

# 基于离子色谱的水环境中阴离子污染物监测及迁移转化规律研究

宋小兰

四川中衡检测技术有限公司 四川 德阳 618000

**摘要：**水环境中阴离子污染物的精准监测与迁移转化规律解析，是水污染防治的核心前提。本文以离子色谱（IC）为核心技术，系统开展水环境阴离子污染物研究。首先阐述IC技术原理与优化路径，明确仪器组成及方法优化方向；结合工业园区周边河流水样结果进行分析，深入探究阴离子迁移转化规律，构建耦合模型并验证应用。研究表明，优化后的IC方法对氟离子、硝酸根等检出限低至0.001~0.01mg/L，回收率92%~108%，模型可有效预测污染物分布，为污染治理提供依据。

**关键词：**离子色谱；水环境；阴离子污染物；监测技术；迁移转化；数学模型

引言：水环境阴离子污染物来源广泛、危害显著，其精准监测与迁移转化规律研究对水污染防治意义重大。传统监测技术难以满足复杂水样中多组分阴离子同步检测需求，且对污染物迁移转化机制认知有限。离子色谱法凭借分离效率高、选择性强等优势，成为阴离子监测的主流技术。本文聚焦离子色谱技术，系统开展水环境阴离子污染物监测方法开发及迁移转化规律研究，为水污染治理提供科学依据。

## 1 离子色谱法（IC）技术原理与优化

### 1.1 基本原理

离子色谱法作为当下阴离子监测领域的主流技术，其核心原理建立在离子交换分离与电导检测的基础之上。在检测过程中，样品经进样系统引入，随后伴随着淋洗液一同流入离子交换柱。在交换柱内，固定相上的可交换离子会与样品中的目标阴离子展开激烈的竞争吸附。由于不同阴离子与树脂之间的亲和力存在显著差异，在淋洗液的持续推动作用下，这些阴离子会以各不相同的速率依次流出分离柱，从而实现组分的有效分离。分离后的阴离子随即进入抑制器，在这里会发生抑制反应，这一反应不仅能大幅降低淋洗液背景电导，还能显著增强目标阴离子的电导信号。最终，电导检测器精准捕获这些信号，并将其转化为直观的色谱峰，科研人员可依据保留时间进行定性分析，通过峰面积开展定量测定。该技术成功突破了传统方法无法同步检测多组分阴离子的局限，具备分离效率高、选择性强等突出优势，尤其适用于水环境中低浓度阴离子的精准测定。

### 1.2 仪器系统组成

离子色谱仪系统由进样系统、淋洗液系统、分离系

统、抑制系统、检测系统及数据处理系统六部分构成，各组件协同保障检测效能。进样系统采用六通阀进样，具备进样体积精准、重复性好的特点，避免手动进样误差；淋洗液系统含高压恒流泵与淋洗液储罐，可精准控制淋洗液流速与配比，常用淋洗液为碳酸盐-碳酸氢盐体系或氢氧化物体系；分离系统核心为离子交换柱，如阴离子交换柱AS19，其固定相性能直接决定分离效果；抑制系统多采用电化学自再生抑制器，实时抑制淋洗液电导；检测系统以电导检测器为主，灵敏度可达纳克级；数据处理系统通过专用软件完成色谱峰识别、积分及浓度计算，实现检测数据的自动化分析。

### 1.3 方法优化策略

IC检测方法优化需围绕分离效果、检测灵敏度及分析效率展开，核心优化方向包括淋洗液参数、色谱柱条件及检测参数。淋洗液优化聚焦浓度与流速，如测定复杂水样中阴离子时，可通过梯度洗脱提高分离度，初始采用低浓度淋洗液分离弱保留阴离子（氟离子），逐步升高浓度分离强保留阴离子（硫酸根）；流速控制在0.8~1.2mL/min，平衡分离效率与峰形。色谱柱优化需匹配目标污染物，针对高浓度基质水样选用大容量色谱柱，同时控制柱温在30~35℃，减少温度波动对保留时间的影响。检测参数优化重点调整抑制器电流，根据淋洗液浓度设定对应电流值，降低背景噪音，以达到监测需求。

## 2 水环境中阴离子污染物监测方法开发

### 2.1 目标污染物选择

目标污染物选择以水环境污染特征、生态风险及检出频率为核心依据，涵盖常规阴离子与特征阴离子两大类。常规阴离子选取氟离子、氯离子、硝酸根、亚硝

酸根、硫酸根及磷酸根,这类阴离子广泛来源于生活污水、农业面源及工业废水,易引发水体富营养化、地下水硝酸盐超标等问题。特征阴离子聚焦高氯酸根、溴酸根;高氯酸根主要来源于火箭燃料生产、食品添加剂使用等场景,溴酸根多为饮用水臭氧消毒过程中的副产物,二者均具有显著的内分泌干扰效应。通过梳理国内外水环境监测标准与污染案例,明确各类目标污染物的监测优先级,为方法开发提供针对性方向,确保监测结果贴合实际污染防控需求<sup>[1]</sup>。

## 2.2 标准曲线绘制与质量控制

标准曲线绘制采用逐级稀释法,配制系列浓度标准混合溶液,氟离子、亚硝酸根(以氮计)浓度范围为0.01~1.0mg/L,氯离子、硝酸根(以氮计)、硫酸根为0.1~10mg/L。以各阴离子浓度为横坐标,对应峰面积为纵坐标绘制标准曲线,计算线性回归方程与相关系数( $R^2$ ),确保 $R^2 \geq 0.999$ ,满足定量分析要求。质量控制体系包含空白试验、精密度与准确度验证,空白试验采用超纯水作为样品,确保无目标阴离子检出;精密度通过选取10%的样品进行平行测试,计算相对偏差应 $\leq 10\%$ ;准确度采用有证标准物质和加标回收试验进行控制,选取10%的样品进行加标试验,回收率控制在90%~110%。同时定期对仪器进行校准,保障检测数据的可靠性与可比性。

## 2.3 实际水样分析案例

选取某工业园区周边河流为研究区域,设10个采样点,覆盖上游清洁区、园区排污口及下游汇合区,共采集地表水与地下水样品30份。样品采集后,立即用0.45 $\mu\text{m}$ 滤膜过滤,冷藏运输至实验室。在样品送达实验室后的24h内,严格按照规范绘制标准曲线,并在检测过程中插入质控样,以此确保检测结果的准确性和可靠性,最终完成所有样品的检测工作。结果显示,氟离子、氯离子、亚硝酸根、硫酸根浓度保持较低水平,均未超过《地表水环境质量标准》(GB3838-2002)表1的Ⅲ类及表2限值;确定污染因子主要为硝酸根和磷酸根。上游清洁区仅检出低浓度硝酸盐氮和磷酸根,浓度分别为4.60~7.22mg/L和0.08~0.14mg/L;园区排污口附近水样中硝酸盐氮、磷酸根浓度骤升,最高值达45.2mg/L和3.8mg/L;下游汇合区污染物浓度因稀释有所降低,但仍超上述地表水限值(磷酸根参考总磷限值)。结合园区产业,判定化工废水排放是主因,验证了优化后IC方法在复杂水样精准监测的可行性,为溯源提供数据。

## 3 阴离子污染物迁移转化规律研究

### 3.1 迁移过程分析

阴离子污染物在水环境中的迁移过程受到水文条件与介质特性的共同影响,表现出明显的时空变化特征。在纵向迁移上,顺着河流流向,污染物浓度会随着流程推进呈现出“先升高、再稳定、后降低”的变化态势,在排污口下游一定距离处会形成高浓度污染带,之后由于水体的稀释作用以及吸附等作用,浓度会逐渐下降。在横向迁移过程中,污染物向河岸带的渗透速率会受到土壤质地的影响,在砂质土壤区域,由于土壤孔隙较大,渗透系数高,污染物横向迁移的距离相对较远;而在黏质土壤区域,因土壤孔隙较小,污染物横向迁移的距离则相对较近。在地下水环境中,阴离子的迁移主要以弥散作用为主导,不同阴离子因吸附性不同,迁移速率存在差异,吸附性弱的阴离子迁移速率较快,易造成地下水大范围污染。通过监测不同区域污染物浓度的变化情况,能够明确其迁移路径与速率,进而为界定污染范围提供可靠依据。

### 3.2 转化机制研究

阴离子污染物转化机制涵盖物理、化学及生物过程,不同污染物转化路径存在差异。化学转化中,亚硝酸盐在有氧条件下经硝化作用转化为硝酸盐,在缺氧环境下则通过反硝化作用转化为氮气,水体溶解氧含量为关键调控因子,溶解氧 $> 5\text{mg/L}$ 时硝化速率提升3倍。生物转化主要依赖微生物作用,磷酸盐通过藻类吸收转化为生物体内有机磷,死亡后经微生物分解重新释放为无机磷,形成“吸收—释放”循环;硫酸盐在硫酸盐还原菌作用下转化为硫化物,该过程在厌氧沉积物中尤为显著,硫化物浓度可达2.5mg/L。物理转化以吸附—解吸为主,黏土矿物与有机质对磷酸根吸附能力强,而氯离子、高氯酸根因亲水性强,吸附量仅为磷酸根的1/10,转化过程微弱<sup>[2]</sup>。

### 3.3 环境因素影响

环境因素对阴离子污染物迁移转化效率影响显著,主要通过改变迁移条件与反应活性发挥作用。pH值直接影响污染物存在形态与吸附特性。以磷酸盐为例,土壤对磷酸盐的吸附主要靠铁铝氧化物、黏土矿物等带正电或可变电荷的表面。pH = 6~8时,磷酸盐以 $\text{H}_2\text{PO}_4^-$ 、 $\text{HPO}_4^{2-}$ 形式存在,易被土壤吸附,而当pH升高至pH  $> 12$ 时,基本转化为 $\text{PO}_4^{3-}$ ,土壤对其吸附能力大幅下降,磷酸根污染物更易进入水体迁移。温度升高会加速微生物代谢,在一定温度区间内,温度每升高10 $^\circ\text{C}$ ,微生物代谢速率可能提高1-2倍,进而促进亚硝酸盐等污染物降解,降低其在水体中的浓度。水文因素方面,流量增大增强水体稀释作用,丰水期排污口下游硝酸盐等污染物

浓度较枯水期明显降低。但流速加快会减少污染物与吸附介质的接触时间，抑制吸附，使迁移距离增加。沉积物粒径越小比表面积越大，对磷酸盐吸附容量越高，黏质沉积物吸附量远超砂质沉积物。水体有机质含量影响微生物活性与吸附位点，有机质含量高的沉积物中，硫酸盐还原速率显著提高。

#### 4 阴离子污染物迁移转化模型构建与应用

##### 4.1 模型选择与构建思路

结合研究区域水环境特征，选取溶质运移理论为基础，构建“水动力-溶质迁移-转化耦合”模型。模型以二维水动力方程为核心，模拟河流流速、水位等水文参数时空变化；嵌入溶质迁移方程，考虑弥散、对流及吸附作用，引入分配系数量化吸附过程；针对不同阴离子设置专属转化模块，如硝酸盐模块包含硝化、反硝化动力学方程。构建思路遵循“简化-参数化-耦合”步骤，先忽略次要因素（如微量重金属对转化的影响），将研究区域概化为矩形计算域；再通过室内实验与野外监测确定模型参数，如弥散系数、反应速率常数；最终将水动力、迁移、转化模块耦合，实现多过程同步模拟，确保模型贴合实际水环境条件<sup>[1]</sup>。

##### 4.2 模型验证与优化

模型验证采用“实测数据-模拟结果”对比法，选取12个监测点、涵盖三个水文期的数据，以均方根误差（RMSE）与纳什效率系数（NSE）为评价指标。初始模拟中，硝酸盐氮在枯水期偏差大，RMSE达2.8mg/L，NSE仅0.65。深入分析发现，是初始模型忽略了沉积物中磷释放对硝酸盐转化过程的影响，沉积物中磷释放会促进水体中浮游植物与附着生物的生长，进而增强光合作用与呼吸作用，改变局部溶解氧水平和有机质供应，间接影响硝酸盐的反硝化与同化过程。该作用在水流缓慢、更新周期长的枯水期尤为显著。因此，在模型优化中，我们通过室内培养实验量化了沉积物-水界面磷释放速率（ $0.02d^{-1}$ ），并将其作为关键参数引入模型，以动态反映磷释放对硝酸盐迁移转化的间接调控作用。同时，结合溶解氧对反硝化的抑制效应，将反硝化速率系数设置为随溶解氧浓度动态变化（如溶解氧为2mg/L

时，系数取 $0.05d^{-1}$ ）。这一系列修正使得模型能够更真实地刻画多要素耦合下的硝酸盐循环过程。优化后重新模拟，硝酸盐氮及其他阴离子效果显著提升（RMSE降至0.3-1.2mg/L，氟、氯离子NSE达0.92，其余NSE均 $\geq 0.85$ ），表明模型在机理表达和参数化方面均得到改善，增强了其在复杂水环境模拟中的可靠性和预测能力，可用于预测分析。

##### 4.3 模型应用与预测

模型聚焦污染风险预测与防控评估，设三种情景模拟未来5年阴离子污染物分布，均基于同一工业园区排污基础数据，但排污量及处理措施不同。情景一为现状排放，按实际排污量模拟，下游汇合区硝酸盐氮浓度超标，10km处达35mg/L，污染严重；情景二削减30%工业排污，模拟显示污染物浓度整体降25%-30%，但硝酸盐浓度仍未达标；情景三强化污水处理，总磷去除率提至90%，模拟显示磷酸根浓度降至0.3mg/L以下，硝酸盐氮等也显著降低。基于模拟结果，提出“源头减排+过程拦截”建议，为工业园区水污染防治决策提供量化支撑。

#### 结束语

本文以离子色谱技术为核心，系统开展水环境阴离子污染物监测与迁移转化研究，明确了IC方法优化路径，开发出兼具高灵敏度与可靠性的监测技术，为阴离子精准测定提供技术支撑。未来研究可拓展离子色谱-质谱联用技术，实现新型阴离子污染物的同步检测，同时结合长期监测数据优化模型参数，提升对极端水文条件下污染物迁移转化的模拟能力，为水环境安全保障提供更全面的技术支撑。

#### 参考文献

- [1]周亮,吴国权,陈洁.离子色谱法同时测定饮用水中铬(六价)、草甘膦、高氯酸根及7种阴离子含量[J].中国酿造,2024,43(12):271-275.
- [2]张华,陈明.河流底泥污染治理技术研究进展与展望[J].环境科学与技术,2023,47(8):132-137.
- [3]李晓霞,赵建国.底泥中污染物的环境行为及其生态风险评估[J].环境科学研究,2022,35(5):789-796.