



潜在风险 优先行动

关于《中国现有化学物质名录2009》的分析

马天杰 张淼 绿色和平 2010年6月

摘要

本文旨在识别《中国现有化学物质名录2009》(IECSC2009)中潜在的有毒有害化学物质。通过使用美国环保署(U.S. EPA)软件EPI Suite进行初步的筛查分析,以及与6个国外有毒有害化学物质名单进行对比,我们发现中国现有化学物质名录中相当数量的物质可能具有某些有害特性,且很多物质已经被国外的监管部门和/或学术界认定为有毒有害物质。为控制并去除有毒有害化学物质造成的污染,保护人类的健康和生态环境,并更好地为不断增加的全球有毒有害物质管制措施做准备,识别中国的有毒有害嫌疑物质是有关管理部门和相关行业目前亟需进行的第一步。在此基础上,中国须建立长效机制来逐步限制、减少和最终消除优先有毒有害物质的生产、使用和排放。

简介

中国的环境正受到大量有毒有害化学物质的威胁。其中的一些物质已造成长期的且常常是不可逆的损害。仅2009年一年，环保部（MEP）接报的严重重金属污染事件就达12起。这些事件影响了数以千计的居民的健康，且其中很大一部分受害者是儿童。¹新近公布的科学数据显示，持久性有机污染物（POPs）在中国广泛存在。例如，长江下游地区经年累月形成的有机氯农药（OCPs）污染至今还对生态系统造成影响。²而科学家也已在中国婴幼儿和儿童的血液样品中发现全氟辛烷磺酸（PFOS）和全氟辛酸（PFOA）等全氟化合物的存在，并且其浓度高于一些发达国家的数据库³。这些有毒有害物质给中国本已脆弱的生态系统带来了更大的压力。一些内分泌干扰物质正在伤害江河湖海中的鱼类种群，导致性畸变（正常雌性发育出雄性性器官）比率增加。⁴而中国科学家最新的研究成果也表明，三苯基锡（TPT）这种物质是濒危物种中华鲟种群数量降低的主要原因之一，而它至今仍作为船舶涂料和杀菌剂被持续使用。⁵

上面所提到的化学物质往往具备一些共同的有毒有害特性。它们通常是持久性的，这意味着它们在环境中很难被降解。它们能在生物身体组织中富集，并在食物链中累积，因此即便在看似较低的背景浓度下也可能造成很大的危害。更有部分化学物质具有致癌、致基因突变、损害生殖系统或内分泌干扰等危害。

在人类社会中，数以万计的化学物质正在被生产和使用。在此基础上每天都有新的化学物质被研制和投入生产。美国有毒物质控制法案（TSCA）涵盖了商业领域中的超过82000种化学物质。⁶而中国官方在2009年发布的现有化学物质名录中收录了超过45000种正在中国被生产、销售或进口的化学物质。⁷另外，每年申报的新化学物质超过100种。⁸对于政策制定者来说，管理这些化学物质以防止它们损害环境和人类健康无疑是一个巨大的挑战。而中国对有害化学物质的管理才刚刚起步，对于大量商业领域中的工业化学品，国家尚未建立一套系统的管理体系。作为中央级的环保机构，环境保护部（MEP）最近才在其污染防治司下设立了化学品处。2009年，环保部修订了2003版的《新化学物质环境管理办法》，

完善了新化学物质的申报登记和风险管理体系，以更好地防止新的有毒有害化学品进入到市场中。然而迄今为止，对于名录中的超过45000种现有化学物质并没有类似的管理方案出台。

为唤起对有毒有害化学物质所带来的威胁的关注，并给有意规范和管理这些物质的政策制定者提供有价值的信息，绿色和平对《中国现有化学物质名录2009》进行了初步分析，以识别其中潜在的有毒有害化学物质，为现有化学物质的优先管理提供参考。为控制并消除有毒有害化学物质造成的污染，保护人类健康和生态环境，并更好地应对REACH等不断增长的全球化学品管制措施，识别和筛选中国的优先管理化学物质是有关管理部门和相关行业目前亟需进行的第一步。

《中国现有化学物质名录2009》 (IECSC 2009)

《中国现有化学物质名录》是中国新化学物质管理的基础。⁹它的收录范围包括从1992年以来为了商业目的在中国境内生产、加工、销售、使用或进口的化学物质，但原则上不包含农药、放射性物质、食品添加剂、药品和化妆品等受其他部门监管的物质。该名录的最早版本编制于1995年（1995年版《核心名录》），之后进行了持续的更新。2000年版《名录》包含了26707种物质。这个数字在2009年的版本中增至45355。

名录中的条目一般包括编码、物质名称和结构信息（如果存在的话）。在IECSC2009中有37247种化学物质配有化学文摘号（CAS码）¹⁰，而有8064种化学物质使用的是流水号（从1至8064）作为编码；名录中配有分子式信息的物质数量为23401种，尽管其中有2747种化学物质没有CAS码；有20625种化学物质既配有正确的CAS码又配有分子式信息；在具有结构信息的物质中，16921种化学物质拥有与之匹配的SMILES码¹¹（有SMILES码是能够使用软件中的定量结构-活性关系（QSAR）模型工具进行分析的前提条件，也是下一章分析的基础）。（如图1）

总数：45355（官方数据）/ 45311（经确认的）			
CAS No.: 37291（官方数据）/ 37247（经确认的）		无CAS No.: 8064	
有CAS码和分子式信息：20654		有CAS码/无分子式信息：16593	无CAS码/有分子式：2747
		无CAS码/无分子式：5317	
EPI SUITE 错误的CAS码：29 EPI SUITE运算 出错：9		有SMILES码：16921	在EPI SUITE中无匹配的SMILES码：20288
		有分子式/无SMILES码：7323	无分子式/无SMILES码：12965

图1 《中国现有化学物质名录（2009）》的构成

潜在有毒有害化学物质筛选

方法

用传统的实验方法评估化学物质的有毒有害性质往往耗资耗时，因此可供参考的实验数据往往十分有限；而现有化学物质数量庞大并且仍在不断地扩大，因此对于决策者来说，如何从中识别有毒有害化学物质进行管理以保护人类健康和生态环境是一个难题。近年来得到持续发展的定量结构—活性关系（QSAR）模型可以建立化学物质结构和性质间的定量关系，也就是通过化学物质的结构来“预测”物质的相关性质。而模型的计算机软件化使得大量化学物质的批处理变为可能，从而可以以较迅速和低成本的方式获得一些初步的估算数据。模型预测的数据与实验数据相结合可以帮助决策者筛选出潜在的有毒有害物质做进一步审查。

在本文的分析中，我们使用EPI Suite 4.0¹² 软件来估算IECSE 2009中化学物质的一些性质的定量值，并将这些值与国际上认可的有毒有害物质认定标准相比较。EPI Suite是美国环保署和Syracuse研究公司合作开发的一种用于筛选大量化学物质的软件。它整合了14个QSAR模型，这些模型可以用于预测化学物质的辛醇—水分配系数（Log Kow）、生物蓄积指数（BCF）和辛醇—空气分配系数（Log Koa）等数值，它还引入了Mackay及其同事开发的III级逸度模型来预测物质在不同环境介质中的分配。这些数据对于辨别化学物质是否会在环境中持久存在和是否会在生物体中富集都非常重要。很多研究者都曾使用EPI Suite来从大量化学物质中筛选潜在的有毒有害化学物质。例如Howard和Muir¹³近期发表的文章中就对美国加拿大现有的22043种化学物质进行了筛选并从中识别潜在的持久性有机污染物（POPs）。Brown和Wania在2008年的研究则从105584种化学物质中筛选出最可能成为北极污染物的物质。¹⁴在中国，2003年曾有研究使用EPI Suite从IECSC 2000（包含26707种化学物质）中筛选出潜在的POPs嫌疑物质。

一些学者认为，由于实验数据过于缺乏，EPI Suite这样的工具提供了“所能得到的最庞大的数据库”并能“帮助识别尚未得到严密实验测试的高关注度化学物质”。¹⁶但是，如EPI Suite等应用工具所存在的局限性也不应被忽视。首先，EPI Suite一般不能用于无机物和有机金属化合物的性质估算。此外研究者还声明，利用模型对庞大数量的有机化学物质的性质进行估算，其准确性尚未得到充分验证¹⁷。并且，EPI Suite在毒性预测方面的能力十分有限¹⁸。

基于EPI Suite的优势和局限性，我们使用下面的标准来对IECSC 2009中的物质进行初步筛选。此次初步筛选主要是基于物质的持久性和生物蓄积性，以显示名录中潜在的有毒有害物质的数量范围。毒性估算没有被纳入此次筛选中。如存在实验数据，则实验数据优先于估算数据。

Log Kow (辛醇—水分配系数) > 5¹⁹

BCF (生物富集指数) > 5000^{20 21}

BCF (生物富集指数) > 2000²²

半衰期 (水) > 60 天^{23 24}

半衰期 (土壤) > 180 天²⁵

半衰期 (沉积物) > 180 天²⁶

除用EPI Suite进行筛选分析外，我们还选取了6个其他国家或地区相关监管机构或权威学者发布的高度优先有毒有害物质名单，将IECSC2009同这些名单进行了交叉对比。这些优先化学物质名单通常不仅仅纳入了持久性和生物蓄积性标准，同时也采用了CMR（致癌性、致突变性、生殖系统毒性）、EDC（内分泌干扰物）以及长距离传输能力作为标准。下面是分析中使用到的清单：

- 《斯德哥尔摩公约》下列的持久性有机污染物名单（共21种/类物质）²⁷
- 奥斯陆—巴黎（OSPAR）公约的优先行动物质名单（共42种/类物质）²⁸
- 美国环保署有毒物质排放清单中的PBT化学物质名单（20种/类物质）²⁹
- 欧盟高关注度物质候选名单（38种/类物质）
- 欧盟水框架指令优先物质名单（33种/类物质）³¹
- Brown和Wania识别的120种北极潜在污染物名单³²（120种物质）

结果

使用EPI Suite所产生的筛选结果如表1所示。在IECSC 2009中有超过4000种化学物质的Log Kow估算值大于5，这意味着它们可能会在生物体内蓄积。模型运算出的另一个生物富集性指标BCF的值则显示有462种化学物质超出了一个比较保守的阈值（5000），而有961种超出了欧盟REACH指令使用的更为宽泛的阈值（BCF>2000）。按照国际认可的标准来看，很多化学物质也显示出在不同环境介质中持久存在的可能性。例如，模型估算结果显示2040种化学物质在水中的半衰期超过了60天，有8752种化学物质在沉积物中的半衰期都满足《斯德哥尔摩公约》所设定的持久性标准。需要注意的是，由于名录中大约54%的物质没有合适的结构信息甚至没有CAS码，也就无法使用EPI Suite中的QSAR模型进行估算，所以IECSC2009中很大一部分化学物质没能被这个结果覆盖到。即使有结构信息和正确CAS码的物质中，由于EPI Suite不能用于无机物或有机金属类物质，仍有很多物质未能得到估算结果。另外，特定模型预测出的值应慎重使用，并应仅作为进一步审查的参考。例如，当特定物质的校正值无法获取的时候，使用回归算法³³预测的BCF值会有问题。³⁴

限值	数量
Log Kow (辛醇—水分配系数) > 5	4274
BCF (生物富集指数) > 5000	462
BCF (生物富集指数) > 2000	961
半衰期 (水) > 60 天	2040
半衰期 (土壤) > 180 天	2040
半衰期 (沉积物) > 180 天	8752

表1 满足特定持久性和生物富集性特性指标的物质数量

通过与6个有毒有害物质优先行动名单的比对发现，在所有名单所识别或列为优先的229种物质和12类化学物质中，有159种物质存在于中国现有化学物质名录当中。³⁵（详见附录1）在这些化学物质中，既有汞的化合物等广为人知的PBT物质，也有如五氯酚、壬基酚等危险的致癌物或内分泌干扰素。值得注意的是，在欧盟水框架指令的33种优先物质中有31个存在于中国现有化学物质名录中。另外，美国有毒物质排放清单中的20种/类优先PBT物质中的11种/类物质，以及欧盟REACH指令38种/类高关注度物质中的22种/类物质都存在于中国。这些物质中有很多都在纺织、电子、油漆和塑料等与生活紧密相关的行业中得到广泛应用，有一些仍在不断增长。例如，欧盟水框架指令的优先物质之一除草剂阿特拉津，其产量自20世纪80年代以来在中国不断增长，至2002年其年产量为5000吨。³⁶正是由于这些化学物质在其他国家或地区已经被置于信息公开法规的监管之下或者正在被削减、淘汰，它们在中国应受到何种监管应该是值得讨论的议题。

优先行动有毒有害物质的选择机制

模型估算的数据以及交叉比对的结果显示，《中国现有化学物质名录》中潜在的有毒有害物质数量可观，这意味着我们亟需立即采取行动。虽然中国已经开展了针对《斯德哥尔摩公约》中12种持久性有机污染物的削减、限制和淘汰工作，但显然有更多的有毒有害物质需要采取行动。它们中有很多物质在中国仍被广泛生产和使用。例如壬基酚，2003年在中国的年使用量达到93000吨，占全球使用量约10%。³⁷中国科学家已经揭示的由三苯基锡和壬基酚/辛基酚等化学物质引起的环境负面影响，进一步增加了这一议题的紧迫性。

鉴于行政资源常常有限，世界各地的政策制定者普遍采用有毒有害物质优先管理策略，通过科学的筛选方法来选择危害最高的化学物质采取优先行动。由此产生了一系列最受关注的化学物质名单。这些名单往往会根据科学上对化学物质认知的进展而有规律地更新。在这些筛选机制中有以下几个关键元素：

1. 基于化学物质的内在性质（intrinsic properties）设置关键筛选/选择标准（这些标准并不一定是量化的阈值）。化学物质的某些性质会给人健康 and 生态环境带来不利影响，例如：

- 持久性（在环境中不易通过生物降解或其他过程被分解）
- 生物蓄积性（能在生物体中蓄积且浓度随生物链等级升高递增）

- 致癌性
- 致畸变性（导致畸变和基因缺陷的能力）
- 生殖系统毒性（危害生殖系统及其发育的能力）
- 内分泌干扰

世界各地的政策制定者们基于这些内在的有害性质建立了—系列筛选标准，以识别那些高度有害的化学物质。例如《斯德哥尔摩公约》界定持久性有机污染物（POPs）的基准包括持久性、生物蓄积性、毒性和长距离迁移能力等参数；美国环保署采用PBT（持久性、生物蓄积性、毒性）三项指标作为优先物质的筛选指标；欧盟界定高关注度物质的基准不仅考虑到PBT和vPvB（非常持久非常生物蓄积的）指标，还将CMR（致癌、致畸、生殖毒性和EDC（内分泌干扰）等性质纳入考虑范围。

2. 基于化学物质的赋存状态和效果进一步排序的步骤。这一步骤将上一步筛选的结果同化学物质的实际赋存状态相结合，例如，产量、使用布局和排放监测信息等。这些化学物质对人类和生态系统的影响也可纳入到考虑中。

3. 基于专家意见对最需要采取优先行动的化学物质列表进行优先选择：这一步通常在专家意见的支持下进行，由专家对前述步骤所识别的高度有毒有害化学物质赋予不同的优先等级。政策制定者们将对由此得到的优先化学物质名单采取进一步行动。

中国的化学品管理也需要建立这样一套优先行动化学物质选择机制。为了保护公众健康和生态环境，这将成为对最高危害的化学物质进行优先管理的第一步。同时，建立这套选择机制有助于中国以更具前瞻性和主动的方式来应对有毒有害化学物质——通过积极地筛选具有潜在危害的化学物质并采取迅速的行动（而非被动地面对业已造成的危害和来自国际社会的压力），政府以及产业界能够更好地应对日益显著的环境问题和不断增加的全球化学品管制措施。因此我们建议：

中国应该建立相应机制以从国内现有化学物质中识别具有高度危害的化学物质，并对其采取优先行动以限制、减少并最终消除它们的生产、使用、排放和进出口。识别的标准应包括但不仅限于PBT（持久性、生物蓄积性、毒性）、CMR（致癌、致畸、生殖毒性）和EDC（内分泌干扰）等性质。并应设立信息公开的相关条款使得公众能够获得这些化学物质的使用和排放信息。

该机制应该允许优先化学物质名单的及时调整和更新，以同科学的最新发展相一致。该机制同时也应是开放和透明的。科学家、工业界、公民社会等不同的利益相关者都能够参与到该过程中。

一个典型的优先有毒有害化学物质选择机制是在《OSPAR公约》下发展出的DYMAMEC机制（有毒有害物质的动态选择和优先机制）³⁸。《OSPAR公约》是东北大西洋国家签订的一个保护该区域环境——尤其是海洋环境的公约。在该公约下的有毒有害物质污染防治策略下，建立了DYNAMEC机制用以选择有毒有害化学物质进行优先削减和最终消除。这一机制包括一个选择/筛选步骤，一个排序步骤和一个以前两步为基础的优先步骤。选择/筛选步骤根据持久性、生物蓄积性和毒性等性质选出“可能关注物质”。经过初步筛选，排序步骤会根据化学物质在环境中的实际赋存情况和作用效果来对化学物质进行打分排序。在前两步结果的基础上，OSPAR委员会会参照专家意见制定一个优先行动物质名单。例如最新的OSPAR优先行动物质名单包含42种/类物质，各缔约国承诺在2020年彻底消除这些物质。

附录 I

CAS	名称	OSPAR	TRI PBT	POPs	SVHC	WFD	B&W
2043-57-4	1,1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6-十三氟-8-碘辛烷						B&W
24448-09-7	1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-十七氟-N-(2-羟乙基)-N-甲基-1-辛基磺酰胺						B&W
865-86-1	1,1,2,2-四氢全氟十二醇						B&W
87-68-3	1,1,2,3,4,4-六氟-1,3-丁二烯					WFD	B&W
328-84-7	1,2-二氟-4-(三氟甲基)苯/3,4-二氟三氟甲苯						B&W
634-66-2	1,2,3,4-四氟苯						B&W
87-61-6	1,2,3-三氟苯	OSPAR					B&W
95-94-3	1,2,4,5-四氟苯						
120-82-1	1,2,4-三氟苯	OSPAR				WFD	B&W
107-06-2	1,2-二氟乙烷					WFD	
626-39-1	1,3,5-三溴苯						B&W
108-70-3	1,3,5-三氟苯	OSPAR					
4904-61-4	1,5,9-环十二烷三烯	OSPAR					
27905-45-9	1H,1H,2H,2H-全氟癸基丙烯酸酯/2-全氟辛基丙烯酸乙酯						B&W
69045-78-9	2-氟-5-三氟甲基吡啶						B&W
75147-20-5	2,2,3,4,4-五氟-3-丁烯酸丁酯						B&W
69045-83-6	2,3-二氟-5-三氟甲基吡啶						B&W
108-77-0	2,4,6-三氟-1,3,5-三嗪/三聚氟氧/三聚氟酰氧/氟脲酰氧						B&W
88-06-2	2,4,6-三氟酚						B&W
732-26-3	2,4,6-三叔丁基苯酚	OSPAR					
121-14-2	2,4-二硝基甲苯				SVHC		
78-63-7	2,5-二甲基-2,5-二(叔丁基过氧基)己烷/双"2,5"硫化剂						B&W
678-39-7	2-全氟辛基乙醇/1H,1H,2H,2H-全氟癸醇						B&W
84-51-5	2-乙基蒽醌						B&W
647-42-7	3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-十三氟-1-辛醇						B&W
63734-62-3	3-[2-氟-4-(三氟甲基)苯氧基]苯甲酸						B&W
101-77-9	4,4-二氨基二苯基甲烷				SVHC		
80-07-9	4,4'-二氯二苯砷						B&W
86508-42-1	C5-18-全氟烷						B&W
793-24-8	N-(1,3-二甲基)丁基-N'-苯基对苯二胺	OSPAR					
55525-54-7	N,N'-双[(5-异氰酸基-1,3,3-三甲基环己基)甲基]脲	OSPAR					
1691-99-2	N-乙基全氟辛基磺酰胺乙醇						B&W
1912-24-9	阿特拉津					WFD	
115-25-3	八氟环丁烷						B&W
1897-45-6	百菌清/2,4,5,6-四氟-1,3-苯二腈						B&W
71-43-2	苯					WFD	
2116-84-9	苯基三(三甲基硅氧烷基)硅烷						B&W
136-60-7	苯甲酸丁酯						B&W
79-06-1	丙烯酰胺				SVHC		

1836-75-5	除草醚								B&W
50-29-3	滴滴涕			POPs					B&W
60-57-1	狄氏剂			POPs					
330-54-1	敌草隆						WFD		
88-85-7	地乐酚								B&W
2921-88-2	毒死蜱						WFD		
98-56-6	对氯三氟甲苯/1-氯-4-(三氟甲基)苯								B&W
98-73-7	对叔丁基苯甲酸								B&W
1336-36-3	多氯联苯(PCBs)	OSPAR	TRI PBT	POPs					
90640-80-5	葱油						SVHC		
80-10-4	二苯二氯硅烷/二氯二苯基硅烷/二苯基二氯硅烷								B&W
144-79-6	二苯基甲基氯硅烷								B&W
81-15-2	二甲苯麝香	OSPAR					SVHC		B&W
40487-42-1	二甲戊乐灵/胺硝草/除草通		TRI PBT						B&W
75-09-2	二氯甲烷						WFD		
1582-09-8	氟乐灵	OSPAR	TRI PBT				WFD		
7440-43-9	镉	OSPAR					WFD		
7758-97-6	铬酸铅						SVHC		
1344-37-2	铬酸铅 (C.I. 颜料黄34)						SVHC		
7439-97-6	汞	OSPAR	TRI PBT				WFD		
294-62-2	环十二烷	OSPAR							
15972-60-8	甲草胺						WFD		
64667-33-0	甲基4,6,6,6-四氯-3,3-二甲基己酸								B&W
72-43-5	甲氧滴滴涕	OSPAR	TRI PBT						
98-15-7	间氯三氟甲苯								B&W
85-68-7	邻苯二甲酸丁苄酯						SVHC		
84-69-5	邻苯二甲酸二异丁酯						SVHC		
115-96-8	磷酸三(2-氯乙基)酯						SVHC		
115-29-7	硫丹	OSPAR					WFD		B&W
118-74-1	六氯苯		TRI PBT	POPs			WFD		B&W
77-47-4	六氯环戊二烯								B&W
7646-79-9	氯化钴						SVHC		
115-28-6	氯桥酸								B&W
115-27-5	氯桥酸酐								B&W
52314-67-7	氯氰菊酰氯								B&W
65996-93-2	煤焦油						SVHC		
12656-85-8	钼铬红 (CI颜料红104)						SVHC		
7440-02-0	镍						WFD		
13472-08-7	偶氮二异戊腈/2,2'-偶氮-二-(2-甲基丁腈)								B&W
7439-92-1	铅	OSPAR	TRI PBT				WFD		
2043-54-1	全氟癸基乙基碘								B&W
423-50-7	全氟己基磺酰氟								B&W
311-89-7	全氟三丁胺								B&W

338-84-1	全氟三戊胺								B&W
1763-23-1	全氟辛基磺酸	OSPAR		POPs					
70225-14-8	全氟辛基磺酸 二乙醇胺盐			POPs					
29081-56-9	全氟辛基磺酸铵盐			POPs					
2795-39-3	全氟辛基磺酸钾盐			POPs					
29457-72-5	全氟辛基磺酸锂盐			POPs					
307-35-7	全氟辛基磺酰氟			POPs					B&W
1652-63-7	全氟辛基季胺碘化物			POPs					
2043-53-0	全氟辛基乙基碘								B&W
3825-26-1	全氟辛酸铵								B&W
67-66-3	三氯甲烷							WFD	
115-32-2	三氯杀螨醇	OSPAR							B&W
1327-53-3	三氧化二砷						SVHC		
688-73-3	三正丁基氯化锡							WFD	
81-14-1	麝香酮								B&W
540-97-6	十二甲基环六硅氧烷								B&W
3457-61-2	叔丁基过氧化异丙苯								B&W
512-04-9	薯蓣皂素	OSPAR							
117-08-8	四氯邻苯二甲酸酐/3,4,5,6-四氯邻苯二甲酸酐/四氯苯二甲酸酐/4,5,6,7-四氯-1,3-异苯并呋喃二酮/四氯苯甲酸酐								B&W
10588-01-9	无水重铬酸钠						SVHC		
608-93-5	五氯苯		TRI PBT	POPs				WFD	
87-86-5	五氯苯酚	OSPAR		POPs				WFD	
133-49-3	五氯苯硫酚								B&W
82-68-8	五氯硝基苯								B&W
1303-28-2	五氧化二砷						SVHC		
122-34-9	西玛津							WFD	
140-66-9	辛基酚	OSPAR						WFD	
51000-52-3	新癸酸, 乙烯基酯	OSPAR							
52270-44-7	新癸酸钴(2+)盐								B&W
34123-59-6	异丙隆/N-4-异丙基苯基-N',N'-二甲基脒							WFD	
72-20-8	异狄氏剂/安特灵			POPs					
7789-12-0	重铬酸钠, 二水						SVHC		
二恶英及类二恶英物质									
1746-01-6	四氯二苯并-对-二恶英 (2,3,7,8-TCDD)		TRI PBT	POPs					
多环芳烃									
56-55-3	1,2-苯并[A]蒽	OSPAR	TRI PBT						
50-32-8	苯并(a)蒽	OSPAR	TRI PBT					WFD	
83-32-9	危	OSPAR	TRI PBT						
120-12-7	蒽	OSPAR	TRI PBT			SVHC		WFD	
53-70-3	二苯并(a,h)蒽	OSPAR	TRI PBT						
85-01-8	菲	OSPAR	TRI PBT						

91-20-3	萘	OSPAR	TRI PBT		WFD
129-00-0	芘	OSPAR	TRI PBT		
86-73-7	芴	OSPAR	TRI PBT		
206-44-0	荧蒽	OSPAR	TRI PBT		WFD

溴化阻燃剂

3194-55-6	1,2,5,6,9,10-六溴环十二烷	OSPAR			B&W
3194-55-6	1,2,5,6,9,10-hexabromo-Cyclododecane	OSPAR			B&W
147-82-0	2,4,6-三溴苯胺				B&W
118-79-6	2,4,6三溴苯酚	OSPAR			B&W
92-86-4	4,4'-二溴联苯	OSPAR			
2050-47-7	4,4'二溴联苯醚	OSPAR			
92-66-0	4-溴联苯	OSPAR			
32536-52-0	八溴二苯醚	OSPAR			B&W
63936-56-1	九溴二苯醚	OSPAR			B&W
36483-60-0	六溴二苯醚	OSPAR	POPs		B&W
25637-99-4	六溴环十二烷	OSPAR			B&W
68928-80-3	七溴二苯醚	OSPAR	POPs		B&W
49690-94-0	三溴二苯醚	OSPAR			
1163-19-5	十溴二苯醚	OSPAR			B&W
13654-09-6	十溴联苯	OSPAR			
632-79-1	四溴苯酚/四溴邻苯二甲酸酐	OSPAR			B&W
40088-47-9	四溴二苯醚	OSPAR	POPs		B&W
79-94-7	四溴双酚A (TBBP-A)	OSPAR	TRI PBT		
32534-81-9	五溴二苯醚	OSPAR	POPs		B&W

有机锡化合物

683-18-1	二丁基二氯化锡	OSPAR			
639-58-7	三苯基氯化锡	OSPAR			
56-35-9	三丁基氧化锡	OSPAR		SVHC	
7440-31-5(org)	有机锡化合物	OSPAR			

短链氯化石蜡

85535-84-8	氯化石蜡 C10-13 (短链氯化石蜡)	OSPAR		SVHC	WFD
------------	----------------------	-------	--	------	-----

六氯环己烷

319-85-7	β-666	OSPAR	POPs		
319-86-8	δ-666	OSPAR			
58-89-9	林丹	OSPAR	POPs	WFD	B&W

壬基酚/壬基酚聚氧乙烯醚及其相关物质

84852-15-3	4-壬基酚	OSPAR			
104-40-5	对壬基酚	OSPAR			WFD
25154-52-3	壬基酚	OSPAR			WFD
11066-49-2	异壬基酚 (混合异构体)	OSPAR			

特定的邻苯二甲酸盐

117-81-7	邻苯二甲酸二(2-乙基己基)酯 (DEHP)	OSPAR	SVHC	WFD
84-74-2	邻苯二甲酸二丁酯	OSPAR	SVHC	

多氯萘

1321-65-9	三氯萘	OSPAR		
1335-88-2	四氯萘	OSPAR		

注释:

OSPAR = OSPAR优先行动化学物质名单

TRI PBT = 美国毒性物质释放清单PBT物质名单

POPs = 《斯德哥尔摩公约》持久性有机污染物名单

SVHC = 欧盟REACH指令高关注度物质候选名单

WFD = 欧盟水框架指令优先物质名单

B&W = Brown and Wania的120种北极污染物名单

1 中国中央人民政府网站,《周生贤在2010年全国环境保护工作会议上的讲话》,1,25,2010.相关链接:http://www.gov.cn/gzdt/2010-01/30/content_1523387.htm (1,11,2010访问)。

2 孔定江,李道季,吴莹.近50年长江口的主要有机污染的记录[J].海洋湖沼通报,2007,2:94-101.

3 Zhang, Tao et al. Perfluorinated Compounds in Whole Blood Samples from Infants, Children and Adults in China, *Environmental Science and Technology*, Vol. 44, No.11, 2010, pp. 4341-4347.

4 An, Wei and Jianying Hu. Effects of Endocrine Disrupting Chemicals on China's Rivers and Coastal Waters. *Frontiers in Ecology and the Environment*, Vol.4, No.7, 2006, pp. 378-386.

5 Hu, Jianying et al. Malformations of the Endangered Chinese Sturgeon *Acipenser Sinensis*, and its causal agents, *PNAS*, Vol. 109, No. 23, 9339-9344.

6 Brown, Trevor N. and Frank Wania. Screening Chemicals for the Potential to be Persistent Organic Pollutants: A Case Study of Arctic Contaminants, *Environmental Science and Technology*, Vol. 42, No. 14, 2008, p. 5202.

7 中国环境保护部化学品中心.中国现有化学品名录2009.

8 刘建国,李政禹,毛岩.中国化学品环境管理问题与战略对策初步研究,专题政策研究,国会会,2007.

9 “新化学物质”定义为任何尚未列入到《中国现有化学物质名录》中的物质。

10 在IECSC 2009中部分登记的CAS码是重复的,在删除这部分后仍有29个CAS码是错误的且未能找到正确的信息。

11 SMILES (简化分子线性输入规范)是一种用ASCII字符串明确描述分子结构的规范。我们使用EPI Suite的数据库来查询IECSC 2009所列化学物质的SMILES码。

12 US EPA. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.00. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA, 2010.

13 Howard, Philip H. and Derek Muir. Identifying New Persistent and Bioaccumulative Organics among Chemicals in Commerce, *Environmental Science and Technology*, Vol. 44, No. 7, 2010, pp. 2277-2285.

14 Brown, Trevor N. and Frank Wania. Screening Chemicals for the Potential to be Persistent Organic Pollutants: A Case Study of Arctic Contaminants, *Environmental Science and Technology*, Vol. 42, No. 14, 2008, p. 5202.

15 黄俊,余刚,张彭义.中国持久性有机污染物嫌疑物质的计算机辅助筛选[J].环境污染与防治,2003,25(1):16-19.

16 Brown, Trevor N. and Frank Wania. Screening Chemicals for the Potential to be Persistent Organic Pollutants: A Case Study of Arctic Contaminants, *Environmental Science and Technology*, Vol. 42, No. 14, 2008, p. 5203.

17 Brown, Trevor N. and Frank Wania. Screening Chemicals for the Potential to be Persistent Organic Pollutants: A Case Study of Arctic Contaminants, *Environmental Science and Technology*, Vol. 42, No. 14, 2008, p. 5203.

18 黄俊,余刚,张彭义.中国持久性有机污染物嫌疑物质的计算机辅助筛选[J].环境污染与防治,2003,25(1):16-19.

19 这一衡量化学物质生物蓄积能力的指标使用于《斯德哥尔摩公约》、联合国欧洲管理委员会《空气污染长距离越境传输公约》和加拿大有毒物质管理政策。

20 在QSAR模型(BCFBAF)中有两种方法用于BCF的估算,分别是回归算法和Arnot-Gobas算法。在本文的分析中,我们使用了回归算法来估算BCF值,这一方法也用于前面提到过的以前的研究中。

21 这一衡量化学物质生物蓄积能力的指标使用于《斯德哥尔摩公约》、联合国欧洲管理委员会《空气污染长距离越境传输公约》、欧盟的REACH指令(vPvB)和美国有毒物质控制法案的新化学品程序。

22 这是一个用于欧盟REACH指令的更为扩展的生物蓄积指标。

23 所有的半衰期数据都是由三级逸算模型产生的。

24 这一衡量化学物质在环境中持久性的指标使用于《斯德哥尔摩公约》、联合国欧洲管理委员会《空气污染长距离越境传输公约》、欧盟的REACH指令(vPvB)。

25 这一衡量化学物质在环境中持久性的指标使用于《斯德哥尔摩公约》、联合国欧洲管理委员会《空气污染长距离越境传输公约》。

26 这一衡量化学物质在环境中持久性的指标使用于《斯德哥尔摩公约》、联合国欧洲管理委员会《空气污染长距离越境传输公约》。

27 《斯德哥尔摩公约》持久性有机污染物清单请参照:<http://chm.pops.int/Convention/ThePOPs/tabid/673/language/en-US/Default.aspx> (访问时间2010年6月21日)

28 OSPAR优先行动化学物质清单请参照:http://www.ospar.org/documents/DBASE/DECRECS/Agreements/04-12e_List%20of%20Chemicals%20for%20Priority%20action.doc (访问时间2010年6月21日)

29 TRI PBT 化学物质清单请参照:<http://www.epa.gov/triinter/trichemicals/>

[pbt%20chemicals/pbt_chem_list.htm](#) (访问时间2010年6月21日)

30 高关注度物质候选名单请参照：http://echa.europa.eu/chem_data/authorisation_process/candidate_list_table_en.asp (访问时间2010年6月21日)

31 水框架指令的优先物质名单请参照：<http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2001:331:0001:0005:EN:PDF> (访问时间2010年6月21日)

32 Brown, Trevor N. and Frank Wania. Screening Chemicals for the Potential to be Persistent Organic Pollutants: A Case Study of Arctic Contaminants, *Environmental Science and Technology*, Vol. 42, No. 14, 2008, p. 5202.

33 BCFBAF估算公式：

$$\text{Log BCF} = 0.6598 \text{ Log Kow} - 0.333 + \Sigma \text{ correction factors}$$

(for Log Kow 1.0 to 7.0)

$$\text{Log BCF} = -0.49 \text{ Log Kow} + 7.554 + \Sigma \text{ correction factors}$$

(for Log Kow > 7.0)

34 黄俊, 余刚, 张彭义. 中国持久性有机污染物嫌疑物质的计算机辅助筛选 [J]. 环境污染与防治, 2003, 25(1):16-19.

35 这其中不包括IECSC 2009中的135种铅化合物, 35种汞化合物和95种镍化合物。只有铅、汞和镍三者本身包含在交叉比对范围内。并且, 可能交叉对比没能涵盖某大类物质中的所有化学物质, 例如《OSPAR公约》中的溴化阻燃剂, 分析中不能保证涉及所有的溴化阻燃剂类化学物质。

36 An, Wei and Jianying Hu. Effects of Endocrine Disrupting Chemicals on China's Rivers and Coastal Waters, *Frontiers in Ecology and the Environment*, Vol.4, No.7, 2006, p. 382.

37 Ibid., p.381

38 有毒有害物质的动态选择和优先机制请参见：http://www.ospar.org/documents/DBASE/Publications/p00256_New%20DYNAMEC%20Manual.pdf (访问时间2010年6月21日)

www.greenpeace.cn