

大连理工大学 环境学院

大连市化学品风险防控及污染防治技术重点实验室

“新污染物治理技术研究中心”简介

☞ 团队概况

- 研究方向：新污染物治理技术、环境计算毒理学、化学品风险预测与控制技术、场地污染修复技术。

- 团队构成：教授 13 人、副教授 8 人、讲师 1 人、博士后 3 人，在读博士生 50 余人。



☞ 团队负责人

陈景文，博士、教授，2013 年获国家杰出青年科学基金、入选长江学者特聘教授，2016 年入选国家万人计划科技创新领军人才。教育部环境科学与工程类专业教学指导委员会委员、国务院学位委员会第八届学科评议组成员，期刊“ACS Sustain. Chem. Eng.”副主编，中国毒理学会计算毒理学专业委员会主任。主要从事新污染物治理技术、化学品风险预测与管理、环境计算毒理学、新污染物监测技术研究。



☞ 团队骨干

- 蔡喜运，博士、教授，教育部新世纪优秀人才、国家环境保护专业技术青年拔尖人才，主要从事场地土壤污染修复技术研究。

- 谢宏彬，博士、教授，辽宁省“兴辽计划”青年拔尖人才，首届“大连市科技之星”，主要从事新污染物大气转化行为研究。

- 李雪花，博士、教授，国家高层次人才特殊支持计划-青年拔尖人才，从事新污染物高通量筛查分析、健康效应的机器学习建模、风险预测方法研究。

- 乔显亮，博士、副教授，从事工业园区新污染物监测技术及来源解析研究。

- 解怀君，博士、副教授，国家“博新计划”入选者，从事新污染物高通量筛查、被动采样技术及风险筛查技术研究。

- 张晗，博士，副教授，从事效应导向分析的新污染物筛查研究。

- 傅志强，博士，讲师，从事新污染物环境转化行为模拟预测及毒理效应的组学解析技术研究。

☞ 代表性成果

(1) 化学品风险预测、筛查与控制技术

创建了一系列环境计算毒理学模型，用于化学品环境暴露、危害性参数的模拟预测，发展了基于机器学习的持久性、生物蓄积性、毒性(PBT)化学品智能筛查和预测技术，构建了化学品风险评价与预测的软件平台，支持新污染物的筛查和风险管理。



(2) 新污染物高通量筛查与定量技术

针对新污染物来源广、种类多、分析检测困难等问题，研发了水中新污染物的 DGT 被动采样技术、单个样品筛查 1300 余种新污染物的高通量精准定性定量技术。



(3) 化学品土壤污染修复技术及产品

针对石油、农药等污染的土壤，构建了新型环糊精材料、铁基材料等活化过硫酸盐的氧化修复技术；筛选了具有高降解性能、环境适应性的高效石油降解菌，制备了降解菌液制剂，已开展中试验证和应用示范。



☞ 代表性研究项目

项目名称	项目来源	起止时间	经费
典型塑料添加剂危害性筛查及预测关键技术	国家重点研发计划项目	2022-2025	3798.5 万元，国拨 1598.5 万元
石油化工类场地有机污染物脱附	国家重点研发计	2020-2023	1426 万元，国拨

项目名称	项目来源	起止时间	经费
降解净化技术研发与工程示范	划课题		626 万元
化学品环境暴露行为的计算毒理学研究	国家自然科学基金重点项目	2022-2026	310 万元
国家青年拔尖人才项目	国家高层次人才特殊支持计划	2022-2024	160 万元
有害化学品的计算毒理学筛查技术研究	辽宁省“兴辽英才计划”科技创新领军人才	2020-2022	100 万元
中国 PBT 化学品的高通量计算毒理学筛查技术研究	国家重点研发计划政府间国际合作重点专项	2019-2021	235 万元
化学品危害评价与优先排序的方法及工具	国家自然科学基金重点国际(地区)合作与交流项目	2017-2021	300 万元
化学品风险预测与削减关键技术	大连市支持高层次人才创新创业项目	2016-2017	400 万元
有机污染物计算毒理学	国家杰出青年科学基金	2014-2017	320 万元
围填海的水环境效应和模拟	国家 973 计划课题	2013-2017	558 万元
抗生素水环境光化学转化/光致毒性机理与计算模拟	国家自然科学基金重点项目	2012-2016	300 万元
化学品种类快速甄别及毒性模型测试技术	国家 863 计划课题	2012-2015	737 万元
湿地系统水环境过程与行为	国家 973 计划课题	2006-2010	385 万元
大连金普新区 42 号工业区大气污染调查分析	大连市金普新区生态环境局项目	2017-2018	156.8 万元
大连市近岸海域水环境激素及抗生素调查评价与防治对策研究	大连市生态环境局项目	2017-2019	98.4 万元
乌鲁木齐市环保局土地污染调查方案	乌鲁木齐生态环境局项目	2017-2018	69.7 万元

☞ 代表性论著

• 陈景文, 王中钰, 傅志强 著。《环境计算化学与毒理学》(我国首部环境计算毒理学方面专著, 国家重点出版物规划项目), 科学出版社, 2018 年出版。

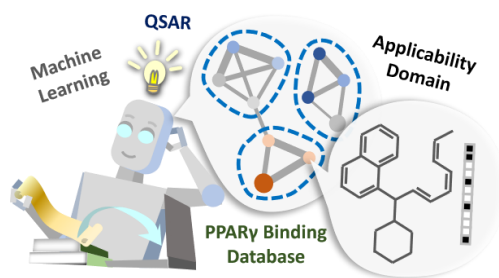
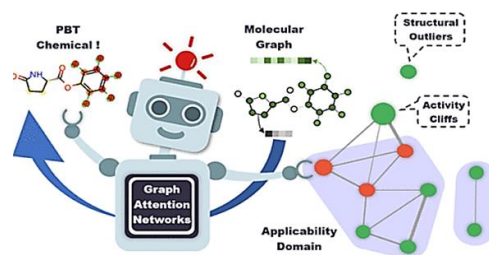
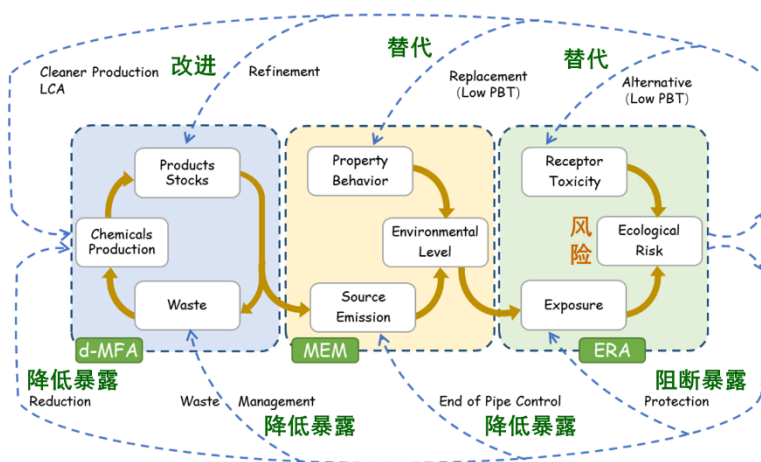
• 陈景文, 全燮, 编著。《环境化学》(普通高等教育“十一五”国家级规划教材、辽宁优秀教材奖), 大连理工大学出版社, 2009 年出版。

• 题目: Coupled Dynamic Material Flow, Multimedia Environmental Model, and Ecological Risk Analysis for Chemical Management: A Di(2-ethylhexyl) Phthalate Case in China. 期刊: Environ. Sci. Technol., 2022, 56 (15), 11006-11016. 建立了耦合动态物质流、多介质环境模型和生态风险评价对污染物进行分析和管理的环

境系统工程方法学, 量化了我国邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯(DEHP)在 1956 年至 2020 年间的流量、存量和释放量, 并评价了其生态风险, 为健全化学品管理和新污染物治理提供了系统性的解决方案。

• 题目: Graph Attention Network Model with Defined Applicability Domains for Screening PBT Chemicals. 期刊: Environ. Sci. Technol., 2022, 56 (10), 6774-6785. 筛查具有环境持久性、生物蓄积性、毒性 (PBT) 的化学品, 是化学品环境管理和新污染物治理的基础。基于图神经网络机器学习算法, 构建了 PBT 化学品智能筛查模型, 筛查《中国现有化学物质名录》中的 17856 种化学品, 发现 2493 种疑似 PBT 化学品。

• 题目: Developing QSAR Models with Defined Applicability Domains on PPAR γ Binding Affinity Using Large Data Sets and Machine Learning Algorithms. 期刊: Environ. Sci. Technol., 2021, 55(10): 6857-6866. 构建了基于机器学习筛查和预测化学品毒性的模型及应用域表征方法。该研究基于机器学习, 构建了化学物质的 PPAR γ 活性的预测和筛查模型。



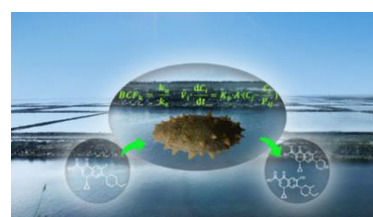
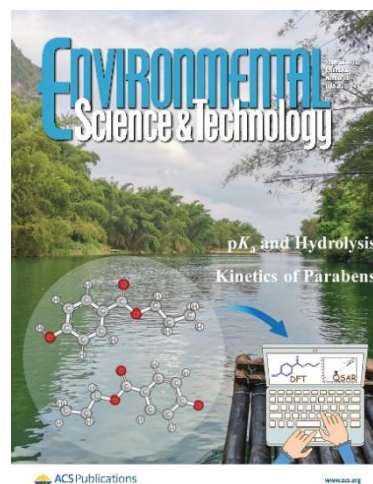
• 题目: Prediction Models on pKa and Base-catalyzed Hydrolysis Kinetics of Parabens: Experimental and Quantum Chemical Studies. 期刊: Environ. Sci. Technol., 2021, 55(9): 6022-6031. 引入量子化学计算, 创建了通过预测水解速率而预测化学品环境持久性参数的系列预测模型, 填补了过去 30 多年里水解相关的环境持久性预测模型缺失的问题。

• 题目: Tissue-Specific Accumulation, Biotransformation, and Physiologically Based Toxicokinetic Modeling of Benzotriazole Ultraviolet Stabilizers in Zebrafish (*Danio rerio*). 期刊: Environ. Sci. Technol., 2021, 55(17), 11874-11884. 构建了可关联新污染物环境暴露浓度与鱼体内暴露浓度的生理毒代动力学模型, 可用于预测苯并三唑类紫外线稳定剂(BUVSs)等新污染物在斑马鱼(*Danio rerio*)体内的分布和富集, 支持新污染物风险预测与管理。

• 题目: Bioaccumulation, Biotransformation, and Multicompartmental Toxicokinetic Model of Antibiotics in Sea Cucumber (*Apostichopus japonicus*). 期刊: Environ. Sci. Technol., 2020, 54(20), 13175-13185. 创建了我国重要养殖生物海参(*Apostichopus japonicus*)中抗生素等新污染物的多室毒代动力学模型, 可基于环境浓度预测海参体内新污染物的浓度分布, 服务于新污染物的健康风险评估, 指导海水养殖中抗生素等药物的合理使用。

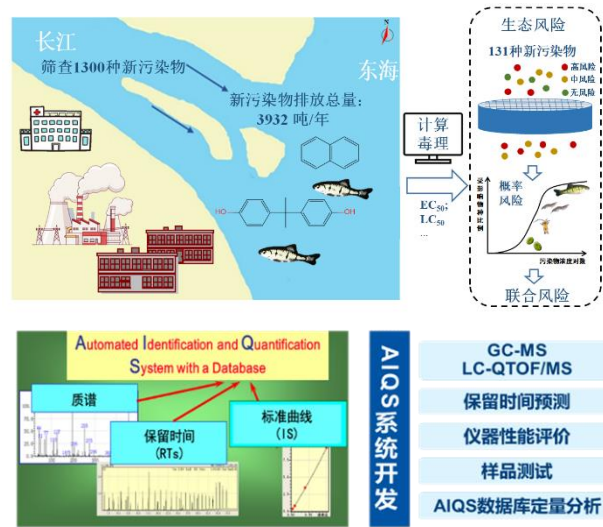
• 题目: Development and Evaluation of a Ceramic Diffusive Layer Based DGT Technique for Measuring Organic Micropollutants in Seawaters. 期刊: Environ. Int., 2021, 156, 106653. 发展了海水环境中抗生素、农药、内分泌干扰物等新污染物的 DGT 被动采样技术, 在高盐度及环境扰动情况下可实现新污染物的精准采集, 大幅降低新污染物采样的经济、时间和劳力成本, 可为海水中新污染物的暴露识别及风险预警提供技术支持。

• 题目: Formation of Low-Volatile Products and Unexpected High Formaldehyde Yield from the Atmospheric Oxidation of Methylsiloxanes. 期刊: Environ. Sci. Technol. 2020, 54, 7136-7145. 揭示了新污染物甲基硅氧烷通过大气反应可高产率地生成甲醛的分子机制, 为甲基硅氧烷这类化学品的环境管理提供科学依据。



• 题目: Atmospheric Autoxidation of Organophosphate Esters. 期刊: Environ. Sci. Technol. 2022, 56, 6944-6955. 揭示了新污染物有机磷酸酯发生大气自氧化反应生成含磷低挥发性物种的分子机制, 为该类新污染物的风险控制提供科学依据。

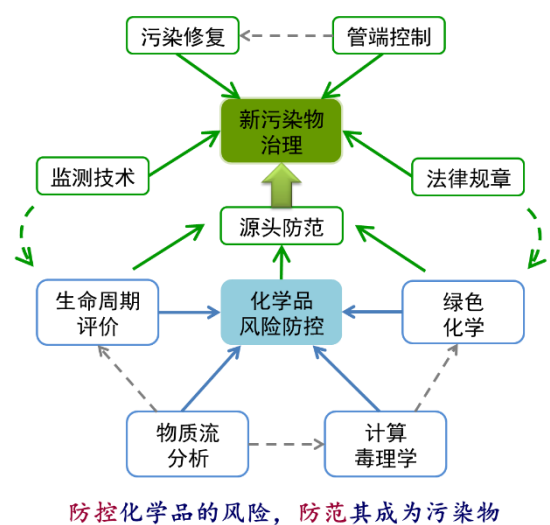
• 题目: Screening and Ecological Risk of 1200 Organic Micropollutants in Yangtze Estuary Water. 期刊: Water Res., 2021, 201, 117341. 发展了基于计算毒理学的层级生态风险评价新策略, 结合新污染物暴露水平的高通量筛查数据, 定量分析了长江口水中 1300 种新污染物的水平, 预测了概率生态风险和复合暴露导致的累积生态风险, 为长江水环境中新污染物的生态风险管控提供了基础数据, 受邀撰写了资政建议。



• 题目: Occurrence and Health Risks of Organic Micro-Pollutants and Metals in Groundwater of Chinese Rural Areas. 期刊: Environ. Health Perspect., 2020, 128(10), 107010. 针对健康指导值和毒性阈值缺乏, 许多新污染物的健康风险及其不确定性无法量化的难题, 发展了计算毒理模型和蒙特卡罗模拟相结合的风险预测方法, 快速填补毒性数据缺口, 表征风险不确定性, 提升了风险预测的科学性。应用于全国 166 个饮用地下水样品中 1300 种新污染物的高通量分析、累积致癌和非致癌风险预测, 揭示了农村饮用地下水的健康风险。



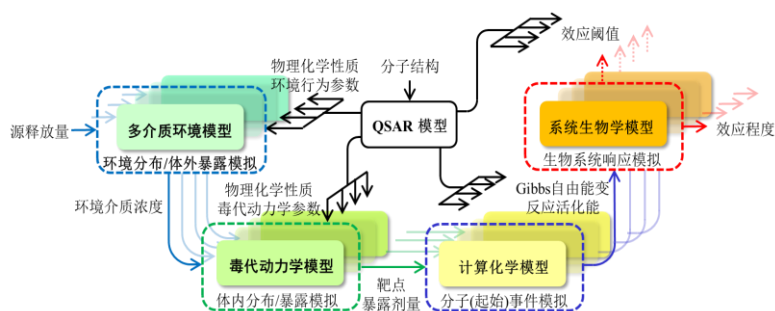
• 题目: 环境新污染物治理与化学品环境风险防控的系统工程。期刊: 科学通报, 2021, 66:1-11. 介绍了新污染物的概念、来源和特性, 指出化学品管理不当及其环境释放(尤其无组织排放)是新污染物的主要来源。治理新污染物, 需要分析化学品在人类社会子系统、新污染物在自然环境子系统中的源-流-汇; 揭示化学品和新污染物对人类社会、生态系统、无机环境系统及各层次子系统造成的影响。以物质



流分析、生命周期评价、计算毒理学、绿色化学等现代科技手段为核心要素的环境系统工程方法,有助于新污染物治理和化学品风险管理。

• 题目: 面向化学品风险评价的计算(预测)毒理学。

期刊: 中国科学: 化学, 2016, 46: 222-240。进入 21 世纪, 为快速高效地评价和预测化学品的环境与生态健康风险, 环境计算毒理学应需而生, 它融合毒理学、计算化学、化学/生物信息学、系统生物学等学科资源, 构建数学或计算机模型以实现化学品的环境暴露、危害性与风险性的高效预测和评价, 并提升对毒性机制的认识。本综述介绍了环境计算毒理学在辅助化学品风险评价以及剖析毒性机制时常用的策略与模型, 并就其在化学品风险管理领域的外延进行了讨论。



🔑 代表性专利

• 一种通过机器学习算法预测化学品致突变性的方法. CN112466399B, 2022.10.21, 授权专利

• 一种通过建立 QSAR 模型预测化学品以斑马鱼胚胎为受体的毒性的方法. CN110910970B, 2022.05.13, 授权专利

• 采用多参数线性自由能关系模型预测有机化合物的辛醇/水分配系数的方法. CN110534163B, 2022.09.06, 授权专利

• 采用定量结构-活性关系模型预测有机化学品的氯自由基反应速率常数的方法. CN107563133B, 2021.05.04, 授权专利

• 一种在海水条件下同步固定多种抗生素的吸附膜. CN107445242B, 2020.08.14, 授权专利

• 一种人运甲状腺素蛋白干扰物虚拟筛选方法. CN106407665B, 2018.10.16, 授权专利

• 采用逻辑回归方法预测有机化学品生物降解性. CN103345544B, 2016.07.06, 授权专利

• 化学品多介质数据库查询系统, 2019SR0773508, 2019.05.17, 软件著作权

• 化学品预测毒理学平台 (CPTP 2.0), 2022SR0120414, 2021.11.15, 软件著作权

• 化学品足迹 GIS 表征工具, 2018SR003934, 2017.06.10, 软件著作权



🔑 人才培养

团队努力营造勤奋严谨、团结互助、方向交叉、学术民主、共同进步、追求卓越的学术氛围，鼓励研究生的批判性思维和辩证性思维。注重以创新的战略培养人，以高尚的情操塑造人，以丰富的学识引导人，以严谨的学风哺育人，以勤奋的工作带动人，以博大的胸怀爱护人，以和蔼的态度对待人，以乐观的精神熏陶人。注重在承担高水平科研项目中，培育英才；创设社会服务与交流合作机会，培养研究生优秀的综合素质。

已培养博士 52 人，毕业硕士 180 人。优秀毕业生举例：李雪花博士，大连理工大学教授，入选国家青年拔尖人才；王震博士，国家海洋环境监测中心研究员，国家生态环境监测“一流专家”；葛林科博士，陕西科技大学教授，获辽宁省优秀博士学位论文奖、第十三届陕西青年科技奖；王莹博士，国家海洋环境监测中心研究员，“兴辽英才计划”青年拔尖人才；张思玉博士，中科院沈阳应用生态研究所研究员，“兴辽英才计划”青年拔尖人才。2 人入选国家博士后创新人才支持计划(2019 年，解怀君博士，获资助 60 万元；2022 年，夏德铭博士，获资助 63 万元)，2 人(于棋、申杰文)获评省优秀硕士论文。



通讯地址：大连市凌工路 2 号，大连理工大学(西部校区)环境学院，邮政编码：116024

联系人：

李越超 (科研助理), ycli@dlut.edu.cn

电话：0411-84707236，

188 4262 5969 (微信同号)

陈景文, jwchen@dlut.edu.cn,

159 0411 5209 (微信同号)



(2022 年 12 月)