

基于地下水污染风险的优先控制活性药物成分识别

王子涵¹, 吕慧茹¹, 吴林^{1,2,3,4}, 刘中培^{1,2,3}, 李亚松⁴

(1.华北水利水电大学, 河南郑州 450046; 2.河南省黄河流域水资源节约集约利用重点实验室, 河南郑州 450046; 3.自然资源部黄河流域中下游水土资源保护与修复重点实验室, 河南郑州 450046; 4.中国地质科学院水文地质环境地质研究所, 福建省水循环与生态地质过程重点实验室, 福建厦门 361021)

摘要:【目的】对淋溶迁移过程中具有高地下水污染风险的活性药物成分 (APIs) 进行识别, 并对其在不同 pH 条件下的迁移潜力进行评估。【方法】综合采用地下水污染指数 (GUS) 法、淋溶性控制指数 (LIX) 法、全球淋溶性指数 (GLI) 法三种淋溶迁移性评价方法构建评分体系, 预测和评价了 59 种具有不同解离性质的 APIs 在 pH5.0、7.0、9.0 条件下通过淋溶迁移引起的地下水污染风险, 识别出需要优先控制的 APIs。【结果】pH 降低会增强 APIs 的淋溶迁移性, 在 pH5.0、7.0、9.0 的条件下分别有 30%、25%、17% 的 APIs 被识别为高地下水污染风险。环丙沙星、恩诺沙星、林可霉素、土霉素、氟康唑、二甲双胍、阿替洛尔、西咪替丁八种药物在三种评价方法下均具有高地下水污染风险, 需要优先控制。吸附性和疏水性差异是同类 APIs 评估结果分异的主因。高风险 APIs 在地下水中的检出率也更高, 表明评价结果具有一定的合理性。【结论】研究所建立的地下水系统 APIs 污染风险评价方法, 弥补了传统方法在预测不同解离性质 APIs 环境迁移行为方面的不足, 可为水体中新污染物的精准识别与优先管控提供更为科学、有效技术支撑与决策依据。

关键词:活性药物成分;地下水系统;淋溶迁移性;优控污染物;检出率

中图分类号:X523

文献标识码:A

活性药物成分 (Active Pharmaceutical Ingredients, APIs) 已被纳入环境监管体系, 但其仍可能在生产、使用和处置过程中被人为排放到自然环境中^[1]。APIs 在多种环境介质中普遍存在, 包括污水处理厂^[2,3]、垃圾填埋场^[4]、垃圾焚烧厂^[5-7]、地表水^[5,8-10]、沉积物^[10,11]、土壤^[12]、地下水^[13]甚至饮用水^[14]。其残留物及代谢产物不仅会通过废水处理厂排放以及垃圾填埋场渗滤等多种途径迁移扩散^[15], 还可能通过淋溶迁移过程进入地下水系统并造成污染风险^[16], 但其影响尚未被充分探究^[17]。根据研究表明, APIs 在地下环境中的归宿和迁移行为主要受其理化性质、污染源和环境条件的综合影响^[18]。此外, APIs 的持续排放不仅会对地下水系统造成不利影响, 还可能对人体健康构成潜在威胁^[19]。

当前, 地下水污染已成为水资源管理部门必须面临的重大问题之一^[20], 地下水环境中有机污染物的调查与生态风险评估也成为国内外环境科学领域的研究热点^[21]。近年来, 中国相继实施大气、水、土壤污染防治三大行动计划, 在常规污染物控制方面取得显著成效, 但许多 APIs 尚未被纳入环境管理且未能有效管理, 特别是针对地下水中的 APIs 的调查研究极为有限。面对如此庞杂的污染物种类, 若对每种污染物均实施全面监测与治理, 不仅需要耗费巨大的资源与人力成本, 且在实践层面难以实现, 因此识别优先控制 APIs 至关重要。

APIs 通常具有不同的解离性质, 不同价态 (分子态、阴离子态、阳离子态和兼性离子态) 的 APIs 在环境介质上的吸附能力存在很大差异

收稿日期/Received:2025-07-25

修回日期/Revised:2025-08-17

基金项目: 国家自然科学基金项目 (No.41902259); 福建省水循环与生态地质过程重点实验室开放基金项目 (No.SK202305KF05); 河南省自然科学基金项目 (No.242300420226); 河南省科技攻关项目 (No.252102321116、No.242102320371); 福建省科技计划项目 (No.2024Y0054)。

第一作者: 王子涵 (2002—), 女, 硕士研究生, 从事地下水污染方面的研究。E-mail:x20231020211@stu.ncwu.edu.cn。

通信作者: 吴林 (1991—), 男, 讲师, 博士, 主要从事地下水监测与修复方面的研究。E-mail:wulin@ncwu.edu.cn。

[22]。同时, 85%的已鉴定有机污染物在天然 pH 条件下以离子态的形式存在^[23], 且环境介质的 pH 值可影响 APIs 的价态分布, 进而影响 APIs 在环境中的吸附能力及对地下水污染的风险^[24]。李煜婷等基于污染物的健康危害性及环境效应双重评估准则, 采用综合评分法对各评价指标定量迭代计算, 获得了地下水优控污染物名单^[25]。黄福杨等基于抗生素的持久性、暴露及生物毒性等评估标准, 采用综合评估方法, 对 105 种候选抗生素进行了系统分析, 得到了优先控制抗生素清单^[26]。然而, 对于不同 pH 环境条件下具有高地下水污染风险的 APIs 的识别研究仍显不足。因此, 迫切需要采用更加科学高效的方法来研究不同环境 pH 条件下解离性质各异的 APIs 对地下水系统构成的污染风险, 识别出高地下水污染风险的 APIs。

本研究针对地下水系统中普遍检出的 59 种

APIs, 结合目前学术界广泛应用的地下水污染指数 (Groundwater Ubiquity Score, GUS) 法、淋溶性控制指数 (Leaching Index, LIX) 法、全球淋溶性指数 (Global Leaching Index, GLI) 法 3 种方法构建评分体系, 分析其在不同 pH 条件下 (5.0、7.0、9.0) 的淋溶迁移行为, 评估其对地下水的污染风险。基于风险评估结果识别出需优先控制的 APIs, 为水环境保护和新污染物风险管控提供科学依据。

1 评价目标与方法

1.1 典型活性药物成分 (APIs) 的选取

基于对国内外相关文献的系统梳理, 本研究选取地下水系统中普遍检出的抗生素类、血糖调节剂类、非甾体抗炎药、抗抑郁类、抗癫痫类、抗组胺药等 15 类 59 种 APIs^[1]作为目标污染物, 如图 1 (a) 所示。

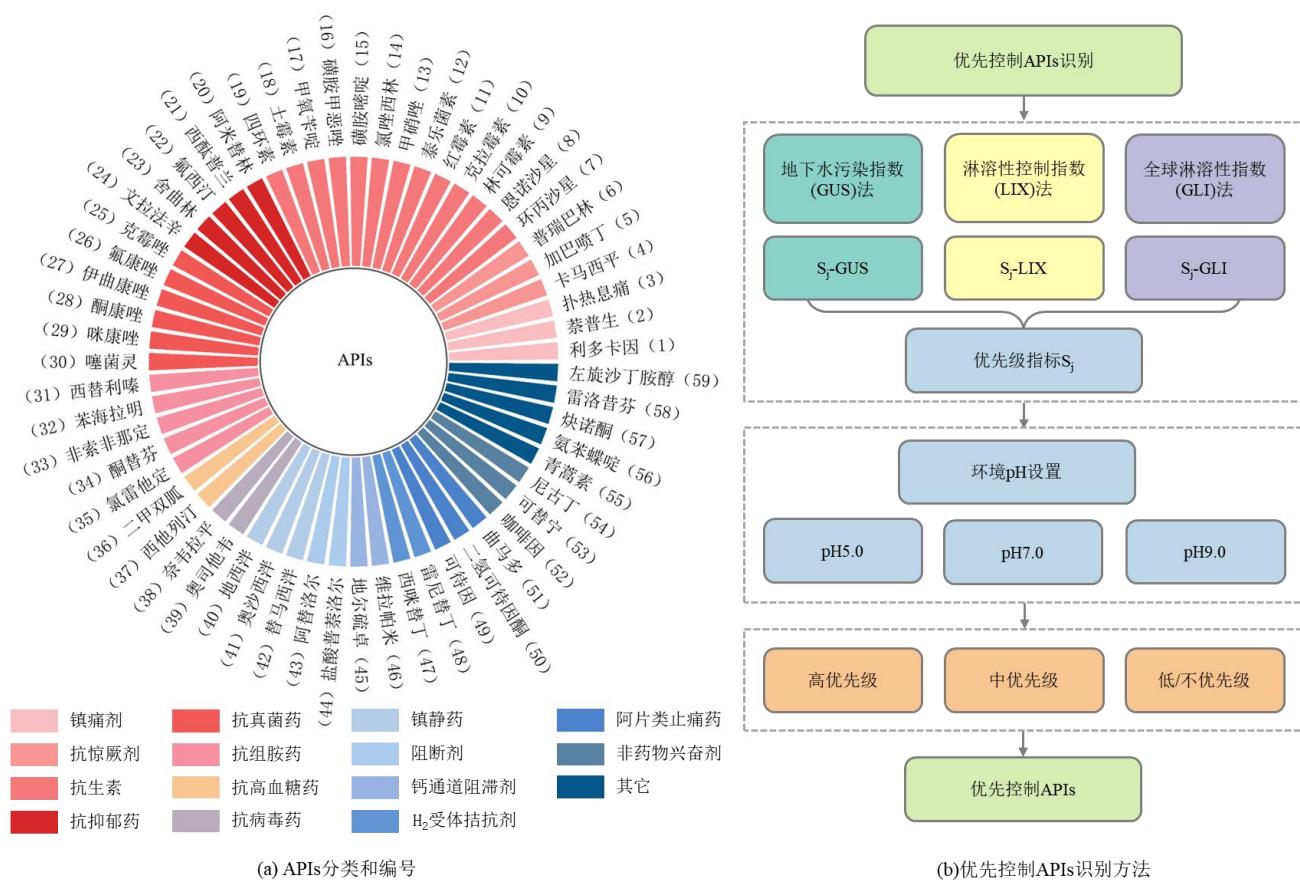


图 1 本研究选取的 APIs 分类和编号与优先控制 APIs 识别方法

Fig 1 Classification and numbering of selected APIs and priority control APIs identification method

1.2 APIs 的淋溶迁移性评价方法及优先级指标得分构成

如图 1 (b) 所示, 本研究综合采用目前国内学术界广泛选取的地下水污染指数 (Groundwater Ubiquity Score, GUS) 法^[27,28]、淋

溶性控制指数 (Leaching Index, LIX) 法^[27]、全球淋溶性指数 (Global Leaching Index, GLI) 法^[27]三种评价方法对 APIs 在地下介质中的淋溶迁移性进行分析。

GUS 的计算综合反映了影响 APIs 在沉积物

和含水层中的吸附和降解作用，因此能够合理表示 APIs 在地下系统中的淋溶迁移性及相应的地下水污染风险。其分级标准为：GUS>2.8 时，淋溶迁移性高，地下水污染风险也高^[24]；1.8≤GUS≤2.8 时，淋溶迁移性中等，地下水污染风险中等；GUS<1.8 时，淋溶迁移性低，地下水污染风险也低。

GUS 计算公式如下^[27,28]：

$$GUS = \lg T_{1/2} (4 - \lg K_{OC}) \quad (1)$$

式中： K_{OC} 为有机碳-水分配系数； $T_{1/2}$ 为 APIs 在沉积物中的半衰期。

LIX 综合反映了影响 APIs 在土壤和地下水中的溶解和迁移过程的主要因素，因此能够合理地表示污染物在地下水系统中的溶解性及其相应的淋溶迁移性。其分级标准为：LIX=1 时，淋溶迁移性高，地下水污染风险也高；0.1≤LIX<1.0 时，淋溶迁移性中等，地下水污染风险中等；0.0≤LIX<0.1 时，淋溶迁移性低，地下水污染风险也低；LIX=0.0 时，不淋溶，无地下水污染风险。

LIX 的计算公式如下^[27]：

$$LIX = \exp(-0.693/T_{1/2}K_{OC}) \quad (2)$$

式中： K_{OC} 为有机碳-水分配系数； $T_{1/2}$ 为 APIs 在沉积物中的半衰期。

GLI 综合考虑了全球范围内不同环境条件下的 APIs 淋溶行为，能够更全面地评估污染物在全球尺度下的淋溶迁移性及相应的环境风险。其分级标准为：GLI>1 时，淋溶迁移性高，地下水污染风险也高；-0.5≤GLI≤1 时，淋溶迁移性中等，地下水污染风险中等；GLI<-0.5 时，淋溶迁移性低，地下水污染风险也低。

GLI 的计算公式如下^[27]：

$$GLI = 0.579LIN + 0.558GUS + 0.595M.LEACH \quad (3)$$

$$\begin{aligned} LIN &= -0.531\lg K_{OC} + 0.518\lg S_w - 0.495\lg K_{OC} \\ &\quad - 0.023\lg V_p - 0.452\lg K_H \end{aligned} \quad (4)$$

$$M.LEACH = S_w T_{1/2} / K_{OC} \quad (5)$$

式中： S_w 为水溶性(mg/L)； V_p 为蒸气压(mmHg)； K_H 为亨利常数；LIN、M.LEACH 为淋溶指数，数值越小，渗流潜力越小。

由于这 3 种评价方法采用了不同的参数，且 GUS 侧重于吸附和降解过程，LIX 侧重于溶解性和局部尺度的迁移行为，GLI 则综合考虑了全球范围内的环境变量，综合考虑到这三种方法的差异，为了更加准确地评估 APIs 在地下介质中的淋溶迁移性，因此本研究采用 S_j 得分来评估 APIs 的优先级，先通过公式计算 S_j -GUS、 S_j -LIX 和 S_j -GLI，再将 S_j -GUS、 S_j -LIX 和 S_j -GLI 参数以相同权重使

用以下公式计算得出 S_j 得分^[8,26]：

$$S_j\text{-GUS} = \frac{GUS_j - GUS_{\min}}{GUS_{\max} - GUS_{\min}} \quad (6)$$

$$S_j\text{-LIX} = \frac{LIX_j - LIX_{\min}}{LIX_{\max} - LIX_{\min}} \quad (7)$$

$$S_j\text{-GLI} = \frac{GLI_j - GLI_{\min}}{GLI_{\max} - GLI_{\min}} \quad (8)$$

$$S_j = \frac{1}{3}(S_j\text{-GUS} + S_j\text{-LIX} + S_j\text{-GLI}) \quad (9)$$

式中： S_j 为第 j 个 APIs 的优先级综合得分； S_j -GUS、 S_j -LIX、 S_j -GLI 分别为第 j 个 APIs 的 GUS、LIX、GLI 参数的归一化值； \min 为每种方法评价结果的最小值； \max 为每种评价结果的最大值。

1.3 参数获取方法

本研究考虑到自然水体实际 pH 值范围，选取代表性酸性、中性和碱性 pH 值（5.0、7.0 和 9.0），采用由 ChemAxon 公司开发的分子建模软件 Marvin Sketch，计算出 APIs 在不同 pH 值条件下的形态分布比例及各价态对应的辛醇-水分配系数（ K_{ow} ）。基于 K_{ow} 值，进一步推导其 K_{OC} 和不同价态归一后的辛醇-水分配系数（ D_{ow} ）。由于所选 APIs 大多为可解离化合物， D_{ow} 能够综合考虑特定 pH 下所有形态（离子态和分子态）在两相（如辛醇-水体系）中的分配行为，因此选用 D_{ow} 以更准确地表征其在真实环境中的迁移与归趋趋势。

当 APIs 以分子态存在时，其分子态的 $K_{OC,n}$ 的计算公式如下^[29]：

$$\lg K_{OC,n} = 0.73 \lg K_{ow,n} + 0.52 \quad (10)$$

当 APIs 发生解离，以离子态存在时，其离子态的 $K_{OC,ion}$ 的计算公式如下^[30]：

$$\lg K_{OC,ion} = 0.52 \lg K_{ow,ion} + 1.02 \quad (11)$$

式中：下标 n 表示分子态；下标 ion 代表离子态； $K_{ow,n}$ 为分子态形态的辛醇-水分配系数； $K_{ow,ion}$ 为离子态形态的辛醇-水分配系数。

通过公式推导 APIs 在不同 pH 条件下的 K_{OC} 和 D_{ow} ：

$$K_{OC} = n \times K_{OC,n} + ion \times K_{OC,ion} \quad (12)$$

$$D_{ow} = n \times K_{ow,n} + ion \times K_{ow,ion} \quad (13)$$

式中： n 为分子态占比，%； ion 为离子态占比，%。

对于不同 APIs 的 $T_{1/2}$ 、 S_w 、 K_H 、 V_p 参数值采用由美国环保局（U.S.EPA）与美国 SRC 公司（Syracuse Research Corporation）联合开发的有机物物理化学性质及环境归宿估算软件 EPI Suite (4.11) 进行计算。

2 结果与讨论

2.1 pH 值对 APIs 淋溶迁移性的影响

pH 值变化对 APIs 淋溶迁移性的影响结果如图 2 所示。由图 2 可看出, pH 值越小, APIs 的淋溶性评价指数越大, 即当水体偏酸性时, APIs 的淋溶迁移性上升, 进而增加 APIs 进入地下水的风险, 这可能是因为酸性条件会促进 APIs 电离, 增加水溶性。在 3 种 pH 值条件下, 15 个药物种类中大部分药物的评价结果为高淋溶迁移性, 对地下水环境以及生态健康具有较大威胁^[24], 在地

下水环境调查中, 应对其予以重视。通过淋溶迁移性分析发现, 同类 APIs 评估结果差异显著, 这主要可能与其理化性质的差异有关^[24]。

在 3 种评价方法中, GLI 方法因引入蒸汽压 (V_p) 与亨利常数 (K_H) 等挥发相关参数, 对难挥发的极性 APIs 可能产生评估偏差, 导致其与 GUS、LIX 方法的评价结果存在差异。GUS 与 LIX 方法基于降解半衰期 ($T_{1/2}$) 和吸附系数 (K_{oc}), 更直接反映污染物迁移能力。本研究通过构建综合评分体系, 有效整合 3 类方法结果, 优先识别出高风险 APIs, 提升了评价结果的可靠性。

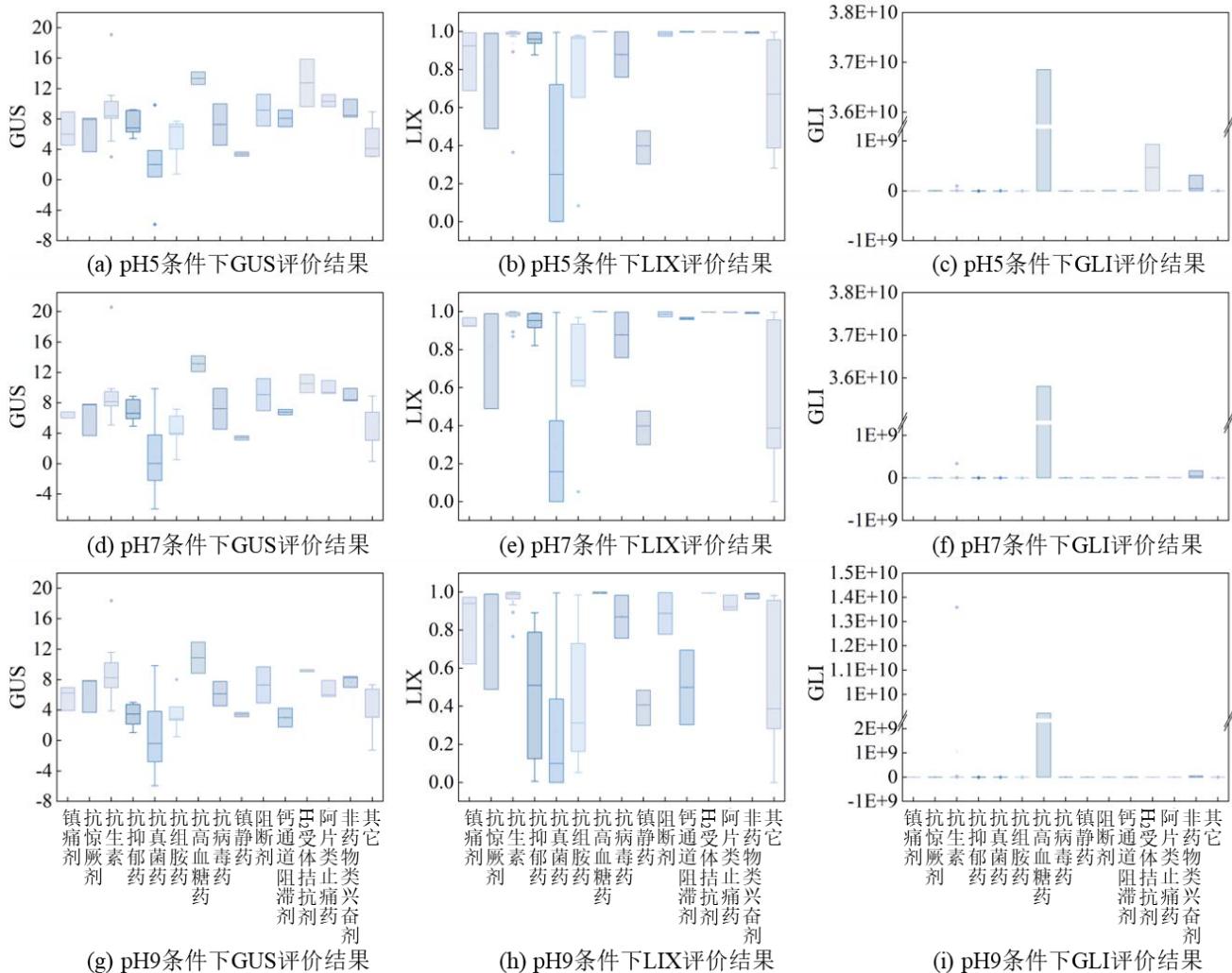


图 2 不同 pH 条件下各类活性药物成分 (APIs) 的淋溶迁移性评价结果

Fig 2 Leaching mobility of various active pharmaceutical ingredients (APIs) under different pH conditions

2.2 优先控制 APIs 识别

当 pH 为 5.0、7.0、9.0 时, 分别有 18(30%)、15(25%)、10(17%) 种 APIs 在 3 种方法下具有高淋溶迁移性 (图 3)。在 3 种 pH 值条件下, 抗生素、抗真菌药、阻断剂、H₂受体拮抗剂、抗高血糖药五个种类在 3 种方法的评价结果中均含有高淋溶迁移性的物质。评价结果显示, 有八种药物在 3

种评价方法下均具有高地下水污染风险, 需要优先控制, 包括抗生素环丙沙星、恩诺沙星、林可霉素、土霉素; 抗真菌药氟康唑; 阻断剂阿替洛尔; H₂受体拮抗剂西咪替丁; 抗高血糖药二甲双胍。由图 3 可知, 二甲双胍在 3 种 pH 条件下均有较高的优先级指标, 作为全球范围内最广泛使用的抗高血糖药物之一^[31], 其对环境具有显著的生态毒理学效应。

据研究表明,由于二甲双胍具有高亲水性和低土壤吸附特性,其在进入环境后极易迁移至水体中并长期存在,使得二甲双胍在全球多个地区的地下水水中被持续检出,在地下水监测中应多加关注^[31]。

在 3 个 pH 条件 (5.0、7.0、9.0) 下, 对 59 种 APIs 的 S_j -GUS、 S_j -LIX、 S_j -GLI 进行分析, 结果如图 4 所示。由图 4 可以看出 4 个优先级下各类别 APIs 的数量及其所占比例, 大部分种类都有高优先级药物。在 pH=5.0 条件下, GUS、LIX、GLI 的高优先级 APIs 占比分别为 93%、31%、93%;

在 pH=7.0 条件下, GUS、LIX、GLI 的高优先级 APIs 占比分别为 92%、27%、93%; 在 pH=9.0 条件下, GUS、LIX、GLI 的高优先级 APIs 占比分别 88%、17%、93%。对于每个优先级, 抗生素类在高、中、低优先级组中贡献均最大。在中等优先级中, 抗真菌类和抗组胺药是主要的 APIs。这可能是由于大部分 APIs 本身具有高亲水性、低挥发性以及较强的生物富集性等特性,会对含水层造成较大范围的污染,对地下水环境以及生态健康具有较大威胁^[22], 在实际的调查与研究中需格外关注。

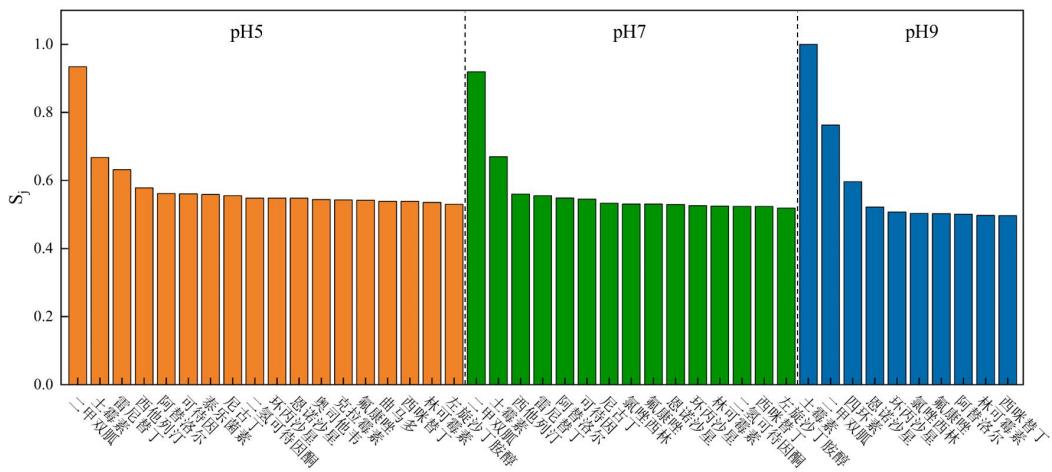
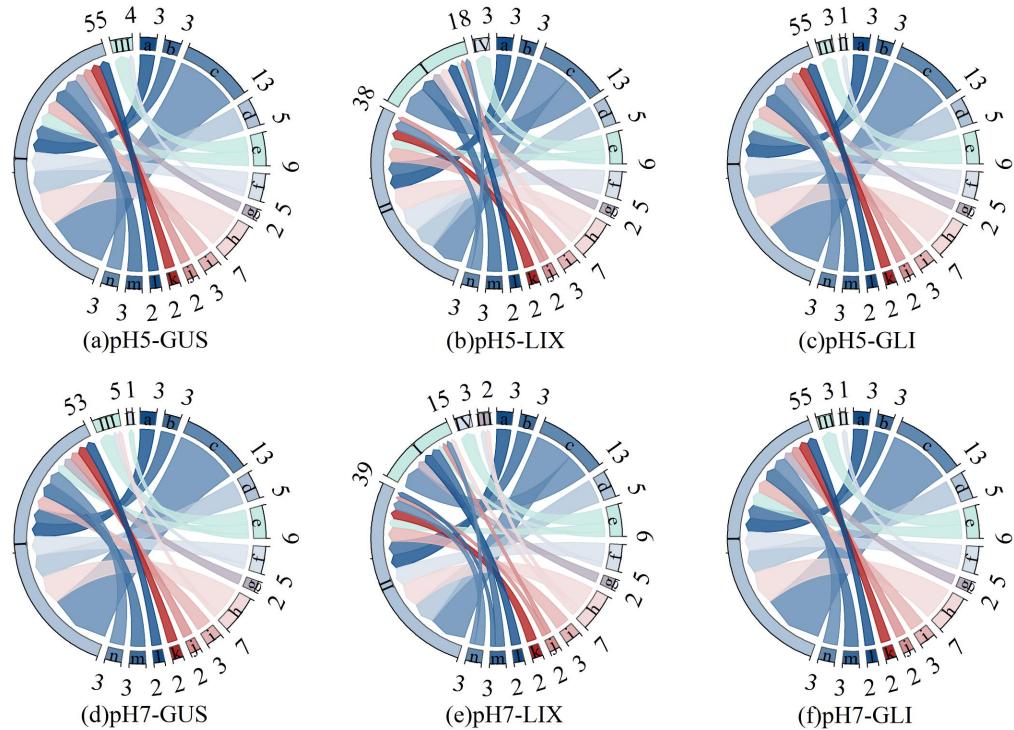
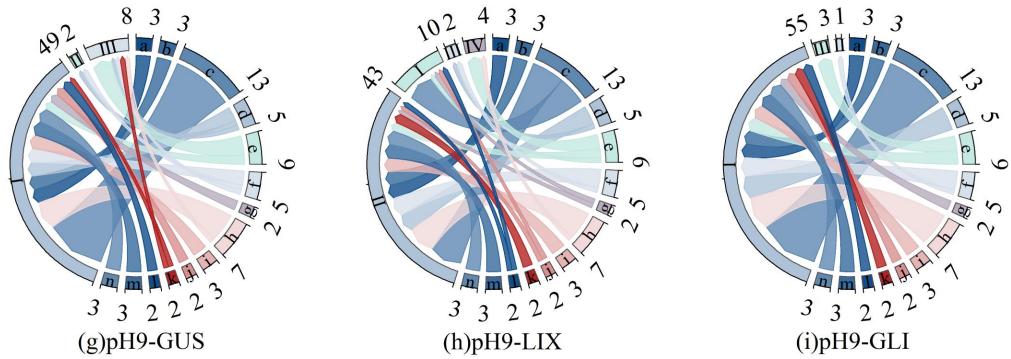


图 3 不同 pH 值条件下均具有高淋溶迁移性的 APIs 优先级指标 S_j

Fig 3 Priority index (S_j) of APIs with high leaching and migration potential under different pH conditions





a.镇痛剂 b.抗惊厥剂 c.抗生素 d.抗抑郁药 e.抗真菌药 f.抗组胺药 g.抗高血糖药 h.抗病毒药
 i. 镇静药 j.阻断剂 k.钙通道阻滞剂 l.H₂受体拮抗剂 m.阿片类止痛药 n.非药物兴奋剂 o.其它
 I.高优先级 II.中优先级 III.低优先级 IV.无优先级

图 4 不同 pH 值条件下 3 种评价方法对 15 种 APIs 优先级评价结果

Fig 4 Prioritization ranking of 15 APIs under different pH conditions using three evaluation methods

2.3 APIs 淋溶迁移性与其理化性质的相关关系

APIs 在进入到地下水系统中后，会发生水解、吸附、光解以及降解等转化过程，APIs 在地下水系统中的淋溶迁移性受本身物理化学性质、研究区水文地质条件以及各种转化过程影响^[32]。APIs 从地表向地下的迁移与多个理化性质有关，包括的 APIs 的吸附性、疏水性、降解性、溶解性等。吸附作用影响着物质在环境中的迁移，吸附能力强的物质在环境中不易迁移，较稳定，易蓄积；而吸附作用弱的物质则易被淋洗。因此，本研究选取 K_{oc} （吸附性代表参数）、 Dow （疏水性代表参数）、 $T_{1/2}$ （降解性代表参数）、 S （溶解性代表参数）与优先级指标 S_i 进行相关性分析。

对 59 种 APIs 的优先级指标 S_i 和 lgK_{oc} 、 $lgDow$ 、 $lgT_{1/2}$ 、 lgS 的相关性分析，结果如图 5 所示。由

图 5 可以看出，对于本研究选取的 59 种 APIs，其优先级指标 S_i 与吸附性（ K_{oc} 表征）和疏水性（ Dow 表征）具有较好的相关性，特别是 S_i -GUS 与 lgK_{oc} 、 $lgDow$ 的 R^2 分别为 0.89、0.79，这与 Samantha^[33] 等及 Laura 等对不同种类污染物的淋溶迁移性评价结果具有一致性，即淋溶迁移性随着 APIs 吸附性、疏水性的增强而降低^[34]。该相关性分析有助于从复合参数中析出主控因子，为理解 APIs 的环境行为提供机理层面的依据。同时，吴林等研究发现淋溶迁移性与吸附性（ K_{oc} 表征）有较好的相关性^[19]；吕颖等研究发现淋溶迁移性与疏水性（ K_{ow} 表征）呈较好的相关性^[24]；Llamas-Dios 的研究指出， lgK_{ow} 是衡量 APIs 疏水性的有效指标，且 APIs 被土壤吸附后生物利用度降低，导致其环境持久性增强^[35]。

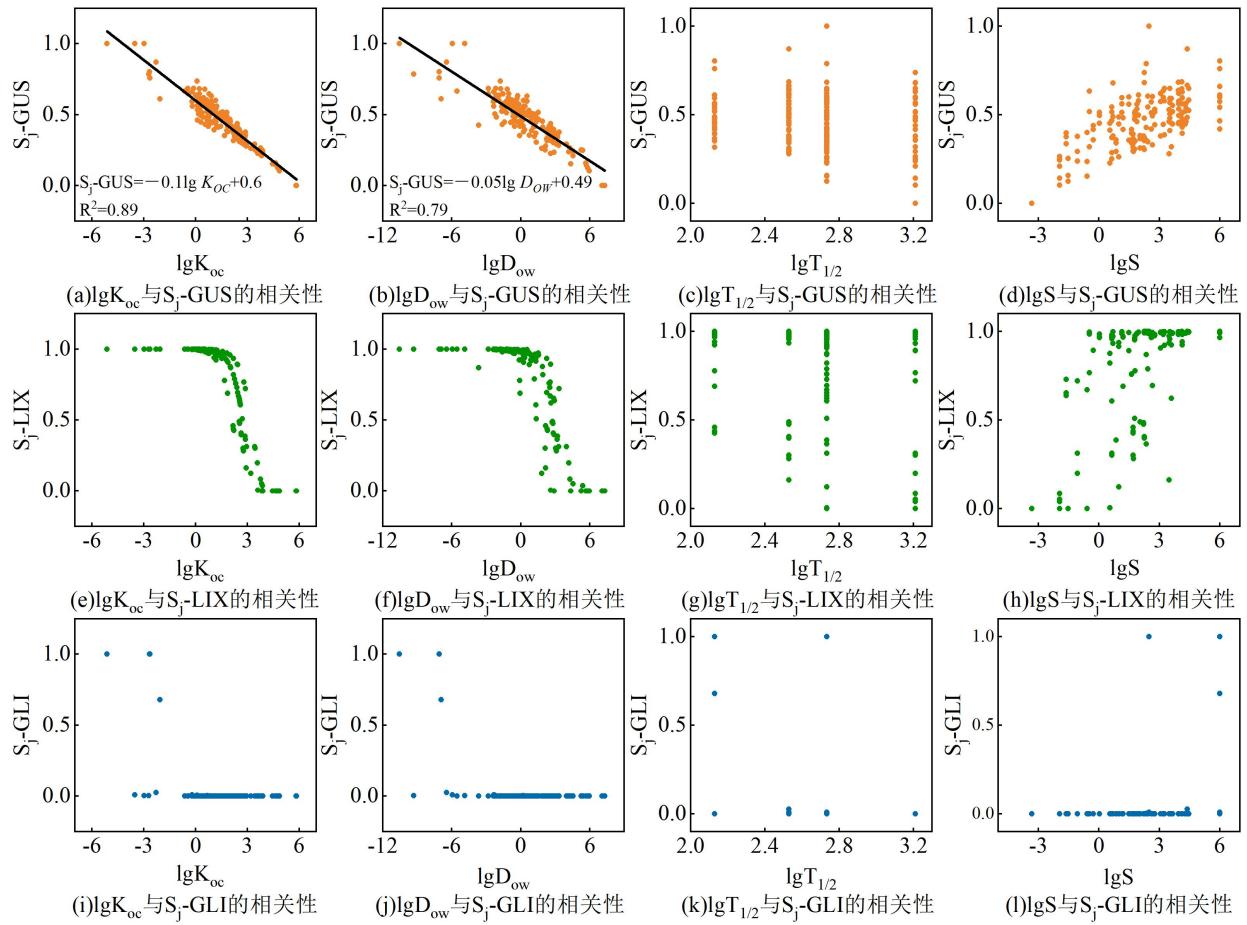


图 5 APIs 的优先级指标与其 $\lg K_{oc}$ 、 $\lg D_{ow}$ 、 $\lg T_{1/2}$ 和 $\lg S$ 的相关关系

Fig 5 Relationships between leaching mobility and $\lg K_{oc}$, $\lg D_{ow}$, $\lg T_{1/2}$, $\lg S$ of APIs respectively

尽管降解半衰期 ($T_{1/2}$) 是 GUS、GLI 等评价方法的核心参数, 用于表征化合物在环境中的持久性, 但本研究发现其对最终风险评级的贡献权重相对小于吸附性。这是因为渗流过程通常是一个相对快速的水力过程^[36], 尤其是在渗透性较好的河床介质中, 地下水的滞留时间可能短于许多 APIs 的降解半衰期, 因此在迁移发生时, 生物降解尚未能充分起作用。溶解度 (S) 直接影响化合物的迁移速率和初始浓度^[37], 但对于多数极性适中的 APIs, 其溶解度远高于环境相关浓度, 溶解度并非其迁移的限制性因子。

2.4 结果验证

为验证评估结果的合理性, 本研究选取 S_j 值较高的 APIs, 对其在亚洲、欧洲、美洲等主要大洲地下水中的检出数据进行交叉验证^[1, 19, 24, 32-34]。基于全球尺度的调查范围, 验证结果具有充分的地理代表性。由于本研究用于结果验证的文献检出数据缺乏完整的水文地质背景信息 (如含水层渗透性、水力梯度等), 这可能对验证的精确性产生一定影响。然而, 鉴于所识别出的高风险 APIs 普遍具有高持久性和低吸附性, 其在多种环

境中均具备较高的迁移潜能, 因此统计所呈现出的高风险 APIs 检出率更高的趋势, 仍在宏观层面支持了本评价结果的有效性。

本研究选取 pH=7.0 中性条件下的部分代表性 APIs 进行分析, 结果如图 6 所示。由图 6 可看出: APIs 在地下水中的检出率整体上与它们的优先级指标 S_j 有较强的相关性, 总体表现为 APIs 的 S_j 越大, 检出率呈增大趋势。由此可以看出, 本研究的识别清单具有一定的合理性。由于不同研究所使用的检出限、采样地点、评估方法不同, 检测方法不统一, 因此同一 APIs 在不同地下水中的检出率结果存在一定的差异性, 今后还需更多的研究结果加以验证。需要注意的是, 本研究考虑了 APIs 理化性质对地下水污染的影响, 但未考虑水文地质参数的调控作用, 未来研究可以耦合含水层特性与水文动力学过程, 揭示污染物迁移转化的协同影响机制。

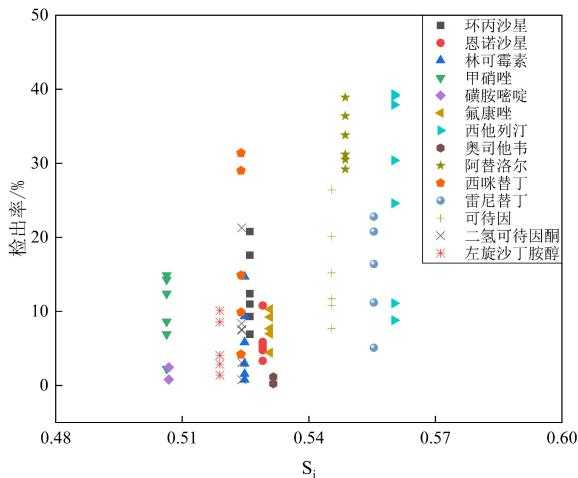


图 6 地下水中 APIs 的检出率与优先级指标的关系

Fig 6 Correlation analysis of APIs detection frequency with priority indices in groundwater

3 结论

1) pH 值越小, APIs 的淋溶迁移性评价指数越大, 即当水体偏酸性时, APIs 的淋溶迁移性增强, APIs 进入地下水的风险相应增高。

2) 在 pH 为 5.0、7.0、9.0 的条件下, 环丙沙星、恩诺沙星、林可霉素、土霉素、氟康唑、二甲双胍、阿昔洛尔、西咪替丁八种药物在三种评价方法下均具有高地下水污染风险, 需要优先控制。

3) APIs 的淋溶迁移性与吸附性参数 (K_{oc})、疏水性参数 (D_{ow}) 相关性较好, 表明这两类理化特性主要控制 APIs 在地下环境中的迁移行为。

参 考 文 献

- [1] WILKINSON J L, BOXALL A B A, KOLPIN D W, et al. Pharmaceutical pollution of the world's rivers[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2022, 119(8).
- [2] MEYER C, STRAVS M A, HOLLENDER J. How Wastewater Reflects Human Metabolism—Suspect Screening of Pharmaceutical Metabolites in Wastewater Influent[J]. Environmental Science & Technology, 2024, 58(22): 9828-9839.
- [3] 易倩文, 肖芳, 李江, 等. 贵阳市典型污水处理厂新污染物的赋存、去除及归趋[J]. 环境科学学报, 2023, 43(08): 141-152. [YI Q W, XIAO F, LI J, et al. Occurrence, removal and fate of emerging pollutants in typical wastewater treatment plants in Guiyang[J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2023, 43 (8) : 141-152]
- [4] 梁丽琛, 张后虎, 许元顺, 等. 新型污染物邻苯二甲酸(2-乙基己基)酯在非正规生活垃圾填埋场原状土壤中赋存水平及环境风险评估[J]. 环境化学, 2024, 43(10): 3342-3354. [LIANG L C, ZHANG H H, XU Y S, et al. The pollution level and environmental risk assessment of new pollutant DEHP(bis(2-ethylhexyl)phthalate) on undisturbed soil of informal landfill[J]. Environmental Chemistry, 2024, 43 (10) : 3342-3354.]
- [5] LIU Y H, ZHU G H, YU Z F, et al. Priority Organic Pollutant Monitoring Inventory and Relative Risk Reduction Potential for Solid Waste Incineration[J]. Environmental Science & Technology, 2024, 58(41): 18356-18367.
- [6] 杨元平, 杨莉莉, 刘国瑞, 等. 工业热过程中无意产生的持久性有机污染物生成机理[J]. 中国科学: 化学, 2021, 51(04): 401-409. [YANG Y P, YANG L L, LIU G D, et al. Formation mechanism of unintentionally produced persistent organic pollutants in industrial thermal processes[J]. Scientia Sinica(Chimica), 2021, 51(04): 401-409.]
- [7] 赵晨妍, 孙宇翔, 杨莉莉, 等. 六氯丁二烯的排放源及环境污染特征[J]. 化学进展, 2023, 35(07): 1040-1052. [ZHAO C Y, SUN Y X, YANG L L, et al. Source and Environmental Characteristics of Hexachlorobutadiene[J]. Progress in Chemistry, 2023, 35(07): 1040-1052.]
- [8] CHAI T T, JIN Y Y, CUI F, et al. Multidimensional occurrence and diet risk of emerging contaminants in freshwater with urban agglomerations[J]. Journal of Hazardous Materials, 2024, 474.
- [9] LUO Y, JIN X W, ZHAO J L, et al. Ecological implications and drivers of emerging contaminants in Dongting Lake of Yangtze River Basin, China: A multi-substance risk analysis[J]. Journal of Hazardous Materials, 2024, 472.
- [10] ZHONG M M, WANG T L, ZHAO W X, et al. Emerging Organic Contaminants in Chinese Surface Water: Identification of Priority Pollutants[J]. Engineering, 2022, 11: 111-125.
- [11] 马妍, 王嘉毅, 陈祥强, 等. 基于综合评分法和风险商值法筛选黄河流域特征污染物及风险污染物[J]. 环境科学研究, 2024, 37(06): 1278-1291. [MA Y, WANG J Y, CHEN X Q, et al. Screening of Characteristic Pollutants and Risk Pollutants in the

- Yellow River Basin Based on Comprehensive Evaluation and Risk Quotient Methods[J].Research of Environmental Sciences,2024,37(06):1278-1291.]
- [12] 蒋建军,刘丽,蒋家贵,等.加压流体萃取-改进QuEChERS-气相色谱质谱法测定土壤和沉积物中4种新污染物的含量[J].化学试剂,2025,47(01):74-79.[JIANG J J,LIU L,JIANG J G,et al.Detection of Four New Pollutants in Soil and Sediment by Accelerated Solvent Extraction Modified QuEChERS-Gas Chromatography-Mass Spectrometry[J].Chemical Reagents,2025,47(01):74-79.]
- [13] GASTON L,LAPWORTH D J,STUART M,et al.Prioritization Approaches for Substances of Emerging Concern in Groundwater :A Critical Review[J].Environmental Science&Technology,2019,53(11):6107-6122.
- [14] 王芝玉,李秋,张扬忠,等.珠江三角洲北江饮用水源地新污染物的非靶向筛查与生态风险评估[J].环境科学,2024,45(11):6555-6564.[WANG Z Y,LI Q,ZHANG Y Z,et al.Non-targeted Screening and Ecological Risk Assessment of Emerging Contaminants in Beijiang Drinking Water Source of the Pearl River Delta[J].Environmental Science,2024,45(11):6555-6564.]
- [15] 刘中培,张冬青,韩宇平,等.灌区地下水作为生活饮用水的适宜性演变规律分析[J].华北水利水电大学学报(自然科学版),2021,42(03):103-108.[LIU Z P,ZHANG D Q,HAN Y P,et al.Evolution Analysis of Groundwater Used as Domestic and Drinking Water in Irrigated Area[J].Journal of North China University of Water Resources and Electric Power(Natural Science Edition),2021,42(03):103-108.]
- [16] WADA O Z,OLAWADE D B.Recent occurrence of pharmaceuticals in freshwater,emerging treatment technologies,and future considerations :A review[J].Chemosphere,2025,374.
- [17] GAO P.Chasing “ Emerging ” Contaminants :A n Endless Journey toward Environmental Health[J].Environmental Science&Technology,2024,58(4):1790-1792.
- [18] ARUMUGAM A,LEE K E,NG P Y,et al.Pharmaceuticals as emerging pollutants :I mplications for water resource management in Malaysia[J].Emerging Contaminants,2025,11(2).
- [19] 吴林,石国伟,刘雅慈,等.药物和个人护理用品对地下水污染的风险评价[J].水文地质工程地质,2023,50(01):189-196.[WU L,SHI G W,LIU Y C,et al.Groundwater pollution risk evaluation of pharmaceuticals and personalcare products in land application of sludge[J].Hydrogeology & Engineering Geology,2023,50(01):189-196.]
- [20] 李志萍,李慧,张帅,等.地下水有机污染健康风险评价研究综述[J].华北水利水电大学学报(自然科学版),2014,35(06):21-24.[LI Z P,LI H,ZHANG S,et al.Research Review on Health Risk Assessment of Organic Pollution in Groundwater[J].Journal of North China University of Water Resources and Electric Power(Natural Science Edition),2014,35(06):21-24.]
- [21] 李亚松,张兆吉,费宇红,等.滹沱河冲积平原浅层地下水有机污染研究[J].干旱区资源与环境,2012,26(08):52-56.[LI Y S,ZHANG Z J,FEI Y H,et al.Preliminary study on organic pollution of shallow groundwater in the alluvial plain of Hutuo River[J].Journal of Arid Land Resources and Environment,2012,26(08):52-56.]
- [22] SIGMUND G,ARP H P H,AUMEIER B M,et al.Sorption and Mobility of Charged Organic Compounds :How to Confront and Overcome Limitations in Their Assessment[J].Environmental Science&Technology,2022,56(8):4702-4710.
- [23] NEUWALD I,MUSCHKET M,ZAHN D,et al.Filling the knowledge gap :A suspect screening study for 1310 potentially persistent and mobile chemicals with SFC -a nd HILIC-HRMS in two German river systems[J].Water Research,2021,204.
- [24] 吕颖,张玉玲,党江艳,等.抗生素在地下环境中的淋溶迁移能力分析 [J].环境科学与技术,2013,36(06):21-25.[LV Y,ZHANG Y L,DANG J Y,et al.Leaching Mobility Analysis of Antibiotics in Polluted Groundwater[J].Environmental Science&Technology,2013,36(06):21-25.]
- [25] 李煜婷,许德刚,李巨峰,等.典型石油炼制厂地下水优先控制污染物识别方法的建立和验证[J].环境工程学报,2019,13(11):2770-2780.[LI Y T,XU D G,LI J F,et al.Establishment and verification of the recognition method of the priority pollutants in

- groundwater of the typical petroleum refining enterprise[J].Chinese Journal of Environmental Engineering,2019,13(11):2770-2780.]
- [26] HUANG F Y,CHEN L P,ZHANG C,et al.Prioritization of antibiotic contaminants in China based on decennial national screening data and their persistence,bioaccumulation and toxicity[J].Science of The Total Environment,2022,806.
- [27] AKAY DEMIR A E,DILEK F B,YETIS U.A new screening index for pesticides leachability to groundwater[J].Journal of Environmental Management,2019,231:1193-1202.
- [28] DAVIES E,STAMM C,FUHRIMANN S,et al.Mixed pesticide sources identified by using wastewater tracers in rivers of South African agricultural catchments[J].Science of The Total Environment,2024,956.
- [29] NGUYEN T H,GOSS K-U,BALL W P.Polyparameter Linear Free Energy Relationships for Estimating the Equilibrium Partition of Organic Compounds between Water and the Natural Organic Matter in Soils and Sediments[J].Environmental Science&Technology,2005,39:913-924.
- [30] SCHAFFER M,BÖRNICK H,NÖDLER K,et al.Role of cation exchange processes on the sorption influenced transport of cationic β -blockers in aquifer sediments[J].Water Research,2012,46(17):5472-5482.
- [31] LESSER L E,MORA A,MOREAU C,et al.Survey of 218 organic contaminants in groundwater derived from the world's largest untreated wastewater irrigation system :Méxiquito Valley,Mexico[J].Chemosphere,2018,198:510-521.
- [32] KLEYWEGT S,PAYNE M,NG F,et al.Environmental loadings of Active Pharmaceutical Ingredients from manufacturing facilities in Canada[J].Science of The Total Environment,2019,646:257-264.
- [33] GASCO CAVERO S,SANTAMARTA J C,CRUZ-PÉREZ N,et al.Comparative study of emerging pollutants of interest in the groundwater of the volcanic islands of La Palma and El Hierro(Canary Islands)[J].Science of The Total Environment,2024,927.
- [34] BEXFIELD L M,TOCCALINO P L,BELITZ K,et al.Hormones and Pharmaceuticals in Groundwater Used As a Source of Drinking Water Across the United States[J].Environmental Science&Technology,2019,53(6):2950-2960.
- [35] LLAMAS-DIOS M I,JIMÉNEZ-GAVILÁN P,CORADA-FERNÁNDEZ C,et al.Multivariate analysis of organic contaminants in groundwater of an endorheic basin draining to a salt lagoon-Fuente de Piedra(Southern Spain)[J].Science of The Total Environment,2024,957.
- [36] 马燕,李志萍,梁珂,等.河流渗滤系统中苯系物污染去除机理实验模拟研究[J].长江流域资源与环境,2012,21(10):1262-1269.[MA Y,LI Z P,LIANG K,et al.Experimental Simulation Study of Adsorption of BTEX in the River Filtration System[J].Resources and Environment in the Yangtze Basin,2012,21(10):1262-1269.]
- [37] 杨蕴,崔孜铭,熊贵耀,等.温度耦合驱动下土壤-地下水有机污染物迁移规律与模拟研究进展[J].土壤,2023,55(03):464-473.[YANG Y,CUI Z M, XIONG G Y,et al.Research Progresses of Simulation and Migration Patterns on Organic Pollutants in Soil and Groundwater Driven by Thermal Coupling[J].Soils,2023,55(03):464-473.]

Identification of Priority Active Pharmaceutical Ingredients Based on Groundwater Contamination Risk

WANG Zihan¹,LV Huiru¹,WU Lin^{1,2,3,4},LIU Zhongpei^{1,2,3},LI Yasong⁴

Water Resources Conservation and Intensive Utilization in the Yellow River Basin,Zhengzhou 450046,China; 3.Key Laboratory of Water and Soil Conservation and Ecological Restoration in the Middle and Lower Reaches of the Yellow River Basin,Ministry of Natural Resources,Zhengzhou 450046,China; 4.Institute of Hydrogeology and Environmental Geology,Chinese Academy of Geological Sciences,Fujian Provincial Key Laboratory of Water Cycling and Eco-Geological Processes,Xiamen 361021,China)

Abstract: **[Objective]** Identification of Active Pharmaceutical Ingredients (APIs) characterized by high groundwater contamination risk during leaching processes, with evaluation of their migration potential under varying pH conditions. **[Methods]** A scoring system was established by integrating three leaching mobility evaluation methods: the Groundwater Ubiquity Score (GUS), the Leaching Index (LIX), and the Global Leaching Index (GLI). This system was employed to predict and evaluate the groundwater contamination risks posed by the leaching migration of 59 APIs with diverse dissociation properties under pH conditions of 5.0, 7.0, and 9.0, thereby identifying priority APIs requiring control. **[Results]** The results demonstrate the reliability of the assessment system: decreased pH enhances the leaching mobility of APIs. At pH 5.0, 7.0, and 9.0, 30%, 25%, and 17% of the APIs were identified as high risk, respectively. Eight compounds—ciprofloxacin, enrofloxacin, lincomycin, oxytetracycline, fluconazole, metformin, atenolol, and cimetidine—consistently exhibited high groundwater contamination risk across all three evaluation methods and thus require priority management. Variations in adsorption capacity and hydrophobicity were identified as the main factors contributing to differential risk assessments among structurally similar APIs. Furthermore, high-risk APIs showed significantly higher detection rates in groundwater monitoring studies, supporting the practical relevance of the assessment results. **[Conclusion]** The API contamination risk assessment method established in this study addresses limitations of conventional approaches in predicting the environmental mobility of APIs with diverse dissociation properties. It provides a more scientific and effective technical foundation and decision-making support for the accurate identification and prioritized control of emerging contaminants in aquatic environments.

Keywords: Active Pharmaceutical Ingredients; Groundwater system; Leaching mobility; Priority pollutants; Detection frequency