 杨文娜, 高明, 王子芳(5491)

南阳盆地东部山区土壤重金属分布特征及生态风险评估 赖书雅, 董秋瑶, 宋超, 杨振京(5500)

城郊农田土壤多环芳烃污染特征及风险评估 张秀秀, 卢晓丽, 魏宇宸, 朱昌达, 潘剑君(5510)

我国东部沿海地区蔬菜中重金属累积分布特征及居民膳食暴露评估 孙帅, 耿柠波, 郭崔崔, 张保琴, 卢宪波, 张海军, 陈吉平(5519)

典型矿区周边农业用地农产品安全风险及影响因素 霍彦慧, 王美娥, 谢天, 姜蓉, 陈卫平(5526)

稻田土壤 Cd 污染与安全种植分区, 以重庆市某区为例 曹淑珍, 母悦, 崔敬鑫, 刘安迪, 程先, 符远航, 魏世强, 张进忠(5535)

镉污染大田条件下不同品种水稻镉积累的特征及影响因素 王宇豪, 杨力, 康愉晨, 陈小红, 耿杰, 李佳欣, 陈文清(5545)

纳米膜覆盖对畜禽粪便好氧堆肥进程及恶臭气体排放的影响 李永双, 孙波, 陈菊红, 彭霞薇, 白志辉, 庄绪亮(5554)

《环境科学》征订启事(5108) 《环境科学》征稿简则(5151) 信息(5249, 5263, 5283)

太湖西岸地表水中极性有机污染物非靶向筛查与生态风险评估

卢昕妍¹, 王菲², 张丽敏², 任晓鸣³, 于南洋^{1*}, 韦斯¹

(1. 南京大学环境学院污染控制与资源化研究国家重点实验室, 南京 210023; 2. 江苏省环境工程技术有限公司, 南京 210000; 3. 江苏省环境科学研究院, 南京 210036)

摘要: 环境中新兴污染物层出不穷, 已经成为当前环境研究的关键问题。为全面筛查太湖西岸武进和宜兴地区地表水中的潜在极性有机污染物, 基于高效液相色谱和飞行时间质谱联用技术进行非靶向筛查, 利用精确质量数、同位素分布和二级碎片信息进行质谱库匹配共识别出 162 个有机物, 包括 46 种农药、34 种药物、8 种个人护理产品、27 种添加剂、17 种有机合成中间体和 30 种动植物代谢物或天然物质, 其中 45 个有机物经过标准品验证。对 42 种污染物进行定量分析并对 3 种营养级模式生物物种进行生态风险评估, 发现 25 种污染物具有中等风险以上, 12 种污染物具有高风险。非靶向筛查能够在无先验信息和标准品的情况下全面识别潜在未知污染物, 不仅快速、准确和分析通量高, 还能为后续生态风险评估提供重要的依据。

关键词: 药物和个人护理品; 农药; 转化产物; 飞行时间质谱; 分布特征

中图分类号: X522 文献标识码: A 文章编号: 0250-3301(2021)11-5284-10 DOI: 10.13227/j.hjkk.202103114

Nontarget Screening and Ecological Risk Assessment of Polar Organic Pollutants in Surface Water on the West Bank of Taihu Lake

LU Xin-yan¹, WANG Fei², ZHANG Li-min², REN Xiao-ming³, YU Nan-yang^{1*}, WEI Si¹

(1. State Key Laboratory of Pollution Control and Resource Reuse, School of the Environment, Nanjing University, Nanjing 210023, China; 2. Jiangsu Provincial Environmental Engineering Technology Co., Ltd., Nanjing 210000, China; 3. Jiangsu Provincial Academy of Environmental Science, Nanjing 210036, China)

Abstract: Emerging pollutants occur in the environment, which has become a pressing issue for environmental research. In order to comprehensively screen potential polar organic pollutants in surface water of Wujin and Yixing in the Taihu Lake Basin, nontarget screening was carried out by high performance liquid chromatography (HPLC) and time of flight mass spectrometry (TOF-MS). Screened by accurate mass, isotope distribution, and MS/MS information, 162 organic compounds were identified, including 46 pesticides, 34 drugs, 8 personal care products, and 27 additives; 17 organic synthetic intermediates and 30 metabolites, 45 of which have been verified by reference standards. Through the quantitative analysis of 42 pollutants and ecological risk assessment of 3 trophic model species, it was found that 25 pollutants posed medium risk while 12 pollutants presented high risk. Nontarget screening can be used to identify potential pollutants with no prior information or standards. It is not only fast, accurate, and has high analytical flux, but also provides an important basis for subsequent ecological risk assessment.

Key words: pharmaceutical and personal care products; pesticides; transformation products; time of flight mass spectrometer; distribution

随着工业和科技的发展, 全世界每年都有成千上万的合成化学品生产, 在生产和应用过程中不可避免地排放到环境中。据统计, 已登记生产和使用超过 35 万种化学品, 并且在不同国家/地区之间存在很大差异^[1]。除了已经登记注册的已知化学品, 新兴有机污染物还可能包括经环境转化生成的化合物^[2]。由于这些未知物质对环境潜在的不利影响, 人们对新兴污染物的关注日益增加。已有文献报道过各种环境基质和生物样品(包括水、土壤、沉积物、污水污泥、人尿和血清等^[3-7])中新兴污染物的存在。靶向分析是目前检测环境中污染物的主要方法, 其对标准品和先验信息的依赖很大程度上限制了对未知污染物的监测, 从而会影响环境风险的评估^[8]。为了更全面地了解环境中存在的污染物, 基于高分辨质谱仪的非靶向筛查方法能够不以特定目标物作为预设研究对象, 在没有标准品的情况下针对整个环境样

品中的质谱数据信息进行化学鉴定^[2,9], 已成功用于识别环境中的各种污染物(例如农药^[10]和全氟化合物^[11]等)。

太湖流域是中国城市化和工业化发展速度最快的区域之一, 在区域经济和社会发展中具有重要的战略地位。近年来对太湖采取了一系列整治措施, 如化工企业的污染排放管控、面源污染物监控、引江济太、重点区域的清淤等, 取得了一定成效, 但西部沿岸、北部梅梁湖等仍是太湖污染较严重的区域^[12,13]。目前有关太湖流域的研究多集中于局部区域特定类别物质(例如多氯联苯或有机磷酸酯^[14,15])的污染情况, 目前还很少有研究对其进行

收稿日期: 2021-03-12; 修订日期: 2021-04-13

基金项目: 国家自然科学基金优秀青年科学基金项目(22022603); 江苏省太湖水环境综合治理科研课题项目(TH2018404)

作者简介: 卢昕妍(1996~), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为环境有机污染物分析, E-mail: lx81049@163.com

* 通信作者, E-mail: yuny@nju.edu.cn

污染物非靶向筛查分析。

因此,本文选择太湖西岸的武进和宜兴地区,基于高效液相色谱-飞行时间质谱对其地表水进行非靶向筛查,识别鉴定地表水中潜在的有机污染物.选择部分污染物进行定量分析,以确定它们的分布特征,评估其水生生态风险.以上结果将有助于人们更全面了解太湖西北部水生环境中污染物的类型、分布状况及其潜在的环境风险。

1 材料与方法

1.1 样品采集

根据研究区域的污染源分布特点、水系特点和所在地的地形特点,于2019年8月27日在武进地区和宜兴地区分别布置8个地表水样品采集点(图1).分别在点位YX4(宜兴市官林凌霞污水处理厂)和WJ3(常州纺织工业园污水处理厂)上下游500 m增设点位YX4U/YX4D和WJ3U/WJ3D.每个点位采集1 L表层水样,其中WJ2和YX2点位取平行水样.将水样置于4℃保温箱,并于24 h内运回实验室提取。



YX4* 和 WJ3* 表示分别在上下游 500 m 增设点位
YX4U/YX4D 和 WJ3U/WJ3D

图1 武进和宜兴采样点位示意

Fig. 1 Map of the sampling sites in Wujin and Yixing

1.2 仪器与试剂

甲醇和正己烷(HPLC级,Merck,德国);甲酸和二氯甲烷(HPLC级,ROE Science,美国);乙酸铵(HPLC级,CNW Technologies GmbH, Duesseldorf, 德国);水(LC-MS级,Fisher,美国).实验用标准品均购自美国AccuStandard公司。

本实验所用仪器包括固相萃取装置(WAT200609,Waters,美国);氮吹仪(N-EVAP112, Organomation Associates, 美国);高效液相色谱

(Nexera X2 LC30, SHIMADZU, 日本);飞行时间质谱(TripleTOF 4600, AB SCIEX, 美国)。

1.3 样品前处理方法

水样过滤去除悬浮颗粒物后进行固相萃取.将1 L水样使用Oasis WAX、Oasis WCX和Oasis HLB固相萃取小柱(Waters, 美国)串联富集.完成富集后,用超纯水淋洗,负压下抽去残留水分,并分别用5 mL含2% $\text{NH}_4 \cdot \text{OH}$ 的甲醇溶液,含2% HCOOH 的甲醇溶液和甲醇洗脱.洗脱液合并浓缩至1 mL,过滤膜后待测。

1.4 仪器分析

样品使用超高效液相色谱-飞行时间质谱联用仪进行分析处理。

色谱柱为Waters BEH C18色谱柱(2.1 mm × 50 mm, 2.5 μm),柱温保持40℃,以A相正模式下0.1%甲酸水溶液(体积比)、负模式下2 mmol·L⁻¹乙酸铵水溶液和B相甲醇为流动相进行梯度洗脱,流速为0.4 mL·min⁻¹.梯度洗脱程序如下:在39 min内,流动相B由0%升至100%并停留9 min,恢复初始状态.进样量为10 μL 。

飞行时间质谱分别采用ESI源正、负离子模式,源温度为550℃,监测模式为全扫描;母离子扫描质荷比范围为50~1 250,子离子扫描质荷比范围为30~1 250;碰撞能量(CE)为20、40和60 eV(正离子)/-20、-40和-60 eV(负离子)。

1.5 非靶向筛查方法

使用MS Dial 4.48提取最低峰响应为1 000、信噪比(S/N)大于3的特征峰,峰对齐参照混合样品,其余参数为软件默认设置.保留未在程序空白中检出或峰面积大于10倍于程序空白中检出的特征峰进行非靶向筛查。

非靶向筛查是通过与开源高分辨质谱库信息比对进行物质识别.匹配参数包括:精确质量误差 $<5 \times 10^{-3}$,同位素分布误差 $<20\%$;与数据库匹配到2个及以上二级质谱碎片.最终通过定量或定性用标准品进行验证(保留时间偏差 $<0.2 \text{ min}$)。

1.6 质量保证与质量控制

采样过程中设置运输空白样品(Milli-Q水)与平行样品(10%样品点位,共2个点位).从样品采集到分析共制备4个全过程空白样品用于扣除环境背景值.采用外标法定量,以3倍信噪比作为方法的检出限,方法检出限范围为0.006~1.044 ng·mL⁻¹,所有物质的平均标准曲线回归系数 $R = 0.992(0.972 \sim 0.999)$,标准品信息和相关质控数据见表1。

表 1 42 种标准品标准曲线回归系数和方法检出限
Table 1 Standard curve regression coefficient and detection
limit of 42 kinds of standards

名称	CAS 号	回归系数 (<i>R</i>)	检出限 (LOD) /ng·mL ⁻¹
灭草松	25057-89-0	0.998	0.058
乙嘧酚	23947-60-6	0.997	0.029
氟洛芬	73231-34-2	0.997	0.107
氟吡尼砜	120068-36-2	0.980	0.129
氟虫腓	120068-37-3	0.990	0.006
氟磺胺草醚	72178-02-0	0.995	0.052
氯虫苯甲酰胺	500008-45-7	0.999	0.029
氟虫双酰胺	272451-65-7	0.988	0.010
厄贝沙坦	138402-11-6	0.991	0.041
2,4-二氯酚	120-83-2	0.985	0.463
2,4-二硝基酚	51-28-5	0.987	0.035
苯并三氮唑	95-14-7	0.976	0.241
4-硝基苯酚	100-02-7	1.000	0.035
五氯酚	87-86-5	0.995	0.021
苯并咪唑	51-17-2	0.988	0.159
水杨酸	69-72-7	0.977	0.652
2-羟基莠去津	2163-68-0	0.993	0.125
2-甲基-4-氯苯氧乙酸	94-74-6	0.996	1.044
扑灭津-2-羟基	7374-53-0	0.996	0.096
对-羟基苯甲酸乙酯	120-47-8	0.999	0.056
六甲基磷酰三胺	680-31-9	0.997	0.046
全氟辛烷磺酸	1763-23-1	1.000	0.006
全氟辛酸	335-67-1	0.999	0.041
1-金刚烷胺	768-94-5	0.999	0.091
扑灭通	1610-18-0	0.996	0.015
避蚊胺	134-62-3	0.982	0.017
异丙隆	34123-59-6	0.988	0.025
二环己基胺	101-83-7	0.998	0.037
多效唑	76738-62-0	0.993	0.018
异丙甲草胺	51218-45-2	0.998	0.030
舒必利	23672-07-3	0.994	0.049
三苯基氧化膦	791-28-6	0.972	0.059
林可霉素	154-21-2	0.997	0.049
烯酰吗啉	110488-70-5	0.991	0.029
缬沙坦	137862-53-4	0.991	0.060
替米沙坦	144701-48-4	0.993	0.025
罗红霉素	80214-83-1	0.990	0.129
全氟十二酸	335-76-2	0.999	0.034
克林巴唑	38083-17-9	0.991	0.050
阿特拉津	1912-24-9	0.991	0.018
2-氨基苯并咪唑	934-32-7	0.975	0.190
敌草隆	330-54-1	0.998	0.027

2 结果与讨论

2.1 地表水中极性有机物非靶向筛查鉴定

采用上述非靶向筛查策略,从太湖西岸地表水中共识别出 162 种物质,其中 45 种物质经标准品验证(表 2)。如图 2 所示,这些检出物质按照主要用途分类。农药作为一类在农业领域中广泛使用的化学品检出数量多达 46 种,包括 7 种酰胺类、6 种三唑类、5 种三嗪类、3 种咪唑类、2 种脲类、1 种有机

氯类、8 种其他类农药及其 14 种转化产物。检出药物包括 6 种抗生素共计 34 种,检出个人护理产品共计 8 种。添加剂主要分为表面活性剂、有机磷阻燃剂、增塑剂、食品添加剂和其他添加剂,共识别出 27 种,包括 5 种全氟化合物。此外,还识别出 17 种有机合成中间体和 30 种天然代谢物。上述 162 种化合物中,有 95 种化合物在所有点位的检出率在 80% 及以上,127 种化合物的检出率在 50% 及以上,指出了这些物质在太湖西岸普遍存在。

依据样品的聚类结果所示,采集地表水的 16 个点位主要分为 3 类(图 3)。YX5 和 YX6 分别为横山水库和油车水库采样点,WJ3 为常州纺织工业园污水处理厂采样点,这 3 个点位化合物的检出率和检出物质的浓度都低于其他点位,说明横山水库和油车水库水质较好,以及常州纺织工业园污水处理厂污水处理效率较高。第二类点位均属于宜兴地区采样点,第三类点位均属于武进地区采样点,这两类点位检出物质的空间分布具有明显差异,说明了不同地区根据其地理位置、工农业生产的差异而可能具有不同的特征污染物。以农药为例,在第二类点位即宜兴地区采样点中,红框范围内有 60% 的化合物属于农药(约 24 种),说明这些农药广泛用于宜兴地区农业生产;而在第三类点位即武进地区采样点中,紫框范围内约 80% 的化合物(约 12 种)被识别为农药,这些农药在武进地区采样点中均有检出。根据 2018 年国民经济和社会发展统计公报^[16,17],宜兴市全年农作物播种面积大约是武进区的 3 倍,说明了宜兴市的农业生产规模更大,在宜兴地区发现的农药数量更多可能与此有关。另外,两个地区内发现的农药种类也不尽相同,推测是因为当地粮食作物种类有差异或使用习惯不同。相较于宜兴地区,在武进地区还发现高响应的药物,包括抗高血压药缬沙坦、厄贝沙坦和美洛托尔,抗精神病药阿米舒必利,抗生素红霉素,抗病毒药金刚烷胺,抗雄激素药比卡鲁胺等。另外,还有一类个人护理产品克林巴唑和一种常用驱蚊产品避蚊胺也被聚类于此,考虑到这些化学品都与人类活动密切相关,推测这种分布是由于武进区的人口密度较高,大约是宜兴市的 2.5 倍所致。此外,污水处理厂及其上下游点位的物质分布也有一定差异。二环己基胺、水杨酸、4-硝基苯酚、4-羟基喹啉、对-甲苯磺酸、2-萘磺酸、环己胺、松香酸、对-羟基苯甲酸、3,4-二羟基苯甲酸、邻-羟基苯乙酸、邻-苯二甲酸和 6-(4-磺基苯基)壬酸都展示出了从宜兴市官林凌霞污水处理厂上游到下游逐渐增加的趋势,暗示这些物质在该污水处理厂附近可能有排放源;而在武进区纺织工业园污水

表 2 162 种非靶向识别有机物¹⁾

Table 1 162 nontarget identified organic compounds

名称	CAS 号	平均质量 信噪比	平均质量 误差 × 10 ⁻³	名称	CAS 号	平均质量 信噪比	平均质量 误差 × 10 ⁻³
咖啡因	58-08-2	14.6	-2.83	腺苷	58-61-7	17.3	-0.58
地麦普内酯	5989-02-6	11.5	1.91	丙环唑	60207-90-1	10.9	-0.49
多菌灵	10605-21-7	80.3	-1.04	4-羟基唑啉	611-36-9	34.7	-0.09
环己胺	108-91-8	74.7	-1.56	查耳酮	614-47-1	35.6	-1.47
烯酰吗啉 ^a	110488-70-5	10.0	0.46	阿米舒必利	71675-85-9	3.9	0.52
4-二甲氨基吡啶	1122-58-3	17.7	-2.04	磺胺甲噁唑	723-46-6	16.0	0.82
红霉素	114-07-8	39.9	1.82	扑草净	7287-19-6	26.4	-0.06
甲氧咪草烟	114311-32-9	21.2	1.47	虫草素	73-03-0	12.5	0.09
磷酸三(2-氯乙基)酯	115-96-8	14.7	1.30	腺嘌呤	73-24-5	13.7	0.68
十四烷基硫酸钠	1191-50-0	4.7	-2.10	扑灭津-2-羟基 ^a	7374-53-0	28.1	-1.53
磷酸三丁酯	126-73-8	6.7	-1.71	多效唑 ^a	76738-62-0	21.6	2.39
噻菌酯	131860-33-8	12.6	-3.80	1-金刚烷胺 ^a	768-94-5	78.8	-2.60
避蚊胺 ^a	134-62-3	53.8	-1.82	磷酸三乙酯	78-40-0	20.8	1.86
氟环唑	135319-73-2	10.4	-1.29	磷酸三(丁氧基乙基)酯	78-51-3	7.6	-0.86
磷酸三(1-氯-2-丙基)酯	13674-84-5	14.0	-1.21	三苯基氧化膦 ^a	791-28-6	53.3	-0.01
4-甲基-5-(β-羟乙基)噻唑	137-00-8	30.2	1.17	己啶醇	79983-71-4	31.3	-0.57
缬沙坦 ^a	137862-53-4	10.1	-3.30	罗红霉素 ^a	80214-83-1	27.6	-3.47
厄贝沙坦 ^a	138402-11-6	17.2	-0.57	戊唑醇	80443-41-0	31.1	-0.50
丙草胺-去咪唑-氨基	139520-94-8	8.1	-0.30	克拉霉素	81103-11-9	21.8	-0.41
替米沙坦 ^a	144701-48-4	19.7	-0.92	对-甲氧基肉桂酸	830-09-1	6.8	0.97
9,12,13-三羟基十八烷基-10-烯酸	29907-56-0	28.7	-1.39	4-乙酰氨基安替比林	83-15-8	22.5	-0.97
5-苯基戊烷-2,4-双酸	1552-94-9	9.4	-1.10	萘甲唑林	835-31-4	13.2	1.46
扑灭通 ^a	1610-18-0	8.2	0.55	邻-苯二甲酸丁苄酯	85-68-7	4.9	-2.75
2-氨基-4-甲基-6-甲氧基-1,3,5-三嗪	1668-54-8	66.2	-1.60	月桂酰胺丙基甜菜碱	86438-79-1	66.2	0.56
4-甲酰氨基安替吡啉	1672-58-8	9.1	-0.22	3-吡啶乙酸	87-51-4	22.0	2.40
阿特拉拉津 ^a	1912-24-9	15.2	1.09	邻-苯二甲酸	88-99-3	14.1	-0.73
莠灭醇	19431-84-6	15.1	-1.83	2-氨基苯并咪唑 ^a	934-32-7	38.6	1.33
3,5-二甲基金刚胺	19982-08-2	533.7	-0.29	二环己基胺 ^a	101-83-7	29.9	0.33
戊唑醇-叔丁基羟基	212267-64-6	8.9	-0.63	2-羟基莠去津 ^a	2163-68-0	20.0	0.57
间-氨基苯甲脒	2237-30-1	33.8	-1.97	六甲基磷酰三胺 ^a	680-31-9	44.2	-0.11
N6-异戊烯腺嘌呤	2365-40-4	15.7	-0.06	双酚 S	80-09-1	73.7	-0.35
舒必利 ^a	23672-07-3	8.1	0.85	水杨醛	90-02-8	8.5	-0.39
				全氟辛酸磺酸 ^a	1763-23-1	88.3	0.29
				乙草胺乙烷磺酸钠盐	187022-11-3	40.9	-0.32
				啶酰菌胺	188425-85-6	56.6	-0.42
				(R)-3-羟基十四烷酸	1961-72-4	10.2	-1.14
				3,6,8-三羟基-1-甲基占吨酮	20716-98-7	34.1	0.71
				醋磺胺甲噁唑	21312-10-7	13.8	3.19
				乙噻吩 ^a	23947-60-6	13.5	-1.33
				灭草松 ^a	25057-89-0	297.6	-0.11
				全氟己基乙磺酸	27619-97-2	6.0	-3.04
				羟基百菌清	28343-61-5	12.5	-1.46
				林可霉素 ^a	154-21-2	4.4	-2.50
				熊果酸	30265-59-9	20.5	0.30
				十一氟己酸 ^b	307-24-4	11.7	0.91
				苯二甲酸单异丁酯	30833-53-5	27.4	0.30
				(4-壬基苯氧基)乙酸	3115-49-9	117.9	-0.59
				敌草隆 ^a	330-54-1	13.6	0.29
				全氟辛酸 ^a	335-67-1	281.2	-3.05
				全氟十二酸 ^a	335-76-2	12.8	-0.57
				3-羟基壬酸	40165-87-5	15.1	-0.96
				3-吡啶甲醛	487-89-8	36.9	0.85
				3-(2-羟苯基)丙酸	495-78-3	320.4	-0.71
				氯虫苯甲酰胺 ^a	500008-45-7	35.3	0.47
				花生四烯酸	506-32-1	56.2	0.27
				2,4-二硝基酚 ^a	51-28-5	28.1	-0.24
				桔霉素	518-75-2	5.4	3.08
				吴耳酸	521-52-8	6.4	-4.98
				3-羟基肉桂酸	588-30-7	6.1	0.96
				玉米赤霉烯醇	5916-52-9	13.6	-0.99
				邻-羟基苯乙酸	614-75-5	8.0	-2.00
				3-硝基-L-酪氨酸	621-44-3	23.9	1.03
				苯甲酸	65-85-0	20.6	-0.35
				水杨酸 ^a	69-72-7	14.3	-0.63

续表 2

名称	CAS 号	平均质量 信噪比	平均质量 误差 $\times 10^{-3}$	名称	CAS 号	平均质量 信噪比	平均质量 误差 $\times 10^{-3}$	名称	CAS 号	平均质量 信噪比	平均质量 误差 $\times 10^{-3}$
9H-吡啶[3,4-b]咪唑	244-63-3	28.7	-0.09	4-硝基苯酚 ^a	100-02-7	37.4	1.27	呋啉-3-甲醇	700-06-1	22.1	-1.14
加拉索酮	256393-37-0	9.8	3.38	对-甲苯磺酸	104-15-4	13.0	-2.36	阿坎酸	77337-76-9	18.8	1.22
呋啉-3-乙醛	2591-98-2	24.5	-3.27	7,8-二甲基咯嗪	1086-80-2	29.0	-0.74	4-吡哆酸	82-82-6	65.9	-0.76
仲丁通 ^b	26259-45-0	10.1	0.40	虫酰肼	112410-23-8	5.5	1.21	磷酸二苯酯	838-85-7	22.2	-4.54
卡马西平	298-46-4	11.6	-2.08	1-萘酚-5-磺酸	117-59-9	23.1	-1.31	1-羟基-2-萘甲酸	86-48-6	99.0	-0.66
2,4,6-三[双(甲氧基甲基)氨基]- 1,3,5-三嗪	3089-11-0	23.5	-1.69	1-萘胺-6-磺酸	119-79-9	68.5	-1.82	比卡鲁胺	90357-06-5	6.4	-0.58
异丙隆 ^a	34123-59-6	10.5	2.16	氟苯脒硫化物	120067-83-6	9.9	-3.20	2,7-萘二磺酸	92-41-1	21.2	-3.72
N-丁基苯磺酰胺	3622-84-2	11.1	-1.45	氟吡尼磺 ^a	120068-36-2	16.9	-6.15	苯并噻唑-2-磺酸	941-57-1	42.5	1.71
美托洛尔	37350-58-6	15.0	-2.64	氟虫脒 ^a	120068-37-3	6.3	-0.86	2-甲基-4-氯苯氧乙酸 ^a	94-74-6	6.8	-1.48
米诺地尔	38304-91-5	9.6	-1.01	氟霜唑	120116-88-3	33.4	-0.07	苯并三唑 ^a	95-14-7	194.3	0.71
三环唑	41814-78-2	156.4	0.23	2-萘磺酸	120-18-3	56.6	0.54	3,4-二羟基苯甲酸	99-50-3	6.6	-2.42
哈儿满碱	486-84-0	14.6	-1.52	2,4-二氯酚 ^a	120-83-2	10.2	0.31	对-羟基苯甲酸	99-96-7	10.0	0.56
犬尿喹啉酸	492-27-3	20.2	-0.42	十二烷基苯磺酸	121-65-3	209.8	-1.09	8-(4-磺苯基)辛酸	-	14.7	0.69
异丙甲草胺 ^a	51218-45-2	16.2	-0.89	对-羟基苯甲醛	123-08-0	31.2	-0.15	5-(4-磺苯基)十一烷	-	278.2	-1.46
环啉酮	51235-04-2	24.7	-1.85	丙草胺(ESA)	123732-85-4	25.0	0.56	6-(4-磺苯基)壬酸	-	21.5	0.88
松香酸	514-10-3	19.0	0.78	玉米素	13114-27-7	8.2	0.54	氟虫双酰胺 ^a	272451-65-7	33.4	-0.12
麦司明	532-12-7	9.3	-0.79	7,4'-二甲氧基-3- 羟基黄酮	13198-99-7	4.8	-1.75	苯并咪唑 ^a	51-17-2	12.6	-0.20
甲基苯丙胺	537-46-2	42.8	-1.22	5-甲基苯并三氮唑	136-85-6	37.7	-0.80	氟磺胺草醚 ^a	72178-02-0	81.4	-0.62
环(脯氨酸-缬氨酸)二肽	5654-87-5	7.5	-1.76	抗倒酯	143294-89-7	28.7	-1.29	氟洛芬 ^a	73231-34-2	32.3	-3.11
甲霜灵 ^b	57837-19-1	12.5	-1.04	原脂酸	1448-96-0	9.0	-1.31	五氯酚 ^a	87-86-5	29.1	2.40
2-羟基苯乙酮	582-24-1	12.9	0.10	泛硫乙胺	16816-67-4	8.8	0.24	对-羟基苯甲酸乙酯 ^a	120-47-8	6.4	0.22
5,6-二甲基苯并咪唑	582-60-5	18.1	-1.26	异丙甲草胺(ESA)	171118-09-5	51.2	-0.99	克林巴唑 ^a	38083-17-9	6.9	2.22

1) a 表示经定量标准品验证, b 表示经定性标准品验证

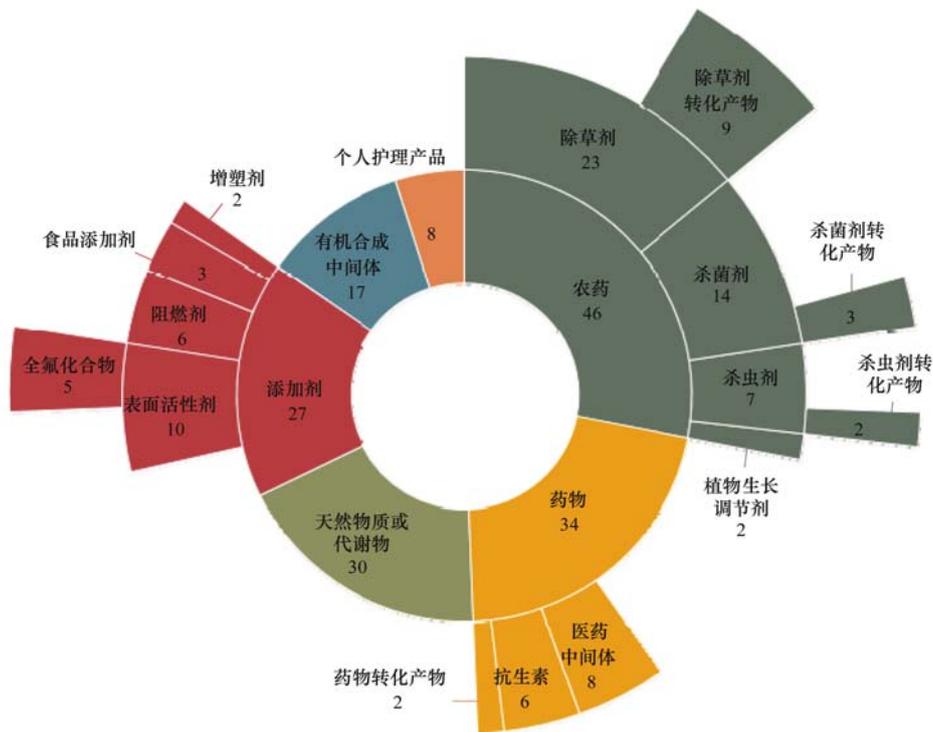


图2 162种检出有机物按用途分类的类别和各类别数量

Fig. 2 Classification and quantity of 162 identified organic compounds by usage

处理厂,仅有磺胺甲噁唑和阿坎酸有从上游到下游逐渐增加的趋势。

2.2 污染物浓度特征

地表水中42种有机污染物定量浓度如表3所示。在20种农药中,灭草松的总体浓度水平最高,为 $1.67 \sim 927.15 \text{ ng} \cdot \text{L}^{-1}$ 。其次是2-甲基-4-氯苯氧乙酸、2,4-二氯酚和氟磺胺草醚,其浓度分别达到了 $83.83 \sim 141.12$ 、 $41.57 \sim 129.09$ 和 $7.81 \sim 106.73 \text{ ng} \cdot \text{L}^{-1}$ 。2,4-二氯酚是2,4-滴的转化产物。灭草松、2-甲基-4-氯苯氧乙酸、2,4-滴和氟磺胺草醚都作为除草剂,在我国被广泛用于农业生产,施用后会伴随地表径流等途径进入地表水,目前还有报道氟磺胺草醚能在水生生物体内进行富集并进入食物链^[18],这种广泛而高强度的检出反映了农业径流对农药非点源污染所带来的影响。两种农药转化产物2-羟基莠去津和氟吡尼砜的浓度是其母体除草剂阿特拉津和杀虫剂氟虫脒的1~4倍,并发现转化产物和其母体之间的浓度都呈显著相关($P < 0.01$)。这说明相比于水体中检测到的农药,其转化产物浓度更高,潜在风险也更大,仅监测水体中农药水平不足以全面评估生态风险^[19]。除此之外,在WJ5、YX1~YX3还发现了 $2.6 \sim 9.77 \text{ ng} \cdot \text{L}^{-1}$ 的五氯酚。五氯酚是一种剧毒多氯除草剂,已在我国淡水水生生物体内检出^[20],被世界卫生组织被列为一类致癌物,属于欧盟高关注度物质(SVHC),也在我国危险化学品目

录^[21]中。

药物和个人护理品(PPCPs)日益受到学术界和公众的广泛关注,已在污水、地表水、地下水和土壤等环境中检出,且被证明可能对生态环境和人类健康具有一定的风险^[22]。3种抗生素罗红霉素、林可霉素和氟洛芬的检出浓度分别为 $17.79 \sim 21.67$ 、 $7.11 \sim 21.21$ 和 $7.24 \sim 166.35 \text{ ng} \cdot \text{L}^{-1}$ 。其中罗红霉素的检出浓度水平与2016年太湖贡湖湾水体一致($14 \sim 23 \text{ ng} \cdot \text{L}^{-1}$)^[23],在太湖流域的表层沉积物中也发现了林可霉素的存在($5.22 \sim 47.7 \text{ ng} \cdot \text{g}^{-1}$)^[24],说明这些抗生素近年在太湖流域稳定存在。3种抗高血压药缬沙坦、厄贝沙坦和替米沙坦的检出浓度分别为 $9.62 \sim 55.25$ 、 $6.97 \sim 56.03$ 和 $11.05 \sim 30.6 \text{ ng} \cdot \text{L}^{-1}$ 。林可霉素和氟洛芬的分布情况显著相关($P < 0.05$)。缬沙坦和替米沙坦的分布也在0.01的水平上具有相关性,可能是因为这些PPCPs具有相似的使用环境。有报道指出污水处理厂是地表水中PPCPs污染的重要来源^[25],武进区纺织工业园污水处理厂出水口下游PPCPs浓度普遍高于上游,与该结论一致,但宜兴市官林凌霞污水处理厂附近点位PPCPs浓度相对较稳定,推测是因为不同污水处理厂接收的污水类型有所区别。

全氟辛酸(PFOA)和全氟辛基磺酸(PFOS)具有环境持久性和生物累积性,广泛存在于我国环境介质及生物体和人体中^[26]。在本研究中所有点位中均检测到了PFOA和PFOS,其浓度范围为 $4.97 \sim$

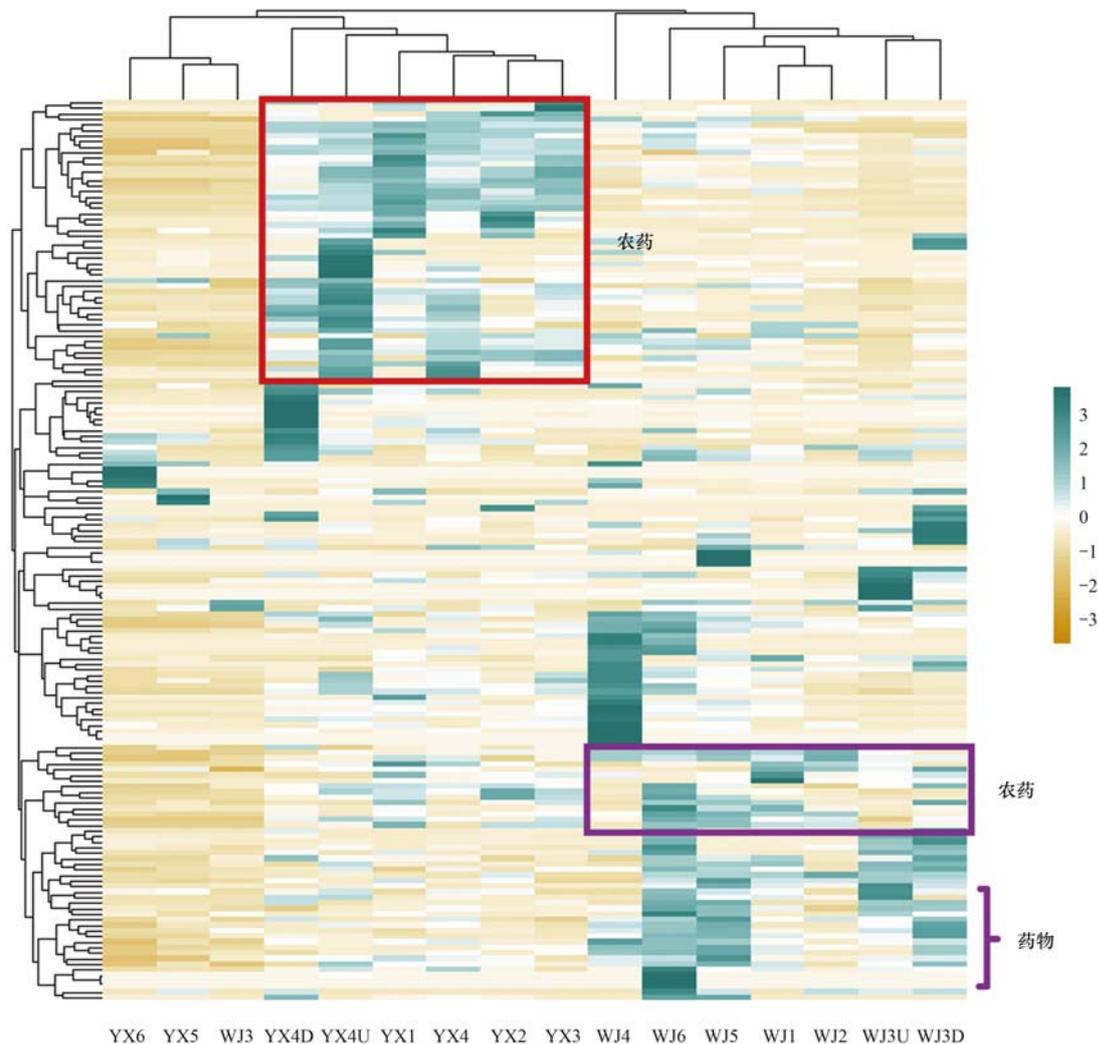


图3 检出有机物在所有点位峰面积分布热图

Fig. 3 Heatmap of peak area distribution of detected organic compounds at all points

表3 地表水中42种有机污染物检出浓度

Table 3 Detection concentration of 42 organic pollutants in surface water

名称	浓度范围 /ng·L ⁻¹	平均浓度 /ng·L ⁻¹	检出率 /%	名称	浓度范围 /ng·L ⁻¹	平均浓度 /ng·L ⁻¹	检出率 /%
灭草松	1.67 ~ 927.15	380.59	100	全氟辛烷磺酸	0.76 ~ 32.21	7.52	94
乙嘧酚	5.08 ~ 16.74	8.38	56	全氟辛酸	4.97 ~ 254.68	41.21	100
氟洛芬	7.24 ~ 166.35	63.24	81	1-金刚烷胺	13.43 ~ 118.74	40.80	94
氟吡尼砜	21.57 ~ 63.43	35.52	81	扑灭通	0.37 ~ 1.59	1.00	31
氟虫腈	3.19 ~ 3.66	3.43	56	避蚊胺	6.53 ~ 19.35	11.97	94
氟磺胺草醚	7.81 ~ 106.73	55.19	88	异丙隆	7.35 ~ 11.62	9.00	50
氯虫苯甲酰胺	2.99 ~ 41.3	15.69	81	二环己基胺	2.81 ~ 10.46	4.66	50
氟虫双酰胺	3.5 ~ 7.96	5.07	69	多效唑	6.67 ~ 13.68	10.86	81
厄贝沙坦	6.97 ~ 56.03	22.47	100	异丙甲草胺	4.24 ~ 32.63	9.17	69
2,4-二氯酚	41.57 ~ 129.09	67.75	31	舒必利	6.32 ~ 23.83	11.53	50
2,4-二硝基酚	7.34 ~ 68.45	24.20	75	三苯基氧化膦	112.6 ~ 279.69	204.71	63
苯并三氮唑	32.52 ~ 4464.58	924.53	94	林可霉素	7.11 ~ 21.21	12.56	81
4-硝基苯酚	37.36 ~ 68.26	52.81	13	烯酰吗啉	7.31 ~ 11.17	8.96	38
五氯酚	2.6 ~ 9.77	4.95	25	缬沙坦	9.62 ~ 55.25	26.15	75
苯并咪唑	10.7 ~ 159.74	53.68	56	替米沙坦	11.05 ~ 30.6	20.07	94
水杨酸	54.48 ~ 187.9	99.94	56	罗红霉素	17.79 ~ 21.67	19.73	13
敌草隆	0.57 ~ 14.23	5.95	94	六甲基磷酰三胺	8.73 ~ 55.39	18.11	81
2-甲基-4-氯苯氧乙酸	83.83 ~ 141.12	109.04	38	2-氨基苯并咪唑	0.73 ~ 5.46	3.36	31
克林巴唑	9.21 ~ 18.69	12.56	50	阿特拉津	8.7 ~ 10.95	9.49	75
对-羟基苯甲酸乙酯	4.49	4.49	6	2-羟基莠去津	18.29 ~ 37.08	29.87	75
全氟十二酸	0.05 ~ 2.59	1.32	13	扑灭津-2-羟基	6.75 ~ 47.51	23.46	75

254.68 ng·L⁻¹和 0.76 ~ 32.21 ng·L⁻¹. 其中 WJ4 的 PFOA 和 PFOS 的浓度远高于其他点位,该点位为横山桥污水处理厂,该污水处理厂可能是这些全氟化合物的来源之一. 有研究指出 2012 年 PFOA 和 PFOS 是太湖梅梁湾最主要的全氟化合物,其浓度范围分别为 7.26 ~ 15.57 ng·L⁻¹和 3.47 ~ 8.06 ng·L⁻¹, 2018 年太湖贡湖湾 PFASs 总浓度约 189 ng·L⁻¹,说明全氟化合物污染现状仍待改善^[27].

3 生态风险评估

本研究使用商值法对检出物质的生态风险进行初步判断^[28,29]. 风险商(RQ)的计算方法如下:

$$RQ = \frac{MEC}{PNEC}$$

式中,MEC 为污染物的实测环境浓度,PNEC 为预测无效应浓度. PNEC 使用评估因子法确定,检出化合物的水生生物毒性数据来源于 ECOTOX 数据库,缺少毒性数据的用 EPA Ecosar 模型^[30]补充. 本研究采用 3 种营养级的 3 种模式生物物种(绿藻、大型蚤和鱼类)作为风险评估保护对象. 选择最低急性慢性毒性数据,以相应的评价因子计算 PNEC 值.

对于急性实验数据,采用半数效应浓度(EC₅₀)或半数致死浓度(LC₅₀)与安全因子系数(safety factor = 1 000)的比值计算 PNEC,即 PNEC = EC₅₀(LC₅₀)/1 000; 对于慢性实验数据,采用最大非可见效应浓度(NOEC)与安全因子系数(safety factor = 10)的比值计算 PNEC,即 PNEC = NOEC/10. 一般认为,当 RQ > 1 时,为高风险; 0.1 ≤ RQ ≤ 1 时,为中等风险; 当 RQ < 0.1 时,为低风险.

生态风险评估结果发现(表 4),有 25 种污染物至少在一个点位对于任一种生物模式物种具有中等风险以上. 12 种污染物属于高风险污染物,有 9 种为农药或农药转化产物,而对于不同物种而言其高风险农药的种类有很大区别. 对于大型蚤类,5 种高风险农药中有 2 种属于农药转化产物,且其 RQ 都高于母体; 对于鱼类,仅有一种农药转化产物即氟吡尼砜在 YX4U 属于高风险污染物,而其母体氟虫腈在所有点位都属于低风险物质,说明转化产物的潜在生态风险可能比母体更高^[31]. 厄贝沙坦是一种抗高血压药,对于藻类和大型蚤类在所有点位都具有高风险. 水杨酸和 4-硝基苯酚都是化工生产中的常见原料,对于大型蚤类在部分点位具有高风险.

表 4 中高风险污染物 RQ 范围和高风险点位比例

Table 4 RQ range of medium and high risk pollutants and proportion of high risk sites

中高风险 污染物	藻类			大型蚤类			鱼类		
	PNEC	RQ 范围	高风险点位 比例/%	PNEC	RQ 范围	高风险点位 比例/%	PNEC	RQ 范围	高风险点位 比例/%
灭草松	5.1E+01	~18 ¹⁾	81	1.3E+05	<0.1	0	1.0E+05	<0.1	0
氟吡尼砜	3.0E+02 * 1)	~0.21	0	1.6E-01	~409	81	6.3E+01	~1.0	6
氟虫腈	1.2E+02	<0.1	0	1.4E-01	~26	56	9.4E+01	<0.1	0
氟磺胺草醚	5.5E+02 *	~0.19	0	7.4E+03 *	<0.1	0	1.3E+04 *	<0.1	0
氯虫苯甲酰胺	1.8E+03	<0.1	0	4.8E+00	~8.6	63	1.1E+03	<0.1	0
氟虫双酰胺	6.9E+01	~0.11	0	1.3E+00	~6.3	69	3.0E+01	~0.27	0
厄贝沙坦	2.0E+00 *	3.5 ~ 28	100	2.0E+00 *	3.5 ~ 28	100	4.3E+04	<0.1	0
2,4-二氯酚	2.4E+03	<0.1	0	3.8E+00	~34	31	2.0E+03	<0.1	0
2,4-二硝基酚	9.4E+02	<0.1	0	1.0E+02	~0.68	0	3.9E+02	~0.18	0
苯并三氮唑	5.9E+03 *	~0.76	0	1.0E+05	<0.1	0	6.5E+04	<0.1	0
4-硝基苯酚	2.5E+02	~0.27	0	5.6E+01	~1.2	6	1.1E+03	<0.1	0
五氯酚	3.5E+00	~2.8	13	1.0E+03	<0.1	0	1.0E+01	~0.98	0
苯并咪唑	2.5E+02 *	~0.63	0	2.8E+03 *	<0.1	0	1.5E+04 *	<0.1	0
水杨酸	1.2E+04	<0.1	0	3.2E+01	~5.9	56	9.0E+04	<0.1	0
敌草隆	1.0E+02	~0.14	0	1.6E+02	<0.1	0	2.4E+03	<0.1	0
2-甲基-4-氯苯氧乙酸	5.0E+02	~0.28	0	1.8E+05	<0.1	0	1.9E+03	<0.1	0
克林巴唑	1.4E+02 *	~0.13	0	7.8E+02 *	<0.1	0	1.0E+03 *	<0.1	0
异丙隆	5.0E+00	~2.32	50	1.0E+03	<0.1	0	2.1E+05	<0.1	0
异丙甲草胺	1.0E+01	~3.26	6	1.1E+03	<0.1	0	3.9E+03	<0.1	0
三苯基氧化膦	— ²⁾	—	—	2.0E+03 *	~0.14	0	5.4E+04	<0.1	0
林可霉素	7.0E+01	~0.30	0	7.2E+03	<0.1	0	1.0E+08	<0.1	0
缬沙坦	2.3E+02 *	~0.25	0	4.2E+02 *	~0.13	0	4.4E+04	<0.1	0
替米沙坦	1.1E+02 *	~0.29	0	1.2E+02 *	~0.27	0	2.1E+03	<0.1	0
阿特拉津	2.5E+01	~0.44	0	4.8E+01	~0.23	0	2.2E+02	<0.1	0
2-羟基莠去津	1.0E+04	<0.1	0	4.1E+03	~0.45	0	6.6E+01	~0.56	0

* 表示该数据由 EPA Ecosar 补充的毒性数据计算得出; 1) 表示灭草松的 RQ 计算值在所有点位中最大值为 18, 最小值小于 0.1 或存在未检出点位; 2) “—”表示此物质对于相应物种没有相关毒性数据和风险数据

4 结论

(1)在太湖西岸武进和宜兴地区一次识别出162种化合物,包括46种农药、34种药物、8种个人护理产品、27种添加剂、17种有机合成中间体和30种动植物代谢物或天然物质。

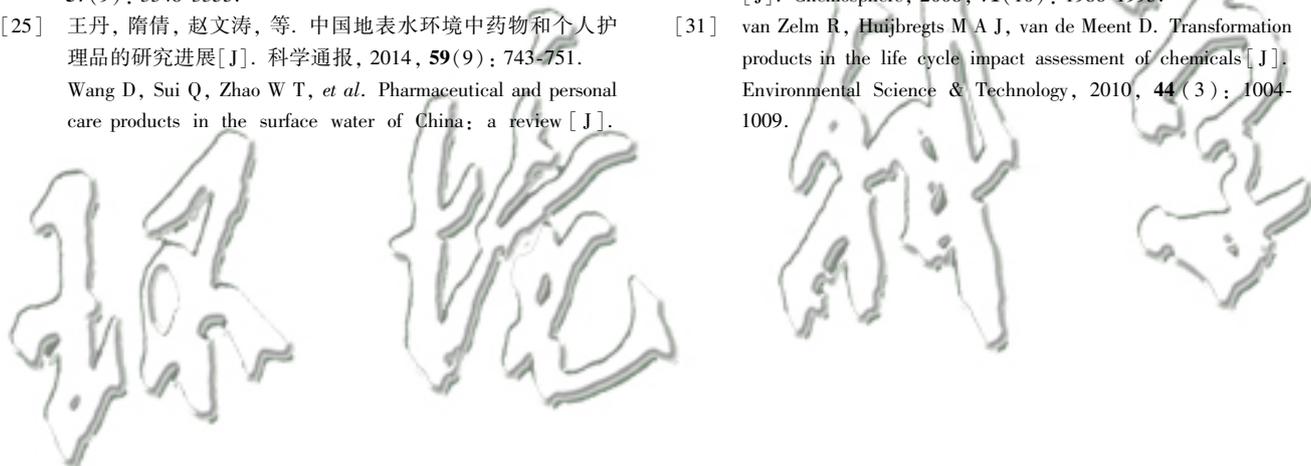
(2)农药中灭草松、2-甲基-4-氯苯氧乙酸、2,4-二氯酚和氟磺胺草醚的总体浓度水平最高。

(3)灭草松、厄贝沙坦、五氯酚、异丙隆、异丙甲草胺、氟吡尼砜、氟虫腓、氯虫苯甲酰胺、氟虫双酰胺、2,4-二氯酚、4-硝基苯酚和水杨酸为12种高风险污染物。

参考文献:

- [1] Wang Z Y, Walker G W, Muir D C G, *et al.* Toward a global understanding of chemical pollution: a first comprehensive analysis of national and regional chemical inventories [J]. *Environmental Science & Technology*, 2020, **54**(5): 2575-2584.
- [2] 阮挺, 江桂斌. 发现新型环境有机污染物的基本理论与方法[J]. *中国科学院院刊*, 2020, **35**(11): 1328-1336.
Ruan T, Jiang G B. Basic theory and analytical methodology for identification of novel environmental organic pollutants [J]. *Bulletin of the Chinese Academy of Sciences*, 2020, **35**(11): 1328-1336.
- [3] Alves A, Giovanoulis G, Nilsson U, *et al.* Case study on screening emerging pollutants in urine and nails [J]. *Environmental Science & Technology*, 2017, **51**(7): 4046-4053.
- [4] Chiaia-Hernandez A C, Krauss M, Hollender J. Screening of lake sediments for emerging contaminants by liquid chromatography atmospheric pressure photoionization and electrospray ionization coupled to high resolution mass spectrometry[J]. *Environmental Science & Technology*, 2013, **47**(2): 976-986.
- [5] Liu A F, Shi J B, Qu G B, *et al.* Identification of emerging brominated chemicals as the transformation products of tetrabromobisphenol A (TBBPA) derivatives in soil [J]. *Environmental Science & Technology*, 2017, **51**(10): 5434-5444.
- [6] Lu Z, De Silva A O, Peart T E, *et al.* Distribution, partitioning and bioaccumulation of substituted diphenylamine antioxidants and benzotriazole UV stabilizers in an urban creek in Canada [J]. *Environmental Science & Technology*, 2016, **50**(17): 9089-9097.
- [7] Yu N Y, Wen H Z, Wang X B, *et al.* Nontarget discovery of per-and polyfluoroalkyl substances in atmospheric particulate matter and gaseous phase using cryogenic air sampler [J]. *Environmental Science & Technology*, 2020, **54**(6): 3103-3113.
- [8] Gago-Ferrero P, Schymanski E L, Bletsou A A, *et al.* Extended suspect and non-target strategies to characterize emerging polar organic contaminants in raw wastewater with LC-HRMS/MS[J]. *Environmental Science & Technology*, 2015, **49**(20): 12333-12341.
- [9] Schymanski E L, Jeon J, Gulde R, *et al.* Identifying small molecules via high resolution mass spectrometry: communicating confidence[J]. *Environmental Science & Technology*, 2014, **48**(4): 2097-2098.
- [10] Singer H P, Wössner A E, McArdell C S, *et al.* Rapid screening for exposure to “non-target” pharmaceuticals from wastewater effluents by combining HRMS-based suspect screening and exposure modeling[J]. *Environmental Science & Technology*, 2016, **50**(13): 6698-6707.
- [11] Wang Y, Yu N Y, Zhu X B, *et al.* Suspect and nontarget screening of per-and polyfluoroalkyl substances in wastewater from a fluorochemical manufacturing park[J]. *Environmental Science & Technology*, 2018, **52**(19): 11007-11016.
- [12] 柳后起, 方正, 孟岩, 等. 环太湖水体污染现状分析[J]. *生态环境学报*, 2020, **29**(11): 2262-2269.
Liu H Q, Fang Z, Meng Y, *et al.* Water quality assessment around Lake Taihu[J]. *Ecology and Environmental Sciences*, 2020, **29**(11): 2262-2269.
- [13] 毛志刚, 谷孝鸿, 陆小明, 等. 太湖东部不同类型湖区疏浚后沉积物重金属污染及潜在生态风险评估[J]. *环境科学*, 2014, **35**(1): 186-193.
Mao Z G, Gu X H, Lu X M, *et al.* Pollution distribution and potential ecological risk assessment of heavy metals in sediments from the different eastern dredging regions of Lake Taihu[J]. *Environmental Science*, 2014, **35**(1): 186-193.
- [14] 程加德, 任晓鸣, 邱阳, 等. 太湖上游多氯联苯的分布、来源及风险评估[J]. *生态环境学报*, 2020, **29**(12): 2433-2440.
Cheng J D, Ren X M, Qiu Y, *et al.* Distribution, source and risk assessment of PCBs in the upstream of Taihu Lake basin[J]. *Ecology and Environmental Sciences*, 2020, **29**(12): 2433-2440.
- [15] 张文萍, 张振飞, 郭昌胜, 等. 环太湖河流及湖体中有机磷酸酯的污染特征和风险评估[J]. *环境科学*, 2021, **42**(4): 1801-1810.
Zhang W P, Zhang Z F, Guo C S, *et al.* Pollution characteristics and risk assessment of organophosphate esters in rivers and water body around Taihu Lake[J]. *Environmental Science*, 2021, **42**(4): 1801-1810.
- [16] 常州市武进区人民政府. 2018年常州市武进区国民经济和社会发展统计公报[EB/OL]. http://www.ahmhc.com/sxqtjgb/17235_3.html, 2020-01-13.
- [17] 宜兴市人民政府. 2018年宜兴市国民经济和社会发展统计公报[EB/OL]. <http://www.yixing.gov.cn/doc/2019/10/09/806304.shtml>, 2019-10-09.
- [18] Chiaia-Hernández A C, Zander P D, Schneider T, *et al.* High-resolution historical record of plant protection product deposition documented by target and nontarget trend analysis in a Swiss lake under anthropogenic pressure [J]. *Environmental Science & Technology*, 2020, **54**(20): 13090-13100.
- [19] Mercurio P, Eaglesham G, Parks S, *et al.* Contribution of transformation products towards the total herbicide toxicity to tropical marine organisms [J]. *Scientific Reports*, 2018, **8**: 4808.
- [20] 李昆, 赵高峰, 周怀东, 等. 血吸虫病疫区水生生物体内氯苯化合物的污染特征与潜在风险[J]. *环境科学*, 2015, **36**(10): 3866-3871.
Li K, Zhao G F, Zhou H D, *et al.* Distribution characteristics and potential risk of CBs in aquatic organisms from typical epidemic areas of schistosomiasis prevalence[J]. *Environmental Science*, 2015, **36**(10): 3866-3871.
- [21] 安全监管总局监督管理三司. 国家安全生产监督管理总局 中华人民共和国工业和信息化部 中华人民共和国公安部 中华人民共和国环境保护部 中华人民共和国交通运输部 中华

- 人民共和国农业部 中华人民共和国国家卫生和计划生育委员会 中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局 国家铁路局 中国民用航空局公告(2015年第5号)危险化学品目录(2015版)[EB/OL]. http://www.mem.gov.cn/gk/gwgg/xgxyw/wxhxp_228/201503/t20150309_232632.shtml, 2015-03-09.
- [22] Yu X, Sui Q, Lyu S G, *et al.* Municipal solid waste landfills: an underestimated source of pharmaceutical and personal care products in the water environment[J]. *Environmental Science & Technology*, 2020, **54**(16): 9757-9768.
- [23] 武旭跃, 邹华, 朱荣, 等. 太湖贡湖湾水域抗生素污染特征分析与生态风险评估[J]. *环境科学*, 2016, **37**(12): 4596-4604.
- Wu X Y, Zou H, Zhu R, *et al.* Occurrence, distribution and ecological risk of antibiotics in surface water of the Gonghu Bay, Taihu Lake[J]. *Environmental Science*, 2016, **37**(12): 4596-4604.
- [24] 张盼伟, 周怀东, 赵高峰, 等. 太湖表层沉积物中 PPCPs 的时空分布特征及潜在风险[J]. *环境科学*, 2016, **37**(9): 3348-3355.
- Zhang P W, Zhou H D, Zhao G F, *et al.* Spatial, temporal distribution characteristics and potential risk of PPCPs in surface sediments from Taihu Lake[J]. *Environmental Science*, 2016, **37**(9): 3348-3355.
- [25] 王丹, 隋倩, 赵文涛, 等. 中国地表水环境中药物和个人护理品的研究进展[J]. *科学通报*, 2014, **59**(9): 743-751.
- Wang D, Sui Q, Zhao W T, *et al.* Pharmaceutical and personal care products in the surface water of China: a review [J]. *Chinese Science Bulletin*, 2014, **59**(9): 743-751.
- [26] 张宏娜, 温蓓, 张淑贞. 全氟和多氟烷基化合物异构体的分析方法、环境行为和生物效应研究进展[J]. *环境化学*, 2019, **38**(1): 42-50.
- Zhang H N, Wen B, Zhang S Z. Analytical methods, environmental behaviors and biological effects of per-and polyfluoroalkyl isomers[J]. *Environmental Chemistry*, 2019, **38**(1): 42-50.
- [27] 张大文, 王冬根, 张莉, 等. 太湖梅梁湾全氟化合物污染现状研究[J]. *环境科学学报*, 2012, **32**(12): 2978-2985.
- Zhang D W, Wang D G, Zhang L, *et al.* A study on the perfluorinated compounds pollution in Meiliang Bay, Taihu Lake [J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2012, **32**(12): 2978-2985.
- [28] Spilisbury F D, Warne M S J, Backhaus T. Risk assessment of pesticide mixtures in Australian rivers discharging to the Great Barrier Reef[J]. *Environmental Science & Technology*, 2020, **54**(22): 14361-14371.
- [29] Backhaus T, Faust M. Predictive environmental risk assessment of chemical mixtures: a conceptual framework [J]. *Environmental Science & Technology*, 2012, **46**(5): 2564-2573.
- [30] Reuschenbach P, Silvani M, Dammann M, *et al.* ECOSAR model performance with a large test set of industrial chemicals [J]. *Chemosphere*, 2008, **71**(10): 1986-1995.
- [31] van Zelm R, Huijbregts M A J, van de Meent D. Transformation products in the life cycle impact assessment of chemicals [J]. *Environmental Science & Technology*, 2010, **44**(3): 1004-1009.



CONTENTS

Disinfection By-products in Drinking Water and Their Control Strategies; A Review	CHU Wen-hai, XIAO Rong, DING Shun-ke, <i>et al.</i>	(5059)
Advances in Mechanism and Influencing Factors Affecting Hydrogen Sulfide Adsorption by Biochar	XU Qi-yong, LIANG Ming-shen, XU Wen-jun, <i>et al.</i>	(5086)
Effect of Vegetation Coverage on the Temporal and Spatial Distribution of PM _{2.5} Concentration in China's Eight Major Economic Regions from 1998 to 2016	YANG Yu-lian, YANG Kun, LUO Yi, <i>et al.</i>	(5100)
Evolution and Potential Source Apportionment of Atmospheric Pollutants of Two Heavy Haze Episodes During the COVID-19 Lockdown in Beijing, China	ZHAO De-long, TIAN Ping, ZHOU Wei, <i>et al.</i>	(5109)
Characteristics and Origin Analysis of Air Pollution During the Spring Festival in Linfen, Fenwei Plain	LIU Wei-jie, HU Tian-peng, MAO Yao, <i>et al.</i>	(5122)
Spatio-Temporal Characteristics and Potential Source Areas of Seasonal Atmospheric Pollution in Shijiazhuang	NIE Sai-sai, WANG Shuai, CUI Jian-sheng, <i>et al.</i>	(5131)
Impact of Air Humidity on PM _{2.5} Mass Concentration and Visibility During Winter in Tianjin	DING Jing, TANG Ying-xiao, HAO Tian-yi, <i>et al.</i>	(5143)
Seasonal Variation and Source Apportionment of Carbonaceous Species in PM _{2.5} in Chengde	HE Bo-wen, NIE Sai-sai, WANG Shuai, <i>et al.</i>	(5152)
Volatile Organic Compounds (VOCs) Emission Inventory from Domestic Sources in China	LIANG Xiao-ming, CHEN Lai-guo, SHEN Guo-feng, <i>et al.</i>	(5162)
Characteristics of Industrial Volatile Organic Compounds (VOCs) Emission in China from 2011 to 2019	LIU Rui-yuan, ZHONG Mei-fang, ZHAO Xiao-ya, <i>et al.</i>	(5169)
VOCs Emission Inventory and Uncertainty Analysis of Industry in Qingdao Based on Latin Hypercube Sampling and Monte Carlo Method	XU Wan-ying, FU Fei, LÜ Jian-hua, <i>et al.</i>	(5180)
Emission Characteristics and Environment Impacts of VOCs from Typical Rubber Manufacture	WANG Hai-lin, XIN Guo-xing, ZHU Li-min, <i>et al.</i>	(5193)
Pollution Characteristics and Ozone Formation Potential of Ambient VOCs in Different Functional Zones of Shenyang, China	KU Ying-ying, REN Wan-hui, SU Cong-cong, <i>et al.</i>	(5201)
Characteristics of BTEX and Health Risk Assessment During Typical Pollution Episodes in Summer and Winter in Tianjin Urban Area	HAN Ting-ting, LI Ying-ruo, PU Wei-wei, <i>et al.</i>	(5210)
Atmospheric NH ₃ Emission Inventory and Analysis of the Driving Force in Zhengzhou City	JI Yao, WANG Chen, LU Xuan, <i>et al.</i>	(5220)
Interactive Effects of the Influencing Factors on the Changes of O ₃ Concentrations Based on GAMs Model in Chengdu	ZHANG Ying, NI Chang-jian, FENG Xin-yuan, <i>et al.</i>	(5228)
Spatial Variation Characteristics and Remote Sensing Retrieval of Total Suspended Matter in Surface Water of the Yangtze River	LI Jian-hong, HUANG Chang-chun, ZHA Yong, <i>et al.</i>	(5239)
Spatial Distribution Characteristics of the Spectrum, Source Analysis, and Nitrogen Response of Dissolved Organic Matter in Summer Rainfall in the Hebei Province	ZHANG Zi-wei, ZHOU Shi-lei, CHEN Zhao-ying, <i>et al.</i>	(5250)
Distribution and Influencing Factors of DOM Components in Urban and Suburban Polluted Rivers	ZHU Yi, CHEN Hao, DING Guo-ping, <i>et al.</i>	(5264)
Composition and Distribution of Microplastics in the Water and Sediments of Urban Rivers in Beijing	HU Jia-min, ZUO Jian-e, LI Di, <i>et al.</i>	(5275)
Nontarget Screening and Ecological Risk Assessment of Polar Organic Pollutants in Surface Water on the West Bank of Taihu Lake	LU Xin-yan, WANG Fei, ZHANG Li-min, <i>et al.</i>	(5284)
Optimization of Extraction Methods and Distribution Characteristics of Antibiotics and Metabolites in Sediments of a River Water-Groundwater Interaction Zone	LI Yu-qiong, TONG Lei, YAN Han, <i>et al.</i>	(5294)
Distribution Characteristics and Risk Assessment of Antibiotics and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the Sediments of Desilting Demonstration Area in Baiyangdian Lake	WANG Tong-fei, ZHANG Wei-jun, LI Li-qing, <i>et al.</i>	(5303)
Dynamic Mechanisms of Groundwater Quality by Residual Contaminants of the Tanghe Wastewater Reservoir in Xiong'an New Area	ZHANG Zhi-xiong, WANG Shi-qin, ZHANG Yi-zhang, <i>et al.</i>	(5312)
Analysis and Prediction of Health Risk from Heavy Metals in Drinking Water Sources Based on Time Series Model	JI Chao, HOU Da-wei, XIE Li, <i>et al.</i>	(5322)
Spatial Distribution, Risk, and Influencing Factors of River Water-Sediment Heavy Metals in the Lower Reaches of the Qianhe River	GAO Yu, WANG Guo-lan, JIN Zi-han, <i>et al.</i>	(5333)
Spatial Distribution and Pollution Assessment of Dissolved Heavy Metals in Chaohu Lake Basin During the Wet Season	HE Miao, LIU Gui-jian, WU Lei, <i>et al.</i>	(5346)
Impact of Enclosure Culture on Heavy Metal Content in Surface Sediments of Hongze Lake and Ecological Risk Assessment	ZI Xin-yuan, ZHANG Ming, GU Xiao-hong, <i>et al.</i>	(5355)
Natural Water Chemistry Change in the Surface Water of Chengdu and Impact Factors	XU Qiu-jin, LAI Cheng-yue, DING Yao, <i>et al.</i>	(5364)
Hydrochemical Characteristics and Controlling Factors of Groundwater in the Leizhou Peninsula	PENG Hong-xia, HOU Qing-qin, ZENG Min, <i>et al.</i>	(5375)
Land-based Nitrogen Pollution Source Structure and Spatial Distribution in Guangdong-Hong Kong-Macao Greater Bay Area	DONG Si-qi, HUANG Chong, <i>et al.</i>	(5384)
Output Characteristics of Nitrogen and Phosphorus from Non-Point Source Pollution of Typical Land Use in a Micro-Watershed in Hilly Red Soil Region	FANG Zhi-da, SU Jing-jun, ZHAO Hong-tao, <i>et al.</i>	(5394)
Effects of Different Fertilization Patterns on Nitrogen Leaching Loss from Paddy Fields Under Reduced Nitrogen	JIANG Hai-bin, ZHANG Ke-qiang, ZOU Hong-tao, <i>et al.</i>	(5405)
Effects of <i>Spartina alterniflora</i> Invasion on Soil Phosphorus Forms in the Jiaozhou Bay Wetland	SHA Meng-qiao, CHAI Na, ZHAO Hong-tao, <i>et al.</i>	(5414)
Contrasting Analysis of Microbial Community Composition in the Water and Sediments of the North Canal Based on 16S rRNA High-Throughput Sequencing	PENG Ke, DONG Zhi, DI Yan-ming, <i>et al.</i>	(5424)
Characteristics of Phosphorus Adsorption in Aqueous Solution by Si-modified Peanut Shell Biochar	ZHAO Min, ZHANG Xiao-ping, WANG Liang-rong, <i>et al.</i>	(5433)
Adsorption Characteristics of Pb(II) on Eucalyptus Biochar Modified by Potassium Permanganate	MO Zhen-lin, ZENG Hong-hu, LIN Hua, <i>et al.</i>	(5440)
Preparation of Mixed Metal Oxide/Carbon Composites and Its Adsorption Performance for Pb(II)	LU Yu-shen, ZONG Li, YU Hui, <i>et al.</i>	(5450)
Fabrication of Supported Titanium Xerogel Adsorbent and Performance Evaluation for Arsenite Removal	SUN Ye-yang, ZHOU Chang, GAN Yong-hai, <i>et al.</i>	(5460)
Nitrite Regulation During Start-up of Combined Partial Nitrification and ANAMMOX Process	ZUO Fu-min, ZHENG Rui, SUI Qian-wen, <i>et al.</i>	(5472)
Effects of Biochar and Straw Return on Soil Aggregate and Organic Carbon on Purple Soil Dry Slope Land	DENG Hua, GAO Ming, LONG Yi, <i>et al.</i>	(5481)
Response of Soil Organic Carbon Content in Different Slope Positions to Fertilization Management in Purple Soil Sloping Fields	XU Man, YU Luo, WANG Fu-hua, <i>et al.</i>	(5491)
Distribution Characteristics and Ecological Risk Assessment of Soil Heavy Metals in the Eastern Mountainous Area of the Nanyang Basin	LAI Shu-ya, DONG Qiu-yao, SONG Chao, <i>et al.</i>	(5500)
Pollution Characteristics and Risk Assessment of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in a Suburban Farmland Soil	ZHANG Xiu-xiu, LU Xiao-li, WEI Yu-chen, <i>et al.</i>	(5510)
Accumulation Characteristics and Dietary Exposure Estimation of Heavy Metals in Vegetables from the Eastern Coastal Region of China	SUN Shuai, GENG Ning-bo, GUO Cui-cui, <i>et al.</i>	(5519)
Security Risk and Influencing Factors of Agro-Products in Farmland Soil Around a Typical Mining Smelter	HUO Yan-hui, WANG Mei-e, XIE Tian, <i>et al.</i>	(5526)
Cd Pollution and Safe Planting Zoning in Paddy Soils: A Case Study in a District of Chongqing	CAO Shu-zhen, MU Yue, CUI Jing-xin, <i>et al.</i>	(5535)
Characteristics and Influencing Factors of Cadmium Accumulation in Different Rice Varieties Under Cadmium Contaminated Field Conditions	WANG Yu-hao, YANG Li, KANG Yu-chen, <i>et al.</i>	(5545)
Effects of Nano-membrane on Aerobic Composting Process and Odor Emission of Livestock Manure	LI Yong-shuang, SUN Bo, CHEN Ju-hong, <i>et al.</i>	(5554)