

《基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值

推导技术指南（征求意见稿）》

编制说明

《基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值推导技术指南》编制工作组

二〇二四年十二月

目 次

1	项目背景.....	4
1.1	任务来源.....	4
1.2	工作过程.....	4
2	标准制订的必要性分析.....	5
2.1	土壤有机污染物安全阈值推导能够为土壤-地下水系统污染风险评估提供理论基础.....	5
2.2	基于保护地下水安全的土壤有机污染物安全阈值推导技术是土壤污染风险管控的关键技术.....	5
2.3	包含土壤有机污染物安全阈值推导的土壤风险评估可以作为土壤环境管理的重要内容..	5
3	基准制定的原则与依据.....	6
3.1	编制原则.....	6
3.2	编制依据.....	6
4	国内外土壤有机污染物安全阈值推导技术发展现状.....	6
4.1	国外土壤污染物安全阈值推导方法发展现状.....	6
4.2	国内土壤污染物安全阈值推导方法发展现状.....	7
5	标准的主要内容及说明.....	7
5.1	适用范围.....	7
5.2	规范性引用文件.....	7
5.3	术语和定义.....	8
5.3.1	土-水分配系数 Soil-Water Partition Coefficient.....	8
5.3.2	固-液分配系数 Solid-Liquid Partition Coefficient.....	8
5.3.3	浓度衰减系数 Concentration reduction Factor.....	8
5.3.4	污染物地下水稀释因子 Groundwater Dilution Factor.....	8
5.4	总体要求.....	8
5.5	阈值推导技术流程.....	8
6	主要技术要点.....	9
6.1	土壤-地下水系统有机物污染特征与影响因素.....	9
6.2	土壤-地下水有机污染物迁移主要过程及参数.....	9
6.3	污染物相间分配过程.....	10
6.3	非饱和带有机污染物运移过程.....	11
6.4	地下水稀释过程计算.....	13
7	标准与国内相关技术标准的比较.....	14

7.1 与《建设用地土壤污染风险评估技术导则》（HJ 25.3—2019）的区别与联系.....	14
7.2 与《环境影响评价技术导则 地下水环境》的区别与联系	14
8 标准的预期作用与效益	15
9 对实施本标准的建议	15
主要参考文献.....	16

1 项目背景

1.1 任务来源

《基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值推导技术指南》编制工作组（下称编制工作组）面向我国土壤环境保护和地下水安全的需求，瞄准土壤-地下水复合污染的科技前沿，聚焦精准治污、科学治污和依法治污，阐明多污染物多尺度跨介质的污染成因，支撑“十四五”期间土壤污染防治行动计划，为全面提升土壤与地下水安全利用水平提供关键科技支撑。科技部会同有关部门及地方，制定了国家重点研发计划“场地土壤污染成因与治理技术”重点专项实施方案，由中国科学院生态环境研究中心牵头实施，组织中科院建筑设计研究院有限公司等单位，开展基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值推导技术指南的制定工作。

在土壤-地下水系统污染风险管控方面，为符合我国土壤环境特征、切合土壤环境管理工作的实际需求，编制工作组在大量资料收集、实地调研、实验检测、数据分析和模型模拟的基础上，综合国内外有关经验，提出适用于我国国情的土壤有机污染物安全阈值的推导技术的研究框架与方法体系，优先制定并发布基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值推导技术指南。

1.2 工作过程

2021年9月，编制工作组承担科学技术部“场地土壤污染成因与治理技术”重点专项“场地土壤环境容量与承载力量化方法”项目场地土壤有机污染物环境容量与承载力精细化核算方法（2021YFC1809103）。

自承担该项目研究以来，编制工作组申请并主持《基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值推导技术指南》团体标准编制工作，在政策解读、前期项目研究、文献综述、实地调研和模型构建等一系列准备工作的基础上，召开研讨会，讨论并且界定了开展本标准编制工作的原则、程序、步骤和方法，并最终编制形成《基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值推导技术指南（征求意见稿）》（以下简称《指南》）及其编制说明，经历了如下编制工作过程。

2024年1-6月，展开国内外相关文献调研，针对《指南》的总体定位、使用范围、编制思路、技术需求等问题召开多轮内部讨论会。

2024年7-8月，编制工作组汇总比较国内外相关研究基础，系统收集数据，构建并确定指南估算计算技术的概念模型，开展污染物运移的模拟及有机污染物浓度衰减系数的估算技术研究。

2024年9月，经编工作制组申请、专家评审论证，中国土壤学会设立《指南》团体标准编制项目。

2024年10月，编制工作组在污染物运移的模拟及有机污染物浓度衰减系数的估算技术研究的基础上，进一步构建地下水安全的土壤有机污染物安全阈值的概念模型，编制工作组汇总先前工作收集的有关资料进行撰写，初步形成《指南（初稿）》。

2024年11月，编制工作组以视频会议和线下的形式组织召开多次专家咨询会，综合多方专家意见生成《指南（初稿）》修改方案；组织召开内部讨论会，依据修改方案制定新一轮文献调研和案例研究

计划。

2024年12月，根据专家咨询意见和内部讨论结论，完善并形成了《指南（征求意见稿）》和编制说明。

2 标准制订的必要性分析

2.1 土壤有机污染物安全阈值推导能够为土壤-地下水系统污染风险评价提供理论基础

土壤-地下水系统污染过程包括污染物在土壤中的界面分配、污染物垂直下渗以及污染物与地下水混合扩散等一系列过程，这些过程均能够影响土壤与地下水中污染物的浓度的变化，阐明相应过程是开展土壤-地下水系统污染风险评价的前提。然而，由于土壤-地下水污染物多界面作用机制复杂，界面迁移转化过程往往涉及物理、化学和生物过程的耦合，原位监测和采样分析等田间调查手段难以在时空尺度上系统刻画污染过程，进行变化规律和趋势预测。因此，通过模型进行土壤污染物的跨介质迁移转化等环境行为的预测，推导土壤有机污染物安全阈值，能够用以评估特定区域内土壤污染的风险水平，为环境保护和公共卫生提供科学依据。

2.2 基于保护地下水安全的土壤有机污染物安全阈值推导技术是土壤污染风险管控的关键技术

土壤中有机污染物不仅通过直接暴露对人体健康和生态系统造成危害，还可以迁移到其他环境介质如地表水体和地下水中对其造成污染，导致环境风险。由于土壤与地下水具有紧密的水力联系，分配到土壤水相中的污染物可能会穿越非饱和带进入地下含水层，造成不同程度的地下水污染问题。因此，以地下水为保护对象，推导基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值，开展污染土壤与地下水风险评价，是土壤污染风险管控的关键环节。近年来，世界各国高度重视基于风险管控的土壤环境管理模式，开展土壤有机污染物安全阈值的推导技术研究，对土壤环境治理从质量管理到风险管控的有效衔接具有里程碑意义。

2.3 包含土壤有机污染物安全阈值推导的土壤风险评价可以作为土壤环境管理的重要内容

土壤有机污染物的安全阈值推导是土壤环境管理的重要组成部分。随着工业化和城市化的快速发展，城市遗留了大量的污染场地，土壤污染问题日益突出，污染场地土壤中的有机污染物可能通过淋溶、扩散等途径进入地下水，对地下水环境安全构成威胁。因此，结合当前我国土壤污染防治工作的现实需求和土壤-地下水系统风险评价的研究进展，紧密结合国家环境管理目标，推导将地下水安全作为保护目标的土壤安全阈值，并形成相关导则、技术文件，以指导区域修复目标、以及国家和地区土壤环境标准的制定，提高污染土壤的风险管理决策水平。综上，建立科学合理的土壤有机污染物安全阈值推导技术，对于保护地下水资源、开展土壤-地下水污染风险评价、制定土壤污染防治措施、预防和控制土壤污染均具有重要意义。

3 基准制定的原则与依据

3.1 编制原则

(1) 符合性原则

以《中华人民共和国环境保护法》、《土壤污染防治法》和《土壤污染防治行动计划》以及我国现行的土壤环境保护法律法规、条例、标准、指南、导则的相关规定和要求为主要编制依据，了解国内土壤-地下水系统污染过程研究现状和最新研究成果，确保我国土壤有机物包气带污染过程模拟符合政策法规的相关要求和研究发展趋势，与土壤环境标准体系相互补充、相互支持。

(2) 适用性原则

对国外发达国家土壤-地下水系统污染物安全阈值推导的方法、体系、技术文件和研究现状等进行系统调研和深入梳理，充分借鉴国外发达国家先进经验和最新研究成果，结合我国现实国情特点进行集成创新，保证土壤有机污染物安全阈值推导的科学性、合理性和可操作性。

(3) 导向性原则。

充分考虑我国土壤环境特征和风险管理需求，以服务土壤环境质量的保护与改善为总体目标，建立健全土壤污染的风险评价机制，通过科学的生态风险评价加强土壤环境质量预警管理，制定针对性的土壤污染防治策略。

3.2 编制依据

基于保护地下水安全的土壤有机污染物安全阈值推导技术是土壤污染风险管控的关键技术。因此本标准编制依据的法律、法规和规章主要是《中华人民共和国土壤污染防治法》、中共中央国务院《关于加快推进生态文明建设的意见》、《土壤污染防治行动计划》以及国内外相关的土壤和地下水环境保护法规、标准和技术导则等。《中华人民共和国土壤污染防治法》对有关土壤污染生态环境风险的危害及标准体系提出具体要求，其中，第二章第十二条：“国务院生态环境主管部门根据土壤污染状况、公众健康风险、生态风险和科学技术水平，并按照土地用途，制定国家土壤污染风险管控标准，加强土壤污染防治标准体系建设”；第三章第二十条：“国务院生态环境主管部门应当会同国务院卫生健康等主管部门，根据对公众健康、生态环境的危害和影响程度，对土壤中有毒有害物质进行筛查评估，公布重点控制的土壤有毒有害物质名录，并适时更新”。《关于加快推进生态文明建设的意见》也提出了“全面推进污染防治，制定实施土壤污染防治行动计划，建立以保障人体健康为核心、以改善环境质量为目标、以防控环境风险为基线的环境管理体系，建立环境风险防范与应急管理工作机制的要求”。

4 国内外土壤有机污染物安全阈值推导技术发展现状

4.1 国外土壤污染物安全阈值推导方法发展现状

美国、加拿大等国家建立了较为成熟的土壤有机污染物安全阈值推导方法和技术指南，并据此颁布了典型的保护地下水的土壤环境标准，是国际上较为典型的案例。

美国环境保护局（US EPA）1996年公布的《土壤筛选导则》提出了保护地下水的通用土壤筛选值并详尽阐释了该标准的推导方法，简称EPA方法^[1]。该方法假设污染羽从土壤表层扩展到含水面，且不考虑包气带和含水层中污染物的衰减（吸附、降解等），使用简单的线性平衡土-水分配方程或淋滤试验估计土壤淋滤液中污染物的释放，并耦合水平衡方程计算地下水稀释因子。基于保守的假设和默认参数，推导出了保护地下水的通用土壤标准。但是当针对具体的场地，概念模型往往与导则保守的假设不一致。在有具体场地资料的情况下，导则推荐将土壤三相分配、地下水稀释和包气带、含水层迁移过程进行耦合。

加拿大保护地下水的土壤质量标准推导模型分为四部分，包括：污染物在土壤三相之间的分配、通过非饱和带渗入地下水、淋滤液混合并稀释到地下水中、饱和区传输。在推导国家通用标准时，与US EPA方法类似，假设包气带污染范围扩散至地下水，且污染源无限，因此不存在包气带的衰减作用。同时假设水井或农业设施在污染包气带下游附近，因此不考虑饱和带迁移^[2]。

4.2 国内土壤污染物安全阈值推导方法发展现状

国内在土壤有机污染物安全阈值推导方面尚处于起步阶段，已有一些研究和实践，但缺乏统一的技术规范和标准。1999年我国《工业企业土壤环境质量风险评价基准》首次提出保护地下水的土壤基准，用于切断有机物淋溶进入地下水的途径。随后，2014年《污染场地风险评估技术导则》和现行的《建设用地土壤污染风险评估技术导则》提出了保护地下水的土壤阈值推导方法。与US EPA方法类似，导则只考虑了三相分配和地下水稀释过程。我国阈值推导的研究也主要参考美国土壤筛选值的推导方法。钟茂生等^[3]采用三相平衡模型耦合地下水稀释模型，推导了北京市不同水文地质条件下10种有机污染物的土壤筛选值；蒋世杰等^[4]按照概念过程的复杂程度将污染物从土壤经地下水移到下游饮用水井划分为3个层次，采用分层评估框架建立了保护地下水的土壤修复目标制定方法。

5 标准的主要内容及说明

标准包括适用范围、规范性引用文件、术语及定义、总体要求、技术框架、土水分配过程计算、包气带浓度衰减过程计算、地下水稀释过程计算以及土壤安全阈值的推导共9部分。

5.1 适用范围

本标准适用于基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值的推导。

5.2 规范性引用文件

本标准引用了下列文件或其中的条款。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。凡是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 14148 地下水质量标准

- HJ 164 地下水环境监测技术规范
- HJ 166 土壤环境监测技术规范
- HJ 25.1 建设用地土壤污染状况调查技术导则
- HJ 25.2 建设用地土壤污染风险管控与修复监测技术导则
- HJ 25.3 建设用地土壤污染风险评估技术导则
- HJ 610 环境影响技术评价导则 地下水环境
- HJ 1019 地块和土壤地下水中挥发性有机物采样技术导则
- XX XXX 土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算技术指南

5.3 术语和定义

本标准明确了土-水分配系数、固-液分配系数、浓度衰减系数等关键术语的定义。

5.3.1 土-水分配系数 Soil-Water Partition Coefficient

污染物在土壤固相和水相中的浓度之比 (L/kg)。

5.3.2 固-液分配系数 Solid-Liquid Partition Coefficient

污染物在土壤污染物固相和水相中的浓度之比，也称吸附系数 (L/kg)。

5.3.3 浓度衰减系数 Concentration Reduction Factor

土壤表层孔隙水与潜水层中污染物的浓度之比，无量纲。

5.3.4 污染物地下水稀释因子 Groundwater Dilution Factor

污染物的土壤渗滤液迁移至地下水面的浓度与其经地下水混合后的浓度之比，无量纲。

5.4 总体要求

- (1) 本指南中污染源存在于土壤表层，且在源处不发生衰减；
- (2) 本指南假设有机污染物在土-水分配过程中瞬间达到平衡且吸附可逆；
- (3) 本指南中含水层为非承压含水层；
- (4) 本指南不考虑非水相液体的存在。

5.5 阈值推导技术流程

本标准中框架主要包括：(1) 土-水分配过程计算、(2) 包气带浓度衰减过程计算、(3) 地下水稀释过程计算和 (4) 土壤有机污染物安全阈值推导的技术流程。推导技术框架如图 1 所示。

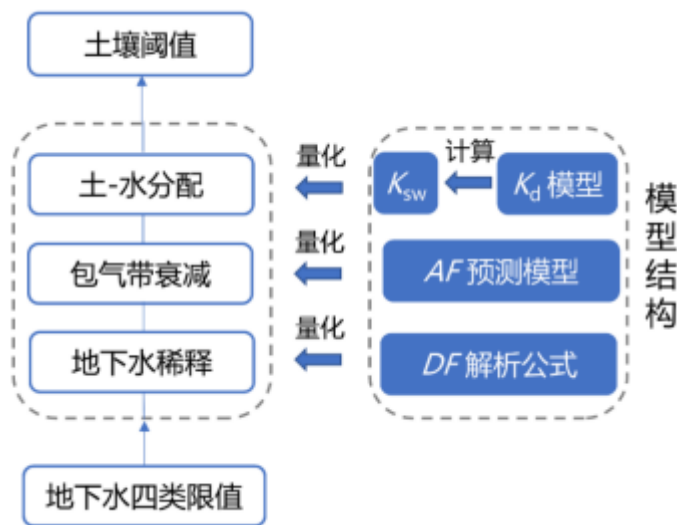


图 5-1 土壤有机污染物安全阈值的推导技术框架

6 主要技术要点

6.1 土壤-地下水系统有机物污染特征与影响因素

人类持续向环境中排放数以万计的有机化合物，这些有机化合物直接或间接进入土壤，土壤有机污染问题已经成为人类面临的全球性挑战之一。长期以来，一些持久性有机污染物，如多环芳烃（PAHs）、多氯联苯（PCBs）、有机氯农药（OCPs）、有机磷农药、除草剂等对土壤-地下水的污染备受环境科学研究者和管理者的关注，21 世纪以后，对新型有机污染物的关注也日益广泛。

影响土壤-地下水系统污染特征的因素主要包括土壤和地质因素、气候因素以及人类活动因素等三个方面。其中，土壤理化性质是影响土壤-地下水整体污染程度的关键性因子，例如，疏松多孔的土壤比板结土壤更有利于过滤吸附污染物而对地下水起到净化作用，而土壤有机质对一些有机污染物具有较强的吸附作用，流域的地质构造对土壤-地下水污染物迁移转化的影响也极为重要^[5]；气候变化是影响溶质在包气带运移的一个因子，例如，溶质垂直迁移深度随着降水量与潜在蒸散发差值的变化而变化^[6]；此外，城市中，工业排放、城市基础设施的表面冲刷、地下管道泄漏等通过渗滤和淋溶能够将大量污染物输入地下水环境，也是造成地下水污染的潜在原因^[7]。因此，土壤-地下水有机污染现象普遍存在，并且由于点源和面源污染同时发生，导致土壤-地下水系统污染过程具有空间多尺度多维度的特征。

6.2 土壤-地下水有机污染物迁移主要过程及参数

污染物在环境中的迁移过程通常采用源-途径-受体模型来描述，该模型展示了有机污染物从源、途径到受体的全过程^[8]。参考 US EPA 和加拿大环境部长理事会（CCME）相关技术导则，有机污染物在土壤-地下水系统中的垂向迁移过程如图 1 所示^[1,2]。

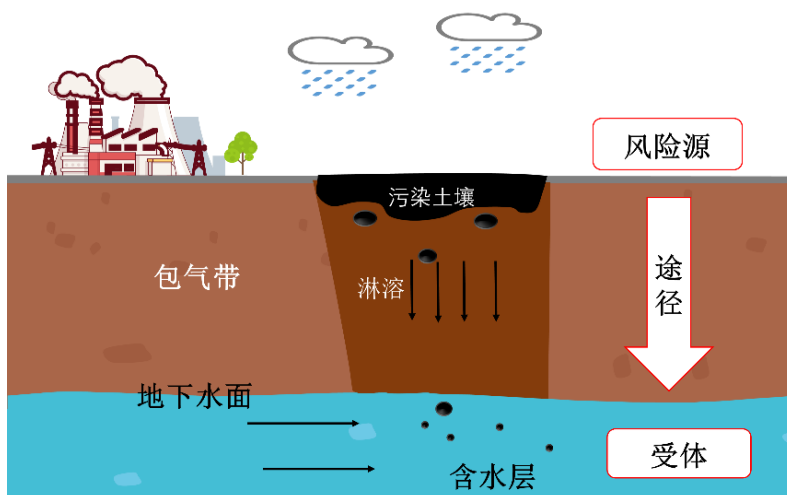


图 1 有机污染物土壤-地下水垂向迁移的源-途径-受体概念模型

有机垂直迁移过程总共分为三步，包括污染物相间分配、非饱和带溶质运移以及地下水稀释（图 1-1）：表层土壤中污染物的土-水分配（即：土壤中污染物释放）是其迁移的起点；随后，在降水或灌溉水力的驱动下，土壤水相中的污染物穿透非饱和带到达地下水面，在此期间污染物经过非饱和带的自然衰减作用（吸附、降解、挥发）浓度降低；最后，到达地下水面的淋滤液与地下水混合稀释，造成地下水污染。该过程可以由以下参数进行量化：土-水分配系数 K_{sw} 、包气带衰减因子 AF （经过包气带前后污染物浓度的比值）、以及地下水稀释因子 DF （经过地下水稀释前后污染物浓度的比值）^[2, 8]。

6.3 污染物相间分配过程

土壤系统是由固相、气相和水相构成的非均质的复杂体系，有机污染物进入土壤系统后可以在固相、水相和气相介质之间发生分配和迁移行为，既可以溶于水相或者挥发到气相中，又可以吸附到固体颗粒内部或表面。此外，对于水溶性较低的有机污染物，如石油烃，通常可以在土壤中形成自由态，即非水相液体。若污染浓度低于饱和溶解度，则可以不考虑非水相液体的存在^[8]。

土壤水相中的污染物移动性强，在三相中最为活跃。在土-水分配系数 K_{sw} 的计算公式（1）中，固-液分配系数 K_d 受环境变量的影响最大，同一有机物的 K_d 值可能有数量级的差距（Li et al., 2021）。因此， K_d 是量化污染物土-水分配以及随后淋溶过程的关键参数。

$$K_{sw} = \frac{\theta_{ws} + (K_d + \rho_b) + (H' + \theta_{as})}{\rho_b} = \frac{C_s}{C_e} \quad (1)$$

$$K_d = \frac{Q_e}{C_e} \quad (2)$$

式中， K_d 为固-液分配系数（L/kg），由公式（2）计算； θ_{ws} 为包气带中的孔隙水体积比（无量纲）； θ_{as} 为包气带中的孔隙空气体积比（无量纲）； ρ_b 为土壤干容重（g/cm³）； H' 为环境温度下的亨利常数（无量纲）； C_e 为平衡时液相浓度（mg/L）； Q_e 为平衡时固相浓度（mg/kg）； C_s 为平衡时土壤中污染物的浓度（mg/kg）。

目前对土壤有机污染物环境行为关键参数固-液分配系数 K_d 的预测主要包括三类方法：第一类为基

于化合物结构的 K_{oc} 方法，该方法依据定量结构-性质关系 QSPR，以化学品的分子描述符（结构描述符或物理化学性质）为预测变量，构建预测分子活性或者其他性质的统计模型^[9,10]。常用的分子描述符包括辛醇-水分配系数、溶解度、Abraham 描述符、分子连通度指数、量子化学描述符等^[11]；第二类为基于土壤性质的归一化预测模型，通过构建特定有机污染物在不同土壤样品中 K_d 和土壤性质的回归模型，考虑环境变量对 K_d 的影响，建立 K_d 值与土壤性质参数之间的函数；第三类为综合分子特征和土壤环境因子的随机模型预测方法，该方法通过机器学习算法如集成学习（如随机森林、XGBoost）和深度学习（如深度神经网络）等大数据分析手段，构建化合物 K_d 及其影响因素数据库，综合分析多种化合物 K_d 值与多种影响因子之间的定量关系。

（1）基于 K_{oc} 的预测方法

土壤中的有机质是疏水性有机污染物的主要吸附剂，大量研究表明有机质含量直接影响吸附的程度^[12,13]。因此，疏水性有机物的 K_d 通常由有机碳归一化的分配系数 K_{oc} 计算，见公式（3），

$$K_d = K_{oc} \times f_{oc} \quad (3)$$

式中， K_{oc} 为有机碳归一化的分配系数（L/kg）； f_{oc} 为有机碳含量（%）； K_{oc} 理论上与化合物分子特征有关，可根据化合物的定量结构-性质关系进行计算。

然而，土壤有机组分复杂，包含碳水化合物、氮化物、木质素等^[14]。有机质的组成对有机物的吸附行为的影响极为重要。例如：在发育上更成熟的硬碳由于比表面积大，通常将污染物吸附在其表面，吸附能力强，而软碳通常将污染物吸收到内部，吸收能力相对较弱^[15,16]。因此， K_d 和 f_{oc} 并不总是呈线性关系，即：同一污染物在不同土壤样品中的 K_{oc} 可能不是恒定的常数^[17]。此外，土壤有机质并非有机污染物唯一的吸附剂。当土壤中有机质含量较低（例如 f_{oc} 小于 0.1%），却含有大量具有高吸附性能的粘土矿物时，利用公式 1-9 计算分配系数可能会低估土壤吸附量，而高估土壤孔隙水中的污染物浓度^[18]。对于可电离的有机物来说，粘土矿物通常比有机质发挥更重要的作用^[17]。因此，上述原因导致 K_{oc} 方法的应用存在一定的局限性。

（2）基于土壤性质归一化预测方法

同一污染物在不同土壤中的 K_d 值通常有较大差异。例如，在 54 种药物成分中，维拉帕米、泰乐菌素和红霉素等有机物在不同土壤中的分配系数均有一个数量级以上的差距，这是由土壤 pH、阳离子交换量、有机质含量和黏粒含量等土壤理化性质决定的^[19]。

（3）综合土壤性质和化合物分子特征的预测法

近年来，随着计算机技术的发展和大数据、人工智能的兴起，机器学习算法如集成学习（如随机森林、XGBoost）和深度学习（如深度神经网络）被应用于污染物环境行为的预测^[19]。由于机器学习算法能更好地对高维数据进行非线性拟合， K_d 的预测也逐渐将更多类型的变量纳入到模型中。

6.3 非饱和带有机污染物运移过程

地下水和土壤水中的有机污染物在对流和弥散等的共同作用下形成的物质运动现象，是污染物的

主要运移过程。

其中,对流是指溶质随水流的整体运动而进行的迁移,是最主要的质量传递过程(邵明安 等,2006)。水流整体运动的速度就是溶质对流运移的速度。对流通量 J 与水流达西流速成正比,其方向与水流速度方向相同。对流通量 J 的计算公式如下:

$$J = c \cdot q \quad (4)$$

式中, J 为对流通量 ($\text{mg}/\text{dm}^2/\text{s}$); c 为浓度 (mg/dm^3); q 为多孔介质中水流的达西流速 (dm/s)。

水力学弥散是指受对流影响之外的溶质扩散,包括两个过程:分子扩散和机械弥散^[20]。分子扩散是指分子从高浓度区域向低浓度区域的运动,在流速低时发挥主要作用。机械弥散是指由于微观多孔介质中水流速度不均而引起的污染物分子扩散,这导致对流携带的污染物分子并不都以地下水平均孔隙速度移动,单个污染物分子的流动速度比平均孔隙速度快或慢。水动力弥散系数是分子扩散和机械弥散系数之和,水动力弥散通量 J_h 计算公式如下:

$$J_h = -\theta D_e \frac{\partial c}{\partial z} \quad (5)$$

$$D_e = D + D_m \quad (6)$$

式中, D 为土壤中分子扩散系数 (dm^2/s); D_m 为土壤中机械弥散系数 (dm^2/s); D_e 为土壤中水动力

弥散系数 (dm^2/s), 由公式 (5) 计算; $\frac{\partial c}{\partial z}$ 为浓度梯度 (mg/dm^4); θ 为体积含水量 (无量纲)。

在包气带运移过程中,还会发生吸附、降解等过程,这些过程引起的质量变化统称为源汇项。对于图 2 所示区域,根据质量守恒定律,该区域单位时间液相质量变化量为:

单位时间液相质量变化变化=对流增加通量-对流减少通量+水动力弥散增加通量-水动力弥散减少通量-源汇项。

各项的计算公式如表 1 所示。

表 1 非饱和带溶质运移的质量平衡项

质量平衡项	公式
对流增加通量	$q \cdot c(z)$
对流减少通量	$q \cdot c(z + \Delta z)$
水动力弥散增加通量	$-\theta \cdot D_e \cdot \frac{\partial c(z)}{\partial z}$
水动力弥散减少通量	$-\theta \cdot D_e \cdot \frac{\partial c(z + \theta z)}{\partial z}$
源汇项	$\Delta z \cdot \theta \cdot S$

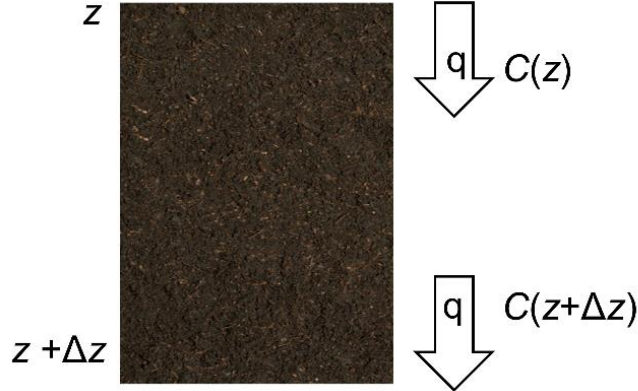


图 1 多孔介质中溶质运移的质量守恒图示

注：图示区域水流向下； q 为达西流速（ dm/s ）； C 表示浓度（ mg/dm^3 ）； Z 表示位置。

化简可得含有源汇项的一维对流弥散方程，即多孔介质中溶质运移的控制方程：

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial z} + D_e \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - S \quad (7)$$

$$v = \frac{q}{\theta} \quad (8)$$

式中， S 为溶质质量的减少量（ $\text{mg/dm}^3/\text{s}$ ）； v 为孔隙流速（ dm/s ），由公式（8）计算。

6.4 地下水稀释过程计算

当渗滤液迁移至地下水水面，渗滤液与地下水与混合，污染浓度进一步降低。稀释因子 DF 表示渗滤液浓度与地下水浓度的比值，该系数与场地特征有关。假设污染物在混合区内均匀分布，基于质量平衡的稀释因子的计算公式如下：

$$DF = \frac{C_d}{C_{gw}} = 1 + \frac{K \cdot i \cdot d}{I \cdot L} \quad (9)$$

$$d_m = (0.011 \cdot 2L^2)^{0.5} + d_a \left(1 - e^{\frac{(-I \times L)}{K \times i \times d_a}} \right) \quad (10)$$

其中， DF 为稀释因子（无量纲）， C_d 为地下水水面处土壤淋滤液中的有机污染物浓度（ mg/L ）； C_{gw} 为经过稀释后地下水有机污染物浓度（ mg/L ）； K 为含水层水力传导度（ m/s ）； i 为水力梯度（无量纲）； d 为混合区深度（ m ）； I 为内渗率（ m/s ）； L 为平行于地下水流的源区长度（ m ）； d_m 为混合区深度（ m ）； d_a 为含水层厚度（ m ）；当 $d_m > d_a$ 时，取 $d_m = d_a$ 。

7 标准与国内相关技术标准的比较

7.1 与《建设用地土壤污染风险评估技术导则》（HJ 25.3—2019）的区别与联系

（1）区别：本技术指南核心在于评估土壤中有机污染物对地下水安全的影响，强调了土壤和地下水之间的相互作用，以及有机污染物在这一系统中的环境行为，并据此制定相应的土壤有机污染物安全阈值；《建设用地土壤污染风险评估技术导则》（HJ 25.3—2019）则更广泛地涉及建设用地土壤污染的风险评估，侧重于评估土壤污染对人体健康和环境的风险，并为污染场地的管理、修复和再开发提供技术支持。

本技术指南提供了一套具体的技术框架和计算方法，用于推导土壤有机污染物的安全阈值，包括土-水分配过程计算、包气带浓度衰减过程计算、地下水稀释过程计算等；《建设用地土壤污染风险评估技术导则》（HJ 25.3—2019）则包含了土壤污染风险评估的全过程，从土壤污染状况调查、风险评估到风险管控与修复监测，后者包括但不限于安全阈值的确定。

（2）联系：两者都基于风险评估的原理，即通过评估污染物的暴露途径和暴露水平来确定风险水平。本技术指南在编制过程中参考了《建设用地土壤污染风险评估技术导则》HJ 25.3—2019 中的一些原则和方法，可以视为《建设用地土壤污染风险评估技术导则》HJ 25.3—2019 在特定领域的深化和细化，特别是在考虑地下水安全方面的土壤有机污染物安全阈值推导。两者在土壤污染风险评估的框架下是相互补充的。

综上所述，本技术指南与《建设用地土壤污染风险评估技术导则》HJ 25.3 在土壤污染风险评估的技术方法和流程上有相似之处，两者在土壤污染风险评估领域内各有侧重，前者更加侧重于基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值的推导，可以作为更为专业的地下水安全评估工具，而后者则提供了一个更广泛的土壤污染风险评估框架。两者可以共同构成了中国土壤污染风险评估和管理的技术体系。

7.2 与《环境影响评价技术导则 地下水环境》的区别与联系

（1）区别：本技术指南针对土壤中有机污染物对地下水安全的影响，提供了推导土壤有机污染物安全阈值的技术框架和计算方法，更侧重于土壤和地下水污染的防治和管理；《环境影响评价技术导则 地下水环境》（HJ 610-2016）是关于环境影响评价的技术导则，旨在评估建设项目对地下水环境可能产生的影响，并提出相应的保护措施和对策。

本技术指南提供了一套具体的技术框架和计算方法，用于推导土壤有机污染物的安全阈值，包括土-水分配过程计算、包气带浓度衰减过程计算、地下水稀释过程计算等；《环境影响评价技术导则 地下水环境》（HJ 610-2016）则提供了环境影响评价的一般性原则、程序和方法，包括地下水环境的现状调查、影响预测、风险评估和监测计划等。

（2）联系：两者保护的环境目标一致，均基于地下水的环境保护开展评估。在环境影响评价过程中，可以参考土壤有机污染物安全阈值推导技术指南中的方法和参数，以评估建设项目对土壤和地下水的污染风险。

综上所述，本技术指南与《环境影响评价技术导则 地下水环境》（HJ 610-2016）在目的、范围和技术内容上有所区别，但两者环境保护对象一致，在环境保护和风险评估方面是相辅相成的。

8 标准的预期作用与效益

（1）开展土壤污染生态环境风险评价

地下水是土壤污染生态环境风险的主要受体之一，本技术指南规定的技术框架和计算方法，包括土-水分配系数、包气带浓度衰减过程计算、地下水稀释过程计算等，用于评估土壤有机污染物的安全阈值，开展土壤中污染物淋溶进入地下水的风险评价。

（2）制定污染场地土壤修复目标值

保护地下水的土壤污染风险评价结果能够为污染场地土壤修复目标值制定提供依据，本标准与不同水文地质条件下土壤污染物包气带垂直淋溶过程密切联系，有利于相关利益方结合场地的水文地质条件，综合土壤污染程度及土壤性质制定修复目标值。

（3）提高污染土壤环境风险管理决策水平

技术指南结合国家环境管理目标，为土壤有机污染物的安全阈值推导提供科学、规范的技术指导，有助于提高土壤污染风险评估的准确性和有效性，完善土壤污染防治标准体系，提高污染土壤环境的风险管理决策水平。

9 对实施本标准的建议

本指南为首次制订，对土壤-地下水风险评价的管理提供前瞻性的认识，拟为开展的针对污染场地及周边土壤的有机污染物地下水污染风险评价提供技术支撑。

本标准为指导性标准，建议标准发布实施后，建议在本标准实施过程中，继续广泛听取和收集各方面的意见与建议，并根据实际应用情况，适时对本标准不断地补充、修订与完善，使其实用性和可操作性与时俱进，为污染土壤修复行动的提供重要参考依据。

主要参考文献

- [1]US EPA., Environmental Protection Agency (EPA). Soil Screening Guidance: User's Guide [EB/OL]. <https://semspub.epa.gov/work/HQ/175238.pdf>. 1996.
- [2] Canadian Council of Ministers of the Environment (CCME). Protocol for the Derivation of Environmental and Human Health Soil Quality Guidelines [EB/OL]. https://publications.gc.ca/collections/collection_2010/ccme/En108-4-8-2006-eng.pdf. 2006.
- [3]钟茂生等, 修复达标土壤回填对地下水环境影响的层次化评估方法应用研究. 环境科学, 2013. 34(3): p. 7.
- [4]蒋世杰等, 基于保护地下水的土壤修复目标层次化制订方法. 环境科学研究, 2016. 29(2): p. 11.
- [5]Bi, P., et al., Natural Background Level and Contamination of Shallow Groundwater Salinity in Various Aquifers in a Coastal Urbanized Area, South China. *Journal of Chemistry*, 2021.
- [6]Barrios, R.E., et al., Climate change impacts the subsurface transport of atrazine and estrone originating from agricultural production activities. *Environmental Pollution*, 2020. 265(Pt A): p. 115024.
- [7]Bi, P., et al., Identification of Groundwater Contamination in a Rapidly Urbanized Area on a Regional Scale: A New Approach of Multi-Hydrochemical Evidences. *International journal of environmental research and public health*, 2021. 18(22).
- [8]陈梦舫等, 污染场地土壤与地下水风险评估方法学. 2017: 污染场地土壤与地下水风险评估方法学.
- [9]Kobayashi, Y., T. Uchida, and K. Yoshida, Prediction of Soil Adsorption Coefficient in Pesticides Using Physicochemical Properties and Molecular Descriptors by Machine Learning Models. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 2020. 39.
- [10]Kobayashi, Y. and K. Yoshida, Quantitative structure–property relationships for the calculation of the soil adsorption coefficient using machine learning algorithms with calculated chemical properties from open-source software. *Environmental Research*, 2021. 196: p. 110363.
- [11]Mamy, L., et al., Prediction of the Fate of Organic Compounds in the Environment From Their Molecular Properties: A Review. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 2015. 45(12): p. 1277-1377.
- [12]Kodešová, R., et al., Pesticide adsorption in relation to soil properties and soil type distribution in regional scale. *Journal of Hazardous Materials*, 2011. 186(1): p. 540-550.
- [13]Site, D. and Alessandro, Factors Affecting Sorption of Organic Compounds in Natural Sorbent/Water Systems and Sorption Coefficients for Selected Pollutants. A Review. *Journal of Physical & Chemical Reference Data*, 2001. 30(1): p. 187-439.
- [14]张勇, et al., 土壤有机质及其研究方法综述. 世界科技研究与发展, 2005. 27(5): p. 7.
- [15]Gurson, A.P., et al., Mobility of 2,4-Dichlorophenoxyacetic Acid, Glyphosate, and Metribuzine Herbicides in Terra Rossa-Amended Soil: Multiple Approaches with

- Experimental and Mathematical Modeling Studies. *Water, Air, and Soil Pollution*, 2019. 230(9): p. 220.1-220.14.
- [16]A, A.K., P.G. B, and W.P.B. C, New modeling paradigms for the sorption of hydrophobic organic chemicals to heterogeneous carbonaceous matter in soils, sediments, and rocks - ScienceDirect. *Advances in Water Resources*, 2002. 25(8–12): p. 985-1016.
- [17]Sigmund, G., et al., Sorption and Mobility of Charged Organic Compounds: How to Confront and Overcome Limitations in Their Assessment. *Environmental Science & Technology: ES&T*, 2022(8): p. 56.
- [18]Meftaul, I.M., et al., Sorption–desorption of dimethoate in urban soils and potential environmental impacts. *Environmental Science: Processes & Impacts*.
- [19]Li, J., L.J. Carter, and A. Boxall, Evaluation and development of models for estimating the sorption behaviour of pharmaceuticals in soils. *Journal of Hazardous Materials*. 392.
- [20]马蒙蒙, 层状土壤中水流和溶质运移特征及数值模拟. 2020, 青岛大学.