

192-200

15086(12)

第15卷 第2期
1995年6月生态学报
ACTA ECOLOGICA SINICAVol. 15, No. 2
Jun. 1995单甲脒等有机污染物多介质环境
的稳态平衡模型构建叶常明 雷志芳[✓] 王宏 闫海 颜文红 丁梅

(中国科学院生态环境研究中心, 北京, 100085)

A

摘要 本文对单甲脒等 20 种有机污染物进行了物化参数(K_{ow} 、蒸汽压、水溶度、 K_{oc} 和 BCF) 的估计, 针对池塘和农田 2 个生态系统构建了稳态平衡速度多介质环境数学模型, 模型研究的初步结果表明该模型用于预测有机污染物在稳态平衡条件下多介质环境中浓度的分布有一定意义。对于大多数憎水性有机污染物, 在土壤或沉积物中的含量大于水中含量, 而水中含量又大于空气中的含量。对于亲水性有机污染物, 在环境介质中含量水平的大小顺序则是水 > 土壤或沉积物 > 空气。上述两类有机污染物在环境介质中的含量水平都具有如下的顺序: 叶 > 根 > 茎。所研究的 20 种有机污染物在鱼体内的含量除了 2-氯苯和 DEHP 外, 其它所有化合物都差不多。

关键词: 有机污染物, 多介质环境, 稳态平衡模型, 单甲脒;

多介质环境模型是 80 年代发展起来的新型环境数学模型^[1], 对它的研究已有若干文献报道^[2-4]。这类模型的特点是可将各种不同环境介质单元内污染物的迁移转化过程与导致污染物跨介质边界的过程相联系, 对有害化学物环境行为的早期评价, 人体暴露分析、环境的科学管理以及污染的防治等方面具有广泛的应用前景。

单甲脒是我国 80 年代新开发的一类高效有机杀虫螨农药^[5], 目前国内外对这类农药多介质环境数学模型的研究还未见报道。为了填补该农药环境行为评价和我国多介质环境数学模型研究领域的空白, 本文着重研究了单甲脒多介质环境的稳态平衡模型。为了确立所建模型的通用性, 本研究还涉及了邻苯二甲酸酯、多氯联苯、二噁英和氯代苯酚等共 20 种重要的环境有机污染物。

作为整个工作的阶段研究成果。本文着重报道单甲脒等有机污染物物理化学参数的计算结果和稳态平衡多介质环境数学模型的构建。随着研究工作的不断深入, 作者还将陆续报道单甲脒等有机污染物的非平衡稳态多介质环境数学模型、动态的多介质环境数学模型、模型的敏感度分析以及模型不确定性分析等若干重要的理论和实际问题的研究成果。

1 模型的概化及理论分析

本文模型模拟的环境系统示于图 1 和图 2。图 1 表示以池塘为代表的水生生态系统, 该系统反映了有机污染物在包括大气、水体、水生植物、鱼体和底部沉积物等环境介质单元间的分布状况。图 2 表示简单的农田生态系统, 该系统反映了有机污染物在包括大气、作物、土壤、土壤水和土壤气体等环境介质单元间的分布状况。这两种生态系统都是典型的多介质环境体系。

* 国家自然科学基金资助项目。

收稿日期: 1993 07 06, 修改稿收到日期: 1994 08 18。

污染物进入系统之后、经过一系列的迁移转化,最后在各个环境介质单元之间达到完全的平衡,即所谓的稳态平衡状态。描述该状态的模型就是本文所说的多介质环境稳态平衡模型。

Mackay 等人^[6]在解决上述类型的问题时,引入了逸度的概念,用逸度代替浓度进行模型计算,即所谓的逸度模型。这种计算的原理是基于:当某一化学物在各个相间的分配达到平衡时,它们的逸度应相等,即有 $f_1 = f_2 = f_3 \dots$, 这里 $f_1, f_2, f_3 \dots$ 分别代表化学物在相单元 1, 2, 3, $\dots$ 中的逸度,具有压力的单位(Pa)。根据逸度的定义,应有 $C = f/Z$ 的关系式,式中 Z 是逸度容量,其单位是 $\text{mol/m}^3 \cdot \text{Pa}$ 。从上看出, f 只与化学物的性质有关,而 Z 则既与化学物性质有关,又与环境介质的特征有关。

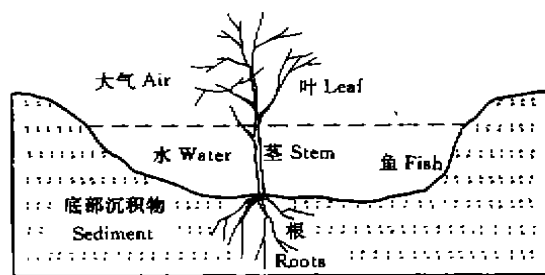


图 1 模型模拟环境系统之一(池塘)

Fig. 1 Diagrammatic sketch for simulating system (pond)

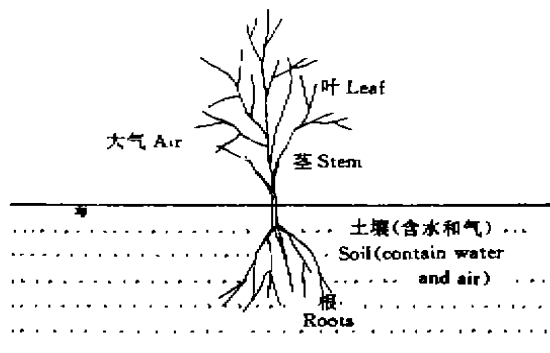


图 2 模型模拟环境系统之二(农田)

Fig. 2 Diagrammatic sketch for simulating system (agricultural field)

对于图 1 和图 2 所示的系统,可写出如下的污染物质量平衡方程:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N V_i \frac{dC_i}{dt} = & \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M k_{ij} A_{ij} (C_j - C_i) + \sum_{i=1}^N V_i K_i \alpha_i C_i \\ & + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M Q_{ji} C_j - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M Q_{ij} C_i + \sum_{i=1}^N S_i \end{aligned} \quad (1)$$

$$N=7, M=7$$

$$i \neq j, \text{ 当 } t=0 \text{ 时, } C_i = C_i(0)$$

式中 C_i 是单元 i 中的化学物浓度 (mol/m^3); S_i 是单元 i 中的污染物源强 (mol/h); k_{ij} 是以单元 i 为基础、污染物在单元 i 与单元 j 之间质量交换的迁移系数 (m/h); A_{ij} 是相应单元间交界面积 (m^2); V_i 是单元 i 的体积 (m^3); C_{ij} 是在与单元 j 处于平衡时, 单元 i 中的污染物浓度. 并有 $C_{ij} = C_i H_{ij}$, H_{ij} 是从单元 i 到 j 的分配系数; K_i 是单元 i 中发生反应的速率常数 ($1/\text{h}$); α_i 是符号指示, 当反应是降解时, $\alpha_i = -1$, 当反应生成污染物时, $\alpha_i = 1$; Q_{ji} 和 Q_{ij} 是相应的对流体积流速 (m^3/h).

在稳态时, 方程 (1) 的左边为零. 右边第一项中 $C_{ij} = C_i$, 这时方程变成:

$$\sum_{i=1}^N S_i = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M Q_{ij} C_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M Q_{ji} C_i - \sum_{i=1}^N V_i K_i \alpha_i C_i \quad (2)$$

设 $S = \sum_{i=1}^N S_i$, 并将 $C = fZ$ 代入上式, (2) 式变成逸度表示的多介质环境稳态模型:

$$S = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M Q_{ij} Z_i f_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M Q_{ji} Z_i f_i - \sum_{i=1}^N V_i K_i \alpha_i Z_i f_i \quad (3)$$

如果只考虑污染物在各介质单元间的分布, 反应过程与迁移相比可以忽略的话, 公式还可以简化为

$$S = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M Q_{ij} Z_i f_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M Q_{ji} Z_i f_i \quad (4)$$

在稳态平衡条件下, $f_i = f$, $Q_{ji} = Q_{ij} = V_i$, 上式可写为

$$S = \sum_{i=1}^N f_i Z_i V_i \quad (5)$$

这时 Z_i 已包括在 Z_i 之内.

2 模型的参数估算

参数是模型计算的重要支柱. 逸度表达的多介质环境模型的主要优点之一是模型所用的各种参数可以通过化学物的结构参数来计算. 根据模型的要求, 本工作对如下的参数进行了计算.

2.1 辛醇/水分配系数 K_{ow}

辛醇/水分配系数是有机污染物多介质环境数学模型研究中的最基础参数. K_{ow} 表示化学物自身在有机相和水之间的分配倾向. 具有低 K_{ow} 值的污染物是相对亲水的, 具有相对高的水溶度, 小的土壤或沉积物吸附系数以及小的生物浓缩因子. 相反, 具有高 K_{ow} 值的有机污染物则表现出很强的憎水性. 本文利用分子碎片常数法计算化合物的 $K_{ow}^{(1)}$, 其基本公式是:

$$\log K_{ow}(\text{新化合物}) = \log K_{ow}(\text{相似化学物}) \pm \text{碎片常数}(f) \pm \text{结构因子}(F) \quad (6)$$

从与文献报道实测值进行比较. 发现计算的 $\log K_{ow}$ 与实测的 $\log K_{ow}$ 之间的平均绝对误差仅为 0.13, 平均相对误差为 3.9% (表 1).

2.2 蒸气压 V_p

蒸气压 V_p 的计算公式如下^[8]:

$$\ln V_p = \frac{\Delta H_{vb}(T_b - C_2)^2}{\Delta Z_b R T_b^2} \left(\frac{1}{(T_b - C_2)} - \frac{1}{(T - C_2)} \right) \quad (7)$$

式中 T_b 是沸点; (K); T 是蒸气压为 V_p 时的温度 (K); 常数 $C_2 = -18 - 0.19 T_b$; 参数 ΔZ_b 一般为 0.97; ΔH_{vb} 是沸点时的蒸发热; R 是气体常数, 为 1.987; ΔH_{vb} 的计算公式是

表 1 logK_{ow} 的计算值与实测值的比较
Table 1 Comparison of calculated and observed value of logK_{ow}

序号 Number	化合物 Compounds	计算值 Calculated value	实测值 Observed value	绝对误差 Absolute error	相对误差 Relative error(%)	实测值来源 Reference of observe
1	单甲脒 Monocarboxaldehyde	2.96	2.92	0.04	1.4	[10]
2	单甲脒盐酸盐 Monocarboxidehyde hydrochloride	-1.82	—	—	—	
3	双甲脒 Dicarboxidehyde	3.69	—	—	—	
4	2-氯苯酚 2-chlorophenol	2.17	2.17	0	0	[11]
5	克草胺 Propachlor	1.61	—	—	—	
6	2,4-二氯苯酚 2,4-dichlorophenol	2.88	—	—	—	
7	2,4,6-三氯苯酚 2,4,6-trichlorophenol	3.59	—	—	—	
8	五氯苯酚 Pentachlorophenol	5.01	4.16	0.85	20.4	[11]
9	六氯苯 Hexachlorophenol	6.54	6.53	0.01	0.15	[11]
10	2,3,7,8-TCDD	6.61	—	—	—	
11	1,2,3,4-TCDD	6.00	—	—	—	
12	2,4,5,2',5'-PCB	6.38	6.38	0.03	0.47	[12]
13	2,4,5,2',4'-PCB	6.63	6.74	0.11	1.6	[12]
14	2,4,5,2',4',5'-HCB	7.34	6.92	0.42	6.1	[12]
15	α-六六六(BHC)	3.89	3.80	0.09	2.4	[8]
16	DDT	5.96	5.98	0.02	3.3	[8]
17	DMP	1.97	1.86	0.11	5.9	[13]
18	DEP	3.05	2.35	0.70	29.8	[11]
19	DBP	5.21	5.15	0.06	1.2	[13]
20	DOP	9.53	—	—	—	
21	DEHP	9.27	9.64	0.37	3.8	[11]
22	辛酸 capric acid	4.10	4.09	0.01	0.24	[14]
23	2-苯基乙酸 2-benzene acetic acid	1.41	1.41	0	0	[14]
24	3-苯基丙酸 3-benzene propanoic acid	1.87	1.84	0.03	1.6	[14]
25	4-苯基丁酸 4-benzene butanoic acid	2.41	2.42	0.01	0.41	[14]
26	乙酸乙酯 Acetic ester	0.71	0.73	0.02	2.7	[14]
27	乙酸正丙酯 n-butyl acetate	1.25	1.23	0.02	1.6	[14]
28	正丙醇 n-propanol	0.33	0.34	0.01	2.0	[14]
29	正丁醇 n-butanol	0.87	0.88	0.01	1.1	[14]
30	正戊醇 n-pentanol	1.41	1.40	0.01	0.71	[14]

$$\Delta H_{vb} = RK_b T_b \frac{(\ln pc) \sqrt{1 - 1/[(pc)(T_b/T_v)^3]}}{1 - (T_b/T_v)} \quad (8)$$

式中 K_K 可查表求得, $pc = a/(27b^2)$, a 和 b 是范德华常数。

2.3 水溶度 S

大多数化合物的水溶度来自文献报道的实测值, 几个化合物是用下式计算的⁽⁸⁾:

$$\log S = -0.922 \log K_{ocw} + 4.184 \quad (9)$$

2.4 沉积物或土壤的吸附系数 K_{oc}

除了文献可查到的实测值外, 其它化学物的 K_{oc} 用如下的公式计算⁽⁹⁾

$$K_{oc} = 0.41 K_{ow} \quad (10)$$

2.5 鱼体的浓缩因子 BCF

BCF 的计算公式为⁽⁸⁾

$$\log BCF = 0.76 \log K_{oc} - 0.23 \quad (11)$$

利用上式计算的 V_p , S , K_{oc} 和 BCF 一并列于表 2。

表 2 单甲脒等有机污染物的物化参数计算结果
Table 2 The calculated results of physico-chemical parameters

序号 No.	化合物 Compounds	分子式 Mole. formula	分子量 MW	V_p (l)	S (mg/l)	K_{oc}	BCF (鱼体内)
1	单甲脒 Monocarboxaldehyde	$C_{10}H_{11}N_2$	162.22	3.0×10^{-4}	21.8	3.7×10^5	1.05×10^7
2	单甲脒盐酸盐 Monocarboxaldehyde hydrochloride	$C_{10}H_{11}N_2 \cdot HCl$	198.71	6.2×10^{-2}	1.7×10^5	2.9×10^{-2}	7.9×10^{-2}
3	双甲脒 Bicarboxaldehyde	$C_{19}H_{23}N_2$	279.41	3.8×10^{-2}	6.1	2.0×10^3	3.75×10^2
4	克草胺 Propachlor	$C_{11}H_{11}ClNO$	211.69	2.3×10^{-4}	7.0×10^2	1.7×10	9.85
5	2-氯苯酚 2-chlorophenol	C_6H_5ClO	128.56	1.77	2.9×10^4	7.3×10	67.5
6	2,4-二氯苯酚 2,4-dichlorophenol	$C_6H_3Cl_2O$	163.00	5.9×10^{-2}	4.6×10^3	3.8×10^2	90.9
7	2,4,6-三氯苯酚 2,4,6-trichlorophenol	$C_6H_3Cl_3O$	197.44	1.2×10^{-2}	8×10^2	2.0×10^3	3.15×10^2
8	五氯苯酚 Pentachlorophenol	C_6HCl_5O	266.34	1.1×10^{-4}	1.4×10	5.3×10^4	3.78×10^7
9	2,3,7,8-TCDD	$C_{12}H_4Cl_4O$	321.97	1.0×10^{-6}	2×10^{-4}	3.5×10^6	1.45×10^4
10	1,2,3,4-TCDD	$C_{12}H_2Cl_4O$	321.97	2.1×10^{-6}	1.1×10^{-5}	4.0×10^5	2.14×10^4
11	2,4,5,2',5'-PCB	$C_{12}H_5Cl_5$	326.44	2.3×10^{-5}	1.14×10^{-4}	5.2×10^5	2.55×10^4
12	2,4,5,2',4'-PCB	$C_{12}H_3Cl_5$	326.44	7.7×10^{-5}	3.1×10^{-4}	3.7×10^5	1.96×10^4
13	2,4,5,2',4',5'-HCB	$C_{12}H_2Cl_6$	360.88	4.1×10^{-5}	2.7×10^{-4}	1.9×10^6	6.79×10^4
14	α -六六六(BHC)	$C_6H_6Cl_6$	290.83	2.5×10^{-5}	1.6	3.8×10^5	5.33×10^2
15	DDT	$C_{12}H_7Cl_5$	354.49	1.9×10^{-7}	5.5×10^{-4}	3.9×10^6	1.83×10^4
16	DDP	$C_{10}H_6O_4$	194.19	4.2×10^{-3}	5×10^4	1.74×10	18.5
17	DEP	$C_{12}H_{12}O_4$	222.24	3.5×10^{-3}	9.0×10^2	1.42×10^2	1.22×10^2
18	DBP	$C_{15}H_{22}O_2$	278.35	1.0×10^{-5}	13	1.7×10^5	5.96×10^3
19	DOP	$C_{21}H_{38}O_4$	390.56	1.4×10^{-4}	3.0	3.6×10^5	1.03×10^7
20	DEHP	$C_{21}H_{38}O_4$	390.56	2.0×10^{-4}	0.4	2.0×10^5	6.53×10^5

3 逸度容量 Z 值的计算

如前所述,逸度容量不仅与化学物的性质有关,而且与环境介质的特征有关,因此在计算化学物的逸度容量时,应分别针对不同的环境介质考虑问题。

水中逸度容量 $Z_w^{(6)}$

$$Z_w = S/V_f$$

大气中逸度容量 $Z_A^{(6)}$

$$Z_A = 1/RT$$

土壤或沉积物逸度容量 $Z_{SOI}^{(6)}$

$$Z_{SOI} = 0.0015\rho_E K_{oc}$$

ρ_E : 土壤密度 = 2.5

鱼体中逸度容量 $Z_F^{(6)}$

$$Z_F = BCF\rho_F Z_w$$

ρ_F : 鱼体密度 = 1.0

植物根中逸度容量 $Z_R^{(9)}$

$$Z_R = (0.82 + 0.014K_{ow})Z_w\rho_R$$

ρ_R : 根的密度 = 0.83

植物茎中逸度容量 $Z_S^{(9)}$

表 3 单甲脒等有机污染物的逸度容量及逸度计算结果
Table 3 The calculated results of fugacity capacity and fugacity

序号	化合物 Compounds	Z_A	Z_w	Z_{SOI}	Z_F	Z_R	Z_S	Z_L	f
1	单甲脒 Monocarbonyldehyde	4.1×10^{-4}	3.4	4.66	3.53	3.79×10	1.88×10	6.4×10	1.0×10^{-1}
2	单甲脒盐酸盐 Monocarbonyldehyde hydrochloride	4.1×10^{-4}	1.0×10^2	1×10^{-2}	8.18	7.05×10	7.05×10	8.29×10	2.9×10^{-2}
3	双甲脒 Dicarbonyldehyde	4.1×10^{-4}	4.3×10^2	3×10^3	1.62×10^3	2.48×10^2	1.17×10^4	4.26×10^4	2.5×10^{-7}
4	克草胺 Propachlor	4.1×10^{-4}	1.1×10^2	6.88	1.06×10^3	1.25×10^3	9.72×10	1.74×10^2	7.2×10^{-5}
5	2-氯苯酚 2-chlorophenol	4.1×10^{-4}	0.96	0.26	5.48×10	5.37	5.31	1.06×10	2.15×10^{-4}
6	2,4-二氯苯酚 2,4-dichlorophenol	4.1×10^{-4}	3.5	5.12	3.26×10^2	3.14×10	1.71×10	8.32×10	2.37×10^{-5}
7	2,4,6-三氯苯酚 2,4,6-trichlorophenol	4.1×10^{-4}	2.5	1.9×10^6	7.97×10^2	1.15×10^2	5.49×10	1.99×10^2	7.58×10^{-5}
8	五氯苯酚 Pentachlorophenol	4.1×10^{-4}	3.5	7.1×10^2	1.35×10^4	4.26×10^3	1.98×10^3	7.33×10^3	1.53×10^{-6}
9	2,3,7,8-TCDD	4.1×10^{-4}	4.7×10^{-3}	5.28×10	68.2×10	4.05×10	1.53×10	5.67×10	1.57×10^{-4}
10	1,2,3,4-TCDD	4.1×10^{-4}	1.2×10^{-4}	0.18	2.57	1.39	0.65	8.6	1.41×10^{-4}
11	2,4,5,2',5'-PCB	4.1×10^{-4}	1.1×10^{-4}	0.21	2.81	1.61	1.50	2.77	3.06×10^{-5}
12	2,4,5,2',4'-PCB	4.1×10^{-4}	9.3×10^{-3}	1.29×10	1.82×10^2	9.63×10	1.06×10^2	1.66×10^2	4.96×10^{-5}
13	2,4,5,2',4',5'-HCB	4.1×10^{-4}	1.4×10^{-3}	9.98	9.51×10	7.44×10	3.46×10	1.28×10^2	5.47×10^{-5}
14	α -六六六(BHC)	4.1×10^{-4}	1.7	2.35×10	8.79×10^2	1.29	7.08×10	2.57×10^2	4.81×10^{-5}
15	DDT	4.1×10^{-4}	0.61	8.9×10^3	1.12×10^4	5.78×10^3	6.83×10^3	9.92×10^3	7.56×10^{-7}
16	DMP	4.1×10^{-4}	4.6×10	3.00	8.51×10^2	8.12×10	5.45×10	4.54×10^2	4.05×10^{-5}
17	DEP	4.1×10^{-4}	8.68	4.62	1.06×10^3	1.2×10^2	5.85×10	2.02×10^2	5.58×10^{-5}
18	DBP	4.1×10^{-4}	3.5×10	2.2×10^4	2.09×10^5	6.5×10^4	3.97×10^4	1.14×10^5	9.4×10^{-6}
19	DOP	4.1×10^{-4}	0.41	5.5×10^6	4.22×10^7	1.81×10^7	7.5×10^6	2.78×10^7	2.8×10^{-10}
20	DEHP	4.1×10^{-4}	3.8×10	2.9×10^6	2.51×10^6	8.31×10^4	3.86×10^4	1.43×10^4	5.4×10^{-12}

$$Z_s = (0.82 - 0.0065K\sigma v)Z_w \rho_s, \quad \rho_s: \text{茎的密度} = 0.83$$

植物叶中逸度容量 $Z_L^{(9)}$

$$Z_L = 0.18Z_A + 0.80Z_m + 0.02K\sigma v$$

根据表 2 所列数据和上述公式计算的 $Z_w, Z_A, Z_{SO_2}, Z_F, Z_R, Z_S$ 和 Z_L 列于表 3。

估算逸度 f 最方便的方法是从具有有限体积边界的作物的化学物总含量, 根、茎、叶的 Z 值, 利用 $m = f(Z_R + Z_S + Z_L)$ 式进行。 m 是总含量, 本文假定为 $100\mu\text{g}$ 。

4 稳态平衡模型的计算结果

利用稳态平衡模型及表 3 的数据, 很容易计算出有机污染物在各种环境介质中的浓度分布, 计算结果列于表 4。

表 4 单甲脒等有机污染物多介质模型的浓度计算值(mg/l)

Table 4 The model calculation results

序号	化合物 Compounds	C_w	C_A	C_{SO_2}	C_F	C_R	C_S	C_L
1	单甲脒 Monocarboxaldehyde	0.545	6.7×10^{-3}	0.756	57.3	6.15	3.05	10.4
2	单甲脒盐酸盐 Monocarboxaldehyde hydrochloride	5.96×10^2	2.36×10^{-3}	5.76×10^{-2}	47.1	4.06×10^2	7.06×10^2	4.78×10^2
3	双甲脒 Bicarboxaldehyde	3.01×10^{-2}	2.8×10^{-4}	0.224	11.3	3.73	0.819	2.98
4	克草胺 Propachlor	1.64	6.23×10^{-9}	0.105	16.12	1.90	1.48	0.105
5	2-氯苯酚 2-chlorophenol	3.6×10^{-3}	6.0×10^{-6}	4.34×10^{-4}	1.08×10^{-1}	3.06×10^{-4}	5.75×10^{-5}	1.77×10^{-4}
6	2,4-二氯苯酚 2,4-dichlorophenol	0.139	3.58×10^{-5}	0.196	12.6	1.32	0.66	3.21
7	2,4,6-三氯苯酚 2,4,6-trichlorophenol	3.8×10^{-2}	6.15×10^{-6}	2.85×10^4	12.0	1.71	0.824	2.99
8	五氯苯酚 Pentachlorophenol	1.46×10^{-3}	1.67×10^{-7}	0.29	5.51	1.74	0.808	2.99
9	2,3,7,8-TCDD	2.37×10^{-4}	2.03×10^{-5}	2.94	3.44	2.05	0.773	2.86
10	1,2,3,4-TCDD	5.47×10^{-5}	1.86×10^{-9}	8.17×10^{-2}	1.17	0.631	0.295	3.63
11	2,4,5,2',5'-PCB	1.1×10^{-4}	4.1×10^{-4}	0.21	2.81	1.61	1.50	2.77
12	2,4,5,2',4'-PCB	1.71×10^{-4}	6.64×10^{-5}	0.209	2.95	1.56	1.75	2.69
13	2,4,5,2',4',5'-HCB	3.26×10^{-5}	9.55×10^{-6}	0.233	2.22	1.73	0.806	2.98
14	α -六六六(BHC)	2.31×10^{-2}	5.74×10^{-5}	0.239	12.3	3.68×10^{-2}	0.984	3.6
15	DDT	1.63×10^{-4}	3.09×10^{-7}	2.39	3.00	1.54	1.83	2.66
16	DMP	0.363	3.23×10^{-6}	2.37×10^{-2}	6.71	0.641	0.43	3.58
17	DEP	0.127	5.99×10^{-6}	6.75×10^{-2}	15.5	1.75	0.854	2.95
18	DBP	9.18×10^{-4}	1.0×10^{-8}	0.576	5.40	1.73	0.804	2.99
19	DOP	4.4×10^{-3}	4.39×10^{-11}	0.589	4.52	1.72	0.803	2.97
20	DEHP	1.5×10^3	1.6×10^{-13}	0.113	9.81×10^{-2}	0.325	0.151	0.559

从表 4 看出, 对于大多数憎水性有机污染物, 在土壤或沉积物中的含量要大于水中含量, 而水中含量又高于大气中含量(浓度含量)。鱼体对这些污染物的富集作用是十分明显的。在植物体内其浓度含量水平的大小顺序一般是叶>根>茎。对于亲水性有机污染物, 其浓度含量水平的大小顺序是水>土壤或沉积物>大气; 在植物体内浓度含量水平的大小顺序虽然也是叶>根>茎, 但相差幅度不大; 鱼体对它的富集系数亦不大。如单甲脒和单甲脒盐酸盐, 由于它

们的水溶性相差很大,虽然在化学结构上比较相似,但其环境行为具有很大的差异。另外对邻苯二甲酸酯类系列化合物的计算结果进行比较,这种规律性反映的就更为明显。

5 结论

通过对单甲脒等 20 种有机污染物在池塘和农田两个生态系统的多介质环境循环模型的初步研究结果表明,本文所构建的稳态平衡逸度模型用来预测有机污染物在稳态平衡条件下的多介质环境中的浓度分布是有效的,模型计算所得分布规律与实际环境的规律是吻合的。研究结果还说明,这种浓度分布不仅取决于有机污染物本身的物理化学性质,而且还与环境介质的特征有关。

从对单甲脒等 20 种有机污染物模型参数的估算研究以及与某些实测值的比较表明,本文所估算的各种参数基本上是可用的,其误差范围是一般环境数学模型允许的。随着研究工作的进一步深入,模型的结构及其使用功能将会得到进一步的完善和扩大。

本文所涉及的两个生态系统研究对于废水处理的氧化塘和土地处理系统的设计具有十分重要的理论和实践意义。

参 考 文 献

- 1 Chone Y. Modeling of Pollutant Transport and Accumulation in a Multimedia Environment. *The conference on Geochemical and Hydrologic Processes and their Protection*. Council on Environmental Quality, Washington, D. C. September 25, 1984
- 2 Cohen Y and Ryan P A Multimedia Modeling of Environmental Transport; Trichloroethylene Test Case. *Environ. Sci. Technol.*, 1985, 9(5), 412—417
- 3 Paterson S and Mackay D. A Steady State Fugacity Based Pharmacokinetic Model with Simultaneous Multiple Exposure Routes. *Environ. Toxic. and Chemistry*, 1987, 6, 241—250
- 4 Connolly J P. Application of a Food Chain Model to Polychlorinated biphenyl Contamination of the Lobster and Winter Flounder Food Chains in the New Bedford Harbor. *Environ. Sci. Technol.* 1991, 25(4), 760—770
- 5 徐振元,刘毅峰,张三奇. 单甲脒的合成. 浙江化工学院学报, 1985, (4), 44—52
- 6 Mackay D and Paterson S. Fugacity Revisited—the Fugacity Approach to Environmental Transport. *Environ. Sci. Technol.*, 1982, 16(12), 654A—660A
- 7 Chou J T and Jurs P C. Computer Assisted Computation of Partition Coefficients From Molecular Structures Using Fragment Constants. *J. chem. Inf. Comput. Sci.*, 1979, 19, 172—176
- 8 Warren J L, William F R and David H R. *Handbook of Chemical Property Estimation Methods—Environmental Behavior of Organic Compounds*. McGraw-Hill Book Company, New York, 1982
- 9 Paterson S and Mackay D. A Fugacity Model of Chemical Uptake by Plants From Soil and Air. *Chemosphere*, 1991, 23(4), 539—565
- 10 庄京,莫汉宏,安凤春等. 单甲脒水中溶解度及正辛醇/水分配系数的测定. 环境化学, 1993, 12(4), 304—308
- 11 Gian C S, Atlas E, Powers M A *et al.* Phthalic acid ester. *The Handbook of Environ. Chem.*, Leonard edited by Hutzinger O, 1986, Vol. 3, part C, Anthropogenic compounds, 67—142
- 12 Page B D and Lacroix G M. Studies into the Transfer and Migration of Phthalate Esters from Aluminum Foil-Paper Cigarettes to Butter and Margarine. *Food Addit. Contam.* 1992, 9(3), 197—212
- 13 Eadsforth C V. Application of Reverse-Phase HPLC for the Determination of Partition Coefficients. *Pest. Sci.*, 1986, 17, 311—325
- 14 Kier L B and Hall L H. *Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research*. Academic Press, New York, 1976

THE ESTABLISHMENT OF STABLE EQUILIBRIUM MODEL OF MONOCARBOXOLDEHYDE AND OTHER ORGANIC POLLUTANTS IN MULTIMEDIA ENVIRONMENT

Ye Changming Lei Zhifang Wang Hong Yan Hai Yan Wenhong Ding Mei

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

The physico-chemical parameters (K_{ow} , evaporation pressure, water solubility, K_{oc} and BCF) of monocarboxoldehyde and other 19 organic pollutants were estimated and fugacity approach model of multimedia environment at stable equilibrium for pond and agricultural field ecosystems was made. The primary results show that the model prediction for concentration distribution of organic pollutants in multimedia environment at stable equilibrium condition is feasible. For hydrophobic organic chemicals, the concentration in soil or sediment > water > air. For hydrophilic organic chemicals, the concentration in water > soil or sediment > air. In plants, the concentration of both types of chemicals in leaf > roots > stem. In fish, the contents of all involved chemicals are not too different.

Key words: organic pollutants, multimedia environment, stable equilibrium.