

团 体 标 准

T/SPEMF 0032-2022
T/SZAEPI 001-2022

阻燃剂类化学物质地表水环境风险评估 技术指南

Technical guidelines for aquatic environmental risk assessment of flame
retardant chemical substances

2021-01-26 发布

2021-01-26 实施

深圳市卓越绩效管理促进会
深圳市环境保护产业协会 发布

目 次

前 言..... II

引 言..... III

1 范围..... 1

2 规范性引用文件..... 1

3 术语和定义..... 1

4 评估工作程序..... 3

5 危害识别..... 3

6 暴露评估..... 4

7 效应评估..... 4

8 风险表征..... 4

9 编制报告..... 5

附录 A （资料性附录） 毒性数据收集、可靠性评估与筛选..... 6

附录 B （资料性附录） 阻燃剂类化学物质测定方法..... 7

附录 C （资料性附录） BDE-47、TBBPA 急慢性毒性数据..... 8

附录 D （规范性附录） 阻燃剂类化学物质 PNEC 计算方法..... 10

附录 E （资料性附录） 典型阻燃剂类化学物质 PNEC 计算案例..... 13

前 言

本文件按照GB/T 1.1-2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规则起草。

本文件的附录A、附录B、附录C和附录E为资料性附录，附录D为规范性附录。附录A介绍了毒性数据收集、可靠性评估与筛选工作流程，附录B列出了阻燃剂类化学物质测定方法。附录C列出了典型阻燃剂类化学物质2,2',4,4'-四溴二苯醚（BDE-47）和四溴双酚A（TBBPA）的急慢性毒性数据。附录D规定了阻燃剂类化学物质预测无效应浓度（PNEC）的计算方法。附录E给出了典型阻燃剂类化学物质BDE-47和TBBPA的地表水环境PNEC计算案例。

本文件由深圳市卓越绩效管理促进会、深圳市环境保护产业协会共同提出并归口。

本文件主要起草单位：南方科技大学、生态环境部固体废弃物和化学品管理中心、北京师范大学、深圳市卓越绩效管理促进会、深圳市环境保护产业协会。

本文件主要起草人：张家玮、葛卉、张梦涛、史江红、于相毅、孟耀斌、陶寰宇、肖锐杰、李滨、许宗林、刘鹏伟、周梦杰、王云鹤、王莹、王梦桢等。

本文件为首次发布。

引 言

为贯彻落实《中共中央 国务院关于深入打好污染防治攻坚战的意见》，按照《中华人民共和国国民经济和社会发展第十四个五年规划和2035年远景目标纲要》中有关“重视新污染物治理”的工作要求以及深圳市污染防治攻坚战指挥部印发的《关于全市深入打好污染防治攻坚战命令》相关工作部署，推进新污染物环境风险管理，指导和规范阻燃剂类化学物质环境风险评估管控技术研究和应用工作，促进新污染物治理能力和治理体系的高水平发展，制定本文件。

阻燃剂类化学物质广泛应用于印制电路板、塑料和纺织等加工制造业，是深圳市典型行业的特征污染物。近年来，多溴二苯醚、六溴环十二烷等含溴阻燃剂以及有机磷阻燃剂等，可以导致生物生殖异常、甲状腺毒性、神经毒性等生态环境风险而受到广泛关注，因此有必要建立健全阻燃剂类化学物质地表水环境风险评估技术方法体系，推动评估技术的实践应用。

依据科学先进性和管理实用性原则，贯彻落实《深圳市生态环境保护“十四五”规划》及深圳市《关于全市深入打好污染防治攻坚战命令》中“因地制宜”、“科学治污、精准治污”的精神，结合国内外最新研究成果和管理技术，充分收集已有数据和信息，鼓励运用更加科学、先进的技术方法，确保评估工作的科学性、准确性和可靠性。根据我国及深圳市阻燃剂类化学物质环境风险管理的实际需求，编制本文件。实事求是，注重实用，便于开展阻燃剂类化学物质地表水环境风险评估工作。

阻燃剂类化学物质地表水环境风险评估技术指南

1 范围

本文件规定了阻燃剂类化学物质地表水环境风险评估工作的一般性原则、工作程序、内容、方法和要求。

本文件适用于涉及印制电路板、塑料和纺织等使用阻燃剂类化学物质行业周边地表水体中环境风险评估和一般地表水中环境风险评估相关工作。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款，其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 34708 化学品风险评估通则

HJ/T 154 新化学物质危害评估导则

HJ 831 淡水水生生物水质基准制定技术指南

HJ/T 91 地表水和污水监测技术规范

HJ/T 166 土壤环境监测技术规范

《化学物质环境风险评估技术方法框架性指南（试行）》（环办固体〔2019〕54号）

《化学物质环境与健康暴露评估技术导则（试行）》（生态环境部公告 2020 年 第 69 号）

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件。

3.1

阻燃剂类化学物质 flame retardant chemical substances

指加入到印制电路板、塑料和纺织品等产品中，防止、延迟或抑制火灾发生蔓延的一类化学物质。本文件中“阻燃剂类化学物质”包括多溴二苯醚（Poly brominated diphenyl ethers, PBDEs）、四溴双酚A（Tetrabromobisphenol A, TBBPA）、六溴环十二烷（Hexabromocyclododecane, HBCD）、有机磷阻燃剂（Organophosphorus flame retardant, OFRs）等深圳市典型行业的特征污染物。

3.2

环境风险评估 environmental risk assessment

评价发生不利于生态影响可能性的过程，即在生态系统受一个或多个化学物质影响后，对不利的生态效应出现的可能性予以评估。本文件中“环境风险评估”是指狭义的环境风险评估，即仅考

虑进入地表水环境中的化学物质对水生生物的影响，不考虑其对生态系统服务功能等生态因素的影响。

3.3

危害识别 hazard identification

确定化学物质具有的固有危害属性，本文件中为阻燃剂类化学物质的生态毒理学属性。

3.4

暴露评估 exposure assessment

风险受体暴露于环境中阻燃剂类化学物质时，对环境中阻燃剂类化学物质的浓度水平（亦称为：环境暴露浓度）及分布特征的测定或预测过程。本文件中的“暴露评估”是指阻燃剂类化学物质在地表水、沉积物等环境介质中的浓度及分布特征的测定或预测过程。

3.5

环境暴露浓度 environmental expose concentration, EEC

阻燃剂类化学物质在地表水、沉积物环境中的实际浓度。包括实测环境浓度（measured environmental concentration, MEC）和预测环境浓度（predicted environmental concentration, PEC）

3.6

效应评估 effect assessment

对化学物质所造成的环境污染和环境破坏、引起生态系统结构和功能的变化程度所进行的评估。本文件中的“效应评估”仅考虑阻燃剂类化学物质对水生生物产生的急性和慢性毒性效应。

3.7

效应浓度 effective concentration

阻燃剂类化学物质对水生生物产生急性和慢性毒性效应的浓度。包括半数致死浓度（ LC_{50} ）、半数效应浓度（ EC_{50} ）、10%效应浓度（ EC_{10} ）、未观察效应浓度（NOEC）和最低可观察效应浓度（LOEC）等。

3.8

预测无效应浓度 predicted no effect concentration, PNEC

阻燃剂类化学物质对水生生物不会产生不良效应的最大环境浓度的预测值。

3.9

物种敏感度分布法 species sensitivity distribution, SSD

描述不同物种对环境因子敏感性相互关系的数据分布，本文件采用阻燃剂化学物质的效应浓度与受影响物种累积概率之间的关系曲线来表示。

3.10

风险表征 risk characterization

综合危害识别、暴露评估和效应评估，对阻燃剂类化学物质环境风险进行定性和定量计算的过程。

3.11

风险商 risk quotient, RQ

阻燃剂类化学物质环境暴露浓度（EEC）与预测无效应浓度（PNEC）的比值。

4 评估工作程序

阻燃剂类化学物质地表水环境风险评估包括危害识别、暴露评估、效应评估和风险表征四个步骤，参见图1。

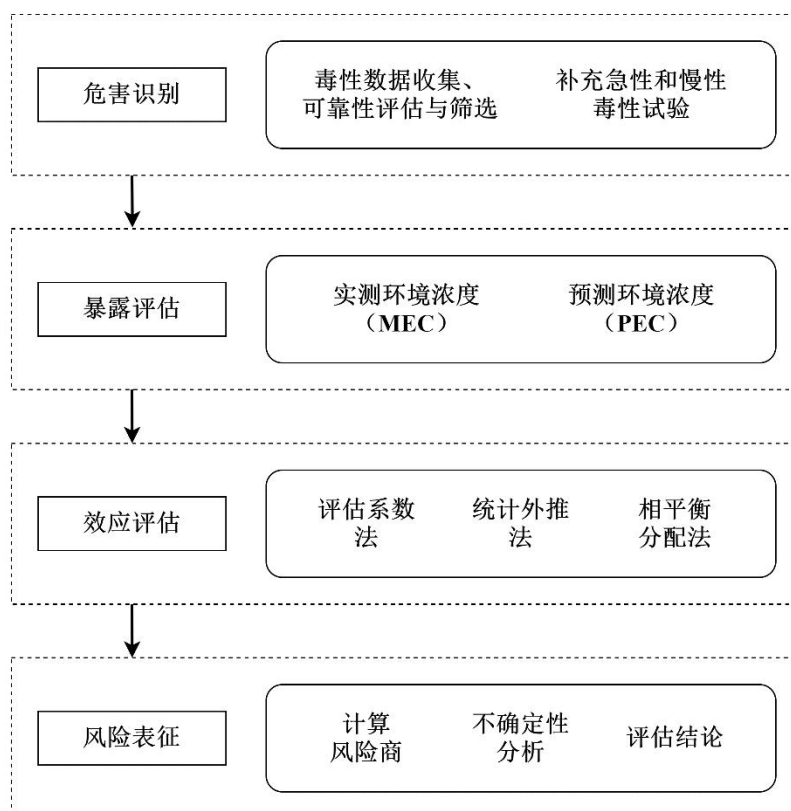


图1 阻燃剂类化学物质地表水环境风险评估工作程序

5 危害识别

危害识别确定化学物质具有的生态毒理特性，包括急性毒性和慢性毒性。

开展毒性数据收集、可靠性评估与筛选，方法参见附录A。通常采用化学物质对藻、蚤、鱼（代表三种不同营养级）的毒性，代表对地表水环境的危害，采用对摇蚊、带丝蚓、狐尾藻等生物的毒性，代表对沉积物的危害。

部分典型阻燃剂类化学物质，如多溴二苯醚（PBDEs）、四溴双酚A（TBBPA）等物质，对生物具有亚致死效应，例如繁殖、生长毒性等，而且对生物体下丘脑-脑垂体-甲状腺（HPT轴）具有不利影响，因此必须同时考虑生物的急性和慢性毒性。

如收集的毒性数据不充足，建议采用我国生态毒理试验相关标准，对藻、溞、鱼等生物补充急性和慢性毒性试验。

6 暴露评估

暴露评估针对地表水、沉积物等环境介质，采用数据收集、现场测定、模型估计等方法获取环境暴露浓度。

建议优先采用地表水、沉积物环境中实测（已收集或现场测定的）环境浓度（MEC）开展环境暴露评估。当采用实测环境浓度时，地表水及沉积物环境的采样布点原则及取样方法分别按照HJ/T 91、HJ/T 166等国家相关规范执行。阻燃剂类化学物质测定方法详见附录B。

当阻燃剂类化学物质实测环境浓度数据不足或没有相关标准检测方法时，建议采用国内外成熟的或国家相关指南推荐的暴露评估模型估算预测环境浓度（PEC），如《化学物质环境与健康暴露评估技术导则（试行）》（生态环境部公告 2020年 第69号）中给出的CET软件（获取来源：<http://ctalab.nies.org/>）。

采用预测环境浓度（PEC）进行环境风险评估时，必须在风险表征程序中详细讨论和说明模型选择和参数设置带来的不确定性及对评估结论的影响程度。

7 效应评估

利用危害识别程序中收集的或补充的生态毒理学数据，参见附录C。针对地表水及沉积物等环境介质，获取阻燃剂类化学物质的预测无效应浓度（PNEC），如地表水 $PNEC_{water}$ 、沉积物 $PNEC_{sed}$ 等。

根据数据的获取情况，参照《化学物质环境与健康危害评估技术导则（试行）》（生态环境部公告 2020年 第69号），合理选择评估系数法、统计外推法、相平衡分配法等PNEC推导方法进行预测，详见附录D。典型阻燃剂类化学物质，包括2,2',4,4'-四溴二苯醚（BDE-47）和四溴双酚A（TBBPA）的 $PNEC_{water}$ 推导案例，参见附录E。

8 风险表征

综合危害识别、暴露评估和效应评估结果开展风险表征，定量描述环境风险大小及其不确定性。

8.1 计算环境风险商

整合暴露评估和效应评估结果，明确阻燃剂类化学物质在地表水、沉积物环境介质中的MEC、PEC和PNEC等数据信息，计算化学物质环境风险商，计算方法见公式（1）或（2）。

$$RQ = \frac{MEC}{PNEC} \dots\dots\dots (1)$$

$$RQ = \frac{PEC}{PNEC} \dots\dots\dots (2)$$

式中：

RQ——环境风险商；

MEC——实测环境浓度；
PEC——预测环境浓度；
PNEC——预测无效应浓度。

8.2 不确定性分析

由于化学物质环境风险评估过程的各个阶段均可能存在一定的不确定性，因此应对环境风险表征结果开展不确定性分析，包括识别不确定性来源，分析不确定性影响方向和影响程度，判断不确定性是否过大而导致评估结论不可靠，研究提出降低不确定性措施。

不确定性分析建议参照《化学物质环境与健康风险表征技术导则（试行）》（生态环境部公告2020年 第69号）开展。

8.3 评估结论

根据环境风险商，得出阻燃剂类化学物质环境风险评估结论，示于表1。

表1 阻燃剂类化学物质环境风险评估结论

环境风险商	评估结论	采取措施
$RQ < 1$	环境风险可接受	在未掌握新的信息之前，暂不需要采取新的风险防控措施
$RQ \geq 1$	环境风险不可接受	需要采取进一步的风险防控措施来降低风险

鉴于风险评估存在不确定性，对于上述两种情形，可根据具体情况，采用证据权重、专家判断等方式决定是否需要进一步收集暴露与毒性数据，开展进一步风险评估，以最终确定环境风险是否可接受。

9 编制报告

阻燃剂类化学物质环境风险评估报告主要包括：评估目的、评估范围、数据收集与数据评估、危害识别、暴露评估、效应评估、风险表征、不确定性分析、评估结论等内容。

附 录 A
(资料性附录)
毒性数据收集、可靠性评估与筛选

A.1 数据收集

物种毒性数据的准确性和可靠性是环境风险评估的前提，需要尽可能多的不同生物物种的生态毒性数据。阻燃剂类化学物质的毒性数据可在国内外生态毒理学数据库（如：Aquatic ECETOC、ECHA REACH、ECOTOX、Aquatic Japan MOE等）、公开发表的论文和报告中获取。

A.2 可靠性评估

为了确保环境风险评估的准确性，用于效应评估的毒性数据必须满足一定的质量标准。数据可靠性的主要判断依据：

- a) 是否使用国家或国际标准测试方法和行业技术标准，操作过程是否遵循良好实验室规范（Good Laboratory Practice, GLP）；
- b) 对于非标准测试方法的实验，所用实验方法是否科学合理；
- c) 实验过程和实验结果的描述是否详细；
- d) 文献是否提供了原始数据。

可靠性评估可以将数据分为四个等级：

- (一) 无限制可靠数据：数据来自 GLP 体系，或数据产生过程完全符合国家或国际标准测试方法和行业技术标准；
- (二) 限制性可靠数据：数据产生过程不完全符合国家或国际标准测试方法和行业技术标准，但有充足的证据证明数据可用；
- (三) 不可靠数据：数据产生过程与国家或国际标准测试方法和行业技术标准有冲突或矛盾，没有充足的证据证明数据可用，实验过程不能令人信服或被专家判断所接受；
- (四) 不确定数据：没有提供足够的实验细节，无法判断数据可靠性。

A.3 数据筛选

无限制可靠数据与限制性可靠数据经过筛选后可用于效应评估，其筛选应符合以下规定：

- a) 实验过程中应严格控制实验条件，宜维持在受试生物的最适生长范围之内；
- b) 实验必须设置对照组，如果对照组中的物种生物出现胁迫、疾病或死亡的比例超过 10%，不得采用该数据；
- c) 以单细胞动物作为受试生物的实验数据不得采用；
- d) 急性毒性效应测试终点（主要包括 LC_{50} 和 EC_{50} ）数据宜使用暴露时间 ≤ 4 天的毒性数据；
- e) 慢性毒性效应测试终点（主要包括 EC_{10} 、NOEC 和 LOEC）数据宜使用暴露时间 ≥ 21 天的毒性数据；
- f) 受试生物应包含不同营养级和生物物种。

附 录 B
(资料性附录)
阻燃剂类化学物质鉴定及样品前处理方法

表 B.1 阻燃剂类化学物质测定方法

物质名称	推荐采用或参考的测定方法	方法编号
多溴二苯醚 (PBDEs)	水质 多溴二苯醚的测定 气相色谱-质谱法	HJ 909—2017
	土壤和沉积物 多溴二苯醚的测定 气相色谱-质谱法	HJ 952—2018
	塑料制品中多溴联苯和多溴二苯醚的测定方法 高效液相色谱法	GB/T 37638—2019
四溴双酚A (TBBPA)	玩具中四溴双酚A和六溴环十二烷含量的测定 高效液相色谱-串联质谱法	GB/T 38415—2019
	电子电气产品中四溴双酚A的测定 气相色谱-质谱法	GB/T 32889—2016
六溴环十二烷 (HBCD)	电子电气产品中六溴环十二烷的测定 气相色谱-质谱联用法	GB/T 29785—2013
	电子电气产品中六溴环十二烷的测定 高效液相色谱-质谱法	GB/T 32883—2016
	玩具中四溴双酚A和六溴环十二烷含量的测定 高效液相色谱-串联质谱法	GB/T 38415—2019
有机磷阻燃剂* (OFRs)	玩具中有机磷阻燃剂含量的测定 气相色谱-质谱联用法	GB/T 36922—2018
	进出口纺织品中有机磷阻燃剂的检测方法	SN/T 3228—2012

*: 有机磷阻燃剂包括磷酸三(1-氯-2-丙基)酯(TCPP), 三(2-氯乙基)磷酸酯(TCEP), 磷酸三(2,3-二氯丙基)酯(TDCP)等。

附 录 C
(资料性附录)
BDE-47、TBBPA 毒性数据

表 C.1 BDE-47 急慢性毒性数据

序号	物种名称	物种拉丁名	毒性效应	毒性终点	毒性值 ($\mu\text{g/L}$)	暴露时间 (天)
1	羊角月牙藻	<i>Selenastrum capricornutum</i>	急性毒性	EC ₅₀	2180	4
2	斑马鱼	<i>Danio rerio</i>	急性毒性	EC ₅₀	5370	4
3	底鳉	<i>Fundulus heteroclitus</i>	急性毒性	EC ₅₀	100	4
4	大型蚤	<i>Daphnia magna</i>	急性毒性	EC ₅₀	1040	4
5	哲水蚤 (成虫)	<i>Acartia tonsa</i>	急性毒性	EC ₅₀	2370	1
6	剑齿草虾 (幼虫)	<i>Palaemonetes pugio</i>	急性毒性	EC ₅₀	23	2
7	剑齿草虾 (成虫)	<i>Palaemonetes pugio</i>	急性毒性	EC ₅₀	78	2
8	褶皱臂尾轮虫	<i>Brachionus plicatilis</i>	急性毒性	EC ₅₀	7923	1
9	大型蚤	<i>Daphnia magna</i>	慢性毒性-繁殖	NOEC	14	21
10	黑头呆鱼	<i>Pimephales promelas</i>	慢性毒性-繁殖	NOEC	2380	21
11	剑齿草虾	<i>Palaemonetes pugio</i>	慢性毒性-繁殖	NOEC	25	4
12	近头状尖胞藻	<i>Raphidocelis subcapitata</i>	慢性毒性-繁殖	LOEC	25	6
13	斑马鱼	<i>Danio rerio</i>	慢性毒性-致死	NOEC	643.6 (mg/kg食物)	90
14	虹鳟	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	慢性毒性-生化基因	NOEC	1000	7

注：EC₅₀为半数效应浓度；NOEC为未观察效应浓度；LOEC为最低可观察效应浓度。

毒性数据来源：ECOTOX数据库 (<https://cfpub.epa.gov/ecotox/>)；数据库访问时间：2021年11月1日。

表 C.2 TBBPA 急慢性毒性数据

序号	物种名称	物种拉丁名	毒性效应	毒性终点	毒性值 (μg/L)	暴露时间 (天)
1	四尾栅藻	<i>Scenedesmus quadricauda</i>	急性毒性	EC ₅₀	1202	4
2	羊角月牙藻	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	急性毒性	EC ₅₀	7723	3
3	日本沼虾	<i>Macrobrachium nipponense</i>	急性毒性	LC ₅₀	1216	4
4	霍甫水丝蚓	<i>Limnodrilus hoffmeisteri</i>	急性毒性	LC ₅₀	7852	4
5	稀有鮡鲫	<i>Gobiocypris rarus</i>	急性毒性	LC ₅₀	210	4
6	虹鳟	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	急性毒性	LC ₅₀	400	4
7	麦穗鱼	<i>Pseudorasbora parva</i>	急性毒性	LC ₅₀	860	4
8	斑马鱼	<i>Danio rerio</i>	急性毒性	LC ₅₀	3000	4
9	蓝鳃太阳鱼	<i>Lepomis macrochirus</i>	急性毒性	EC ₅₀	510	2
10	虹鳟	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	急性毒性	EC ₅₀	400	4
11	泽陆蛙	<i>Rana limnocharis</i>	急性毒性	EC ₅₀	1254	4
12	摇蚊	<i>Chironomus plumosus</i>	急性毒性	LC ₅₀	24576	1
13	大型溞	<i>Daphnia magna</i>	慢性毒性-繁殖	NOEC	100	48
14	谷皮菱形藻	<i>Nitzschia palea</i>	慢性毒性-繁殖	LOEC	2610	3
15	泽陆蛙	<i>Rana limnocharis</i>	慢性毒性-致死	NOEC	49	30
16	斑马鱼	<i>Danio rerio</i>	慢性毒性-致死	LOEC	500	6
17	银鲫	<i>Carassius auratus</i>	慢性毒性-生长抑制	EC ₁₀	522	30

注：EC₅₀为半数效应浓度；NOEC为未观察效应浓度；LOEC为最低可观察效应浓度。

毒性数据来源：ECOTOX数据库（<https://cfpub.epa.gov/ecotox/>）；数据库访问时间：2021年11月1日。

附 录 D
(规范性附录)
阻燃剂类化学物质 PNEC 计算方法

根据阻燃剂类化学物质对地表水、沉积物环境介质中生物的生态毒理学数据充分程度，合理选择推导PNEC的方法。

D.1 地表水PNEC

通常采用评估系数法或统计外推法，推导阻燃剂类化学物质在地表水环境中的预测无效应浓度（PNEC_{water}）。

当获得水生生物毒性数据数量<5时，采用评估系数法推导PNEC_{water}。

当获得水生生物毒性数据数量≥5且满足统计外推法对数据的基本要求时，可采用统计外推法推导PNEC_{water}。推荐选用物种敏感度分布法（SSD）作为水环境预测无效应浓度推算的统计外推法。SSD模型构建方法详见HJ 831-2017。

PNEC_{water}按公式（D.1）计算。

$$PNEC_{water} = ecoTox_{water} / AF_{water} \dots\dots\dots (D.1)$$

式中：

PNEC_{water}——地表水环境预测无效应浓度；

ecoTox_{water}——地表水环境生态毒理学关键效应值，通常采用最敏感物种的LC₅₀、EC₅₀、EC₁₀、NOEC或SSD法推导的毒性阈值等；

AF_{water}——评估系数，根据ecoTox_{water}的情况选择确定，无量纲。推荐评估系数见表D.1。

表 D.1 推导 PNEC_{water} 的评估系数

数据要求	评估系数 (AF _{water})
三个营养级的生物（鱼类、溞类和藻类）中，每个营养级至少有一项急性毒性试验的LC ₅₀ 或EC ₅₀ 数据	1000
两个营养级的生物（鱼类、溞类或藻类）中，至少有一项慢性毒性试验的EC ₁₀ 或NOEC数据	100
三个营养级的生物（鱼类、溞类和藻类）中，至少有两项慢性毒性试验的EC ₁₀ 或NOEC数据，且分别代表两个营养级的生物物种	50
三个营养级的生物（鱼类、溞类和藻类）中，至少有三项慢性毒性试验的EC ₁₀ 或NOEC数据，且分别代表三个营养级的生物物种	10
SSD法推导的毒性阈值、野外数据或模拟生态系统数据	1-5（视实际情况判断）

D.2 沉积物PNEC

通常采用评估系数法推导阻燃剂类化学物质在沉积物中的预测无效应浓度（PNEC_{sed}）。无法获得沉积物生物有效生态毒性数据时，采用相平衡分配法进行估算。但是，仅获得沉积物生物急性毒性数据时，应同时考虑评估系数法和相平衡分配法的计算结果，取两者中的低值作为沉积物的PNEC_{sed}。

若获得沉积物生物毒性数据充分且满足统计外推法对数据的基本要求时，可采用统计外推法估算 $PNEC_{sed}$ ，但应对所采用的统计外推法进行详细说明。

D.2.1 评估系数法

$PNEC_{sed}$ 由环境危害识别确定的沉积物中生物的生态毒理学关键效应数据除以评估系数推导得出，具体见公式（D.2）。

$$PNEC_{sed} = ecoTox_{sed} / AF_{sed} \dots \dots \dots (D.2)$$

式中：
 $PNEC_{sed}$ ——沉积物预测无效应浓度，mg/kg；
 $ecoTox_{sed}$ ——沉积物环境生态毒理学关键效应值，通常采用最敏感物种的 LC_{50} 、 EC_{50} 、 EC_{10} 、 $NOEC$ 等，mg/kg；
 AF_{sed} ——评估系数，根据 $ecoTox_{sed}$ 的情况选择确定，无量纲。推荐评估系数见表D.2。

表 D.2 推导 $PNEC_{sed}$ 的评估系数

数据要求	评估系数
沉积物生物物种的一项慢性毒性试验数据（ $NOEC$ 或 EC_{10} ）	100
代表不同食性及生长条件的沉积物生物物种的两项慢性毒性试验数据（ $NOEC$ 或 EC_{10} ）	50
代表不同食性及生长条件的沉积物生物物种的三项慢性毒性试验数据（ $NOEC$ 或 EC_{10} ）	10

D.2.2 相平衡分配法

基于阻燃剂类化学物质在水相和沉积物相中的分配情况，结合化学物质的 $PNEC_{water}$ 来推导 $PNEC_{sed}$ ，具体见公式（D.3-D.5）。

$$PNEC_{sed} = \frac{K_{susp-water}}{RHO_{susp}} \times PNEC_{water} \times 1000 \dots \dots \dots (D.3)$$

式中：
 $PNEC_{sed}$ ——沉积物预测无效应浓度，mg/kg；
 $PNEC_{water}$ ——地表水环境预测无效应浓度，mg/L；
 RHO_{susp} ——悬浮物容重，kg/m³。默认值为1150。若能获得实测数据，应优先选用；
 $K_{susp-water}$ ——悬浮物-水分配系数，m³/m³。优先采用实测数据，难以获得实测数据时，可基于环境分配理论估算获得，估算方法如下。

$$K_{susp-water} = Fwater_{susp} + Fsolid_{susp} \times \frac{Kp_{susp}}{1000} \times RHO_{solid} \dots \dots \dots (D.4)$$

$$Kp_{susp} = Foc_{susp} \times Koc \dots \dots \dots (D.5)$$

式中：
 $K_{susp-water}$ ——水环境中化学物质的悬浮物-水分配系数，m³/m³；
 $Fwater_{susp}$ ——悬浮物中水相的体积分数，m_{water}³/m_{susp}³，默认值为0.9；
 $Fsolid_{susp}$ ——悬浮物中固相的体积分数，m_{solid}³/m_{susp}³，默认值为0.1；
 Kp_{susp} ——化学物质在悬浮物中固相与水相的分配系数，L/kg；
 RHO_{solid} ——固相密度，kg/m³，默认值为2500；
 Foc_{susp} ——悬浮物中有机碳含量，kg_{oc}/kg_{susp}，默认值为0.1。
 Koc ——化学物质在悬浮物中有机碳与水相中分配系数，L/kg。

T/SPMF 0032-2022

T/SZAEPI 001-2022

根据不同化学物质的特性，上述公式（D.3）适用于 $\lg K_{ow} \geq 3$ （ K_{ow} ：正辛醇-水分配系数，Octanol-Water Partition Coefficient）的化学物质。但是，对于 $\lg K_{ow} \geq 5$ 的化学物质，应将公式（D.3）获得的结果乘以修正因子0.1进行修正，以增加估算结果的可靠性。

附 录 E
(资料性附录)
典型阻燃剂类化学物质水环境 PNEC 计算案例

E.1 2,2',4,4'-四溴二苯醚 (BDE-47)

E.1.1 毒性数据

按照本文件效应评估的工作流程,收集筛选2,2',4,4'-四溴二苯醚(BDE-47)对不同水生生物的急慢性毒性数据,参见表C.1。

E.1.2 水环境PNEC计算

按照附录A的规定,将附录C中BDE-47急慢性毒性数据进行可靠性评估和筛选,经筛选后可以采用的BDE-47毒性数据 <5 ;根据附录D的相关规定,选择采用评估系数法计算PNEC。

经筛选后的BDE-47急慢性毒性数据包括三个营养级,并且有两项慢性毒性试验的NOEC数据,分别代表两个营养级的生物物种,因此根据表D.2选取评估系数为50。

由公式(D.1)可得BDE-47的 $PNEC_{water}$ 为:

$$14 \mu\text{g/L (最敏感物种大型溞毒性值)} / 50 \text{ (评估系数)} = 0.28 \mu\text{g/L}。$$

E.2 四溴双酚A (TBBPA)

E.2.1 毒性数据

按照本文件效应评估的工作流程,收集筛选四溴双酚A(TBBPA)对不同水生生物的急慢性毒性数据,参见表C.2。

E.2.2 水环境PNEC计算

按照附录A的规定,将附录C中TBBPA急慢性毒性数据进行可靠性评估和筛选,经筛选后可以采用的TBBPA急慢性毒性数据 ≥ 5 ;根据附录D的相关规定,经筛选后TBBPA毒性数据能够满足统计外推法对数据的基本要求。因此,采用统计外推法(具体为物种敏感度分布法,SSD法)计算PNEC,物种敏感度分布曲线见图E.1,SSD法推导的5%物种受影响浓度(HC_5)为 $57.8 \mu\text{g/L}$ 。

由公式(D.1)可得TBBPA的 $PNEC_{water}$ 为:

$$57.8 \mu\text{g/L (SSD法推导的} HC_5) / 5 \text{ (评估系数)} = 11.56 \mu\text{g/L}。$$

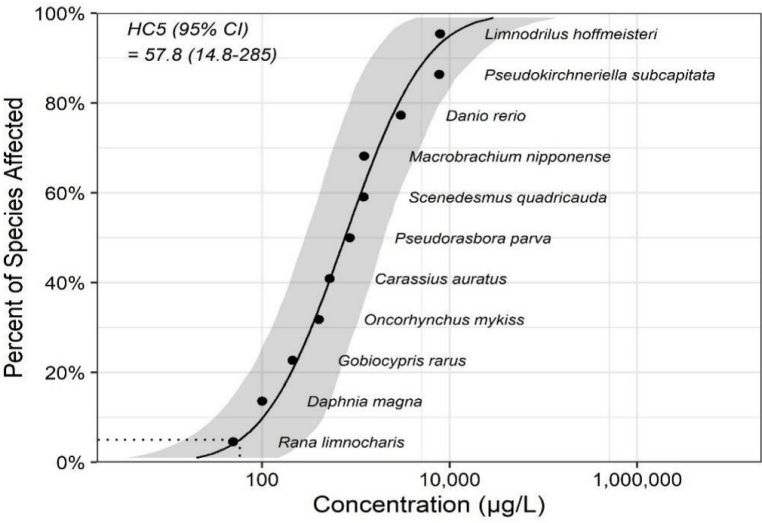


图 E.1 TBBPA 物种敏感度分布曲线