

附件 1

化学物质环境与健康危害评估技术导则（试行）

中华人民共和国生态环境部

二〇二〇年十二月

目 录

1 适用范围.....	1
2 规范性引用文件.....	1
3 术语和定义.....	2
4 评估内容与程序.....	4
5 技术要求.....	5
6 评估结果.....	24
附录 A 环境生物二次毒性危害评估.....	26
附录 B 危害评估涉及的相关参数及推荐值.....	28

化学物质环境与健康危害评估技术导则

(试行)

为指导化学物质环境与健康危害评估工作，制定本技术导则。

1 适用范围

本技术导则规定了化学物质环境与健康危害评估的工作程序、评估内容、基本方法和技术要求。

本技术导则适用于化学物质的环境与健康危害评估。

2 规范性引用文件

本技术导则内容引用了下列文件或其中的条款。凡是不注日期的引用文件，其有效版本适用于本技术导则。

GB/T 24782 持久性、生物累积性和毒性物质及高持久性和高生物累积性物质的判定方法

GB 30000.18 化学品分类和标签规范 第 18 部分：急性毒性

GB 30000.19 化学品分类和标签规范 第 19 部分：皮肤腐蚀/刺激

GB 30000.20 化学品分类和标签规范 第 20 部分：严重眼损伤/眼刺激

GB 30000.21 化学品分类和标签规范 第 21 部分：呼吸道或皮肤致敏

GB 30000.22 化学品分类和标签规范 第 22 部分：生殖细胞致突变性

GB 30000.23 化学品分类和标签规范 第 23 部分：致癌性

GB 30000.24 化学品分类和标签规范 第 24 部分：生殖毒性

GB 30000.25 化学品分类和标签规范 第 25 部分：特异性靶器官毒性 一次接触

GB 30000.26 化学品分类和标签规范 第 26 部分：特异性靶器官毒性 反复接触

GB 30000.28 化学品分类和标签规范 第 28 部分：对水生环境的危害

GB 30000.29 化学品分类和标签规范 第 29 部分：对臭氧层的危害

HJ 831 淡水水生生物水质基准制定 技术指南

《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）

《新化学物质环境管理登记办法》（生态环境部令 第 12 号）

《新化学物质环境管理登记指南》（生态环境部公告 2020 年第 51 号）

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本技术导则。

3.1 化学物质

为商业目的取自大自然，或者经生产、加工生成的单质及化合物；混合物是指由两种或者多种不发生反应的化学物质组成的物质。

3.2 环境危害评估

确定环境生物个体、（亚）种群暴露于化学物质时引起潜在危害的过程。包括环境危害识别和环境危害表征。

3.3 健康危害评估

确定人体通过环境介质暴露于化学物质时引起潜在健康危害的过程。包括健康危害识别和健康危害表征。

3.4 环境危害识别

识别和确定化学物质所具有的能够对环境生物个体、（亚）种群产生不良影响的类型和性质的过程。

3.5 健康危害识别

识别和确定化学物质所具有的能够对人体产生不良影响类型和性质的过程。

3.6 环境危害表征

定量描述化学物质可能引起环境受体发生有害效应的固有特性。

3.7 健康危害表征

定量描述化学物质通过环境介质可能引起人体发生有害效应的固有特性。

3.8 预测无效应浓度

在现有认知条件下，化学物质在受关注环境单元中预计对环境生物不会产生不良效应的最大浓度。

3.9 每日可耐受摄入量

人体每天摄入某种化学物质而不产生可检测到的对健康产生危害的数量。

3.10 关键效应

预期在最低剂量或浓度下发生的具有生物学意义的主要不良反应。

4 评估内容与程序

环境与健康危害评估内容主要包括数据收集、环境与健康危害识别、环境与健康危害表征三个方面。

评估程序示意图 1。

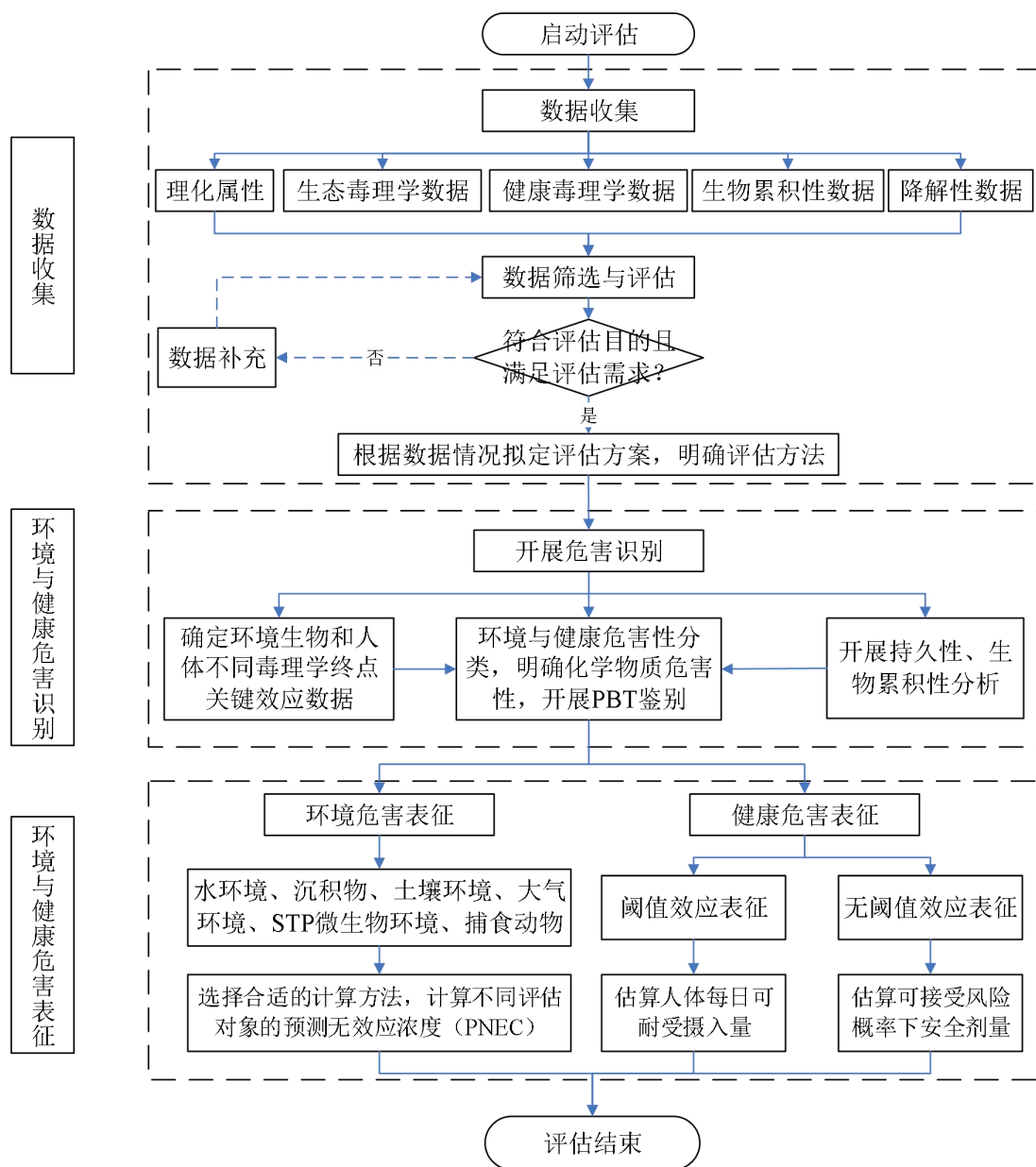


图 1 化学物质环境与健康危害评估程序示意图

5 技术要求

5.1 数据收集

5.1.1 一般规定

数据收集应遵循科学性、全面性、可及性、可解释性和满足评估需求等基本原则。

应充分考虑环境与健康危害评估目的、拟评估化学物质和评

估对象的不同，收集与危害评估相关的尽可能多的数据。

5.1.2 数据种类和来源

5.1.2.1 数据种类

包括化学物质的生态毒理学数据、健康毒理学数据、生物累积性数据、降解性数据和理化属性数据等。

(1) 生态毒理学数据

需要收集的生态毒理学数据包括不同环境评估对象中生物的急性毒性数据、慢性毒性数据以及其他非生物危害效应数据。环境评估对象包括水环境、沉积物、土壤环境、大气环境、污水处理厂（STP）微生物环境、捕食动物等。

对于水环境，一般应收集藻类、溞类和鱼类等水生生物的毒性数据，例如藻类生长抑制毒性、溞类急性活动抑制毒性、鱼类急性毒性、鱼类慢性毒性等。

对于沉积物，收集摇蚊、带丝蚓、狐尾藻等底栖生物的毒性数据，例如沉积物-水系统中摇蚊毒性、穗状狐尾藻毒性等。

对于土壤环境，收集土壤微生物、蚯蚓、植物等土壤生物的毒性数据，例如蚯蚓急性毒性、陆生植物生长活力试验毒性等。

对于大气环境，通常收集苔藓、蕨类植物等生物的毒性数据以及全球气候变暖、消耗臭氧层、酸雨效应等非生物效应数据。

对于 STP 微生物环境，收集活性污泥呼吸抑制、细菌抑制或原生动物生长抑制等毒性数据，例如活性污泥呼吸抑制毒性等。

对于捕食动物，通常收集鸟类、哺乳动物的经口毒性数据。

(2) 健康毒理学数据

需要收集的健康毒理学数据包括急性毒性、腐蚀性、刺激性（皮肤、眼睛）、致敏性（皮肤、呼吸道）、（亚）慢性毒性、致突变性、生殖发育毒性、致癌性等。此外，还应收集流行病学数据、毒代动力学、毒效动力学等相关数据。

对于通过阈值作用模式产生毒性效应且能够获得可靠阈值的健康毒理学终点（例如（亚）慢性毒性、生殖发育毒性等），应明确剂量描述符并收集不同暴露途径的毒性数据，例如经口途径 LD_{50} 、吸入途径 LC_{50} 、经皮途径的 NOAEL 或 LOAEL 等。对于通过无阈值作用模式产生毒性效应的健康毒理学终点（例如致突变性、遗传毒性致癌性），以及通过阈值作用模式产生毒性效应但无法获得可靠阈值的健康毒理学终点（例如刺激性），在难以明确剂量描述符的前提下，应收集详细的试验过程与试验结果等方面的描述信息。

(3) 理化属性数据

需要收集的理化属性数据主要包括水溶解度、沸点、蒸气压、亨利常数、正辛醇-水分配系数、有机碳标化吸附系数、解离常数、pH 值、熔点/凝固点、密度、表面张力、粒径等。

(4) 生物累积性数据

需要收集的生物累积性数据主要包括水生或陆生生物的生物富集系数 (BCF)、生物累积系数 (BAF)、生物放大系数 (BMF)、生物-沉积物累积系数 (BSAF) 等。

(5) 降解性数据

需要收集的降解性数据主要包括生物降解数据(例如快速生物降解数据、固有生物降解数据、模拟试验数据等)、非生物降解数据(例如水解数据、光解数据等)和半衰期等。

5.1.2.2 数据来源

数据来源尽可能广泛,以确保能够获得充足的数据开展环境与健康危害评估。数据来源包括测试试验、国内外已有的化学物质数据库、公开发表的文献/报告、计算毒理学数据以及其他可获得的技术资料等。

5.1.3 数据筛选与评估

应按照相关性、可靠性和充分性原则,对所有收集获得的化学物质数据进行筛选评估,确定用于环境与健康危害评估的数据。必要时应辅以专家判断。

(1) 相关性是指获得的有效数据对危害评估的适用程度。通常,相关性评估需要考虑测试物质相关性、测试生物相关性、生态毒理学/健康毒理学终点相关性、环境暴露方式相关性、估算方法适用性等影响因素。

(2) 可靠性是指获得的有效测试数据的内在质量高低,与测试方法以及对测试过程和结果描述的清晰程度、逻辑性等相关。通常,可靠性评估需要考虑的主要影响因素包括:试验类型说明是否明确(例如是否为标准试验、是否遵循良好实验室规范(GLP)原则等),测试方法与测试物质的描述是否清晰,测试条件描述

是否全面，测试过程中是否有合适的质量控制，测试结果是否给出了清晰准确的描述等。

(3) 充分性是指获得的有效数据对化学物质某些危害性判断的支撑程度。通常，充分性评估应由专业人员综合分析数据的完整性，重点考虑现有数据是否足以支撑开展环境与健康危害评估。

根据上述原则，确定数据筛选要求如下。

(1) 优先采用按照国家标准测试方法、行业技术标准或等效采用国际标准测试方法（例如 ISO 方法、OECD 导则等）所获得的试验数据。采用非标准测试方法获得的试验数据，应评估其测试方法、试验结果等因素，并结合专家判断确认其科学合理后，方可选用。

(2) 优先采用遵循 GLP 原则开展测试所获得的试验数据。

(3) 优先采用我国本土生物试验数据。在缺乏本土生物试验数据或有证据表明本土生物非敏感物种的情况下，可采用国际机构发布的其他生物试验数据。但是，有管理规定的应符合管理规定对数据的基本要求。

(4) 当缺少可靠试验数据时，可选用交叉参照方法或(Q)SAR 模型估算获得的数据，但是应确保交叉参照方法的适用性、充分性以及(Q)SAR 模型的科学性、估算方法、应用域等均已得到充分论证说明。

(5) 不应选用不具有充分辅助信息能够予以解释说明、数

据产生过程与试验准则有冲突或矛盾、试验描述信息缺乏可信度等类型的数据。

对于经筛选和评估后不满足评估需求的，必要时应结合评估目的开展测试，进行数据补充。试验方案应参照国家标准测试方法、行业技术标准或国际标准测试方法等进行设计。

5.2 环境与健康危害识别

化学物质环境与健康危害识别包括三方面内容：确定拟评估化学物质不同生态毒理学和健康毒理学终点的关键效应数据；明确化学物质的环境与健康危害性，开展拟评估化学物质危害性分类；开展拟评估化学物质持久性、生物累积性分析与持久性、生物累积性和毒性物质（PBT）/高持久性和高生物累积性物质（vPvB）、内分泌干扰物质（EDCs）判别。

5.2.1 环境危害识别

5.2.1.1 确定关键效应数据

应基于专业判断开展化学物质不同生态毒理学终点关键效应数据的确定。

对于收集到的所有生态毒理学终点数据，首先剔除存在支撑信息不充分、测试明显不规范等情形的无效数据。对于有效数据，按不同环境评估对象（水环境、沉积物、大气环境、土壤环境、STP 微生物环境、捕食动物）进行归类，并对每个环境评估对象中的所有有效生态毒理学数据进行质量评估，筛选满足质量要求的数据。针对每个环境评估对象，选用最敏感物种数据作为关键

效应数据，明确拟评估化学物质对环境生物的危害性。

5.2.1.2 环境危害性分类

根据 GB 30000.28 和 GB 30000.29，分别对拟评估化学物质的水生环境和臭氧层的危害进行分类。

5.2.2 健康危害识别

5.2.2.1 确定关键效应数据

应基于专业判断开展化学物质不同健康毒理学终点关键效应数据的确定。

对于收集到的所有健康毒理学终点数据，首先剔除存在支撑信息不充分、测试明显不规范等情形的无效数据。对于有效数据，按不同健康毒理学终点进行归类，对每个健康毒理学终点数据进行质量评估，筛选满足质量要求的数据。优先选用人体流行病学调查数据，缺少流行病学调查数据或数据质量低的，对于不同健康毒理学终点选择最为敏感的其他数据作为关键效应数据，明确拟评估化学物质对健康的危害性。

在数据质量相同的前提下，对于同一个健康毒理学终点，如果有多个试验动物数据，通常选择与人体最相关且最敏感的试验动物数据作为关键效应数据，或采取证据权重的方法进行确定。同时，通常选择测试暴露途径与人体潜在暴露相似的试验获得的数据作为关键效应数据。确定关键效应数据时，应充分考虑试验动物与人体对化学物质的暴露条件、生物利用率、摄入/吸入量等方面的差异。

5.2.2.2 健康危害性分类

根据 GB 30000.18-GB 30000.26，对拟评估化学物质的健康危害进行分类。

5.2.3 分析持久性、生物累积性及开展 PBT/vPvB、EDCs 判别

根据 GB/T 24782 开展化学物质持久性、生物累积性分析与 PBT/vPvB 判别。属于新化学物质的，还可以采用《新化学物质环境管理登记指南》中规定的标准进行判别。

关于 EDCs，应对比国际现有的 EDCs 管理清单，以及在现有国际数据库中检索拟评估化学物质是否属于 EDCs 或疑似 EDCs。属于疑似 EDCs 的，条件允许时，可参照国际通行技术指南技术方法，对化学物质的 EDCs 属性进行初步评估。

化学物质持久性、生物累积性分析与 PBT/vPvB 判别一般仅针对化学物质本身，对于在使用过程或环境中发生水解、生物降解或化学反应等转化的，还应评估转化产物（或“降解产物”或“代谢产物”）是否具有持久性或毒性。

5.3 环境与健康危害表征

5.3.1 环境危害表征

利用环境危害识别过程确定的不同环境评估对象的关键效应数据，推导化学物质通常不会对环境生物产生不良效应的浓度（预测无效应浓度（PNEC）），开展环境危害表征。

环境危害表征中，重点推导化学物质对水环境、沉积物、土壤环境、STP 微生物环境以及捕食动物的 PNEC。对于大气环境

危害，目前通过定性分析化学物质是否具有全球气候变暖、消耗臭氧层、酸雨效应等非生物效应进行表征。

通常，用于推导预测无效应浓度的关键效应数据的生态毒理学终点为致死率、生长抑制率和繁殖率等，常选用半数致死浓度（ LC_{50} ）、半数效应浓度（ EC_{50} ）、10%效应浓度（ EC_{10} ）或无观察效应浓度（ $NOEC$ ）。

根据环境评估对象中生物的生态毒理学数据充分程度，合理选择推导环境评估对象 $PNEC$ 的方法，例如评估系数法、统计外推法、相平衡分配法等。

5.3.1.1 水环境危害表征

水环境危害表征通常采用统计外推法或评估系数法，推导水环境中生物的预测无效应浓度（ $PNEC_{water}$ ）。对于不同方法获得的不同 $PNEC$ 值，应予以比较分析，确定用于水环境危害表征的 $PNEC$ 值。

当获得水生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，可采用统计外推法推导 $PNEC$ 。水环境预测无效应浓度推算的统计外推法常选用物种敏感性分布法（ SSD ），推导 $PNEC$ 的具体过程可参见 HJ 831“8.1 水质基准推导方法”。

采用评估系数法推导水环境生物预测无效应浓度（ $PNEC_{water}$ ），由危害识别确定的水环境生物的生态毒理学关键效应数据除以评估系数推算得出。具体见公式（1）。

$$PNEC_{water} = ecoTox_{water} / AF_{water} \quad (1)$$

式中：

$PNEC_{water}$ ——水环境生物的预测无效应浓度， $mg \cdot L^{-1}$ ；

$ecoTox_{water}$ ——水环境生物的生态毒理学关键效应值，通常采用最敏感物种的半数致死浓度 (LC_{50})、效应浓度 (EC_{50} 或 EC_{10}) 或无观察效应浓度 ($NOEC$) 等， $mg \cdot L^{-1}$ ；

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 1。

表 1 计算 $PNEC_{water}$ 的推荐评估系数

数据要求	评估系数 (AF_{water})
水环境三个营养级别的生物（鱼类、溞类和藻类）中，每个营养级别至少有一项短期 $L(E)C_{50}$ 数据	1000
两个营养级别的生物（鱼类或溞类）中，至少有一项长期试验的 EC_{10} 或 $NOEC$ 数据	100
三个营养级别的生物（鱼类、溞类和藻类）中，至少有两项长期试验的 EC_{10} 或 $NOEC$ 数据，且分别代表两个营养级别的生物物种	50
三个营养级别的生物（鱼类、溞类和藻类）中，至少有三项长期试验的 EC_{10} 或 $NOEC$ 数据，且分别代表三个营养级别的生物物种	10
野外数据或模拟生态系统数据	视实际情况判断 (不大于 5)

5.3.1.2 沉积物危害表征

沉积物危害表征通常采用相平衡分配法或评估系数法，推导沉积物中生物的预测无效应浓度 ($PNEC_{sed}$)。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；获得有限的沉积物生物有效生态毒性数据时，应采用评估系数法进行估算。但是，仅获得沉积物生物短期毒性数据时，应同时考虑评估系数法（以沉积物生物的生态毒性数据除以评估系数 1000 计算）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 $PNEC$ 。

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，但应对所采用的统计外推法进行详细说明。

(1) 相平衡分配法

相平衡分配法基于化学物质在沉积物底泥相和水相中的分配情况，结合化学物质的 $PNEC_{water}$ 来推导 $PNEC_{sed}$ 。具体见公式 (2)。

$$PNEC_{sed} = \frac{K_{susp-water}}{RHO_{susp}} \times PNEC_{water} \times 1000 \quad (2)$$

式中：

$PNEC_{sed}$ ——沉积物生物预测无效应浓度， $mg \cdot kg^{-1}$ ；

$PNEC_{water}$ ——水环境生物预测无效应浓度， $mg \cdot L^{-1}$ ；

RHO_{susp} ——悬浮物容重， $kg \cdot m^{-3}$ 。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， $m^3 \cdot m^{-3}$ 。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。

$$K_{susp-water} = F_{water_{susp}} + F_{solid_{susp}} \times \frac{Kp_{susp}}{1000} \times RHO_{solid} \quad (3)$$

$$Kp_{susp} = Foc_{susp} \times Koc \quad (4)$$

式中：

$K_{susp-water}$ ——水环境中化学物质的悬浮物-水分配系数， $m^3 \cdot m^{-3}$ ；

$F_{water_{susp}}$ ——悬浮物中水相的体积分数， $m_{water}^3 \cdot m_{susp}^{-3}$ 。默

认为值为 0.9;

$F_{solid_{susp}}$ ——悬浮物中固相的体积分数, $m_{solid}^3 \cdot m_{susp}^{-3}$ 。默认值为 0.1;

Kp_{susp} ——化学物质在悬浮物中的固-水分配系数, $L \cdot kg^{-1}$;

RHO_{solid} ——固相密度, $kg \cdot m^{-3}$ 。默认值为 2500;

Foc_{susp} ——悬浮物中有机碳含量, $kg_{oc} \cdot kg_{susp}^{-1}$ 。默认值为 0.1。

根据不同化学物质的特性, 上述公式 (2) 适用于 $lgKow \geq 3$ 的化学物质。但是, 对于 $lgKow \geq 5$ 的化学物质, 应将公式 (2) 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。对于 $lgKow < 3$ 的化学物质, 且无法获得沉积物生物有效生态毒性数据时, 开展危害定性分析。

(2) 评估系数法

沉积物生物预测无效应浓度 ($PNEC_{sed}$) 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 (5)。

$$PNEC_{sed} = ecoTox_{sed} / AF_{sed} \quad (5)$$

式中:

$PNEC_{sed}$ ——沉积物生物预测无效应浓度, $mg \cdot kg^{-1}$;

$ecoTox_{sed}$ ——沉积物生物的生态毒理学关键效应值, 通常采用最敏感物种的半数致死浓度 (LC_{50})、效应浓度 (EC_{50} 或 EC_{10}) 或无观察效应浓度 ($NOEC$) 等, $mg \cdot kg^{-1}$;

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 2。

表 2 计算 $PNEC_{sed}$ 的推荐评估系数

数据要求	评估系数 (AF_{sed})
沉积物生物物种的一项长期试验数据 ($NOEC$ 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长期试验数据 ($NOEC$ 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长期试验数据 ($NOEC$ 或 EC_{10})	10

5.3.1.3 土壤环境危害表征

土壤环境危害表征通常采用相平衡分配法或评估系数法，推导土壤环境中生物的预测无效应浓度 ($PNEC_{soil}$)。无法获得土壤生物有效生态毒性数据时，采用相平衡分配法进行估算；获得有限的土壤生物有效生态毒性数据时，应采用评估系数法进行估算。但是，若仅获得一种土壤生物（例如蚯蚓）有效短期毒性试验数据时，同时考虑评估系数法（以土壤生物的生态毒性数据除以评估系数 1000 计算）和相平衡分配法的计算结果，取两者中的低值作为土壤的 $PNEC$ 。

若获得土壤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 $PNEC$ ，但应对所采用的统计外推法进行详细说明。

（1）相平衡分配法

相平衡分配法是基于化学物质在土壤固体相和水相中的分配情况，并结合化学物质的 $PNEC_{water}$ 来推导 $PNEC_{soil}$ 。具体见公式（6）。

$$PNEC_{soil} = \frac{K_{soil-water}}{RHO_{soil}} \times PNEC_{water} \times 1000 \quad (6)$$

式中:

$PNEC_{soil}$ ——土壤生物预测无效应浓度, $mg \cdot kg^{-1}$;

$PNEC_{water}$ ——水环境生物预测无效应浓度, $mg \cdot L^{-1}$;

RHO_{soil} ——土壤容重, $kg \cdot m^{-3}$ 。默认值为 1700。若能获得实测数据, 应优先选用;

$K_{soil-water}$ ——土壤-水分配系数, $m^3 \cdot m^{-3}$ 。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。

$$K_{soil-water} = Fair_{soil} \times K_{air-water} + Fwater_{soil} + Fsolid_{soil} \times \frac{Kp_{soil}}{1000} \times RHO_{solid} \quad (7)$$

$$K_{air-water} = \frac{HENRY}{R \times TEMP} \quad (8)$$

$$Kp_{soil} = Foc_{soil} \times Koc \quad (9)$$

式中:

$Fair_{soil}$ ——土壤中气相的体积分数, $m_{air}^3 \cdot m_{soil}^{-3}$ 。默认值为 0.2;

$K_{air-water}$ ——气-水分配系数, 无量纲;

$Fwater_{soil}$ ——土壤中水相的体积分数, $m_{water}^3 \cdot m_{soil}^{-3}$ 。默认值为 0.2;

$Fsolid_{soil}$ ——土壤中固相的体积分数, $m_{solid}^3 \cdot m_{soil}^{-3}$ 。默认值为 0.6;

Kp_{soil} ——化学物质在土壤中的固-水分配系数, $L \cdot kg^{-1}$;

RHO_{solid} ——固相密度, $kg \cdot m^{-3}$ 。默认值为 2500;

Foc_{soil} ——土壤中有机碳含量, $kg_{oc} \cdot kg_{soil}^{-1}$ 。默认值为 0.02;

HENRY——亨利常数， $\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$ ；

R——气体常数， $8.314\text{ Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ；

TEMP——水气界面的温度，K。默认值为 283。

根据不同化学物质的特性，上述公式（6）适用于 $\lg K_{ow} \geq 3$ 的化学物质。但是，对于 $\lg K_{ow} \geq 5$ 的化学物质，应将公式（6）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。对于 $\lg K_{ow} < 3$ 的化学物质，且无法获得土壤生物有效生态毒性数据时，开展危害定性分析。

（2）评估系数法

土壤环境生物的预测无效应浓度（ $PNEC_{soil}$ ）由环境危害识别确定的土壤环境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（10）。

$$PNEC_{soil} = ecoTox_{soil} / AF_{soil} \quad (10)$$

式中：

$PNEC_{soil}$ ——土壤生物预测无效应浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ；

$ecoTox_{soil}$ ——土壤生物的生态毒理学关键效应值，通常采用最敏感物种的半数致死浓度（ LC_{50} ）、效应浓度（ EC_{50} 或 EC_{10} ）或无观察效应浓度（ $NOEC$ ）等， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ；

AF_{soil} ——评估系数，根据 $ecoTox_{soil}$ 的情况选择确定，无量纲。推荐评估系数见表 3。

表 3 计算 PNEC_{soil} 的推荐评估系数

数据要求	评估系数 (AF _{soil})
至少两项短期毒性试验的 $L(E)C_{50}$ 数据，代表不同土壤营养级生物（如植物、蚯蚓或微生物）	1000
土壤生物（如蚯蚓、植物等）的一项长期毒性试验的 $NOEC$ 数据	100
两项长期试验的 $NOEC$ 数据，至少来自两个土壤营养级的物种	50
三项长期试验的 $NOEC$ 数据，至少来自三个土壤营养级的物种	10
野外数据或模拟生态系统数据	视实际情况判断

开展土壤 PNEC 推导时，化学物质的生物利用率及生物毒性效应均与土壤性质有关，采用不同类型土壤开展毒性试验获得的试验数据一般不能直接进行比较，应先将毒性数据校正为标准土壤（人工土壤）毒性数据后再进行使用。进行标准土壤毒性数据校正的计算方法如下。

$$NOEC_s = NOEC_t \times \frac{Fom_s}{Fom_t} \quad (11)$$

$$L(E)C_{50(s)} = L(E)C_{50(t)} \times \frac{Fom_s}{Fom_t} \quad (12)$$

式中：

$NOEC_s$ 或 $L(E)C_{50(s)}$ ——标准土壤中生物的 $NOEC$ 或 $L(E)C_{50}$ ， $mg \cdot kg^{-1}$ ；

$NOEC_t$ 或 $L(E)C_{50(t)}$ ——实际暴露试验土壤中生物的 $NOEC$ 或 $L(E)C_{50}$ ， $mg \cdot kg^{-1}$ ；

Fom_s ——标准土壤中有机质含量， $kg_{om} \cdot kg_s^{-1}$ 。默认为 3.4%；

Fom_t ——实际暴露试验土壤中的有机质含量， $kg_{om} \cdot kg_t^{-1}$ 。

5.3.1.4 污水处理厂（STP）微生物环境危害表征

污水处理厂（STP）微生物环境危害表征包括市政生活污水处理和工业污水处理两类。在开展危害表征时应选择最合适的污

泥试验获得的有效数据，例如评估生活污水处理厂时，不能采用处理工业污水的污泥开展的试验结果。

采用评估系数法推导污水处理厂微生物的预测无效应浓度 ($PNEC_{\text{micro-organisms}}$)，由环境危害识别获得的生态毒理学关键效应数据除以相应的评估系数推导得出。具体见公式 (13)。

$$PNEC_{\text{micro-organisms}} = ecoTox_{\text{micro-organisms}} / AF_{\text{micro-organisms}} \quad (13)$$

式中：

$PNEC_{\text{micro-organisms}}$ ——STP微生物的预测无效应浓度， $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ ；

$ecoTox_{\text{micro-organisms}}$ ——微生物毒性值，通常采用最敏感物种的效应浓度 (EC_{10} 、 EC_{50} 等) 或无观察效应浓度 ($NOEC$) 等， $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ ；

$AF_{\text{micro-organisms}}$ ——评估系数，根据 $ecoTox_{\text{micro-organisms}}$ 的情况选择确定，无量纲。推荐评估系数见表 4。

表 4 计算 $PNEC_{\text{micro-organisms}}$ 的推荐评估系数

测试方法	数据	评估系数 ($AF_{\text{micro-organisms}}$)
——呼吸抑制试验；或 ——活性污泥生长抑制试验	$NOEC$ 或 EC_{10}	10
	EC_{50}	100
——快速生物降解试验；或 ——固有生物降解试验	测试浓度可作为污水处理厂微生物的毒性 $NOEC$	10
——硝化细菌抑制试验；或 ——纤毛虫生长抑制试验；或 ——假单胞菌 (<i>Pseudomonas putida</i>) 生长抑制试验	$NOEC$ 或 EC_{10}	1
	EC_{50}	10
小规模活性污泥降解模拟试验	依据专家判断	1-5

5.3.1.5 捕食动物危害表征

如果化学物质具有《化学品分类和标签规范》(GB 30000 系

列)经口暴露途径的健康危害分类,且具有持久性、生物累积性时,则鼓励针对化学物质潜在的食物链传递,开展环境生物的二次毒性危害评估,推导 $PNEC_{predator}$ 。具体方法参见附录 A。

5.3.2 健康危害表征

利用危害识别过程确定的不同健康毒理学终点的关键效应数据,估算化学物质长期或短期作用于人体不会产生明显不良效应的剂量水平或概率。通常,应针对不同暴露途径(经口、经皮和吸入)下的不同健康毒理学终点分别估算不会产生明显不良效应的剂量水平或概率。

在综合分析健康毒理学数据基础上,结合化学物质的毒效动力学信息,确定化学物质危害效应的可能作用模式或机制(有阈值或无阈值)。根据化学物质人体健康毒性作用机理的不同,健康危害表征分为有阈值效应的表征和无阈值效应的表征两种方式。

5.3.2.1 有阈值效应的表征

对于化学物质通过阈值作用模式产生毒性效应且能够获得可靠阈值的健康毒理学终点(例如(亚)慢性毒性、生殖发育毒性等),根据经过健康危害识别后的关键效应数据(通常为NOAEL、LOAEL、BMD等)估算对人体不会产生明显不良效应的安全剂量,以每日可耐受摄入量(TDI)表示。具体见公式(14)。

$$TDI = \frac{NOAEL(\text{或 } LOAEL, BMD)}{UF} \quad (14)$$

式中:

TDI——每日可耐受摄入量, $\text{mg}\cdot\text{kg}_{\text{BW}}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$;

NOAEL——未观察到有害作用剂量, $\text{mg}\cdot\text{kg}_{\text{BW}}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$ (经口、经皮) 或 $\text{mg}\cdot\text{m}^{-3}$ (吸入);

LOAEL——最小观察到有害作用剂量, $\text{mg}\cdot\text{kg}_{\text{BW}}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$ (经口、经皮) 或 $\text{mg}\cdot\text{m}^{-3}$ (吸入);

UF——不确定系数, 无量纲。不确定系数体现了评估过程中可能存在的不确定性, 须根据综合分析所采用的化学物质关键效应数据情况并结合专家判断进行确定, 不是固定不变的。通常, 将动物试验数据外推到人以 100 倍的不确定系数为起点, 即体现种间差异 10 倍和种内差异 10 倍。当具有毒代动力学数据时, 该不确定系数可适当进行调整。此外, 存在以 *LOAEL* 代替 *NOAEL*、以亚慢性数据外推到慢性数据等情形时, 应进一步增加不确定系数, 一般对每种不确定情形赋予 2-10 之间的不确定系数。

5.3.2.2 无阈值效应的表征

对于化学物质通过无阈值作用模式产生毒性效应的健康毒理学终点 (例如致突变性、遗传毒性致癌性), 推荐采用线性外推法, 即通过获取的不同暴露途径下试验数据建立剂量 (浓度) -反应 (效应) 关系曲线, 根据曲线定量推导产生无阈值危害效应的单位危害强度系数 (q_1), 并在给定的可接受风险概率下计算化学物质的虚拟安全剂量 (*VSD*)。对于采用其他无阈值效应表征方法的, 应对采用的方法进行详细说明。

单位危害强度系数 ($q1$) 的估算, 通常是根据剂量 (浓度) -反应 (效应) 关系曲线推导出暴露剂量为 $1\text{mg}\cdot\text{kg}_{\text{BW}}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$ 时产生无阈值效应的概率, $q1$ 的单位为 $(\text{mg}\cdot\text{kg}_{\text{BW}}^{-1}\cdot\text{d}^{-1})^{-1}$ 。基于动物试验数据, 根据下列方法推导得出人体效应数据。

$$q1(\text{人}) = q1(\text{动物}) \times \left(\frac{BW(\text{动物})}{BW(\text{人})}\right)^{1/4} \quad (15)$$

式中:

$BW(\text{人})$ ——人体体重, kg 。推荐采用《中国人群暴露参数手册》(成人卷、儿童卷) 提供的参数;

$BW(\text{动物})$ ——试验动物体重, kg 。

根据剂量 (浓度) -反应 (效应) 关系曲线, 在给定的可接受风险概率 (默认为 10^{-6}) 下, 计算化学物质无阈值效应终点的虚拟安全剂量 (VSD), 方法如下。

$$VSD = \frac{10^{-6}}{q1(\text{人})} \quad (16)$$

式中:

VSD ——无阈值效应化学物质的虚拟安全剂量, $\text{mg}\cdot\text{kg}_{\text{BW}}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$;

$q1(\text{人})$ ——人体单位危害强度系数, $(\text{mg}\cdot\text{kg}_{\text{BW}}^{-1}\cdot\text{d}^{-1})^{-1}$ 。

6 评估结果

环境与健康危害评估结果一般应包括:

(1) 评估所用关键效应数据等相关信息、危害性分类标准、估算方法及参数等内容的解释说明;

(2) 化学物质的环境与健康危害性分类结果，以及与现有结果的比较分析；

(3) 环境与健康危害评估时获得的不同环境评估对象的 PNEC 值，以及人体健康危害评估的 TDI、VSD 值；

(4) 化学物质是否属于 PBT/vPvB、EDCs 判别结果及说明。

附录 A 环境生物二次毒性危害评估

如果化学物质具有《化学品分类和标签规范》(GB 30000 系列)经口暴露途径的健康危害分类,且具有持久性、生物累积性时,鼓励开展环境生物二次毒性危害评估。

重点考虑化学物质通过食物链蓄积和传递对哺乳动物和鸟类的危害,食物链的长度视实际环境评估对象情况而定。推荐采用评估系数法推导鸟类或哺乳动物的 PNEC。具体见公式 (A-1)。

$$PNEC_{predator} = ecoTox_{oral,predator} / AF_{predator} \quad (A-1)$$

式中:

$PNEC_{predator}$ ——鸟类或哺乳动物经口食物摄入的预测无效应浓度, $kg \cdot kg_{food}^{-1}$ 。如果同时有通过鸟类和哺乳动物数据估算获得的 PNEC 值,选择其中较低值进行环境生物二次毒性评估;

$AF_{predator}$ ——评估系数,无量纲。推荐取值如下表。

表A.1 计算 $PNEC_{predator}$ 的推荐评估系数

$ecoTox_{oral,predator}$	测试时间	AF
$LC_{50,bird}$	5 天	3000
$NOEC_{bird}$	慢性	30
$NOEC_{mammal}$	28 天	300
	90 天	90
	慢性	30

$ecoTox_{oral,predator}$ ——鸟类和哺乳动物关于致死率、生长率或繁殖率的毒性数据。鸟类和哺乳动物 NOEC 数值的获取,通常依靠鸟类和哺乳动物经口食物饲喂暴露途径获得的 $NOAEL_{oral,food}$ 进行推导。具体推导方法见公式 (A-2)。

$$NOEC_{oral} = NOAEL_{oral,food} \times cf \quad (A-2)$$

式中:

$NOEC_{oral}$ ——鸟类或哺乳动物的无观察效应浓度, $mg \cdot kg_{food}^{-1}$;

$NOAEL_{oral,food}$ ——鸟类或哺乳动物的未观察到有害作用剂量, $mg \cdot kg_{BW}^{-1} \cdot d^{-1}$;

cf ——从 $NOAEL$ 向 $NOEC$ 的转化系数, $kg_{BW} \cdot d \cdot kg_{food}^{-1}$ 。推荐系数如下表。

表A.2 推荐的毒性转化系数

试验物种	转化系数 (cf)
犬科动物 (<i>Canis domesticus</i>)	40
猕猴属 (<i>Macaca sp.</i>)	20
田鼠 (<i>Microtus spp.</i>)	8.3
小鼠 (<i>Mus musculus</i>)	8.3
家兔 (<i>Oryctolagus cuniculus</i>)	33.3
大鼠 (<i>Rattus norvegicus</i> (> 6 weeks))	20
大鼠 (<i>Rattus norvegicus</i> (≤ 6 weeks))	10
家鸡 (<i>Gallus domesticus</i>)	8

附录 B 危害评估涉及的相关参数及推荐值

附表 B.1 危害评估相关参数推荐值

参数	符号	单位	推荐值
悬浮物容重	RHO_{susp}	$kg \cdot m^{-3}$	1150
悬浮物中水相的体积分数	$F_{water_{susp}}$	$m_{water}^3 \cdot m_{susp}^{-3}$	0.9
悬浮物中固相的体积分数	$F_{solid_{susp}}$	$m_{solid}^3 \cdot m_{susp}^{-3}$	0.1
固相密度	RHO_{solid}	$kg \cdot m^{-3}$	2500
悬浮物中有机碳含量	$F_{oc_{susp}}$	$kg_{oc} \cdot kg_{susp}^{-1}$	0.1
土壤容重	RHO_{soil}	$kg \cdot m^{-3}$	1700
土壤中水相的体积分数	$F_{water_{soil}}$	$m_{water}^3 \cdot m_{soil}^{-3}$	0.2
土壤中气相的体积分数	$F_{air_{soil}}$	$m_{air}^3 \cdot m_{soil}^{-3}$	0.2
土壤中固相的体积分数	$F_{solid_{soil}}$	$m_{solid}^3 \cdot m_{soil}^{-3}$	0.6
土壤中有机碳含量	$F_{oc_{soil}}$	$kg_{oc} \cdot kg_{soil}^{-1}$	0.02
标准土壤中有机质含量	F_{om_s}	$kg_{om} \cdot kg_s^{-1}$	3.4%