

ICS 13.020.40  
CCS Z00

# 团 标 准

T/CSES 96—2023

## 场地土壤污染物人体暴露组解析技术规范 炼焦化学工业

Technical specification for exposome analysis for human exposure to soil  
contaminants from sites Coking chemical industry

2023 - 05 - 22 发布

2023 - 05 - 22 实施

中国环境科学学会 发 布



# 目 次

|   |     |
|---|-----|
| 前言 .....                                  | III |
| 引言 .....                                  | III |
| 1 范围 .....                                | 1   |
| 2 规范性引用文件 .....                           | 1   |
| 3 术语和定义 .....                             | 1   |
| 3.1 炼焦化学工业 .....                          | 1   |
| 4 工作流程 .....                              | 1   |
| 5 初步调查 .....                              | 1   |
| 5.1 资料收集与分析 .....                         | 1   |
| 5.2 现场踏勘和人员访谈 .....                       | 2   |
| 5.3 初步调查结果 .....                          | 2   |
| 6 场地调查 .....                              | 2   |
| 6.1 确定调查范围 .....                          | 2   |
| 6.2 环境样品采集 .....                          | 3   |
| 6.3 环境样品分析 .....                          | 3   |
| 6.4 健康风险评估 .....                          | 3   |
| 7 人群调查 .....                              | 4   |
| 7.1 人群调查方案的制定 .....                       | 4   |
| 7.2 调查人群的选择 .....                         | 4   |
| 7.3 生物样品采集、问卷调查和体格检查 .....                | 4   |
| 7.4 生物样品检测与分析 .....                       | 5   |
| 7.5 内源性代谢物分析 .....                        | 5   |
| 7.6 数据库的建立 .....                          | 5   |
| 8 暴露生物标志物的确定 .....                        | 6   |
| 8.1 统计分析 .....                            | 6   |
| 8.2 综合研判 .....                            | 6   |
| 9 质量控制 .....                              | 6   |
| 9.1 人员和实验条件 .....                         | 6   |
| 9.2 样品采集、保存、运输与实验室分析 .....                | 6   |
| 9.3 数据审核与处理 .....                         | 6   |
| 10 报告编制 .....                             | 7   |
| 附 录 A (资料性) 炼焦化学工业重点工艺及特征污染物 .....        | 8   |
| 附 录 B (资料性) 炼焦化学工业场地本地化筛查数据库推荐特征化合物 ..... | 9   |
| 附 录 C (资料性) 炼焦化学污染场地污染物分析推荐内标物 .....      | 20  |

## 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》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由广东工业大学提出。

本文件由中国环境科学学会归口。

本文件起草单位：广东工业大学、生态环境部华南环境科学研究所、山西大学。

本文件主要起草人：安太成、唐斌、温美成、郑晶、李桂英、张昕、杜东伟。

## 引　　言

炼焦化学工业作为国务院重点监管行业之一，其形成的污染场地对周边人群健康造成威胁。采用暴露组研究先进理念与方法，结合行业特征，建立炼焦化学工业污染场地土壤污染物与人体暴露的关联，获得暴露生物标志物，为推动我国炼焦化学工业场地污染物人体暴露风险评估技术的发展，防范重点环境风险提供支撑。

为贯彻《中华人民共和国环境保护法》《中华人民共和国土壤污染防治法》和《土壤污染防治行动计划》，规范和指导炼焦化学工业污染场地土壤污染物暴露标志物筛选工作，推进场地环境保护监督管理技术的创新、示范和推广，开展暴露组解析并获得暴露生物标志物，评估场地污染物的人体健康风险，保障人体健康，特制定本文件。



# 场地土壤污染物人体暴露组解析技术规范 炼焦化学工业

## 1 范围

本标准规定了炼焦化学工业企业场地土壤污染物人体暴露组解析的工作程序、初步调查、场地调查、人群调查、暴露标志物筛选等技术要求。

本文件适用于炼焦化学工业企业生产、关停、搬迁过程中形成的污染场地中土壤污染物（仅限化学污染物）暴露人群的暴露组解析工作。

## 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 16171 炼焦化学工业污染物排放标准
- GB/T 8170 数值修约规则与极限数值的表示和判定
- GB/T 16126 生物监测质量保证规范
- HJ 25.1 建设用地土壤污染状况调查技术导则
- HJ 630 环境监测质量管理技术导则
- HJ 682 建设用地土壤污染风险管控和修复术语
- HJ 834 土壤和沉积物 半挥发性有机物的测定 气相色谱-质谱法
- HJ 854 排污许可证申请与核发技术规范 炼焦化学工业
- HJ 964 环境影响评价技术导则 土壤环境（试行）
- T/CSES 94 场地土壤污染物人体暴露组解析技术规范 总纲
- 《医疗机构临床实验室管理办法》（卫医发〔2006〕73号）

## 3 术语和定义

GB 16171、HJ 682、HJ 964和T/CSES 94界定的术语和定义适用于本文件。

### 3.1

**炼焦化学工业 coking chemical industry**

指炼焦煤按生产工艺和产品要求配比后，装入隔绝空气的密闭炼焦炉内，经高、中、低温干馏转化为焦炭、焦炉煤气和化学产品的工艺过程。

## 4 工作流程

场地土壤污染物人体暴露组解析可分为初步调查、场地调查、人群调查、暴露生物标志物筛选和报告编制5个阶段，工作程序见T/CSES 94。

## 5 初步调查

### 5.1 资料收集与分析

收集资料主要包括：场地基本资料、场地所在区域的自然、社会信息、场地土地利用历史及环境资料、炼焦化学工业污染相关信息（见表1）。炼焦化学工业企业产排污类别与解释参照HJ 854。当调查场地与相邻场地存在相互污染的可能时，须调查相邻地的相关记录和资料。

表 1 炼焦化学工业污染信息建议收集的资料清单

| 信息           | 资料项目   |
|--------------|--|
| 基本信息         | 炼焦化学工业企业名称、运营管理单位、生产运行状况、企业总平面布置图及面积、重点设施设备分布图、雨污管线分布图   |
| 生产信息         | 炼焦炉型、主要生产单元、工艺、设备、产品及产能;<br>主要原辅材料及其馏分、挥发分，主要燃料及其灰分、硫分、挥发分；  |
| 环境管理信息       | 环境影响评价文件及批复、建设项目竣工验收报告、环境影响后评价报告、清洁生产报告、排污许可证、突发环境事件风险评估报告、应急预案等；<br>废气、废水收集、处理及排放，固体废物产生、贮存、利用和处置情况；<br>土壤和地下水环境调查监测数据、环境处罚信息、历年突发环境事件情况；<br>监督性监测报告、危废鉴定报告 |
| 产排污及污染防治设施情况 | 废气产污环节、特征污染物、排放形式及污染治理设施建设和运行情况；<br>废水类别、特征污染物及污染治理设施建设和运行情况；<br>固体废物的产生与处置情况  |
| 环境影响情况       | 生态环境影响报告、周边的相关介质监测数据，周边的投诉情况等  |

## 5.2 现场踏勘和人员访谈

在资料收集和初步分析的基础上，通过现场踏勘进一步了解场地及周边区域的现状和历史情况，以及敏感目标的分布和暴露人群的特征。对资料收集与现场踏勘所涉及的疑问，采取面谈、电话交流或书面调查等方式，对场地现状或历史的知情人进行访谈，进行信息补充和已有资料的考证。现场踏勘和人员访谈的具体内容和重点参照HJ 25.1。

## 5.3 初步调查结果

5.3.1 通过查阅和分析经收集、踏勘和访谈获得的资料信息，根据专业知识和经验判断，识别场地被污染的可能性和疑似污染区域，初步判断土壤污染物类型，明确目标暴露人群，明确是否开展场地调查。

5.3.2 开展场地调查应同时满足：场地当前或历史上存在炼焦化学工业污染源；炼焦化学工业生产活动对场地土壤造成污染且存在人群暴露，可能带来健康风险。

5.3.3 场地内炼焦化学工业污染源引起的土壤污染不存在人群健康风险或造成人群健康风险的可能性极低时，可终止调查。

5.3.4 除炼焦化学工业，场地内或周边还存着其他重要污染源，可能对研究结果产生重大影响的，调查方法参考 T/CSES 94。

## 6 场地调查

### 6.1 确定调查范围

6.1.1 根据场地的具体情况、场地内外的污染源分布、水文地质条件以及污染物的迁移和转化等因素，判断场地土壤污染物的可能分布，并参考场地内炼焦化工厂环境影响评价文件中提出的周围敏感区域，确定暴露区的调查范围。

6.1.2 参照 T/CSES 94，对暴露区、对照区进行划定。

6.1.3 炼焦炉型包括常规机焦炉、热回收焦炉、半焦（兰炭）炭化炉三种，对应的重点工艺区域及特征污染物见附录 A。应根据不同炉型的对应重点工艺特征污染物情况，参照 GB 16171 进一步将生产

区划分为不同生产单元分区。

## 6.2 环境样品采集

6.2.1 炼焦化工行业应重点关注的特征污染物包括多环芳烃（苯并[a]芘、苯并[b]荧蒽、苯并[a]蒽、萘等）及其衍生物（卤代多环芳烃、甲基多环芳烃、硝基多环芳烃、含氧多环芳烃等）、苯系物（苯、甲苯、乙苯等）、烃类（烯炔烃、卤代烃等）、酚类（苯酚等）、苯胺类（苯胺等）、金属元素（汞、铅、钒、钴、砷等）等。

6.2.2 暴露区与对照区的点位布设执行 T/CSES 94。

6.2.3 应依据污染物种类和环境介质类型，参照相关标准执行采集量、采集方式、保存与运输方法、采样记录、质量控制等要求。

## 6.3 环境样品分析

### 6.3.1 可疑目标筛查和非目标筛查

宜结合色谱-高分辨质谱对炼焦化学工业污染场地中半挥发性有机物等潜在污染物进行定性分析，筛选判断场地特征污染物及/或其分解产物。

- a) 土壤中半挥发性有机物筛查的前处理及分析方法参照 HJ 834，筛查获得的组间差异特征峰经鉴定取得差异化合物信息。
- b) 为便于场地特征污染物筛查和鉴定，根据炼焦化学工业场地特征有机污染物及其迁移转化规律，结合文献调研，依托 METLIN、T3DB、PubChem 等化合物开源数据库，建立包含炼焦化学工业场地特征有机污染物分子结构信息的本地化筛查数据库，宜包含的特征有机污染物见附录 B。

### 6.3.2 目标物分析

根据实际情况，宜对筛查获得的场地特征污染物及/或其分解产物、其它需重点关注炼焦化工污染场地特征污染物、金属元素等，采用定量分析方法获得其定量浓度。

- a) 分析方法宜优先采用国家、地方和行业相关标准。标准中未涵盖目标污染物的分析可采用经验证的实验室自建方法。
- b) 对暴露区和对照区各环境介质中检出的目标污染物浓度水平进行统计描述、预处理和数据质量评价。根据数据特征采用 *t-test*/非参数检验进行组间比较，获得暴露区显著高于对照区的差异化合物 ( $P < 0.05$ )。

### 6.3.3 综合判断

整理调查信息和监测结果，评估数据质量，分析数据的有效性和充分性，确定是否需要补充采样分析等。根据各环境介质中污染物筛查结果，对获得的暴露区浓度水平显著高于对照区的化合物，结合场地内炼焦化工污染源的工艺和污染物排放情况，判断其合理性，获得该炼焦化工场地特征污染物清单。

## 6.4 健康风险评估

6.4.1 暴露评估、风险表征、风险判断的具体方法执行 T/CSES 94。

6.4.2 应对生活区、办公区及不同生产区的暴露人群亚组进行暴露情景识别及暴露量计算。生产区宜包括：洗煤厂、煤矸石电厂、油库区、炼焦车间、煤气净化车间、粗苯精制、焦炉熄焦区、焦油车间和粗苯加工车间等。暴露途径宜包括：经消化道摄入途径、经呼吸途径与皮肤接触途径。

6.4.3 暴露量计算过程宜重点关注多环芳烃、苯系物、酚类、苯胺类、重金属及其化合物等炼焦化工行业特征有毒有害污染物类型。

6.4.4 根据受体人群在不同暴露情景下对应的暴露量，判断场地人群健康风险水平，若风险超过可接

受水平则开展人群调查，若风险可接受则结束调查。

## 7 人群调查

### 7.1 人群调查方案的制定

根据炼焦化工场地特征污染物清单中污染物特点及其暴露途径，识别潜在体内负荷污染物及其代谢产物，制定人群调查方案。人群调查方案应包括调查人群选择、人数确定、人群抽取、问卷调查、体格检查、体内负荷水平分析、内源性代谢物分析等内容。在开展人群调查前，应通过医学伦理审查并取得知情同意。

### 7.2 调查人群的选择

充分考虑场地土壤污染情况确定调查人群。调查人群可分为暴露人群与对照人群。其中暴露人群分为职业接触人群和一般暴露人群（暴露区非职业接触居民）。样本量的确定与调查人群的抽取方法参考HJ 839。根据暴露情景差异，可将暴露人群进一步划分为不同暴露等级的亚组人群，组内调查人群宜尽量涵盖不同暴露等级的人群亚组。

### 7.3 生物样品采集、问卷调查和体格检查

#### 7.3.1 生物样品采集

根据场地调查获得的场地特征污染物清单及其暴露途径，确定采集生物样品的类型、采集时间、采集量、采集方式、保存与运输条件等。炼焦化学污染场地暴露带来的体内负荷污染物主要包括苯酚、多环芳烃及其衍生物（硝基类衍生物、含氧类衍生物、氯代衍生物和溴代衍生物）、杂环多环芳烃（咔唑、吡啶、喹啉、吲哚等）等半挥发性有机物，苯系物等挥发性有机物，挥发性有机物代谢物，半挥发性有机物代谢物（羟基多环芳烃、羟基氯代多环芳烃等），金属元素（汞、铅、钒、钴、砷等）及其代谢产物等。推荐采集的生物样品、采集方式、保存与运输条件等见表2，具体操作参照GB/T 16126。采集生物样品前需获得调查对象的知情同意并签订知情同意书。

表 2 建议采集生物样品及采样方法

| 生物样品 | 项目    | 金属元素   | 有机污染物分析   |       | 内源性代谢物<br>非目标筛查       |
|------|-------|--|---|-------|-----------------------|
|      |       |  | 可疑/非目标筛查  | 目标分析  |                       |
| 血液   | 目标化合物 | V、Cr、Mn、Co、Ni、Cu、Zn、As、Se、Cd、Sn、Sb、Hg、Tl 和 Pb 等 26 种金属 | 苯系物、烯炔烃、卤代烃、等 VOCs，苯酚、多环芳烃及其衍生物等 SVOCs，以及 VOCs 和 SVOCs 代谢产物 |       | 氨基酸、糖、有机酸、脂肪酸、核苷、核苷酸等 |
|      | 采集量   | 2 mL   | 2 mL  | 2 mL  |                       |
|      | 采集方式  | 无抗凝采血管   |   |       | 抗凝采血管                 |
|      | 保存和运输 | 冷藏运输，-80℃冷冻保存  |   |       |                       |
| 尿液   | 目标化合物 | V、Cr、Mn、Co、Ni、Cu、Zn、As、Se、Cd、Sn、Sb、Hg、Tl 和 Pb 等 26 种金属 | VOCs 代谢物、SVOCs 代谢物  |       | 氨基酸、糖、有机酸、脂肪酸、核苷、核苷酸等 |
|      | 采集量   | 20 mL  | 20 mL   | 20 mL |                       |

| 生物样品 | 项目    | 金属元素 | 有机污染物分析          |      | 内源性代谢物<br>非目标筛查 |  |  |
|------|-------|------|------------------|------|-----------------|--|--|
|      |       |      | 可疑/非目标筛查         | 目标分析 |                 |  |  |
|      | 采集方式  |      | 一次性聚乙烯尿杯采集，冻存管分装 |      |                 |  |  |
|      | 保存和运输 |      | 冷藏运输，-80℃冷冻保存    |      |                 |  |  |

### 7.3.2 问卷调查和体格检查

采集生物样品的同时，对调查人群开展问卷调查和体格检查，具体方法执行T/CSES 94。

## 7.4 生物样品检测与分析

### 7.4.1 污染物分析

#### 7.4.1.1 可疑目标筛查和非目标筛查

7.4.1.1.1 结合场地调查获得的污染物清单和文献调研，推导炼焦化工污染场地人群生物样品中可能的特征有机污染物及其代谢产物，并结合 METLIN、T3DB、PubChem 等化合物开源数据库，在 6.3.1 b) 所构建数据库的基础上，补充 VOCs 代谢物，以及羟基多环芳烃（OH-PAHs）和羟基氯代多环芳烃（OH-Cl-PAHs）等代谢产物信息，建立包含炼焦化工场地特征有机污染物及其代谢产物分子结构信息的本地化筛查数据库（附录 B）。

7.4.1.1.2 可疑目标筛查和非目标筛查方法见 T/CSES 94。

7.4.1.1.3 结合炼焦化学污染场地特征污染物类型，可疑目标/非目标筛查分析中推荐使用的内标物见附录 C，包括挥发性有机物及其代谢物、多环芳烃及其衍生物、多环芳烃代谢物等。

#### 7.4.1.2 目标物分析

7.4.1.2.1 对筛查获得的炼焦化学工业场地人群特征污染物及/或其代谢产物、其它需重点关注的目标物、金属元素等，可采用定量分析方法获得其浓度数据。

7.4.1.3 目标物的分析宜优先采用国家、地方和行业相关标准。标准中未涵盖目标物的分析可采用经验证的实验室自建方法。人体血液和尿液中金属元素和多环芳烃及其衍生物、杂环多环芳烃、苯系物等炼焦化工行业特征污染物的定量分析方法见 T/CSES 94。

7.4.1.4 对暴露人群和对照人群检出的特征污染物浓度水平进行统计描述，根据数据特征采用 *t*-test/非参数检验进行组间比较，获得暴露人群显著高于对照人群的差异化合物 ( $P < 0.05$ )。

### 7.4.2 评估和验证

整理调查信息和调查结果，评估数据的质量，分析数据的有效性和充分性，以及结果的可靠性，确定是否需要补充采样分析。根据生物样品中污染物定性和定量分析结果，对获得的暴露人群显著高于对照人群的化合物进行分析评判，提出炼焦化学场地特征体内负荷污染物及/或其代谢产物清单。

## 7.5 内源性代谢物分析

结合所获清单中污染物及其代谢物健康效应类型及毒性参数，确定内源性代谢物分析采用的生物样品类型及检测手段。推荐使用血液和尿液，检测手段可采用目标分析与非目标分析，目标物类型可包括代谢组学等。基于液相色谱-高分辨质谱的血液和尿液中多种内源性代谢物非目标分析方法见 T/CSES 94。获得的数据文件经标准化处理后，使用多变量化学计量学方法衡量和验证各离子对各组样本分类判别的影响强度和解释能力，挖掘具有生物学意义的差异因子，并通过进一步结构鉴定得到炼焦化学场地特征内源性代谢物。

## 7.6 数据库的建立

建立包含场地特征污染物及/或其代谢产物分子、人群特征体内负荷污染物及/或其代谢产物、问卷调查、体格检查及健康状况调查的数据库。

## 8 暴露生物标志物的确定

### 8.1 统计分析

以特征内源性代谢物、生化指标等健康效应指标为因变量，特征污染物浓度值、暴露风险等为自变量，考虑人口学特征、行为活动情况、健康相关因素等基本信息，采用线性回归分析、贝叶斯线性回归、弹性网络回归等模型分析多种场地特征污染物混合暴露与健康效应指标之间的关联。具体分析方法执行T/CSES 94。

### 8.2 综合研判

采用专家打分法，组织权威专家对特征污染物/代谢产物进行讨论，根据主要因素制定权重后评分排序，综合研判确定暴露生物标志物及对应的样品类型，考虑的主要因素包括：

- a) 与特征内源性代谢物的相关程度；
- b) 与该场地特征土壤污染物的关联，对应暴露途径和暴露情景；
- c) 与该场地炼焦化工生产工艺、原辅料、排放污染物的关联；
- d) 本次研究的检出率、人体负荷水平；
- e) 当前研究情况，包括与炼焦化工行业的关联、分析方法的成熟度、已有人群研究的检出率和负荷水平、毒性效应、人群潜在暴露风险等。

获得的暴露生物标志物一般不宜多于10种/类污染物。

## 9 质量控制

### 9.1 人员和实验条件

9.1.1 项目参与人员应接受技术培训，考核合格后上岗。

9.1.2 承担分析任务的实验室需具备相关资质。实验室运行管理规范，配备所承担任务相配套的实验室仪器设备和人员，有完备的质量控制与质量保证管理系统。

9.1.3 校准和比对所需测量分析的工具及仪器，包括体格检查、环境监测仪器及实验室分析仪器的准确度和精密度，合格率应达到100%。

### 9.2 样品采集、保存、运输与实验室分析

9.2.1 环境样品的采集、保存、运输的质量控制执行对应标准中相关要求；人群生物样品的采集、保存、运输的质量控制按GB/T 16126执行；体格检查的质量控制按《医疗机构临床实验室管理办法》执行。

9.2.2 环境样品和人体生物样品分析方法原则上优先选择国家标准、行业标准、国际标准、国外标准等规范性方法，或者公认权威的分析方法。分析过程的质量控制与质量保证技术要求执行对应标准中相关要求。

9.2.3 自行扩充和修改过的标准方法、实验室自建方法宜参照HJ 630进行方法确认，建立实验室分析质量控制技术要求并严格执行。

### 9.3 数据审核与处理

9.3.1 数据的录入、整理与分析处理按GB/T 8170执行。编制数据清理计划，按统一的标准化方式处理所有数据，检查数据的规范性、完整性、合理性、唯一性、准确性、可溯源性，将核查问题汇总并分析后，采取标准化、修订、补遗或去除等处理。

9.3.2 异常数据的识别和剔除需具有充分理由并考虑可能影响因素及合理性。

9.3.3 根据数据特征选择正确的统计分析方法，注意辨析混杂因素及其影响。

## 10 报告编制

炼焦化学污染场地土壤污染物人体暴露组解析报告应全面、真实的反映解析工作的全过程，调查方案、原始数据、计算和分析过程可编入报告附录。报告应包括背景介绍、初步调查、场地调查、人群调查、暴露生物标志物筛选、质量控制与评价、结论及建议等章节。

附录 A  
(资料性)  
炼焦化学工业重点工艺及特征污染物

下表给出了炼焦化学工业重点工艺及物料的特征污染物。

表 A.1 炼焦化学工业重点工艺及特征污染物

| 污染类型      | 排污环节            | 特征污染物           |
|-----------|-----------------|-----------------|
| 废水        | 蒸氨废水(酚氰废水)      | 多环芳烃、苯系物、酚类、烃类等 |
|           | 湿熄焦废水           | 多环芳烃、氰化物、酚类等    |
|           | 初期雨水            | 多环芳烃、苯系物、烃类、酚类等 |
|           | 粗苯分离水           | 苯系物、多环芳烃、酚类、烃类等 |
|           | 终冷污水            | 苯系物、多环芳烃、酚类、烃类等 |
|           | 煤气冷凝液           | 多环芳烃、苯系物、酚类、烃类等 |
| 固体废物/危险废物 | 焦油渣             | 多环芳烃、苯系物、酚类、烃类等 |
|           | 脱硫废液            | 金属元素、酚类等        |
|           | 洗油再生渣           | 多环芳烃、苯系物、酚类等    |
|           | 蒸氨残渣            | 多环芳烃、苯系物、酚类等    |
|           | 废水处理污泥          | 多环芳烃、苯系物、酚类等    |
|           | 酸焦油             | 多环芳烃、苯系物、酚类等    |
|           | 废机油             | 烃类、多环芳烃、金属元素等   |
| 废气        | 焦炉烟囱废气          | 金属元素等           |
|           | 焦炉炉体无组织废气       | 多环芳烃等           |
|           | 干法熄焦废气          | 金属元素等           |
|           | 管式炉等燃用焦炉煤气的设施废气 | 金属元素等           |
|           | 冷凝鼓风、焦油各类贮槽等废气  | 多环芳烃、苯系物、烃类、酚类等 |
|           | 苯贮槽废气           | 多环芳烃、苯系物、酚类、烃类等 |

## 附录 B

(资料性)

## 炼焦化学工业场地本地化筛查数据库推荐特征化合物

下表给出了炼焦化学工业场地本地化筛查数据库推荐特征化合物。

表 B.1 炼焦化学工业场地本地化筛查数据库推荐特征化合物

| 类别  | 序号 | 中文名           | 英文名                     | CAS.     |
|-----|----|---------------|-------------------------|----------|
| 苯系物 | 1  | 苯             | Benzene                 | 71-43-2  |
|     | 2  | 甲苯            | Toluene                 | 108-88-3 |
|     | 3  | 乙苯            | Ethylbenzene            | 100-41-4 |
|     | 4  | 邻二甲苯          | O-xylene                | 95-47-6  |
|     | 5  | 间二甲苯          | M-xylene                | 108-38-3 |
|     | 6  | 对二甲苯          | P-xylene                | 106-42-3 |
|     | 7  | 苯乙烯           | Styrene                 | 100-42-5 |
|     | 8  | 2-乙基甲苯(邻甲乙苯)  | O-ethyltoluene          | 611-14-3 |
|     | 9  | 3-乙基甲苯(间甲乙苯)  | M-ethyltoluene          | 620-14-4 |
|     | 10 | 4-乙基甲苯(对-甲乙苯) | P-ethyltoluene          | 622-96-8 |
|     | 11 | 1,3,5-三甲苯     | 1,3,5-Trimethylbenzene  | 108-67-8 |
|     | 12 | 1,2,4-三甲基苯    | 1,2,4-Trimethylbenzene  | 95-63-6  |
|     | 13 | 1,2,3-三甲苯     | 1,2,3 -Trimethylbenzene | 526-73-8 |
|     | 14 | 4-异丙基甲苯       | P-isopropyltoluene      | 99-87-6  |
|     | 15 | 正丙苯           | N-propylbenzene         | 103-65-1 |
|     | 16 | 异丙苯           | Iso-propylbenzene       | 98-82-8  |
|     | 17 | 丁苯            | N-butylbenzene          | 104-51-8 |
|     | 18 | 叔丁基苯          | Tert-Butylbenzene       | 98-06-6  |
|     | 19 | 仲丁基苯          | Sec-Butylbenzene        | 135-98-8 |
|     | 20 | 氯苯            | Chlorobenzene           | 108-90-7 |
|     | 21 | 邻二氯苯          | 1,2(o)-Dichlorobenzene  | 95-50-1  |
|     | 22 | 1,3-二氯苯       | 1,3(m)-Dichlorobenzene  | 541-73-1 |
|     | 23 | 1,4-二氯苯       | 1,4(p)-Dichlorobenzene  | 106-46-7 |
|     | 24 | 1,2,3-三氯苯     | 1,2,3-Trichlorobenzene  | 87-61-6  |
|     | 25 | 三氯苯           | 1,2,4-Trichlorobenzene  | 120-82-1 |
|     | 26 | 2-氯甲苯         | 2-Chlorotoluene         | 95-49-8  |
|     | 27 | 对氯甲苯          | 4-Chlorotoluene         | 106-43-4 |
|     | 28 | 溴苯            | Bromobenzene            | 108-86-1 |
|     | 29 | 1,3-二乙基苯      | 1,3-Diethylbenzene      | 141-93-5 |

| 类别     | 序号 | 中文名          | 英文名                            | CAS.     |
|--------|----|--------------|--------------------------------|----------|
|        | 30 | 对二乙基苯        | P-Diethylbenzene               | 105-05-5 |
| 烯烃、卤代烃 | 1  | 氯甲烷          | Chloromethane                  | 74-87-3  |
|        | 2  | 二氯甲烷         | Dichloromethane                | 75-09-2  |
|        | 3  | 三氯甲烷         | Chloroform/Trichloromethane    | 67-66-3  |
|        | 4  | 四氯化碳         | Carbon tetrachloride           | 56-23-5  |
|        | 5  | 三氯氟甲烷        | Monofluorotrichloromethane     | 75-69-4  |
|        | 6  | 二氯二氟甲烷       | Dichlorodifluoromethane        | 75-71-8  |
|        | 7  | 溴氯甲烷         | Bromochloromethane             | 74-97-5  |
|        | 8  | 二溴甲烷         | Dibromo methane                | 74-95-3  |
|        | 9  | 一溴二氯甲烷       | Bromodichloromethane           | 75-27-4  |
|        | 10 | 一氯二溴甲烷       | Dibromochloromethane           | 124-48-1 |
|        | 11 | 溴甲烷          | Bromomethane                   | 74-83-9  |
|        | 12 | 三溴甲烷         | Bromoform                      | 75-25-2  |
|        | 13 | 氯乙烷          | Chloroethane                   | 75-00-3  |
|        | 14 | 1,2-二氯乙烷     | 1,2-Dichloroethane             | 107-06-2 |
|        | 15 | 1,1-二氯乙烷     | 1,1-Dichloroethane             | 75-34-3  |
|        | 16 | 1,1,1-三氯乙烷   | 1,1,1-Trichloroethane          | 71-55-6  |
|        | 17 | 1,1,2-三氯乙烷   | 1,1,2-Trichloroethane          | 79-00-5  |
|        | 18 | 1,1,1-三氯三氟乙烷 | 1,1,1-Trichlorotrifluoroethane | 354-58-5 |
|        | 19 | 1,1,1,2-四氯乙烷 | 1,1,1,2-Tetrachloroethane      | 630-20-6 |
|        | 20 | 1,1,2,2-四氯乙烷 | 1,1,2,2-Tetrachloroethane      | 79-34-5  |
|        | 21 | 1,2-二溴乙烷     | 1,2-Dibromoethane              | 106-93-4 |
|        | 22 | 1,2-二氯丙烷     | 1,2-Dichloropropane            | 78-87-5  |
|        | 23 | 2,2-二氯丙烷     | 2,2-Dichloropropane            | 594-20-7 |
|        | 24 | 1,3-二氯丙烷     | 1,3-Dichloropropane            | 142-28-9 |
|        | 25 | 1,2-二溴-3-氯丙烷 | 1,2-Dibromo-3-chloropropane    | 96-12-8  |
|        | 26 | 乙烯           | Ethene                         | 74-85-1  |
|        | 27 | 丙烯           | Propene                        | 115-07-1 |
|        | 28 | 正丁烯          | 1-Butylene                     | 106-98-9 |
|        | 29 | 顺-2-丁烯       | Cis-2-Butene                   | 590-18-1 |
|        | 30 | 反-2-丁烯       | Trans-2-Butene                 | 624-64-6 |
|        | 31 | 1-戊烯         | 1-Pentene                      | 109-67-1 |
|        | 32 | 顺-2-戊烯       | Cis-2-Pentene                  | 627-20-3 |
|        | 33 | 反-2-戊烯       | Trans-2-Pentene                | 646-04-8 |

| 类别       | 序号 | 中文名                 | 英文名                           | CAS.       |
|----------|----|---------------------|-------------------------------|------------|
| 苯酚和氯代苯酚类 | 34 | 1-己烯                | 1-Hexene                      | 592-41-6   |
|          | 35 | 1,3-丁二烯             | 1,3-Butadiene                 | 106-99-0   |
|          | 36 | 异戊二烯                | Isoprene                      | 78-79-5    |
|          | 37 | 乙炔                  | Acetylene                     | 74-86-2    |
|          | 38 | 氯乙烯                 | Vinyl chloride                | 75-01-4    |
|          | 39 | 1, 1-二氯乙烯           | 1,1-Dichloroethene            | 75-35-4    |
|          | 40 | 反-1,2-二氯乙烯          | Trans-1,2-Dichloroethene      | 156-60-5   |
|          | 41 | 顺-1,2-二氯乙烯          | Cis-1,2-Dichloroethene        | 156-59-2   |
|          | 42 | 三氯乙烯                | Trichloroethylene             | 79-01-6    |
|          | 43 | 四氯乙烯                | Tetrachloroethylene           | 127-18-4   |
|          | 44 | 1,1-二氯丙烯            | 1,1-Dichloropropene           | 563-58-6   |
|          | 45 | 顺式-1,3-二氯丙烯         | cis-1,3-Dichloropropene       | 10061-01-5 |
|          | 46 | 反式-1,3-二氯-1-丙烯      | Trans-1,3-Dichloropropene     | 10061-02-6 |
|          | 47 | 六氯-1,3-丁二烯          | Hexachlorobutadiene           | 87-68-3    |
|          | 48 | 2,2-二甲基丁烷           | 2,2-Dimethylbutane            | 75-83-2    |
|          | 49 | 1-己烯                | 1-Hexene                      | 592-41-6   |
|          | 50 | 2,4-二甲基戊烷           | 2,4-Dimethylpentane           | 108-08-7   |
|          | 51 | 2,3,4-三甲基戊烷         | 2,3,4-trimethyl-Pentane       | 565-75-3   |
|          | 52 | 1,1,2,2-四氟-1,2-二氯乙烷 | 1,2-Dichloroperfluoroethane   | 76-14-2    |
|          | 53 | 亚乙基二氯               | 1,1-Dichloroethane            | 75-34-3    |
|          | 54 | 四氯乙烷                | 1,1,2,2-tetrachloroethane     | 79-34-5    |
|          | 1  | 苯酚                  | Phenol                        | 108-95-2   |
|          | 2  | 邻甲酚                 | 2-Cresol/Ortho cresol         | 95-48-7    |
|          | 3  | 间甲酚                 | 3-Cresol/Meta cresol          | 108-39-4   |
|          | 4  | 对甲酚                 | 4-Cresol/Para cresol          | 106-44-5   |
|          | 5  | 2,4-二甲基苯酚           | 2,4-Xylenol                   | 105-67-9   |
|          | 6  | 2,5-二甲基苯酚           | 2,5-Xylenol                   | 95-87-4    |
|          | 7  | 2,6-二甲基苯酚           | 2,6-xylenol                   | 576-26-1   |
|          | 7  | 3,4-二甲基苯酚           | 3,4-Xylenol                   | 95-65-8    |
|          | 9  | 2,3-二甲酚             | 2,3-Xylenol                   | 526-75-0   |
|          | 10 | 3,5-二甲基苯酚           | 3,5-Xylenol                   | 108-68-9   |
|          | 11 | 间苯二酚                | Resorcinol/M-Dihydroxybenzene | 108-46-3   |
|          | 12 | 2-硝基苯酚              | 2-Nitrophenol                 | 88-75-5    |

| 类别   | 序号 | 中文名           | 英文名                             | CAS.      |
|------|----|---------------|---------------------------------|-----------|
| 多环芳烃 | 13 | 4-硝基苯酚        | 4-Nitrophenol                   | 100-02-7  |
|      | 14 | 3-硝基苯酚        | 3-Nitrophenol                   | 554-84-7  |
|      | 15 | 2,4-二硝基酚      | 2,4-Dinitrophenol               | 51-28-5   |
|      | 16 | 4-硝基间甲苯酚      | 3-Methyl-4-nitrophenol          | 2581-34-2 |
|      | 17 | 4,6-二硝基邻甲酚    | 4,6-Dinitro-2-methylphenol      | 534-52-1  |
|      | 18 | 2-氯苯酚         | 2-Chlorophenol                  | 95-57-8   |
|      | 19 | 2,4-二氯酚       | 2,4-Dichlorophenol              | 120-83-2  |
|      | 20 | 2,6-二氯苯酚      | 2,6-Dichlorophenol              | 87-65-0   |
|      | 21 | 4-氯-3-甲酚      | 4-Chloro-3-methylphenol         | 59-50-7   |
|      | 22 | 2,4,5-三氯苯酚    | 2,4,5-Trichlorophenol           | 95-95-4   |
|      | 23 | 2,4,6-三氯酚     | 2,4,6-Trichlorophenol           | 88-06-2   |
|      | 24 | 2,3,4,6-四氯苯酚  | 2,3,4,6-Tetrachlorophenol       | 58-90-2   |
|      | 25 | 五氯苯酚          | Pentachlorophenol               | 87-86-5   |
|      | 1  | 萘             | Naphthalene                     | 91-20-3   |
|      | 2  | 苊             | Acenaphthene                    | 83-32-9   |
|      | 3  | 菲             | Phenanthrene                    | 85-01-8   |
|      | 4  | 蒽             | Anthracene                      | 120-12-7  |
|      | 5  | 芴             | Fluorene                        | 86-73-7   |
|      | 6  | 芘             | Pyrene                          | 129-00-0  |
|      | 7  | 1,2-苯并[A]蒽    | 1,2-Benz(a)anthracene           | 56-55-3   |
|      | 8  | 苯并[k]荧蒽       | Benzo[k]fluoranthene            | 207-08-9  |
|      | 9  | 苯并(a)芘        | Benzo[a]pyrene                  | 50-32-8   |
|      | 10 | 茚并(1,2,3-CD)比 | Indeno(1,2,3-cd)pyrene          | 193-39-5  |
|      | 11 | 苯并(g,h,i)芘    | Benzo[ghi]perylene              | 191-24-2  |
|      | 12 | 苊烯            | Acenaphthylene                  | 208-96-8  |
|      | 13 | 荧蒽            | Fluoranthene                    | 206-44-0  |
|      | 14 | 1,2,5,6-二苯并萘  | Chrysene                        | 218-01-9  |
|      | 15 | 苯并(B)荧蒽       | Benzo[b]fluoranthene            | 205-99-2  |
|      | 16 | 二苯并蒽          | Dibenzanthracene                | 414-29-9  |
|      | 17 | 茈             | Perylene                        | 198-55-0  |
|      | 18 | 苯并[E]芘        | Benzo[e]pyrene                  | 192-97-2  |
|      | 19 | 地托咪定          | Benzo[b]naphtho[2,1-d]thiophene | 239-35-0  |
|      | 20 | 苯并[ghi]荧蒽     | Benzo[ghi]fluoranthene          | 203-12-3  |

| 类别     | 序号 | 中文名          | 英文名                            | CAS.       |
|--------|----|--------------|--------------------------------|------------|
| 甲基多环芳烃 | 21 | 环戊烯(C,D)芘    | Cyclopenteno[cd]pyrene         | 27208-37-3 |
|        | 22 | 苯并菲          | Triphenylene                   | 217-59-4   |
|        | 23 | 苯并[j]荧蒽      | Benzo[j]fluoranthene           | 205-82-3   |
|        | 24 | 二苯并[cd,jk]芘  | Anthanthrene                   | 191-26-4   |
|        | 25 | 六苯并苯         | Coronene                       | 191-07-1   |
|        | 26 | 苯并芴          | Benzo[a]fluorene               | 238-84-6   |
|        | 27 | 7,12-二甲基苯并蒽  | 7,12-Dimethylbenz[a]anthracene | 57-97-6    |
|        | 28 | 3-甲基胆蒽       | 3-Methylcholanthrene           | 56-49-5    |
|        | 1  | 1-甲基萘        | 1-Methylnaphthalene            | 90-12-0    |
|        | 2  | 2-甲基萘        | 2-Methylnaphthalene            | 91-57-6    |
|        | 3  | 1,3-二甲基萘     | 1,3-Dimethylnaphthalene        | 575-41-7   |
|        | 4  | 1,4-二甲基萘     | 1,4-Dimethylnaphthalene        | 571-58-4   |
|        | 5  | 1,7-二甲基萘     | 1,7-Dimethylnaphthalene        | 575-37-1   |
|        | 6  | 2,6-二甲基萘     | 2,6-Dimethylnaphthalene        | 581-42-0   |
|        | 7  | 2,7-二甲基萘     | 2,7-Dimethylnaphthalene        | 582-16-1   |
|        | 8  | 2,3,5-三甲基萘   | 2,3,5-Trimethylnaphthalene     | 2245-38-7  |
|        | 9  | 1,4,6,7-四甲基萘 | 1,4,6,7-Tetramethylnaphthalene | 13764-18-6 |
|        | 10 | 2-异丙基萘       | 2-Isopropylnaphthalene         | 2027-17-0  |
|        | 11 | 1-甲基芴        | 1-Methylfluorene               | 1730-37-6  |
|        | 12 | 9-甲基-9H-芴    | 9-Methylfluorene               | 2523-37-7  |
|        | 13 | 二苯并噻吩        | Dibenzothiophene               | 132-65-0   |
|        | 14 | 4-甲基二苯并噻吩    | 4-Methyldibenzothiophene       | 7372-88-5  |
|        | 15 | 2,8-二甲基二苯并噻吩 | 2,8-Dimethyldibenzothiophene   | 1207-15-4  |
|        | 16 | 1-甲基菲        | 1-Methylphenanthrene           | 832-69-9   |
|        | 17 | 2-甲基菲        | 2-Methylphenanthrene           | 2531-84-2  |
|        | 18 | 3-甲基菲        | 3-Methylphenanthrene           | 832-71-3   |
|        | 19 | 9-甲基菲        | 9-Methylphenanthrene           | 883-20-5   |
|        | 20 | 1-甲基荧蒽       | 1-Methylfluoranthene           | 25889-60-5 |
|        | 21 | 薏烯           | Retene                         | 483-65-8   |
|        | 22 | 1-甲基䓛        | 1-Methylchrysene               | 3351-28-8  |
|        | 23 | 2-甲基䓛        | 2-Methylchrysene               | 3351-32-4  |
|        | 24 | 甲基萘          | Methylnaphthalene              | 1321-94-4  |

| 类别     | 序号 | 中文名          | 英文名                            | CAS.        |
|--------|----|--------------|--------------------------------|-------------|
| 氯代多环芳烃 | 1  | 2,7-二氯芴      | 2,7-Dichlorofluorene           | 7012-16-0   |
|        | 2  | 9-氯-9-H-芴    | 9-Chlorofluorene               | 6630-65-5   |
|        | 3  | 9-氯代菲        | 9-Chlorophenanthrene           | 947-72-8    |
|        | 4  | 2-氯菲         | 2-Chlorophenanthrene           | 24423-11-8  |
|        | 5  | 9,10-二氯代菲    | 9,10-Dichlorophenanthrene      | 17219-94-2  |
|        | 6  | 1-氯蒽         | 1-Chloroanthracene             | 4985-70-0   |
|        | 7  | 2-氯蒽         | 2-Chloroanthracene             | 17135-78-3  |
|        | 8  | 9-氯蒽         | 9-Chloroanthracene             | 716-53-0    |
|        | 9  | 1,5-二氯蒽      | 1,5-Dichloroanthracene         | 6406-96-8   |
|        | 10 | 9,10-二氯蒽     | 9,10-Dichloroanthracene        | 605-48-1    |
|        | 11 | 1,5,9,10-四氯蒽 | 1,5,9,10-Tetrachloroanthracene | 82843-47-8  |
|        | 12 | 3-氯荧蒽        | 3-Chlorofluoranthene           | 25911-51-7  |
|        | 13 | 3,8-二氯荧蒽     | 3,8-Dichlorofluoranthene       | 25911-52-8  |
|        | 14 | 1-氯芘         | 1-Chloropyrene                 | 34244-14-9  |
|        | 15 | 7-氯苯并[a]蒽    | 7-Chlorobenz[a]anthracene      | 20268-52-4  |
|        | 16 | 6-氯苯并[a]芘    | 6-Chlorobenzo[a]pyrene         | 21248-01-1  |
|        | 17 | 2-氯芴         | 2-Chlorofluorene               | 2523-44-6   |
|        | 18 | 4-氯菲         | 4-Chlorophenanthrene           | 24079-43-4  |
|        | 19 | 1,8-二氯蒽      | 1,8-Dichloro-anthracene        | 14381-66-9  |
|        | 20 | 8-氯荧蒽        | 8-Chlorofluoranthene           | 145730-31-0 |
|        | 21 | 1-氯芘         | 1-Chloropyrene                 | 34244-14-9  |
|        | 22 | 7-氯苯并[a]蒽    | 7-Chlorobenz(a)anthracene      | 20268-52-4  |
|        | 23 | 6-氯苯并[a]芘    | 6-Chlorobenz(a)pyrene          | 21248-01-1  |
| 溴代多环芳烃 | 1  | 5-溴苊         | 5-Bromoacenaphthene            | 2051-98-1   |
|        | 2  | 2-溴芴         | 2-Bromofluorene                | 1133-80-8   |
|        | 3  | 1,2-二溴苊      | 1,2-Dibromoacenaphthylene      | 14209-08-6  |
|        | 4  | 3-溴菲         | 3-Bromophenanthrene            | 715-50-4    |
|        | 5  | 9-溴菲         | 9-Bromophenanthrene            | 573-17-1    |
|        | 6  | 2-溴菲         | 2-Bromophenanthrene            | 62162-97-4  |
|        | 7  | 1-溴蒽         | 1-Bromoanthracene              | 7397-92-4   |
|        | 8  | 9-溴蒽         | 9-Bromoanthracene              | 1564-64-3   |
|        | 9  | 2,7-二溴芴      | 2,7-Dibromofluorene            | 16433-88-8  |
|        | 10 | 3-溴荧蒽        | 3-Bromofluoranthrene           | 13438-50-1  |

| 类别     | 序号 | 中文名            | 英文名                          | CAS.        |
|--------|----|----------------|------------------------------|-------------|
| 硝基多环芳烃 | 11 | 1,8-二溴蒽        | 1,8-Dibromoanthracene        | 131276-24-9 |
|        | 12 | 9,10-二溴蒽       | 9,10-Dibromoanthracene       | 523-27-3    |
|        | 13 | 9,10-二溴菲       | 9,10-Dibromophenanthrene     | 15810-15-8  |
|        | 14 | 4-溴芘           | 4-Bromopyrene                | 1732-26-9   |
|        | 15 | 1-溴芘           | 1-Bromopyrene                | 1714-29-0   |
|        | 16 | 7-溴苯并[a]蒽      | 7-Bromobenz[a]anthracene     | 32795-84-9  |
|        | 17 | 1,6-二溴芘        | 1,6-Dibromopyrene            | 27973-29-1  |
|        | 1  | 1-硝基萘          | 1-Nitro-naphthalene          | 86-57-7     |
|        | 2  | 2-硝基萘          | 2-Nitro-naphthalene          | 581-89-5    |
|        | 3  | 5-硝基苊          | 5-Nitro-acenaphthene         | 602-87-9    |
|        | 4  | 2-硝基芴          | 2-Nitro-fluorene             | 607-57-8    |
|        | 5  | 9-硝基蒽          | 9-Nitro-anthracene           | 602-60-8    |
|        | 6  | 9-硝基菲          | 9-Nitro-phenanthrene         | 954-46-1    |
|        | 7  | 3-硝基菲          | 3-Nitro-phenanthrene         | 17024-19-0  |
| 含氧多环芳烃 | 8  | 3-硝基荧蒽         | 3-Nitro-fluoranthene         | 892-21-7    |
|        | 9  | 1-硝基芘          | 1-nitro-pyrene               | 5522-43-0   |
|        | 10 | 7-硝基苯[A]蒽      | 7-Nitro-benzo[a]anthracene   | 20268-51-3  |
|        | 11 | 6-硝基联苯         | 6-Nitro-chrysene             | 7496-02-8   |
|        | 12 | 6-硝基苯[a]嵌二萘    | 6-Nitro-benzo[a]pyrene       | 63041-90-7  |
|        | 13 | 2-硝基荧蒽         | 2-Nitrofluoranthene          | 954-46-1    |
|        | 14 | 2-硝基芘          | 2-Nitropyrene                | 5522-43-0   |
|        | 1  | 1,4-萘醌         | 1,4-Naphthoquinone           | 130-15-4    |
|        | 2  | 1-苊酮           | 1-Acenaphthenone             | 2235-15-6   |
| 杂环芳烃   | 3  | 9-芴酮           | 9-Fluorenone                 | 486-25-9    |
|        | 4  | 1,2-苊醌         | 1,2-Acenaphthalenedione      | 82-86-0     |
|        | 5  | 6H-苯并[cd]芘-6-酮 | 6H-Benzo[cd]pyren-6-one      | 3074-00-8   |
|        | 6  | 9,10-菲醌        | 9,10-Phenanthrenequinone     | 84-11-7     |
|        | 7  | 苯并[a]蒽-7,12-二酮 | Benz(a)anthracene-7,12-dione | 2498-66-0   |
|        | 8  | 苯并蒽酮           | Benzanthrone                 | 82-05-3     |
|        | 9  | 蒽醌             | Anthraquinone                | 84-65-1     |
|        | 1  | 喹啉             | Quinoline                    | 91-22-5     |
|        | 2  | 2-甲基喹啉         | 2-Methyl quinoline           | 91-63-4     |
|        | 3  | 3-甲基喹啉         | 3-Methyl quinoline           | 612-58-8    |
|        | 4  | 7-甲基喹啉         | 7-Methyl quinoline           | 612-60-2    |

| 类别 | 序号 | 中文名           | 英文名                          | CAS.       |
|----|----|---------------|------------------------------|------------|
|    | 5  | 2,4-二甲基喹啉     | 2,4-Dimethyl quinoline       | 1198-37-4  |
|    | 6  | 2,5-二甲基喹啉     | 2,5-Dimethyl quinoline       | 26190-82-9 |
|    | 7  | 7-乙基喹啉        | 7-Ethyl quinoline            | 7661-47-4  |
|    | 8  | 异喹啉           | Isoquinoline                 | 119-65-3   |
|    | 9  | 1-甲基异喹啉       | 1-Methylisoquinoline         | 1721-93-3  |
|    | 10 | 3-甲基异喹啉       | 3-Methylisoquinoline         | 1125-80-0  |
|    | 11 | 5-氨基异喹啉       | 5-Aminoisoquinoline          | 1125-60-6  |
|    | 12 | 8-苯基喹啉        | 8-Phenylquinoline            | 605-04-9   |
|    | 13 | 苯并[f]喹啉       | Benzo[f]quinoline            | 85-02-9    |
|    | 14 | 苯并[H]异喹啉      | Benzo[h]quinoline            | 229-71-0   |
|    | 15 | 噻吩            | Thiophene                    | 110-02-1   |
|    | 16 | 苯胺            | Aniline                      | 62-53-3    |
|    | 17 | 联苯胺           | Benzidine                    | 92-87-5    |
|    | 18 | 吲哚            | Indole                       | 120-72-9   |
|    | 19 | 吡啶            | Pyridine                     | 110-86-1   |
|    | 20 | 咔唑            | Carbazole                    | 86-74-8    |
|    | 21 | 氧茚            | Benzofuran                   | 271-89-6   |
|    | 22 | 二苯并呋喃         | Dibenzofuran                 | 132-64-9   |
|    | 23 | 吖啶            | Acridine                     | 260-94-6   |
|    | 24 | 7-甲基吲哚        | 7-Methyl-1H-indole           | 933-67-5   |
|    | 25 | 2-甲基吡啶        | 2-Methylpyridine             | 109-06-8   |
|    | 26 | 咔唑            | Carbazole                    | 86-74-8    |
|    | 27 | 2,5-二苯基呋喃     | 2,5-Diphenyl furan           | 955-83-9   |
|    | 28 | 1-萘胺          | Naphthylamine                | 134-32-7   |
|    | 29 | 1,4-二甲基-9H-咔唑 | 1,4-Dimethylcarbazole        | 18028-55-2 |
|    | 30 | 1,8-二甲基咔唑     | 1,8-Dimethylcarbazole        | 6558-83-4  |
|    | 31 | 2,8-二甲基二苯并噻吩  | 2,8-Dimethyldibenzothiophene | 1207-15-4  |
|    | 32 | 2-硝基双苯并噻吩     | 2-Nitrodibenzothiophene      | 6639-36-7  |
|    | 33 | 3-甲基咔唑        | 3-Methylcarbazole            | 4630-20-0  |
|    | 34 | 3-甲基二苯并噻吩     | 3-Methyldibenzothiophene     | 16587-52-3 |
|    | 35 | 4,6-二甲基二苯并噻吩  | 4,6-Dimethyldibenzothiophene | 1207-12-1  |
|    | 36 | 4-甲基二苯并呋喃     | 4-Methyldibenzofuran         | 7320-53-8  |

| 类别     | 序号 | 中文名         | 英文名                          | CAS.       |
|--------|----|-------------|------------------------------|------------|
|        | 37 | 4-甲基二苯并噻吩   | 4-Methyldibenzothiophene     | 7372-88-5  |
|        | 38 | 5,6-苯并喹啉    | 5,6-Benzoquinoline           | 85-02-9    |
|        | 39 | 二苯并噻吩       | Dibenzothiophene             | 132-65-0   |
| 羟基多环芳烃 | 1  | 1-萘酚        | 1-Hydroxynaphthalene         | 90-15-3    |
|        | 2  | 2-萘酚        | 2-Hydroxynaphthalene         | 135-19-3   |
|        | 3  | 9-羟基芴       | 9-Hydroxyfluorene            | 1689-64-1  |
|        | 4  | 3-羟基芴       | 3-Hydroxyfluorene            | 6344-67-8  |
|        | 5  | 2-羟基芴       | 2-Hydroxyfluorene            | 2443-58-5  |
|        | 6  | 4-羟基菲       | 4-Hydroxyphenanthrene        | 7651-86-7  |
|        | 7  | 9-羟基菲       | 9-Hydroxyphenanthrene        | 484-17-3   |
|        | 8  | 3-羟基菲       | 3-Hydroxyphenanthrene        | 605-87-8   |
|        | 9  | 1-羟基菲       | 1-Hydroxyphenanthrene        | 2433-56-9  |
|        | 10 | 2-羟基菲       | 2-Hydroxyphenanthrene        | 605-55-0   |
|        | 11 | 3-羟基荧蒽      | 3-Hydroxyfluoranthene        | 17798-09-3 |
|        | 12 | 1-羟基芘       | 1-Hydroxypyrene              | 5315-79-7  |
|        | 13 | 1,,2-二羟基芘   | 1,2-Dihydroxypyrene          |            |
|        | 14 | 1-羟基苯并(a)蒽  | 1-Hydroxybenzo[a]anthracene  | 69847-26-3 |
|        | 15 | 3-羟基苯并(a)蒽  | 3-Hydroxybenzo[a]anthracene  | 483435-9   |
|        | 16 | 苯并[I]芘-4-醇  | 4-Hydroxybenzo[a]anthracene  | 37574-48-4 |
|        | 17 | 5-羟基苯并[a]蒽  | 5-Hydroxybenzo[a]anthracene  | 960-92-9   |
|        | 18 | 8-羟基苯并[a]蒽  | 8-Hydroxybenzo[a]anthracene  | 34501-23-0 |
|        | 19 | 苯并[a]蒽-11-醇 | 11-Hydroxybenzo[a]anthracene | 63019-35-2 |
|        | 20 | 1-羟基䓛       | 1-Hydroxychrysene            | 63019-38-5 |
|        | 21 | 2-羟基䓛       | 2-Hydroxychrysene            | 65945-06-4 |
|        | 22 | 3-羟基䓛       | 3-Hydroxychrysene            | 63019-39-6 |
|        | 23 | 4-羟基䓛       | 4-Hydroxychrysene            | 63019-40-9 |
|        | 24 | 6-羟基䓛       | 6-Hydroxychrysene            | 37515-51-8 |
|        | 25 | 1-羟基苯并[a]芘  | 1-Hydroxybenzo[a]pyrene      | 13345-23-8 |
|        | 26 | 2-羟基苯并[a]芘  | 2-Hydroxybenzo[a]pyrene      | 56892-30-9 |
|        | 27 | 3-羟基苯并[a]芘  | 3-Hydroxybenzo[a]pyrene      | 13345-21-6 |
|        | 28 | 4-羟基苯并[a]芘  | 4-Hydroxybenzo[a]pyrene      | 28318-40-3 |
|        | 29 | 5-羟基苯并[a]芘  | 5-Hydroxybenzo[a]pyrene      | 24027-84-7 |
|        | 30 | 6-羟基苯并[a]芘  | 6-Hydroxybenzo[a]pyrene      | 33953-73-0 |

| 类别             | 序号 | 中文名                               | 英文名  | CAS.        |
|----------------|----|-----------------------------------|--|-------------|
| 多环芳烃<br>衍生物代谢物 | 31 | 7-羟基苯并[a]芘                        | 7-Hydroxybenzo[a]pyrene                            | 37994-82-4  |
|                | 32 | 8-羟基苯并[a]芘                        | 8-Hydroxybenzo[a]pyrene                            | 13345-26-1  |
|                | 33 | 9-羟基苯并[a]芘                        | 9-Hydroxybenzo[a]pyrene                            | 17573-21-6  |
|                | 34 | 10-羟基苯并[a]芘                       | 10-Hydroxybenzo[a]pyrene                           | 56892-31-0  |
|                | 35 | 11-羟基苯并[a]芘                       | 11-Hydroxybenzo[a]pyrene                           | 56892-32-1  |
|                | 36 | 12-羟基苯并[a]芘                       | 12-Hydroxybenzo[a]pyrene                           | 56892-33-2  |
|                | 37 | 羟基苯并[b]荧蒽                         | 1-Hydroxybenzo[b]fluoranthene                      | 100516-03-8 |
| VOCs 代谢物       | 1  | 2-羟基氧芴                            | 2-Hydroxydibenzofuran                              | 86-77-1     |
|                | 2  | 3-羟基咔唑                            | 3-Hydroxycarbazole                                 | 7384-07-8   |
|                | 3  | 5-羟基异喹啉                           | 5-Hydroxyisoquinoline                              | 2439-04-5   |
|                | 4  | 4-硝基-1-萘酚                         | 4-Nitro-1-Naphthol                                 | 605-62-9    |
| VOCs 代谢物       | 1  | S-苯汞基酸                            | N-Acetyl-S-(phenyl)-l-cysteine                     | 4775-80-8   |
|                | 2  | 反式,反式-1,3-丁二烯-1,4-二羧酸             | Trans, trans-Muconic acid                          | 3588-17-8   |
|                | 3  | 邻苯二酚                              | 1,2-Dihydroxybenzene                               | 120-80-9    |
|                | 4  | 苯甲酰甲酸                             | Phenylglyoxylic acid                               | 611-73-4    |
|                | 5  | D-扁桃酸                             | Mandelic acid                                      | 611-71-2    |
|                | 6  | N-乙酰基卞基半胱氨酸                       | N-Acetyl-S-(benzyl)-l-cysteine                     | 19542-77-9  |
|                | 7  | N-乙酰基-S-(2,4 - 二甲基苯)-L-半胱氨酸       | N-Acetyl-S-(2,4/2,5/3,4-dimethylphenyl)-l-cysteine | 581076-69-9 |
|                | 8  | 2-甲基马尿酸                           | 2-Methylhippuric acid                              | 42013-20-7  |
|                | 9  | 3-甲基马尿酸                           | 3-Methylhippuric acid                              | 27115-49-7  |
|                | 10 | 4-甲基马尿酸                           | 4-Methylhippuric acid                              | 27115-50-0  |
|                | 11 | N-乙酰基-S- (2-羟乙基) -L-半胱氨酸          | N-Acetyl-S-(2-hydroxyethyl)-l-cysteine             | 15060-26-1  |
|                | 12 | 硫代二乙酸                             | Thiodiglycolic acid                                | 123-93-3    |
|                | 13 | N-乙酰-S-(3,4-二羟基丁基)-L-半胱氨酸         | N-Acetyl-S-(3,4-dihydroxybutyl)-l-cysteine         | 144889-50-9 |
|                | 14 | N-乙酰基-S- (4-羟基-2-丁烯-1-基) - L-半胱氨酸 | N-Acetyl-S-(1-hydroxymethyl-2-propenyl)-l-cysteine | 159092-65-6 |
|                | 15 | (2R)-2-乙酰氨基-3-(1,2,2-三氯乙烯基硫基)丙酸   | N-Acetyl-S-(trichlorovinyl)-l-cysteine             | 111348-61-9 |

| 类别 | 序号 | 中文名                               | 英文名  | CAS.        |
|----|----|-----------------------------------|--|-------------|
|    | 16 | (2R)-2-乙酰氨基-3-[(Z)-1,2-二氯乙烯基]硫基丙酸 | N-Acetyl-S-(1,2-dichlorovinyl)-l-cysteine  | 2148-31-4   |
|    | 17 | (2R)-2-乙酰氨基-3-(2,2-二氯乙烯基硫基)丙酸     | N-Acetyl-S-(2,2-dichlorovinyl)-l-cysteine  | 126543-43-9 |
|    | 18 | N-乙酰基-S-(N-甲基氨基甲酰基)-L-半胱氨酸        | N-Acetyl-S-(N-methylcarbamoyl)-L-cysteine  | 103974-29-4 |
|    | 19 | N-乙酰-S-(2-氰乙基)-L-2-氨基-3-巯基丙酸      | N-Acetyl-S-(2-cyanoethyl)-L-cysteine       | 74514-75-3  |
|    | 20 | 2-苯基丙酸                            | (±)-2-Phenylpropanoic acid                 | 492-37-5    |
|    | 21 | 2,5-二氯苯酚                          | 2,5-Dichlorophenol                         | 583-78-8    |
|    | 22 | N-乙酰基苄基半胱氨酸                       | N-Acetyl-S-(benzyl)-L-cysteine             | 19542-77-9  |
|    | 23 | 3,5-二氯苯酚                          | 3,5-Dichlorophenol                         | 591-35-5    |
|    | 24 | 3,4-二氯苯酚                          | 3,4-Dichlorophenol                         | 95-77-2     |
|    | 25 | 2-噻氧噻唑烷-4-羧酸                      | (R)-2-Thioxothiazolidine-4-carboxylic acid | 20933-67-9  |
|    | 26 | 2-氨基-2-噻唑啉-4-羧酸                   | rac 2-Aminothiazoline-4-carboxylic acid    | 2150-55-2   |
|    | 27 | 4-氯邻苯二酚                           | 4-Chlorocatechol                           | 2138-22-9   |

附录 C  
(资料性)  
炼焦化学污染场地污染物分析推荐内标物

下表给出了炼焦化学污染场地污染物分析推荐内标物。

表 C.1 炼焦化学污染场地污染物分析推荐内标物

| 类别             | 中文名                                    | 英文名   | 缩写                                      | CAS         |
|----------------|--|---|---|-------------|
| PAHs 内标        | 萘-d <sub>8</sub>                       | Naphthalene-d <sub>8</sub>                              | Nap-d <sub>8</sub>                      | 211439-12-2 |
|                | 苊-d <sub>10</sub>                      | Acenaphthene-d <sub>10</sub>                            | Acp-d <sub>10</sub>                     | 15067-26-2  |
|                | 菲-d <sub>10</sub>                      | Phenanthrene-d <sub>10</sub>                            | Phe-d <sub>10</sub>                     | 1517-22-2   |
|                | 蒽-d <sub>12</sub>                      | Chrysene-d <sub>12</sub>                                | Chr-d <sub>12</sub>                     | 1719-03-5   |
|                | 芘-d <sub>12</sub>                      | Perylene-d <sub>12</sub>                                | Per-d <sub>12</sub>                     | 1520-96-3   |
| PAHs 衍生物<br>内标 | 2-硝基芴-d <sub>9</sub>                   | 2-Nitrofluorene-d <sub>9</sub>                          | Nflu-d <sub>9</sub>                     | 128008-87-7 |
|                | 3-硝基荧蒽-d <sub>9</sub>                  | 3-Nitrofluoranthene-d <sub>9</sub>                      | Nfla-d <sub>9</sub>                     | 350820-11-0 |
|                | 蒽醌-d <sub>8</sub>                      | Anthraquinone-d <sub>8</sub>                            | Anqun-d <sub>8</sub>                    | 10439-39-1  |
|                | 异喹啉-d <sub>7</sub>                     | Isoquinoline-d <sub>7</sub>                             | Isoq μ L-d <sub>7</sub>                 | 17157-12-9  |
|                | 1-硝基萘-d <sub>7</sub>                   | 1-Nitronaphthalene-d <sub>7</sub>                       | 1-Nnap-d <sub>7</sub>                   | 80789-77-1  |
|                | 9-芴酮-d <sub>8</sub>                    | 9-Fluorenone-d <sub>8</sub>                             | 9-Flr-d <sub>8</sub>                    | 137219-34-2 |
|                | 1-硝基芘-d <sub>9</sub>                   | 1-Nitropyrene-d <sub>9</sub>                            | 1-Npyr-d <sub>9</sub>                   | 93487-20-8  |
| PAHs 代谢物<br>内标 | 2-羟基萘-d <sub>7</sub>                   | 2-Hydroxy-Naphthalene-d <sub>7</sub>                    | 2-OH-Nap-d <sub>7</sub>                 | 135-19-3    |
|                | 2-羟基芴-d <sub>9</sub>                   | 2-Hydroxy-Fluorene-d <sub>9</sub>                       | 2-OH-Flu-d <sub>9</sub>                 | 2443-58-5   |
|                | 3-羟基菲-13C <sub>12</sub>                | 3-Hydroxy-Phenanthrene- <sup>13</sup> C <sub>12</sub>   | 3-OH-Phe- <sub>13</sub> C <sub>12</sub> | 605-87-8    |
|                | 1-羟基芘-d <sub>9</sub>                   | 1-Hydroxy-Pyrene-d <sub>9</sub>                         | 1-OH-Pyr- d <sub>9</sub>                | 5315-79-7   |
| VOCs 内标        | 氟苯                                     | Fluorobenzene   | Frb                                     | 462-06-6    |
|                | 4-溴氟苯                                  | 4-Bromofluorobenzene                                    | 4-Bflb                                  | 460-00-4    |
|                | 1,2-二氯苯-d <sub>4</sub>                 | 1,2- Dichlorobenzene -d <sub>4</sub>                    | 1,2-Dcb-d <sub>4</sub>                  | 2199-69-1   |
|                | 1,4-二氟苯                                | 1,4-Difluorobenzene                                     | 1,4-Dflb                                | 540-36-4    |
|                | 氯苯-d <sub>5</sub>                      | chlorobenzene-d <sub>5</sub>                            | Cb-d <sub>5</sub>                       | 3114-55-4   |
| VOCs 代谢物<br>内标 | N-乙酰-S-(2-甲氨酰乙基)-L-半胱氨酸-d <sub>4</sub> | N-Acetyl-S-(2-carbamoylethyl)-L-cysteine-d <sub>4</sub> | AAMA-d <sub>4</sub>                     | 81690-92-8  |
|                | 苯甲酰甲酸-d <sub>5</sub>                   | Phenylglyoxylic acid-d <sub>5</sub>                     | PGA-d <sub>5</sub>                      | 611-73-4    |
|                | N-乙酰-S-丙基-L-半胱氨酸-d <sub>7</sub>        | N-Acetyl-S-propyl-L-cysteine--d <sub>7</sub>            | BPMA-d <sub>7</sub>                     | 14402-54-1  |
|                | N-乙酰-S-苯基-L-半胱氨酸-d <sub>5</sub>        | N-Acetyl-S-(phenyl)-l-cysteine-d <sub>5</sub>           | PMA-d <sub>5</sub>                      | 4775-80-8   |