

# 环境化学若干研究动向

刘静宜

(中国科学院生态环境中心, 北京 100085)

**[摘要]** 介绍了大气、水体和土壤环境化学,着重提出跨介质(多介质)变化特点,动态过程的化学研究,如大气非均相化学、土壤(底质)环境界面化学、氮汞元素化学循环、污染控制化学和“绿色”化学、清洁工艺、污染点修复等,结合研究问题,还介绍了计算机技术在环境化学中的某些应用。

**[关键词]** 大气、水、土壤环境化学, 污染环境控制化学

环境化学主要研究化学物质在不同环境介质中的环境化学行为、它们之间的相互作用及跨介质/多介质变化的特点。特别是对复杂体系(开放体系)动态过程(不可逆过程)的化学原理、方法和手段的研究,将是环境化学的主要内容。

## 1 大气环境化学

大气环境化学研究大气污染物的物理化学表征、环境中的化学反应动力学、大气光化学机制以及自由基反应过程等。近年来研究重点已由均相化学反应转向非均相反应。结合区域和全球性大气问题,对颗粒物的微粒组成以及对生态/健康的影响也受到很大重视。

1995年度诺贝尔化学奖获得者,三位大气环境化学家Crutzen, Rowland和Molina,首先提出了平流层臭氧破坏的化学机制,这些基础理论的研究成果对南极“臭氧洞”的发现(1985)引起全世界的“震动”而导致《蒙特利尔议定书》的签订(1987),为保护全球环境作出了重大的贡献,同时也标志着大气环境化学已进入到成熟的阶段。近年来,平流层和对流层化学一直是大气化学研究的重要内容。臭氧洞的形成及其原因以及如何保护臭氧层等问题,已是当今全球性环境问题的热点。非均相大气化学反应也得到了很大重视。

我国在严重的燃煤大气污染背景下,叠加了日益严重的汽车尾气污染,两类污染相互作用或影响的耦合机制尚不清楚。此外,区域性大气环境问题与全球性环境问题的叠加也将是现今研究的重要课题。

## 2 水环境化学 (Aquatic Chemistry)

近年来,水环境化学以化学平衡原理为主,天然水体系统在环境化学过程的速率及反应机制两方面的研究,其原理性和参数所形成的模型和模式逼近真实,已使天然水体化学的最重要的方面逐渐进入定量化研究阶段。在固体-水的界面化学研究方面,特别是对固体表面和

获国家自然科学基金资助项目。

本文于1997年2月18日收到。

溶质相互作用的吸附过程研究,已相当深入。无论是对颗粒物之间胶体化学系统和行为的研究,还是对地球化学过程速率、规模的定量处理等方面,界面化学等都是很重要的。颗粒物之间相互作用的界面化学涉及面广,如土壤/沉积物间有机、无机化学物质的环境行为,水与底泥界面营养元素的转化及再向水体中的释放过程与机制,水表面层中污染物的行为,它与大气之间的界面反应以及水污染控制等过程的研究中,界面过程均属有广泛实际意义的基础性研究内容。

大气和水的相互作用的重要性已日益受到人们的关注。在大气中尽管水分只是一种次要的组分,然而在云雾、降水化学反应,在联接土壤、水及大气环境等方面,大气和水的相互作用也很重要。水体中金属离子的形态分析及变化,以及其络合、吸附反应动力学模型模式,包括动态模式,均在发展中。

有机物在水体/土壤中单个环境化学过程在分子水平上的定量研究,描述了吸附、化学/生化降解等重要转化过程,并与其反应物的毒性效应研究相结合;另一方面,结合实际环境污染问题研究水体/土壤、河/湖中有机污染物在有关体系中的动态过程,并和特定污染物的源、分布和归宿的评价相结合,将环境有机化学与生物地球化学、环境工程等研究配合起来,使有机环境化学研究日趋系统化,有利于解决实际问题。

### 3 土壤环境化学

随着农药和化肥的应用,生物质燃烧等农业活动加剧,大气污染物沉降和酸雨的影响,污灌和污泥的土地利用,工、矿、生活固体废弃物的堆放与填埋等,使土壤系统受到种种化学物质的污染,因此,土壤系统中重金属、农药等有机物的环境化学行为亟待研究解决。化学污染物的潜在食物链污染影响,土壤中金属形态和生态有效性以及生态毒性的研究,多组分化学混合物以及污染物在多介质中的土壤环境化学行为及其模型、模式的研究,受到关注。对大量有机污染物特别是农药的污染一直是研究热点。多介质土壤系统中污染物的化学(生化)降解和氧化还原过程的研究更为系统,包括了土壤/沉积物,土壤水/地下水,土壤和大气等介质以及不饱和土壤对化学污染物的分配、吸附、降解等化学行为。土壤环境中有机物的降解性和移动性评价研究更多,如将土壤环境化学研究和生物降解、物理扩散/挥发、逸散流动性因素相结合而建立的综合试验、模拟动态研究等等。以上研究可为制定土壤环境中化学污染物基准,对控制、修复受污染的土壤,为保护土壤生境健康以及土壤利用提供必要的科学依据。

当前大量工矿业固体废弃物处理场或填埋场已严重污染土壤/地下水。对被沾污/破坏的土壤环境修复(Remediation)方面的环境化学,尤其是土壤环境化学过程也有较快的发展。从1991年新创刊的《修复》杂志中也可以见到有关多介质环境化学的内容,包括:沾污/污染源中有害化学物质的鉴别、分析和表征;有毒有害物质在环境中的释放及归宿;土壤/沉积物表面、土壤水/间隙水层中污染物的化学动态过程;优先化学毒物对生物/人群的暴露评价及可能影响健康和生态效应的预测;还包括了定量结构与活性或毒性相关性(QSARs)的研究。

当前多介质环境问题渗透到复杂生态系统、元素生物地球化学以及全球变化等研究领域,其中土壤环境化学是它的一个重要组成部分。

## 4 元素化学循环

全球性元素循环研究在不断发展，如汞和氮的转化与迁移过程的环境化学过程的研究有较快发展。

### (1) 汞的化学循环

汞作为全球性污染物已日益受到重视，研究的内容涉及汞的源、环境过程、大气化学过程、健康影响、全球性模型模式，以及金矿开采、水库建设、燃煤等人为活动引起的汞污染及其对生态环境和健康的影响。汞污染源的不断发现以及甲基汞对胎儿健康的影响也已引起国际关注，超痕量不同形态汞的分析方法不断改善。美国、北欧对于汞循环中大气化学过程及其机制的研究，以及有关化学模型、模式已较系统的开展，促了人们对区域性/全球性汞循环及其影响的进一步了解。

### (2) 氮化合物的迁移转化过程

区域性（全球性）元素循环中氮化物的迁移和转化，包括氮在不同生态系统中的硝化和反硝化转化过程。由于石化燃料燃烧，氮肥生产，固氮工业中氮化物的泄出，及豆科植物栽培等人类活动，使排放的大量氮化物转化为生物有效态氮，并远远超过了自然过程中固定的氮。农田生物质燃烧、施肥、土地利用以及农业生产活动均有大量氮化物排入大气，并使贮存态氮转化为动态氮（ $N_2O$ ,  $NH_3$ ,  $N_2$  等）。目前国内外研究发现不少生态系统显示出  $NO_3^-$  和  $NH_4^+$  浓度大大增长的趋势。随着土壤中氮转化排放的  $N_2O$  对温室气体贡献的增加， $N_2O$  排放和转化对沿海、海湾生态系统富营养化及对海洋资源的影响等等，氮的转化和迁移已受到海洋、森林、农业、大气以及气候等部门关注。此外，大气中  $NO_3^-$  和  $NH_4^+$  浓度的增加，对全球一些地区的土壤、森林、饮用水质、农业生态系统的酸化也带来不利因素。热带、亚热带地区农业活动频繁，对土地利用变化较大的亚洲地区，特别是东南亚地区，氮源及氮的迁移和转化问题更受到国际环境界重视。

## 5 污染控制化学方面

以污染预防为主的一体化污染控制方式正在取代过去的“管端”污染控制方式。污染控制化学的研究与技术开发也在发生相应的转变，其主要特征是节约资源、节省能源、环境影响最少化。为此，从产品的设计开始，包括整个化学工艺过程，都要从化学的角度，运用“寿命周期分析”方法，研究评价所有材料、工艺和产品的环境影响，设计研究合适的工艺和产品；研究开发可用作二次资源的分离、回收、利用、重复利用技术及最佳组合技术，以产生较大的环境经济效益。例如，改用混合气体流态床法代替熔盐法进行金属零部件的热处理，减少了废物排放，提高了安全性和产品质量，降低了生产成本；采用反渗透法回收马铃薯淀粉工艺废水中的蛋白，解决了废水处理及节水问题；利用玉米淀粉生产过程的水解物代替硫化钠作为还原剂处理废水，简化了印染工艺；以及有色金属冶炼加工、碳黑、纸浆、制革等严重污染行业中的众多污染控制化学的研究。

污染控制中，提高废水废气处理效率（被称为“生态效率”，Ecoefficiency）的管端技术仍在发展中，如新型高效絮凝剂的研制及絮凝过程研究，高效氧化剂、催化剂、膜技术等化学品生产寿命周期全过程中研究开发“环境友好（无害，Benign）化学和技术”（也称为“绿

色化学和技术”),把环境污染控制化学又推进一步。美国化学会强调在有机合成、催化氧化等领域,设计研究、开发既有选择性又具有原子经济性(充分利用原料分子中原子)的无害合成反应,研究有效氧化方法并开展替代物(如甲烷、生物质、“废”塑料)研究。其中催化剂开发和催化反应研究潜力很大,如水溶性均相络合反应、固体酸催化剂应用等等,在化工、石油炼制、塑料降解、纸浆、制革工业方面均已有很好的进展。环境化学界充分重视和发挥化学和化工界的合作和配合,这将是21世纪工业发展的特点,也将是环境化学研究的一个重点。

## 6 环境计算化学研究

环境计算化学研究与数学、物理有关学科相结合,使以经验、实验为基础的环境化学研究趋于更加理论化和科学化,并解决了一些过去难以进行数值求解的问题,扩展了环境化学研究成果的应用,是值得重视的一个新的领域,它包括以下几个方面:

(1) 环境计量学的研究。化学计量学在环境化学中的应用,包括在某些多组分体系分析中可免去分离步骤,对混合物波谱进行定量解析,扩大了仪器处理复杂环境样品的能力;将随机变量引入传统的多元统计分析方法中,概念的突破推动了对离散性数据的模拟;遗传算法(“物竞天择”思想)等新的算法的引入进一步发展了化学计量学在环境化学中的应用;与人工神经网络相结合,实现了环境控制过程方案选择的优化。最近分形理论得以应用,可预报随机性较大的多因素控制的复杂过程,如自然灾害等,也有可能应用于与环境化学类似的化学过程中。

(2) 大气、水体、土壤环境过程模拟和模式得到进一步发展。环境计算化学在国内外已有不少工作,如模拟水稻田释放甲烷、小麦田释放 $N_2O$ 等实际过程。高密度有毒气体扩散模拟包括化学热力学、化学动力学、传热传质等化学和物理过程。大气化学模式发展更快,如目前已能够用确定模式描述痕量气体在生物源内的生成、释放和传输、转化等复杂过程。

(3) 人工智能在环境化学中的应用,包括神经网络、专家系统和模糊数学方面。人工神经网络主要描述非线性规律特别是多元非线性以至突变规律,这对环境化学体系十分适合,它与过程模拟、模型相结合,互补应用,已形成一个新的趋势;与分析仪器开发相结合,形成智能分析仪器,使其功效有较大增强;还可用于化学突发事件的灾前预测和提供灾时对策等。环境化学过程(工艺)的模糊控制在不久的将来可望获得较大的成功。

参加调研和撰稿的还有生态环境中心单孝全、陈定茂、庄亚辉、白乃彬、相文衷等研究人员。

## RECENT DEVELOPMENT OF ENVIRONMENTAL CHEMISTRY

Liu Jingyi

(Ecoenvironment Center, CAS, Beijing 100085)

**Abstract** Recent development of environmental chemistry on atmospheric, aquatic and soil environmental chemistry are briefly reported, emphasizing on the multi- and trans-media

characteristics and dynamic processes, e. g. heterogeneous atmospheric chemistry, interfacial chemistry of soil/sediment, nitrogen and mercury elemental chemical cycling, environmental pollution chemistry working together with green chemistry, clean technology and remediation of contaminated sites. Some applications of computer technology in environmental chemistry is mentioned in this paper.

**Key words** atmospheric, aquatic and soil environmental chemistry, environmental pollution chemistry

· 信 息 ·

1997年国家自然科学基金委员会资助的部分国际学术交流会议

会议名称	会议地点	会议时间	联系人	电话
传热强化与节能会议	华南理工大学 (广州)	06.16—19	王世华	87112997
机械传动与机构学国际会议	天津大学 (天津)	07.01—04	张 策	3359116
第17届固体中原子碰撞会议	北京大学 (北京)	07.02—06	王忠烈	66162356
国际激光器——材料与应用	中国气象学会 (天津)	07.08—11	王肇圻	3505503
第3次远东生物医学材料会议	四川联合大学 (成都)	07.14—18	张兴栋	5555246
工业工程与工程管理会议	香港	08.19—20	华中理工大学 武汉 陈荣秋	
国际生产工程学会第47届年会	天津大学 (天津)	08.24—30	张国雄	7404650
第14届形态科学讨论会	医科院基础所 (北京)	09.09—13	薛社普	65137536
第7届国际计算流体力学会议	中科院力学所 (北京)	09.15—19	庄逢甘	62554127
第5届亚洲铸造会议	东南大学 (南京)	09.23—25	孙国雄	5414104
第4届中日双边光化学学术讨论会	中科院感光化学所 (北京)	10.05—09	张宝文	62017061 转 401
第14届国际酶工程会议	中科院微生物所 (北京)	10.12—17	黎高翔	62550183
先进显微学及应用	中国科技大学 (合肥)	10.14—19	吴自勤	3601885
第4届亚太地区生化工程会议	清华大学 (北京)	10.20—23	沈忠耀	62785514
国际内燃机学术会议	华中理工大学 (武汉)	10.22—24	盛凯夫	7542366
工程与天南地北地球物理学会	成都理工学院 (成都)	10.25—28	贺振华	4078890
第3届亚太地区植物生理大会	中科院上海植物生理所 (上海)	11.03—07	沈允钢	64042090

(国际合作局 周嘉 供稿)