

## **Appendix C:**

### **Basic Physicochemical Properties of Individual Gaseous Hazardous Air Pollutants and Mixtures**

Table C.1. Basic physicochemical properties of individual hazardous air pollutants at 298.2 K.

298.2 K 下个别有害空气污染物的基本理化性质

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sup>a</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
1	乙醛 Acetaldehyde	75-07-0	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O	44.05	-123.0	20.1	47.2	51.8	0.1281	1.450
2	乙酰胺 Acetamide	60-35-5	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> NO	59.07	81.0	222.0	54.0	55.5	0.1153	1.402
3	乙腈; 氰化甲烷 Acetonitrile	75-05-8	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N	41.05	-43.8	81.6	43.3	56.3	0.1342	1.393
4	乙酰苯 Acetophenone	98-86-2	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O	120.15	20.0	202.0	133.5	140.4	0.07241	0.8054
5	2-乙酰氨基苄 2-Acetylamino-fluorene	53-96-3	C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> NO	223.28	193.0	NA <sup>a</sup>	224.3	248.0	0.05473	0.4807
6	丙烯醛 Acrolein	107-02-8	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O	56.06	-87.7	52.6	63.1	66.6	0.1094	1.279
7	丙烯酰胺 Acrylamide	79-06-1	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> NO	71.08	84.5	192.6	69.9	80.8	0.1012	1.151
8	丙烯酸 Acrylic acid	79-10-7	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	72.06	12.3	141.0	69.2	83.2	0.1014	1.132
9	丙烯腈 Acrylonitrile	107-13-1	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N	53.06	-83.5	77.3	59.2	71.1	0.1133	1.235
10	烯丙基氯 Allyl chloride	107-05-1	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> Cl	76.53	-134.5	45.1	80.3	87.5	0.09463	1.099
11	4-氨基联二苯 4-Aminobiphenyl	92-67-1	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N	169.23	53.5	302.0	184.2	198.8	0.06097	0.6032
12	苯胺 Aniline	62-53-3	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N	93.13	-6.0	184.1	97.8	110.2	0.08504	0.9533
13	邻氨基苯甲醚 o-Anisidine	90-04-0	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> NO	123.16	6.2	224.0	124.4	143.4	0.07449	0.7928
14	苯 Benzene	71-43-2	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	78.11	5.5	80.0	91.0	96.0	0.08962	1.040
15	联苯胺 Benzidine	92-87-5	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	184.24	120	401.0	191.0	213.0	0.05962	0.5644
16	三氯甲苯 Benzotrichloride	98-07-7	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>3</sub>	195.48	-5.0	221.0	167.6	180.9	0.06299	0.6568
17	氯化苄 Benzyl chloride	100-44-7	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> Cl	126.59	-45.0	179.0	130.2	124.3	0.07284	0.8791
18	联苯 Biphenyl	92-52-4	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub>	154.21	69.0	256.1	177.3	199.6	0.06247	0.6009
19	双氯甲醚 Bis(chloromethyl) ether	542-88-1	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub> O	114.96	-41.5	106.0	89.2	102.7	0.08636	0.9974
20	邻苯二甲酸二(2-乙基己基)酯 Bis(2-ethylhexyl)phthalate	117-81-7	C <sub>24</sub> H <sub>38</sub> O <sub>4</sub>	390.57	-55.0	384.0	475.5	524.8	0.03724	0.1002
21	三溴甲烷 Bromoform	75-25-2	CHBr <sub>3</sub>	252.75	8.0	149.1	83.9	99.5	0.08357	1.017
22	1,3-二丁烯 1,3-Butadiene	106-99-0	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>	54.09	-108.9	-4.4	77.5	81.4	0.1013	1.146
23	己内酰胺 Caprolactan	105-60-2	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> NO	113.16	NA	NA	113.2	133.9	0.07823	0.8336
24	克菌丹 Captan	133-06-2	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>3</sub> NO <sub>2</sub> S	300.59	172.5	NA	227.6	262.5	0.05355	0.4501
25	西维因 Carbaryl	63-25-2	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	201.22	145.0	NA	196.4	220.8	0.05853	0.5445

Table C.1. (Cont.).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子量 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
26	二硫化碳 Carbon disulfide	75-15-0	CS <sub>2</sub>	76.14	-111.5	46.0	61.7	66.0	0.1053	1.285
27	四氯化碳 Carbon tetrachloride	56-23-5	CCl <sub>4</sub>	153.82	-23.0	76.8	99.9	113.2	0.08024	0.9366
28	硫化羰 Carbonyl sulfide	463-58-1	COS	60.07	-138.8	-50.0	44.9	48.7	0.1234	1.493
29	邻苯二酚 Catechol	120-80-9	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	110.11	105.0	245.0	103.2	110.8	0.08159	0.9499
30	氯胺 Chloramben	133-90-4	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	206.03	200.0	NA	163.3	180.3	0.06351	0.6587
31	顺式氯丹 <i>cis</i> -Chlordane	5103-71-9	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>8</sub>	409.78	108	NA	286.0	332.5	0.04756	0.3256
32	反氯丹 <i>trans</i> -Chlordane	5103-74-2	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>8</sub>	409.78	104	NA	286.0	332.5	0.04756	0.3256
33	氯乙酸 Chloroacetic acid	79-11-8	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> Cl	94.50	63.0	189.3	72.0	89.3	0.09631	1.086
34	氯乙酰苯 2-Chloroacetophenone	532-27-4	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> OCl	154.60	56.5	247.0	152.2	161.3	0.06686	0.7233
35	氯苯 Chlorobenzene	108-90-7	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Cl	112.56	-45.2	131.7	109.7	116.9	0.07933	0.9167
36	克氯苯 Chlorobenzilate	510-15-6	C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> Cl <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	325.19	37.0	157.0 (0.07 mm Hg)	310.5	337.2	0.04613	0.3184
37	三氯甲烷 Chloroform	67-66-3	CHCl <sub>3</sub>	119.38	-63.6	61.1	81.2	92.3	0.08944	1.065
38	氯甲基甲基醚 Chloromethyl methyl ether	107-30-2	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OCl	80.51	-103.5	59.5	70.5	81.8	0.09910	1.143
39	氯丁二烯 Chloroprene	126-99-8	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> Cl	88.54	-130.0	59.4	96.2	102.3	0.08615	0.9996
40	邻甲苯酚 <i>o</i> -Cresol	95-48-7	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O	108.14	29.8	191.0	117.6	125.6	0.07732	0.8727
41	间甲酚 <i>m</i> -Cresol	108-39-4	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O	108.14	11.8	202.2	117.6	125.6	0.07732	0.8727
42	对甲酚 <i>p</i> -Cresol	106-44-5	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O	108.14	35.5	201.9	117.6	125.6	0.07732	0.8727
43	乙酸辛酯 <i>o</i> -Cresyl acetate	533-18-6	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	150.18	NA	208.0	160.1	177.2	0.06552	0.6685
44	异丙基苯 Cumene	98-82-8	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	120.20	-96.0	152.4	152.5	162.6	0.06830	0.7186
45	重氮甲烷 Diazomethane	334-88-3	CH <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	42.04	-145.0	-23.0	29.6	53.4	0.1535	1.429
46	二苯并呋喃 Dibenzofuran	132-64-9	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> O	168.2	86.5	287.0	160.5	176.7	0.06489	0.6702
47	二溴氯丙烷 1,2-Dibromo-3-chloropropane	96-12-8	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> ClBr <sub>2</sub>	236.34	NA	196.0	124.1	141.5	0.07110	0.8005
48	2,4-二氯苯氧乙酸 2,4-Dichloro-phenoxyacetic acid	94-75-7	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub> Cl <sub>2</sub>	221.04	140.5	160.0 (0.4 mm Hg)	183.1	209.8	0.06008	0.5727
49	1,1-二氯-2,2-双(4-氯苯基)乙烯 1,1-Dichloro-2,2-bis( <i>p</i> -chlorophenyl)ethylene	72-55-9	C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>4</sub>	318.03	89.0	NA	288.5	305.2	0.04782	0.3701

50	邻苯二甲酸二丁酯 Dibutyl phthalate	84-74-2	C <sub>16</sub> H <sub>22</sub> O <sub>4</sub>	278.35	-35.0	340.0	311.4	347.2	0.04639	0.3034
----	-------------------------------	---------	--	--------	-------	-------	-------	-------	---------	--------

Table C.1. (Cont.).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
51	对二氯苯 1,4-Dichlorobenzene	106-46-7	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	147.00	52.7	174.0	128.3	137.8	0.07236	0.8164
52	3,3'-二氯联苯胺 3,3'-Dichlorobenzidine	91-94-1	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	253.13	165.0	NA	228.4	265.0	0.05390	0.4448
53	二氯乙醚 Dichloroethyl ether	111-44-4	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub> O	143.01	-51.9	178.5	130.2	147.9	0.07206	0.7742
54	反式-1,3-二氯丙烯 <i>trans</i> -1,3-Dichloropropene	10061-02-6	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	110.97	NA	112.0	98.9	108.4	0.08301	0.9633
55	2,2-二氯乙烯基二甲基磷酸酯 Dichlorvos	62-73-7	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> P	220.98	NA	140.0 (20 mm Hg)	169.1	193.1	0.06227	0.6194
56	二乙醇胺 Diethanolamine	111-42-2	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	105.14	28.0	268.8	105.8	126.7	0.08114	0.8672
57	硫酸二乙酯 Diethyl sulfate	64-67-5	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> SO <sub>4</sub>	154.19	-24.0	208.0	134.0	155.0	0.07073	0.7465
58	二乙二醇丁醚 Diethylene glycol monobutyl ether	112-34-5	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O <sub>3</sub>	162.23	-68.0	231.0	187.1	213.3	0.06073	0.5635
59	邻二茴香胺 3,3'-Dimethoxybenzidine	119-90-4	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	244.30	137.0	NA	244.3	279.4	0.05234	0.4166
60	二甲基黄 4-Dimethylamino-azobenzene	60-11-7	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	225.30	117.0	NA	234.3	275.9	0.05325	0.4233
61	N,N-二甲基苯胺 N,N-Dimethylaniline	121-69-7	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N	121.18	2.4	194.1	138.9	156.1	0.07111	0.7423
62	4,4'-二氨基-3,3'-二甲基联苯 3,3'-Dimethylbenzidine	119-93-7	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	212.30	131.5	NA	232.0	257.4	0.05404	0.4605
63	二甲氨基甲酰氯 Dimethylcarbamyl chloride	79-44-7	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> NOCl	107.54	-33.0	167.0	93.2	110.6	0.08538	0.9508
64	N,N-二甲基甲酰胺 N,N-Dimethylformamide	68-12-2	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO	73.10	-60.4	153.0	74.5	89.7	0.09820	1.083
65	偏二甲肼 1,1-Dimethylhydrazine	57-14-7	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	60.10	-58.0	63.9	59.4	90.4	0.1108	1.078

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
66	邻苯二甲酸二甲酯 Dimethyl phthalate	131-11-3	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	194.19	5.5	283.7	188.2	206.4	0.05981	0.5819
67	硫酸二甲酯 Dimethyl sulfate	77-78-1	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> SO <sub>4</sub>	126.13	-27.0	76.0 (15 mm Hg)	93.0	110.6	0.08411	0.9508
68	4,6-二硝基邻甲酚 4,6-Dinitro- <i>o</i> -cresol	534-52-1	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	198.14	86.5	NA	146.5	172.4	0.06681	0.6844
69	2,4-二硝基酚 2,4-Dinitrophenol	51-28-5	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	184.11	115.5	sublimes	126.0	150.2	0.07171	0.7650
70	2,4-二硝基甲苯 2,4-Dinitrotoluene	121-14-2	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	182.14	71.0	300.0 decomposes	140.4	165.0	0.06845	0.7098
71	1,4-二氧六环 1,4-Dioxane	123-91-1	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	88.11	11.8	101.5	76.0	93.6	0.09502	1.056
72	二苯肼 1,2-Diphenylhydrazine	122-66-7	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	184.24	131.0	NA	191.0	216.0	0.05962	0.5565
73	环氧氯丙烷,AR Epichlorohydrin	13403-37-7	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> ClO	92.53	-26.0	117.0	68.1	88.9	0.09874	1.089
74	1,2-环氧丁烷 1,2-Epoxybutane	106-88-7	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	72.11	-150.0	63.3	69.9	90.2	0.1010	1.080
75	丙烯酸乙酯 Ethyl acrylate	140-88-5	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	100.12	-71.2	99.4	110.2	123.4	0.08017	0.8833

Table C.1. (Cont.).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
76	乙基苯 Ethylbenzene	100-41-4	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	106.17	-94.9	136.1	132.0	140.4	0.07369	0.8052
77	氨基甲酸乙酯 Ethyl carbamate	51-79-6	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	89.09	49.0	185.0	80.6	100.6	0.09264	1.010
78	乙基氯 Ethyl chloride	75-00-3	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> Cl	64.52	-138.7	12.3	64.4	72.7	0.1061	1.220
79	二溴乙烷 Ethylene dibromide	106-93-4	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Br <sub>2</sub>	187.87	9.9	131.6	84.8	98.4	0.08467	1.024
80	1,2-二氯乙烷 Ethylene dichloride	107-06-2	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	98.96	-35.5	83.5	83.0	93.6	0.09040	1.056
81	乙二醇 Ethylene glycol	107-21-1	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	62.07	-13.0	197.3	57.9	66.6	0.1113	1.279
82	乙二醇单丁醚 Ethylene glycol monobutyl ether	111-76-2	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	118.18	-74.8	168.4	140.0	159.0	0.07104	0.7315
83	乙烯亚胺 Ethyleneimine	151-56-4	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N	43.07	-77.9	56.0	47.9	63.7	0.1279	1.309
84	环氧乙烷 Ethylene oxide	75-21-8	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O	44.05	-111.7	10.6	28.9	45.8	0.1534	1.535
85	乙烯硫脲 Ethylene thiourea	96-45-7	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> S	102.16	131.0	NA	93.5	118.3	0.08574	0.9092
86	1,1-二氯乙烷 Ethylidene dichloride	75-34-3	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	98.96	-96.9	57.4	83.0	93.6	0.09040	1.056
87	甲醛 Formaldehyde	50-00-0	CH <sub>2</sub> O	30.03	-92.0	-19.1	26.6	29.6	0.1720	1.845
88	七氯 Heptachlor	76-44-8	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>7</sub>	373.30	95.5	NA	230.9	274.6	0.05274	0.4258
89	六氯苯 Hexachlorobenzene	118-74-1	C <sub>6</sub> Cl <sub>6</sub>	284.78	231.8	325.0	203.1	221.4	0.05657	0.5428
90	六氯丁二烯 Hexachlorobutadiene	87-68-3	C <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	260.76	-21.0	215.0	189.6	206.8	0.05861	0.5808
91	α-六氯环己烷(α)-1,2,3,4,5,6- Hexachlorocyclohexane	60291-32-9	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>6</sub>	290.83	159.5	288.0	217.0	243.6	0.05482	0.4903
92	γ-六氯环己烷(γ)-1,2,3,4,5,6- Hexachlorocyclohexane	58-89-9	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>6</sub>	290.83	112.5	323.4	217.0	243.6	0.05482	0.4903

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
93	六氯环戊二烯 Hexachloro-cyclopentadiene	77-47-4	C <sub>5</sub> Cl <sub>6</sub>	272.77	-9	239.0	187.2	210.1	0.05882	0.5719
94	六氯乙烷Hexachloroethane	67-72-1	C <sub>2</sub> Cl <sub>6</sub>	236.74	187.0 (tripl. pt.)	NA	157.8	177.2	0.06397	0.6685
95	1,6-己二异氰酸酯 Hexamethylene diisocyanate	822-06-0	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	168.20	NA	255.0	176.2	208.8	0.06223	0.5754
96	六甲基磷酰三胺 Hexamethyl-phosphoramidate	680-31-9	C <sub>6</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> OP	179.20	7.0	232.5	179.6	225.3	0.06142	0.5332
97	正己烷Hexane	110-54-3	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	86.18	-95.3	68.7	127.7	140.6	0.07660	0.8043
98	肼Hydrazine	302-01-2	N <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	32.05	1.0	113.6	18.3	35.8	0.1922	1.709
99	对苯二酚Hydroquinone	123-31-9	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	110.11	172.3	287.0	103.2	110.8	0.08159	0.9497
100	异佛尔酮Isophorone	78-59-1	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O	138.21	-8.1	215.2	163.3	177.4	0.06541	0.6679

Table C.1. (Cont.).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
101	顺丁烯二酸酐 Maleic anhydride	108-31-6	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	98.06	52.8	202	68.3	79.8	0.09796	1.159
102	甲醇 Methanol	67-56-1	CH <sub>4</sub> O	32.04	-97.6	64.6	31.3	37.0	0.1598	1.686
103	甲氧DDT Methoxychlor	72-43-5	C <sub>16</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>3</sub>	345.66	87.0		327.7	358.1	0.04485	0.2877
104	溴甲烷 Methyl bromide	74-83-9	CH <sub>3</sub> Br	94.94	-93.7	3.5	44.7	52.9	0.1153	1.435
105	氯甲烷 Methyl chloride	74-87-3	CH <sub>3</sub> Cl	50.49	-97.7	-24.0	43.8	50.5	0.1284	1.467
106	1,1,1-三氯乙烷 Methyl chloroform	71-55-6	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub>	133.41	-30.4	74.0	101.7	114.5	0.08059	0.9293
107	甲乙酮 Methyl ethyl ketone	78-93-3	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	72.11	-86.7	79.6	88.2	96.2	0.09180	1.039
108	甲基胍 Methylhydrazine	60-34-4	CH <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	46.07	-52.4	87.5	38.8	59.5	0.1367	1.355
109	碘甲烷 Methyl iodide	74-88-4	CH <sub>3</sub> I	141.94	-66.4	42.5	52.6	62.9	0.1047	1.317
110	4-甲基-2-戊酮 Methyl isobutyl ketone	108-10-1	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	100.16	-84.0	116.5	129.2	140.6	0.07486	0.8043
111	异氰酸甲酯 Methyl isocyanate	624-83-9	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NO	57.05	-45.0	39.5	49.4	63.7	0.1200	1.309
112	甲基丙烯酸甲酯 Methyl methacrylate	80-62-6	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	100.12	-48.0	100.5	110.2	121.8	0.08017	0.8913
113	甲基叔丁基醚 Methyl tert-butyl ether	1634-04-4	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	88.15	-108.6	55.2	113.3	129.4	0.08043	0.8544
114	4,4'-二氨基-3,3'-二氯二苯甲烷 4,4'-Methylenebis(2-chloroaniline)	101-14-4	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	267.16	NA	NA	248.9	277.0	0.05166	0.4212
115	二氯甲烷 Methylene chloride	75-09-2	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	84.93	-95.1	40.0	62.5	71.4	0.1033	1.232
116	4,4'-亚甲基双(异氰酸苯酯) 4,4'-Methylenediphenyl diisocyanate	101-68-8	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	250.26	NA	NA	246.3	275.0	0.05208	0.4250
117	4,4'-二氨基二苯甲烷 4,4'-Methylenedianiline	101-77-9	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	198.27	92.5	398	211.5	235.2	0.05664	0.5095



No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
118	萘 Naphthalene	91-20-3	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	128.18	80.2	217.9	140.9	147.6	0.07029	0.7754
119	硝基苯 Nitrobenzene	98-95-3	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	123.11	5.7	210.8	105.4	124.5	0.07997	0.8778
120	4-硝基联苯 4-Nitrobiphenyl	92-93-3	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	199.21	114	340.0	191.8	208.0	0.05920	0.5776
121	4-硝基苯酚 4-Nitrophenol	100-02-7	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	139.11	113.8	279.0	111.5	126.8	0.07722	0.8697
122	2-硝基丙烷 2-Nitropropane	79-46-9	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	89.09	-91.3	120.2	80.6	97.4	0.09264	1.031
123	甲基-1-亚硝基脲 N-Nitroso-N-methylurea	684-93-5	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	103.08	123.5 decomposes	NA	69.2	101.9	0.09691	1.002
124	N-亚硝基二甲胺 N-Nitrosodimethylamine	62-75-9	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	74.08	NA	154.0	60.9	87.7	0.1063	1.098
125	N-亚硝基吗啉 N-Nitrosomorpholine	59-89-2	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	116.12	29.0	225.0	85.1	135.7	0.08797	0.8256

Table C.1. (Cont.).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
126	乙基对硫磷 Parathion	56-38-2	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>5</sub> PS	291.26	6.1	375.0	253.9	288.0	0.05097	0.4005
127	五氯硝基苯 Pentachloro-nitrobenzene	82-68-8	C <sub>6</sub> Cl <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	295.34	144.0	328.0 decomposes	198.9	223.9	0.05702	0.5366
128	五氯酚 Pentachlorophenol	87-86-5	C <sub>6</sub> Cl <sub>5</sub> OH	266.34	174.0	310.0 decomposes	190.5	204.2	0.05843	0.5879
129	苯酚 Phenol	108-95-2	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH	94.11	40.9	181.8	97.1	99.7	0.07844	1.016
130	对苯二胺 <i>p</i> -Phenylenediamine	106-50-3	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	108.14	146.0	267.0	104.7	124.4	0.07598	0.8783
131	氯代甲酰氯 Phosgene	75-44-5	COCl <sub>2</sub>	98.92	-127.9	8.0	64.0	71.4	0.1004	1.232
132	磷化氢 Phosphine	7803-51-2	H <sub>3</sub> P	34.00	-133.0	-87.8	29.8	36.7	0.1604	1.716
133	苯酐 Phthalic anhydride	85-44-9	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	148.12	130.8	295.0	118.2	132.5	0.07492	0.8400
134	,3-丙烷磺内酯 1,3-Propane sultone	1120-71-4	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> SO <sub>3</sub>	122.14	32.0	180.0 (30 mm Hg)	84.5	105.6	0.08779	0.9797
135	β-丙内酯 β-Propiolactone	57-57-8	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	72.06	-33.4	162.0	50.9	69.1	0.1144	1.254
136	丙醛 Propionaldehyde	123-38-6	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	58.08	-80.0	48.0	67.7	74.0	0.1057	1.209
137	2-(1-甲基乙氧基)苯基氨基甲酸酯 Propoxur	114-26-1	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	209.25	87.0	decomposes	214.1	248.3	0.05613	0.4800
138	1,2-Dichloropropane	26198-63-0	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>2</sub>	112.99	-100.4	96.4	103.6	115.8	0.08124	0.9223
139	环氧丙烷 Propylene oxide	75-56-9	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	58.08	-111.9	35.0	49.4	70.5	0.1197	1.241
140	2-甲基氮丙啶 1,2-Propylenimine	75-55-8	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N	57.10	NA	67.0	50.1	76.3	0.1194	1.188
141	喹啉 Quinoline	91-22-5	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N	129.16	-14.8	237.1	127.2	144.7	0.07345	0.7872

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系 数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系 数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
142	苯醌 Quinone	106-51-4	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	108.10	115.7	sublimes	98.6	103.4	0.08334	0.9929
143	苯乙烯 Styrene	100-42-5	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub>	104.15	-31.0	145.0	127.4	133.0	0.07500	0.8377
144	氧化苯乙烯 Styrene oxide	96-09-3	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O	120.15	-35.6	194.1	115.2	138.0	0.07718	0.8155
145	2,3,7,8-四氯二苯并对-二噁英 (硫丙磷) 2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo- <i>p</i> - dioxin	1746-01-6	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	321.98	305.0	446.5	241.4	267.8	0.05196	0.4392
146	四氯乙烷 1,1,2,2-Tetrachloroethane	79-34-5	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	167.85	-43.8	146.5	120.4	135.4	0.07361	0.8270
147	四氯乙烯 Tetrachloroethylene	127-18-4	C <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	165.83	-22.3	121.3	115.8	128.0	0.07492	0.8610
148	甲苯 Toluene	108-88-3	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	92.14	-94.9	110.6	111.5	118.0	0.08054	0.9097
149	2,4-二氨基甲苯 Toluene-2,4-diamine	95-80-7	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	122.17	99.0	292.0	125.2	146.6	0.07663	0.7780
150	2,4-甲苯二异氰酸酯 2,4-Toluene diisocyanate	584-84-9	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	174.16	20.5	251	160.0	186.4	0.06481	0.6395

Table C.1. (Cont.).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
151	邻甲苯胺 o-Toluidine	95-53-4	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N	107.16	-16.3	200.3	118.3	132.4	0.07720	0.8405
152	氯代莰烯 Toxaphene	8001-35-2	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> Cl <sub>8</sub>	413.80	65-90	NA	313.5	358.8	0.04552	0.2867
153	三氯苯 1,2,4-Trichlorobenzene	120-82-1	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub>	181.45	17.0	213.5	147.0	158.7	0.06710	0.7326
154	1,1,2-三氯乙烷 1,1,2-Trichloroethane	79-00-5	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub>	133.41	-36.6	113.8	101.7	114.5	0.08059	0.9293
155	三氯乙烯 Trichloroethylene	79-01-6	C <sub>2</sub> HCl <sub>3</sub>	131.39	-84.7	87.2	97.1	107.1	0.08229	0.9709
156	2,4,5-三氯苯酚 2,4,5-Trichlorophenol	95-95-4	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub> O	197.45	69.0	247.0	153.1	166.1	0.06554	0.7060
157	2,4,6-三氯酚 2,4,6-Trichlorophenol	88-06-2	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub> O	197.45	69.0	246.0	153.1	166.1	0.06554	0.7060
158	三乙胺 Triethylamine	121-44-8	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N	101.19	-114.7	89.0	134.6	156.3	0.07346	0.7415
159	2,6-二硝基-N,N-二正丙基 -4-三氟甲基苯胺(氟乐 灵) Trifluralin	1582-09-8	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	335.28	49.0	140.0 (4.2 mm Hg)	307.5	339.1	0.04629	0.3155
160	2,2,4-三甲基戊烷 2,2,4-Trimethylpentane	540-84-1	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	114.23	-107.3	99.2	168.8	185.0	0.06561	0.6438
161	醋酸乙烯酯 Vinyl acetate	108-05-4	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	86.09	-93.2	72.5	89.7	101.2	0.08902	1.006
162	溴乙烯 Vinyl bromide	593-60-2	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Br	106.96	-137.8	15.8	60.6	67.7	0.1018	1.268
163	氯乙烯 Vinyl chloride	75-01-4	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl	62.50	-153.7	-13.3	59.7	65.3	0.1099	1.292
164	过氯乙烯 Vinylidene chloride	75-35-4	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	96.94	-122.5	31.6	78.4	86.2	0.09276	1.109
165	邻二甲苯 o-Xylene	95-47-6	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	106.17	-25.2	144.5	132.0	140.4	0.07369	0.8052
166	间二甲苯 m-Xylene	108-38-3	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	106.17	-47.8	139.1	132.0	140.4	0.07369	0.8052
167	对二甲苯 p-Xylene	106-42-3	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	106.17	13.2	138.3	132.0	140.4	0.07369	0.8052

<sup>a</sup>NA, not available

Table C.2. Basic physicochemical properties of polychlorinated biphenyl (PCB) congeners at 298.2 K.

298.2 K 下多氯联苯(PCB)同族化合物的基本理化性质

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
1	2-氯联苯 2-Monochloro	2051-60-7	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> Cl	188.66	34.0	274	196.0	205.5	0.05883	0.5843
2	3-氯联苯 3-Monochloro	2051-61-8	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> Cl	188.66	25.1	284	196.0	205.5	0.05883	0.5843
3	4-氯联苯 4-Monochloro	2051-62-9	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> Cl	188.66	77.9	291	196.0	205.5	0.05883	0.5843
4	2,2'-二氯联苯 2,2'-Dichloro	13029-08-8	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	61.0	NA <sup>a</sup>	214.7	226.4	0.05585	0.5305
5	2,3-二氯联苯 2,3-Dichloro	16605-91-7	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	NA	NA	214.7	226.4	0.05585	0.5305
6	2,3'-二氯联苯 2,3'-Dichloro	25569-80-6	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	NA	NA	214.7	226.4	0.05585	0.5305
7	2,4-二氯联苯 2,4-Dichloro	33284-50-3	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	24.4	NA	214.7	226.4	0.05585	0.5305
8	2,4'-二氯联苯 2,4'-Dichloro	34883-43-7	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	43.0	NA	214.7	226.4	0.05585	0.5305
9	2,5-二氯联苯 2,5-Dichloro	34883-39-1	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	25.1	NA	214.7	226.4	0.05585	0.5305
10	2,6-二氯联苯 2,6-Dichloro	33146-45-1	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	34.9	NA	214.7	226.4	0.05585	0.5305
11	3,3-二氯联苯 3,3'-Dichloro	2050-67-1	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	29.0	322	214.7	226.4	0.05585	0.5305
12	3,4-二氯联苯 3,4-Dichloro	2974-92-7	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	49.0	NA	214.7	226.4	0.05585	0.5305
13	3,4'-二氯联苯 3,4'-Dichloro	2974-90-5	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	NA	NA	214.7	226.4	0.05585	0.5305
14	3,5-二氯联苯 3,5-Dichloro	34883-41-5	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	31.0	NA	214.7	226.4	0.05585	0.5305
15	4,4'-二氯联苯 4,4'-Dichloro	2050-68-2	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub>	223.10	149.0	315	214.7	226.4	0.05585	0.5305

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
16	2,2',3-三氯联苯 2,2',3-Trichloro	38444-78-9	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	28.0	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
17	2,2,4-三氯联苯 2,2',4-Trichloro	37680-66-3	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
18	2,2,5-三氯联苯醚 2,2',5-Trichloro	37680-65-2	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	44.0	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
19	2,2,6-三氯联苯 2,2',6-Trichloro	38444-73-4	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
20	2,3,3'-三氯联苯 2,3,3'-Trichloro	38444-84-7	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
21	2,3,4-三氯联苯醚 2,3,4-Trichloro	55702-46-0	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	102.0	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
22	2,3,4'-三氯联苯 2,3,4'-Trichloro	38444-85-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
23	2,3,5-三氯联苯 2,3,5-Trichloro	55720-44-0	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
24	2,3,6-三氯联苯 2,3,6-Trichloro	58702-45-9	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
25	2,3',4-三氯联苯 2,3',4-Trichloro	55712-37-3	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821

Table C.2. (续表).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
26	2,3',5-三氯联苯 2,3',5-Trichloro	38444-81-4	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	40.5	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
27	2,3',6-三氯联苯 2,3',6-Trichloro	38444-76-7	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
28	2,4,4'-三氯联苯 2,4,4'-Trichloro	7012-37-5	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	57.0	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
29	2,4,5-三氯联苯 2,4,5-Trichloro	15862-07-4	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	78.0	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
30	2,4,6-三氯联苯 2,4,6-Trichloro	35693-92-6	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	62.5	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
31	2,4,5-三氯联苯醚 2,4',5-Trichloro	16606-02-3	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	67.0	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
32	2,4',6-三氯联苯 2,4',6-Trichloro	38444-77-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
33	2',3,4-三氯联苯 2',3,4-Trichloro	38444-86-9	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	60.0	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
34	2',3,5-三氯联苯 2',3,5-Trichloro	37680-68-5	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
35	3,3',4-三氯联苯 3,3',4-Trichloro	37680-69-6	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	87.0	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
36	3,3',5-三氯联苯 3,3',5-Trichloro	38444-87-0	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
37	3,4,4'-三氯联苯 3,4,4'-Trichloro	38444-90-5	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	87.0	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
38	3,4,5-三氯联苯 3,4,5-Trichloro	53555-66-1	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
39	3,4',5-三氯联苯 3,4',5-Trichloro	38444-88-1	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	NA	NA	233.4	247.3	0.05332	0.4821
40	2,2',3,3'-四氯联苯 2,2',3,3'-Tetrachloro	38444-93-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	121.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
41	2,2',3,4-四氯联苯 2,2',3,4-Tetrachloro	52663-59-9	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
42	2,2',3,4'-四氯联苯 2,2',3,4'-Tetrachloro	36559-22-5	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
43	2,2',3,5-四氯联苯 2,2',3,5-Tetrachloro	70362-46-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
44	2,2',3,5'-四氯联苯 2,2',3,5'-Tetrachloro	41464-39-5	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	47.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
45	2,2',3,6-四氯联苯 2,2',3,6-Tetrachloro	70362-45-7	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
46	2,2',3,6'-四氯联苯 2,2',3,6'-Tetrachloro	41464-47-5	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
47	2,2',4,4'-四氯联苯 2,2',4,4'-Tetrachloro	2437-79-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	83.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
48	2,2',4,5-四氯联苯 2,2',4,5-Tetrachloro	70362-47-9	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
49	2,2',4,5'-四氯联苯 2,2',4,5'-Tetrachloro	41464-40-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	64.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
50	2,2',4,6-四氯联苯 2,2',4,6-Tetrachloro	62796-65-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384



Table C.2. (续表).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
51	2,2',4,6'-四氯联苯 2,2',4,6'-Tetrachloro	65194-04-7	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
52	2,2,5,5-四氯联苯 2,2',5,5'-Tetrachloro	35693-99-3	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	87.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
53	2,2',5,6'-四氯联苯 2,2',5,6'-Tetrachloro	41464-41-9	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	104.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
54	2,2',6,6'-四氯联苯 2,2',6,6'-Tetrachloro	15968-05-5	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	198.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
55	2,3,3',4-四氯联苯 2,3,3',4-Tetrachloro	74338-24-2	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
56	2,3,3',4'-四氯联苯 2,3,3',4'-Tetrachloro	41464-43-1	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
57	2,3,3',5-四氯联苯 2,3,3',5-Tetrachloro	70424-67-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
58	2,3,3',5'-四氯联苯 2,3,3',5'-Tetrachloro	41464-49-7	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
59	2,3,3',6-四氯联苯 2,3,3',6-Tetrachloro	74472-33-6	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
60	2,3,4,4'-四氯联苯 2,3,4,4'-Tetrachloro	33025-41-1	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	142.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
61	2,3,4,5-四氯联苯 2,3,4,5-Tetrachloro	33284-53-6	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	92.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
62	2,3,4,6-Tetrachloro	54230-23-7	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
63	2,3,3',4,6-五氯联苯 2,3,4',5-Tetrachloro	74472-35-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
64	2,3,4',6-四氯联苯 2,3,4',6-Tetrachloro	52663-58-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
65	2,3,5,6-四氯联苯 2,3,5,6-Tetrachloro	33284-54-7	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	79.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
66	2,3',4,4'-四氯联苯 2,3',4,4'-Tetrachloro	32598-10-0	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	124.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
67	2,3",4,5-四氯联苯 2,3',4,5-Tetrachloro	73575-53-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
68	2,3',4,5'-四氯联苯 2,3',4,5'-Tetrachloro	73575-52-7	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
69	2,3',4,6-四氯联苯 2,3',4,6-Tetrachloro	60233-24-1	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
70	2,3,4,5-四氯联苯醚 2,3',4',5-Tetrachloro	32598-11-1	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	104.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
71	2,3',4',6-四氯联苯 2,3',4',6-Tetrachloro	41464-46-4	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
72	2,4',5,5'-四氯联苯 2,4',5,5'-Tetrachloro	41464-42-0	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
73	2,3',5',6-四氯联苯 2,3',5',6-Tetrachloro	74338-23-1	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
74	2,4,4',5-四氯联苯 2,4,4',5-Tetrachloro	32690-93-0	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
75	2,4,4',6-四氯联苯 2,4,4',6-Tetrachloro	32598-12-2	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384

Table C.2. (续表).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
76	2',3,4,5-四氯联苯 2',3,4,5-Tetrachloro	70362-48-0	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
77	3,3,4,4-四氯联苯 3,3',4,4'-Tetrachloro	32598-13-3	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	180.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
78	3,3',4,5-四氯联苯 3,3',4,5-Tetrachloro	70362-49-1	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
79	3,3',4,5'-四氯联苯 3,3',4,5'-Tetrachloro	41464-48-6	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
80	3,3',5,5'-四氯联苯 3,3',5,5'-Tetrachloro	33284-52-5	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	164.0	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
81	3,4,4',5-四氯联苯 3,4,4',5-Tetrachloro	70362-50-4	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>4</sub>	291.99	NA	NA	252.1	268.2	0.05113	0.4384
82	2,2',3,3',4-五氯联苯 2,2',3,3',4-Pentachloro	52663-62-4	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
83	2,2',3,3',5-五氯联苯 2,2',3,3',5-Pentachloro	60145-20-2	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
84	2,2',3,3',6-戊氯联苯 2,2',3,3',6-Pentachloro	52663-60-2	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
85	2,2',3,4,4'-五氯联苯醚 2,2',3,4,4'-Pentachloro	65510-45-4	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
86	2,2',3,4,5-戊氯联苯 2,2',3,4,5-Pentachloro	55312-69-1	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	100.0	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
87	2,2',3,4,5'-戊氯联苯 2,2',3,4,5'-Pentachloro	38380-02-8	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	114.0	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
88	2,2',3,4,6-戊氯联苯 2,2',3,4,6-Pentachloro	55215-17-3	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	100.0	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
89	2,2',3,4,6'-五氯联苯 2,2',3,4,6'-Pentachloro	73575-57-2	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
90	2,2',3,4',5-戊氯联苯 2,2',3,4',5-Pentachloro	68194-07-0	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
91	2,2',3,4',6-戊氯联苯 2,2',3,4',6-Pentachloro	58194-05-8	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
92	2,2',3,5,5'-戊氯联苯 2,2',3,5,5'-Pentachloro	52663-61-3	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
93	2,2',3,5,6-戊氯联苯 2,2',3,5,6-Pentachloro	73575-56-1	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
94	2,2',3,5,6'-戊氯联苯 2,2',3,5,6'-Pentachloro	73575-55-0	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
95	2,2',3,5',6-戊氯联苯 2,2',3,5',6-Pentachloro	38379-99-6	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	100.0	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
96	2,2',3,6,6'-戊氯联苯 2,2',3,6,6'-Pentachloro	73575-54-9	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
97	2,2',3',4,5-戊氯联苯 2,2',3',4,5-Pentachloro	41464-51-1	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
98	2,2',3',4,6-五氯联苯 2,2',3',4,6-Pentachloro	60233-25-2	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
99	2,2',4,4',5-五氯联苯 2,2',4,4',5-Pentachloro	38380-01-7	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
100	2,2',4,4',6-戊氯联苯 2,2',4,4',6-Pentachloro	39485-83-1	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985

Table C.2. (续表).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
101	2,2,4,5,5-五氯联苯 2,2',4,5,5'-Pentachloro	37680-73-2	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	76.5	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
102	2,2',4,5,6'-五氯联苯 2,2',4,5,6'-Pentachloro	68194-06-9	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
103	2,2',4,5',6-五氯联苯 2,2',4,5',6-Pentachloro	60145-21-3	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
104	2,2',4,6,6'-五氯联苯 2,2',4,6,6'-Pentachloro	56558-16-8	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
105	2,3,3,4,4'-五氯二苯酚 2,3,3',4,4'-Pentachloro	32598-14-4	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	105.0	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
106	2,3,3',4,5-五氯联苯 2,3,3',4,5-Pentachloro	70424-69-0	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
107	2,3,3',4',5-五氯联苯 2,3,3',4',5-Pentachloro	70424-68-9	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
108	2,3,3',4,5'-五氯联苯 2,3,3',4,5'-Pentachloro	70362-41-3	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
109	2,3,3',4,6-五氯联苯 2,3,3',4,6-Pentachloro	74472-35-8	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
110	2,3,3',4',6-五氯联苯 2,3,3',4',6-Pentachloro	38380-03-9	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
111	2,3,3',5,5'-五氯联苯 2,3,3',5,5'-Pentachloro	39635-32-0	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
112	2,3,3',5,6-五氯联苯 2,3,3',5,6-Pentachloro	74472-36-9	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
113	2,3,3',5',6-五氯联苯 2,3,3',5',6-Pentachloro	68194-10-5	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
114	2,3,4,4',5-五氯联苯 2,3,4,4',5-Pentachloro	74472-37-0	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
115	2,3,4,4',6-五氯联苯 2,3,4,4',6-Pentachloro	74472-38-1	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
116	2,3,4,5,6-五氯联苯 2,3,4,5,6-Pentachloro	18259-05-7	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	124.0	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
117	2,3,4',5,6-五氯联苯 2,3,4',5,6-Pentachloro	68194-11-6	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
118	2,3'4,4',5-五氯联苯 2,3'4,4',5-Pentachloro	31508-00-6	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	107.0	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
119	2,3',4,4',6-五氯联苯 2,3',4,4',6-Pentachloro	56558-17-9	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
120	2,3',4,5,5'-五氯联苯 2,3',4,5,5'-Pentachloro	68194-12-7	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
121	2,3',4,5',6-五氯联苯 2,3',4,5',6-Pentachloro	56558-18-0	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
122	2',3,3',4,5-五氯联苯 2',3,3',4,5-Pentachloro	76842-07-4	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
123	2',3,4,4',5-五氯联苯 2',3,4,4',5-Pentachloro	65510-44-3	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
124	2',3,4,5,5'-五氯联苯 2',3,4,5,5'-Pentachloro	70424-70-3	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
125	2',3,4,5,6'-五氯联苯 2',3,4,5,6'-Pentachloro	74472-39-2	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985

Table C.2. (续表).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
126	3,3',4,4',5-五氯联苯 3,3',4,4',5-Pentachloro	57465-28-8	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
127	3,3',4,5,5'-五氯联苯 3,3',4,5,5'-Pentachloro	39635-33-1	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326.44	NA	NA	270.8	289.1	0.04921	0.3985
128	2,2',3,3',4,4'-六氯联苯 2,2',3,3',4,4'-Hexachloro	38380-07-3	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	150.0	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
129	2,2',3,3',4,5--六氯联苯 2,2',3,3',4,5-Hexachloro	55215-18-4	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	85.0	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
130	2,2',3,3',4,5'-六氯联苯 2,2',3,3',4,5'-Hexachloro	52663-66-8	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
131	2,2',3,3',4,6-六氯联苯 2,2',3,3',4,6-Hexachloro	61798-70-7	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
132	2,2',3,3',4,6'-六氯联苯 2,2',3,3',4,6'-Hexachloro	38380-05-1	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
133	2,2',3,3',5,5'-六氯联苯 2,2',3,3',5,5'-Hexachloro	35694-04-3	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
134	2,2',3,3',5,6-六氯联苯 2,2',3,3',5,6-Hexachloro	52704-70-8	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	100.0	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
135	2,2',3,3',5,6'-六氯联苯 2,2',3,3',5,6'-Hexachloro	52744-13-5	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
136	2,2',3,3',6,6'-六氯联苯 2,2',3,3',6,6'-Hexachloro	38411-22-2	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	112.2	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
137	2,2',3,4,4',5-六氯联苯 2,2',3,4,4',5-Hexachloro	35694-06-5	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
138	2,2',3,4,4',5'-六氯联苯 2,2',3,4,4',5'-Hexachloro	35065-28-2	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	80.0	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
139	2,2',3,4,4',6-六氯联苯 2,2',3,4,4',6-Hexachloro	56030-56-9	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
140	2,2',3,4,4',6'-六氯联苯 2,2',3,4,4',6'-Hexachloro	59291-64-4	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
141	2,2',3,4,5,5'-六氯联苯 2,2',3,4,5,5'-Hexachloro	52712-04-6	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
142	2,2',3,4,5,6-六氯联苯 2,2',3,4,5,6-Hexachloro	41411-61-4	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
143	2,2',3,4,5,6'-六氯联苯 2,2',3,4,5,6'-Hexachloro	68194-15-0	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
144	2,2',3,4,5',6-六氯联苯 2,2',3,4,5',6-Hexachloro	68194-14-9	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
145	2,2',3,4,6,6'-六氯联苯 2,2',3,4,6,6'-Hexachloro	74472-40-5	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
146	2,2',3,4',5,5'-六氯联苯 2,2',3,4',5,5'-Hexachloro	51908-16-8	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
147	2,2',3,4',5,6-六氯联苯 2,2',3,4',5,6-Hexachloro	68194-13-8	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
148	2,2',3,4',5,6'-六氯联苯 2,2',3,4',5,6'-Hexachloro	74472-42-7	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
149	2,2',3,4',5',6-六氯联苯 2,2',3,4',5',6-Hexachloro	38380-04-0	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
150	2,2',3,4',6,6'-六氯联苯 2,2',3,4',6,6'-Hexachloro	68194-08-1	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619



Table C.2. (续表).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散 系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系 数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
151	2,2',3,5,5',6-六氯联苯 2,2',3,5,5',6-Hexachloro	52663-63-5	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
152	2,2',3,5,6,6'-六氯联苯 2,2',3,5,6,6'-Hexachloro	68194-09-2	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
153	2,2',4,4',5,5'-六氯联苯 2,2',4,4',5,5'-Hexachloro	35065-27-1	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	103.0	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
154	2,2',4,4',5,6'-六氯联苯 2,2',4,4',5,6'-Hexachloro	60145-22-4	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
155	2,2',4,4',6,6'-六氯联苯 2,2',4,4',6,6'-Hexachloro	33979-03-2	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	114.0	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
156	2,3,3',4,4',5-六氯联苯 2,3,3',4,4',5-Hexachloro	38380-08-4	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
157	2,3,3',4,4',5'-六氯联苯 2,3,3',4,4',5'-Hexachloro	69782-90-7	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
158	2,3,3',4,4',6-六氯联苯 2,3,3',4,4',6-Hexachloro	74472-42-7	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
159	2,3,3',4,5,5'-六氯联苯 2,3,3',4,5,5'-Hexachloro	39635-35-3	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
160	2,3,3',4,5,6-六氯联苯 2,3,3',4,5,6-Hexachloro	41411-62-5	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
161	2,3,3',4,5',6-六氯联苯 2,3,3',4,5',6-Hexachloro	74472-43-8	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
162	2,3,3',4',5,5'-六氯联苯 2,3,3',4',5,5'-Hexachloro	39635-34-2	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
163	2,3,3',4',5,6-六氯联苯 2,3,3',4',5,6-Hexachloro	74472-44-9	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
164	2,3,3',4',5',6--六氯联苯 2,3,3',4',5',6--Hexachloro	74472-45-0	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
165	2,3,3',5,5',6-六氯联苯 2,3,3',5,5',6-Hexachloro	74472-46-1	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
166	2,3,4,4',5,6-六氯联苯 2,3,4,4',5,6-Hexachloro	41411-63-6	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
167	2,3',4,4',5,5'-六氯联苯	52663-72-6	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散 系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系 数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
	2,3',4,4',5,5'-Hexachloro									
168	2,3',4,4',5',6-六氯联苯 2,3',4,4',5',6-Hexachloro	59291-65-5	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	NA	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
169	3,3',4,4',5,5'-六氯联苯 3,3',4,4',5,5'-Hexachloro	32774-16-6	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360.88	202.0	NA	289.4	310.0	0.04751	0.3619
170	2,2,3,3,4,4,5-七氯联苯 2,2',3,3',4,4',5-Heptachloro	35065-30-6	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	135.5	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
171	2,2',3,3',4,4',6--七氯联苯 2,2',3,3',4,4',6-Heptachloro	52663-71-5	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	122.4	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
172	2,2',3,3',4,5,5'--七氯联苯 2,2',3,3',4,5,5'-Heptachloro	52663-74-8	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
173	2,2',3,3',4,5,6--七氯联苯 2,2',3,3',4,5,6-Heptachloro	68194-16-1	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
174	2,2',3,3',4,5,6'--七氯联苯 2,2',3,3',4,5,6'-Heptachloro	38411-25-5	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
175	2,2',3,3',4,5',6--七氯联苯 2,2',3,3',4,5',6-Heptachloro	40186-70-7	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281

Table C.2. (续表).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
176	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,3',4,6,6'-Heptachloro	52663-65-7	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
177	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,3',4',5,6-Heptachloro	52663-70-4	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
178	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,3',5,5',6-Heptachloro	52663-67-9	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
179	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,3',5,6,6'-Heptachloro	52663-64-6	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
180	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,4,4',5,5'-Heptachloro	35065-29-3	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	110.0	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
181	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,4,4',5,6-Heptachloro	74472-47-2	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
182	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,4,4',5,6'-Heptachloro	60145-23-5	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
183	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,4,4',5',6-Heptachloro	52663-69-1	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
184	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,4,4',6,6'-Heptachloro	74472-48-3	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
185	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,4,5,5',6-Heptachloro	52712-05-7	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	149.0	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
186	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,4,5,6,6'-Heptachloro	74472-49-4	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
187	2,2',3,3',4,5',6-七氯联苯 2,2',3,4',5,5',6-Heptachloro	52663-68-0	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
188	2,2',3,4',5,6,6'-七氯联苯 2,2',3,4',5,6,6'-Heptachloro	74487-85-7	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
189	2,3,3',4,4',5,5'-七氯联苯 2,3,3',4,4',5,5'-Heptachloro	39635-31-9	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
190	2,3,3',4,4',5,6-七氯联苯 2,3,3',4,4',5,6-Heptachloro	41411-64-7	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
191	2,3,3',4,4',5,6-七氯联苯 2,3,3',4,4',5,6-Heptachloro	74472-50-7	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
192	2,3,3',4,5,5',6-七氯联苯 2,3,3',4,5,5',6-Heptachloro	74472-51-8	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
193	2,3,3',4',5,5',6-七氯联苯 2,3,3',4',5,5',6-Heptachloro	69782-91-8	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395.33	NA	NA	308.1	330.9	0.04597	0.3281
194	2,2',3,3',4,4',5,5'-八氯联苯 2,2',3,3',4,4',5,5'-Octachloro	35694-08-7	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	159.0	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967
195	2,2',3,3',4,4',5,6-八氯联苯 2,2',3,3',4,4',5,6-Octachloro	52663-78-2	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	NA	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967
196	2,2',3,3',4,4',5,6'-八氯联苯 2,2',3,3',4,4',5,6'-Octachloro	42740-50-1	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	NA	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967
197	2,2',3,3',4,4',6,6'-八氯联苯 2,2',3,3',4,4',6,6'-Octachloro	33091-17-7	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	NA	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967
198	2,2',3,3',4,5,5',6-八氯联苯 2,2',3,3',4,5,5',6-Octachloro	68194-17-2	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	NA	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967
199	2,2',3,3',4,5,5',6'-八氯联苯 2,2',3,3',4,5,5',6'-Octachloro	52663-75-9	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	NA	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967
200	2,2',3,3',4,5,6,6'-八氯联苯 2,2',3,3',4,5,6,6'-Octachloro	52663-73-7	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	NA	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967

Table C.2. (续表).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
201	2,2',3,3',4,5',6,6'-八氯联苯 2,2',3,3',4,5',6,6'-Octachloro	40186-71-8	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	NA	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967
202	2,2',3,3',5,5',6,6'-八氯联苯 2,2',3,3',5,5',6,6'-Octachloro	2136-99-4	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	162.0	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967
203	2,2',3,4,4',5,5',6-八氯联苯 2,2',3,4,4',5,5',6-Octachloro	52663-76-0	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	NA	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967
204	2,2',3,4,4',5,6,6'-八氯联苯 2,2',3,4,4',5,6,6'-Octachloro	74472-52-9	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	NA	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967
205	2,3,3',4,4',5,5',6-八氯联苯 2,3,3',4,4',5,5',6-Octachloro	74472-53-0	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	429.77	NA	NA	326.8	351.8	0.04457	0.2967
206	2,2',3,3',4,4',5,5',6-九氯联苯 2,2',3,3',4,4',5,5',6-Nonachloro	40186-72-9	C <sub>12</sub> HCl <sub>9</sub>	464.22	206.0	NA	345.5	372.7	0.04329	0.2674
207	2,2',3,3',4,4',5,6,6'-九氯联苯 2,2',3,3',4,4',5,6,6'-Nonachloro	52663-79-3	C <sub>12</sub> HCl <sub>9</sub>	464.22	NA	NA	345.5	372.7	0.04329	0.2674
208	2,2',3,3',4,5,5',6,6'-九氯联苯 2,2',3,3',4,5,5',6,6'-Nonachloro	52663-77-1	C <sub>12</sub> HCl <sub>9</sub>	464.22	182.8	NA	345.5	372.7	0.04329	0.2674
209	2,2',3,3',4,4',5,5',6,6'-九氯联苯 2,2',3,3',4,4',5,5',6,6'- Decachloro	2051-24-3	C <sub>12</sub> Cl <sub>10</sub>	498.66	305.9	NA	364.2	393.6	0.04212	0.2401

<sup>a</sup>NA, not available

Table C.3. Basic physicochemical properties of polychlorinated biphenyls (PCBs) at 298.2 K – aroclor mixtures.

阿罗克洛混合——苯基多氯联苯(PCBs)在 298.2 K 的基本物理化学性质。

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )
1	亚老格尔 (多氯联苯) Aroclor 1016	12674-11-2	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257.55	233.4	247.3	0.05332	0.4821
2	亚老格尔 (多氯联苯) Aroclor 1221	111-042-82	C <sub>12</sub> H <sub>8.85</sub> Cl <sub>1.15</sub>	193.83	198.8	208.6	0.05835	0.5759
3	亚老格尔 (多氯联苯) Aroclor 1232	111-411-65	C <sub>12</sub> H <sub>7.96</sub> Cl <sub>2.04</sub>	224.48	215.4	227.2	0.05574	0.5285
4	亚老格尔 (多氯联苯) Aroclor 1242	534-692-19	C <sub>12</sub> H <sub>6.9</sub> Cl <sub>3.1</sub>	260.99	235.2	249.4	0.05309	0.4476
5	亚老格尔 (多氯联苯) Aroclor 1248	126-722-96	C <sub>12</sub> H <sub>6.1</sub> Cl <sub>3.9</sub>	288.55	250.2	266.1	0.05134	0.4426
6	亚老格尔 (多氯联苯) Aroclor 1254	110-976-91	C <sub>12</sub> H <sub>5.04</sub> Cl <sub>4.96</sub>	325.06	270.0	288.3	0.04929	0.4000
7	亚老格尔 (多氯联苯) Aroclor 1260	110-968-25	C <sub>12</sub> H <sub>3.7</sub> Cl <sub>6.3</sub>	371.22	295.0	316.3	0.04703	0.3514

Table C.4. Basic physicochemical properties of dioxins at 298.2 K.  
298.2 K 时二噁英的基本理化性质

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系 数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系 数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
1	二苯并-对-二噁英 Dibenzo- <i>p</i> -dioxin	262-23-4	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	184.20	123.0	283.5	166.6	184.2	0.06340	0.6463
2	氯二苯并-对-二噁英 1-Chlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	39227-53-7	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> Cl	218.65	105.5	315.5	185.3	205.1	0.05979	0.5854
3	2-氯二苯并-对-二噁英 2-Chlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	39227-54-8	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> Cl	218.65	89.0	316.0	185.3	205.1	0.05979	0.5854
4	2,3-二氯二苯并-对-二噁英 2,3-Dichlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	29446-15-9	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	253.09	164.0	358.0	204.0	226.0	0.05678	0.5315
5	2,7-二氯二苯并-对-二噁英 2,7-Dichlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	33857-26-0	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	253.09	210.0	373.5	204.0	226.0	0.05678	0.5315
6	2,8-二氯恶蒎 2,8-Dichlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	38964-22-6	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	253.09	151.0	NA <sup>a</sup>	204.0	226.0	0.05678	0.5315
7	1,2,4-三氯二苯并-对-二恶英 1,2,4-Trichlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	39227-58-2	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>3</sub>	287.54	129.0	375.0	222.7	246.9	0.05420	0.4830
8	1,2,4-三氯二苯并-对-二恶英 1,2,3,4-Tetrachlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	30756-58-8	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	321.98	190.0	419.0	241.4	267.8	0.05196	0.4392
9	1,2,3,7-四氯二苯并[1,4]二恶英 1,2,3,7-Tetrachlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	67028-18-6	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	321.98	172.0	438.3	241.4	267.8	0.05196	0.4392
10	1,2,3,4-四氯二苯并-对-二恶英 1,3,6,8-Tetrachlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	30746-58-8	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	321.98	219.0	438.3	241.4	267.8	0.05196	0.4392
11	2,3,7,8-四氯二苯并对二噁英 2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	1746-01-6	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	321.98	305.0	446.5	241.4	267.8	0.05196	0.4392
12	1,2,3,4,7-五氯二苯并-对-二恶英 1,2,3,4,7-Pentachlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	39227-61-7	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>5</sub>	356.43	195.0	464.7	260.1	288.7	0.04998	0.3993
13	1,2,3,4,7,8-Hexachlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	39227-26-8	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>6</sub>	390.87	273.0	487.7	278.7	309.6	0.04822	0.3626
14	1,2,3,4,6,7,8-七氯二苯并-对-二恶英 1,2,3,4,6,7,8-Heptachlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	35822-46-9	C <sub>12</sub> HO <sub>2</sub> Cl <sub>7</sub>	425.32	265.0	507.2	297.4	330.5	0.04663	0.3287
15	1,2,3,4,6,7,8,9-八氯二苯并-对-二恶英 Octachlorodibenzo- <i>p</i> -dioxin	3268-87-9	C <sub>12</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub>	459.76	322.0	510.0	316.1	351.4	0.04519	0.2973

<sup>a</sup>NA, not available

Table C.5. Basic physicochemical properties of dibenzofurans at 298.2 K.

298.2 K 时二苯并呋喃类化合物的基本理化性质

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
1	二苯并呋喃 Dibenzofuran	132-64-9	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> O	168.20	86.5	287.0	160.5	176.7	0.06488	0.6702
2	2,8-二氯二苯并呋喃 2,8-Dichlorodibenzofuran	5409-83-6	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> OCl	202.64	184.0	375.0	179.2	197.6	0.06099	0.6064
3	2,4,7,8-四氯二苯并呋喃 2,3,7,8- Tetrachlorodibenzofuran	51207-31-9	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> OCl <sub>4</sub>	305.98	227.0	438.3	235.3	260.3	0.05269	0.4544
4	2,4,7,8-四氯二苯并呋喃 2,3,4,7,8- Pentachlorodibenzofuran	51207-31-4	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> OCl <sub>5</sub>	340.42	196.0	464.7	253.9	281.2	0.05063	0.4132
5	1,2,3,4,7,8-六氯二苯并呋喃 1,2,3,4,7,8- Hexachlorodibenzofuran	70658-26-9	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> OCl <sub>6</sub>	374.87	225.5	487.7	272.6	302.1	0.04880	0.3754
6	1,2,3,6,7,8-六氯二苯并呋喃 1,2,3,6,7,8- Hexachlorodibenzofuran	57117-44-9	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> OCl <sub>6</sub>	374.87	232.0	487.7	272.6	302.1	0.04880	0.3754
7	1,2,3,4,6,7,8-七氯二苯并呋喃 1,2,3,4,6,7,8- Heptachlorodibenzofuran	67462-39-4	C <sub>12</sub> HOCl <sub>7</sub>	409.31	236.0	507.2	291.3	323.0	0.04715	0.3406
8	1,2,3,6,7,8,9-七氯二苯并呋喃 1,2,3,4,7,8,9- Heptachlorodibenzofuran	55673-89-7	C <sub>12</sub> HOCl <sub>7</sub>	409.31	221.0	507.2	291.3	323.0	0.04715	0.3406
9	八氯二苯并呋喃 Octachlorodibenzofuran	39001-02-0	C <sub>12</sub> OCl <sub>8</sub>	443.76	258.0	537.0	310.0	343.9	0.04566	0.3083



Table C.6. Basic physicochemical properties of polycyclic organic matter (POM) at 298.2 K.  
298.2 K 下多环有机物(POM)的基本理化性质。

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
1	二氢化茚 Indan	496-11-7	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub>	118.18	-51.0	178.0	129.6	143.7	0.07347	0.7913
2	萘 Naphthalene	91-20-3	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	128.18	80.2	217.9	140.9	147.6	0.07029	0.7754
3	1-甲基萘 1-Methylnaphthalene	90-12-0	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub>	142.20	-22.0	244.6	161.4	169.8	0.06559	0.6932
4	2-甲基萘 2-Methylnaphthalene	91-57-6	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub>	142.20	34.6	241.9	161.4	169.8	0.06559	0.6932
5	1,2-二甲基萘 1,2-Dimethylnaphthalene	573-98-8	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>	156.23	-1.0	267.0	181.9	192.0	0.06169	0.6227
6	1,3-二甲基萘 1,3-Dimethylnaphthalene	575-41-7	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>	156.23	NA <sup>a</sup>	265.0	181.9	192.0	0.06169	0.6227
7	1,4-二甲基萘 1,4-Dimethylnaphthalene	571-58-4	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>	156.23	7.7	262.0	181.9	192.0	0.06169	0.6227
8	1,5-二甲基萘 1,5-Dimethylnaphthalene	571-61-9	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>	156.23	81.0	249.0	181.9	192.0	0.06169	0.6227
9	2,3-二甲基萘 2,3-Dimethylnaphthalene	581-40-8	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>	156.23	105.0	269.0	181.9	192.0	0.06169	0.6227
10	2,6-二甲基萘 2,6-Dimethylnaphthalene	581-40-2	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>	156.23	108.0	262.0	181.9	192.0	0.06169	0.6227
11	1-乙基萘 1-Ethylnaphthalene	1127-76-0	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>	156.23	-13.8	258.7	181.9	192.0	0.06169	0.6227
12	2-乙基萘 2-Ethylnaphthalene	939-27-5	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>	156.23	-70.0	252.0	181.9	192.0	0.06169	0.6227
13	三甲基萘 1,4,5- Trimethylnaphthalene	2131-41-1	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub>	170.26	64.0	185.0	202.4	214.2	0.05839	0.5611
14	联苯 Biphenyl	92-52-4	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub>	154.21	71.0	256.0	177.3	184.6	0.06247	0.6451
15	4-甲基联苯 4-Methylbiphenyl	644-08-6	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub>	168.24	45.5	268.0	197.8	206.8	0.05906	0.5808

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩 散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散 系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
16	4,4'-二甲基联苯 4,4'-Dimethylbiphenyl	613-33-2	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub>	170.26	119.0	295.0	202.4	214.2	0.05839	0.5611
17	二苯甲烷 Diphenylmethane	101-81-5	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub>	168.24	25.0	264.3	197.8	206.8	0.05906	0.5808
18	1,2-二苯乙烷 Bibenzyl	103-29-7	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub>	182.27	52.2	285.0	218.3	229.0	0.05613	0.5242
19	反式-1,2 二苯乙烯 <i>trans</i> -Stilbene	103-30-0	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub>	180.25	124.0	NA	213.7	221.6	0.05672	0.5423
20	芴 Acenaphthene	83-32-9	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub>	154.21	96.2	277.5	159.0	173.1	0.06559	0.6821
21	芴烯 Acenaphthylene	208-96-8	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub>	152.20	92.0	270.0	154.4	165.7	0.06652	0.7074
22	芴 Fluorene	86-73-7	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub>	166.22	116.0	295.0	174.9	187.9	0.06249	0.6350
23	1-甲基芴 1-Methylfluorene	1730-37-6	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub>	180.25	85.0	NA	195.4	210.1	0.05909	0.5719
24	菲 Phenanthrene	85-01-8	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>	178.24	101.0	339.0	190.8	196.7	0.05978	0.6090
25	1-甲基菲 1-Methylphenanthrene	832-69-6	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub>	192.26	123.0	359.0	211.3	218.9	0.05677	0.5491
26	蒽 Anthracene	120-12-7	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>	178.24	216.2	340.0	190.8	196.7	0.05978	0.6090
27	9-甲基蒽 9-Methylanthracene	779-02-2	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub>	192.26	81.5	355.0	211.3	218.9	0.05677	0.5491

Table C.6. (Cont.).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩 散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散 系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> x 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
28	2-甲基蒽 2-Methylanthracene	613-12-7	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub>	192.26	209.0	359.0	211.3	218.9	0.05677	0.5491
29	9,10-二甲基蒽 9,10-Dimethylanthracene	781-43-1	C <sub>16</sub> H <sub>14</sub>	206.29	182.0	NA	231.8	241.1	0.05416	0.4960
30	芘 Pyrene	129-00-0	C <sub>16</sub> H <sub>10</sub>	202.26	151.2	404.0	204.3	213.8	0.05747	0.5622
31	荧蒽 Fluoranthene	206-44-0	C <sub>16</sub> H <sub>10</sub>	202.26	107.8	384.0	204.3	217.3	0.05747	0.5532
32	1,2-苯并芴 Benzo[a]fluorene	238-84-6	C <sub>17</sub> H <sub>12</sub>	216.29	189.5	405.0	224.8	239.5	0.05477	0.4996
33	四甲基茚 Benzo[b]fluorene	243-17-4	C <sub>17</sub> H <sub>12</sub>	216.29	212.0	402.0	224.8	239.5	0.05477	0.4996
34	蒽 Chrysene	218-01-9	C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>	228.30	252.2	448.0	240.7	250.8	0.05290	0.4745
35	9,10-苯并菲 Triphenylene	217-59-4	C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>	228.30	199.0	425.0	240.7	250.8	0.05290	0.4745
36	对三联苯 <i>p</i> -Terphenyl	92-94-4	C <sub>18</sub> H <sub>14</sub>	230.31	213.0	389.0	263.6	273.2	0.05068	0.4286
37	并四苯 Naphthacene	92-24-0	C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>	228.30	357.0	sublimes	240.7	250.8	0.05290	0.4745
38	苯并[a]蒽 Benz[a]anthracene	56-55-3	C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>	228.30	158.0	437.6	240.7	250.8	0.05290	0.4745
39	苯并[b]荧蒽 Benzo[b]fluoranthene	205-99-2	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	252.32	164.0	NA	254.2	268.9	0.05130	0.4370
40	苯并[i]荧蒽 Benzo[j]fluoranthene	205-82-2	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	252.32	166.0	480.0	254.2	268.9	0.05130	0.4370
41	苯并[k]荧蒽 Benzo[k]fluoranthene	207-08-9	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	252.32	217.0	480.0	254.2	268.9	0.05130	0.4370
42	苯并[a]芘 Benzo[a]pyrene	50-32-8	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	252.32	176.5	495.0	254.2	265.4	0.05130	0.4440
43	苯并[e]芘 Benzo[e]pyrene	192-97-2	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	252.32	177.5	311.0	254.2	265.4	0.05130	0.4440

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
44	芘 Perylene	198-55-0	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	252.32	274.0	495.0	254.2	265.4	0.05130	0.4440
45	7,12-二甲基苯并[a]蒽 7,12-Dimethylbenz[a] anthracene	57-97-6	C <sub>20</sub> H <sub>16</sub>	256.35	122.5	NA	281.8	295.2	0.04883	0.3875
46	9,10-二甲基苯并[a]蒽 9,10-Dimethylbenz[a] anthracene	56-56-4	C <sub>20</sub> H <sub>16</sub>	256.35	122.0	NA	281.8	295.2	0.04883	0.3875
47	3-甲基胆蒽 3-Methylcholanthrene	56-49-5	C <sub>21</sub> H <sub>16</sub>	268.36	179.0	280.0 (80 mm Hg)	279.4	298.5	0.04892	0.3817
48	苯并[ghi]芘 Benzo[ghi]perylene	191-24-2	C <sub>21</sub> H <sub>16</sub>	268.36	278.0	NA	261.1	280.0	0.05050	0.4155
49	并五苯 Pentacene	135-48-8	C <sub>22</sub> H <sub>14</sub>	278.36	257.0	NA	290.6	302.4	0.04793	0.3749
50	1,2:3,4-二苯并蒽 Dibenz[a,c]anthracene	215-58-7	C <sub>22</sub> H <sub>14</sub>	278.36	206.0	518.0	290.6	302.4	0.04793	0.3749
51	二苯并[a,h]蒽 Dibenz[a,h]anthracene	53-70-3	C <sub>22</sub> H <sub>14</sub>	278.36	269.5	524.0	290.6	302.4	0.04793	0.3749
52	二苯并[a,j]蒽 Dibenz[a,j]anthracene	58-70-3	C <sub>22</sub> H <sub>14</sub>	278.36	196.0	NA	290.6	302.4	0.04793	0.3749
53	蔻 Coronene	191-07-1	C <sub>24</sub> H <sub>12</sub>	300.36	437.3	525.0	281.2	294.6	0.04852	0.3886

<sup>a</sup>NA, not available

Table C.7. Basic physicochemical properties of coke oven emissions at 298.2 K – monoaromatic and phenolic compounds.

298.2 K 焦炉排放的基本物化性质-单芳香和酚类化合物。

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
1	乙苯 Ethylbenzene	100-41-4	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	106.17	-95.0	136.2	132.0	140.4	0.07369	0.8052
2	1,2,3-三甲苯 1,2,3-Trimethylbenzene	526-73-8	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	120.20	-25.4	176.1	152.5	162.6	0.06829	0.7184
3	偏三甲苯 1,2,4-Trimethylbenzene	95-63-6	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	120.20	-43.8	169.4	152.5	162.6	0.06829	0.7184
4	1,3,5-三甲苯 1,3,5-Trimethylbenzene	108-67-8	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	120.20	-44.7	164.7	152.5	162.6	0.06829	0.7184
5	丙基苯 <i>n</i> -Propylbenzene	103-65-1	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	120.20	-101.6	159.2	152.5	162.6	0.06829	0.7184
6	异丙苯 Isopropylbenzene	98-82-8	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	120.20	-96.6	154.2	152.5	162.6	0.06829	0.7184
7	邻乙基甲苯 1-Ethyl-2-methylbenzene	611-14-3	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	120.20	-80.8	165.2	152.5	162.6	0.06829	0.7184
8	3-乙基甲苯 1-Ethyl-3-methylbenzene	620-14-4	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	120.20	-95.5	161.5	152.5	162.6	0.06829	0.7184
9	4-乙基甲苯 1-Ethyl-4-methylbenzene	622-96-8	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	120.20	-62.3	162.0	152.5	162.6	0.06829	0.7184
10	4-异丙基甲苯 1-Isopropyl-4-methylbenzene	99-87-6	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	134.22	-67.9	177.1	173.0	184.8	0.06391	0.6444
11	丁苯 <i>n</i> -Butylbenzene	104-51-8	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	134.22	-88.0	183.0	173.0	184.8	0.06391	0.6444
12	异丁基苯 Isobutylbenzene	538-93-2	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	134.22	-51.0	170.0	173.0	184.8	0.06391	0.6444
13	仲丁基苯 <i>sec</i> -Butylbenzene	135-98-8	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	134.22	-75.5	173.0	173.0	184.8	0.06391	0.6444
14	叔丁基苯 <i>tert</i> -Butylbenzene	98-06-6	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	134.22	-57.8	169.0	173.0	184.8	0.06391	0.6444
15	1,2,3,4-四甲基苯 1,2,3,4-Tetramethylbenzene	48-23-3	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	134.22	-6.25	205.0	173.0	184.8	0.06391	0.6444

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
16	1,2,3,5-四甲基苯 1,2,3,5- Tetramethylbenzene	527-53-7	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	134.22	-23.68	198.0	173.0	184.8	0.06391	0.6444
17	1,2,4,5-四甲基苯 1,2,4,5- Tetramethylbenzene	95-93-2	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	134.22	-79.2	196.8	173.0	184.8	0.06391	0.6444
18	戊基苯 <i>n</i> -Pentylbenzene	538-68-1	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>	148.25	-75.0	205.4	193.6	207.0	0.06022	0.5803
19	五甲基苯 Pentamethylbenzene	538-61-1	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>	148.25	54.5	231.0	193.6	207.0	0.06022	0.5803
20	己基苯 <i>n</i> -Hexylbenzene	1077-16-3	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>	162.28	-61.0	226.0	214.1	229.2	0.05711	0.5237
21	六甲基苯 Hexamethylbenzene	87-85-4	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>	162.28	166.7	265.0	214.1	229.2	0.05711	0.5237
22	2,3-二甲苯酚 2,3-Dimethylphenol	526-75-0	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O	122.17	75.0	218.0	138.1	147.8	0.07124	0.7746
23	2,4-二甲苯酚 2,4-Dimethylphenol	105-67-9	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O	122.17	26.0	211.5	138.1	147.8	0.07124	0.7746
24	2,4-二甲苯酚 2,5-Dimethylphenol	105-67-9	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O	122.17	75.0	212.0	138.1	147.8	0.07124	0.7746
25	2,6-二甲苯酚 2,6-Dimethylphenol	576-26-1	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O	122.17	49.0	203.0	138.1	147.8	0.07124	0.7746

Table C.7. (Cont.).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩 散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散 系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> x 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
26	<b>3,4-二甲基苯酚</b> 3,4-Dimethylphenol	95-65-8	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O	122.17	67.0	225.0	138.1	147.8	0.07124	0.7746
27	<b>3,5-二甲基苯酚</b> 3,5-Dimethylphenol	108-68-9	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O	122.17	68.0	219.5	138.1	147.8	0.07124	0.7746
28	<b>2,3,5-三甲基苯酚</b> 2,3,5-Trimethylphenol	697-82-5	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	136.20	93.0	NA <sup>a</sup>	158.6	170.0	0.06635	0.6925
29	<b>2,3,6-三甲基苯酚</b> 2,3,6-Trimethylphenol	2416-94-6	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	136.20	63.0	NA	158.6	170.0	0.06635	0.6925
30	<b>2,4,5-三甲酚</b> 2,4,5-Trimethylphenol	496-78-6	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	136.20	72.0	NA	158.6	170.0	0.06635	0.6925
31	<b>2,4,6-三甲酚</b> 2,4,6-Trimethylphenol	527-60-6	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	136.20	72.0	NA	158.6	170.0	0.06635	0.6925
32	<b>3,4,5-三甲基苯酚</b> 3,4,5-Trimethylphenol	527-54-8	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	136.20	108.0	NA	158.6	170.0	0.06635	0.6925
33	3-乙基-5-甲基苯酚 3- Methyl-5-ethylphenol	NA	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	136.20	NA	NA	158.6	170.0	0.06635	0.6925
34	邻乙基苯酚 2-Ethylphenol	90-00-6	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O	122.17	NA	NA	138.1	147.8	0.07124	0.7746
35	<b>3-乙基苯酚</b> 3-Ethylphenol	620-17-7	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O	122.17	NA	NA	138.1	147.8	0.07124	0.7746
36	<b>4-乙基苯酚</b> 4-Ethylphenol	123-07-9	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O	122.17	44.0	NA	138.1	147.8	0.07124	0.7746
37	2-正丙基苯酚 2-Propylphenol	644-35-0	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	136.20	NA	NA	158.6	170.0	0.06635	0.6925
38	4-丙基苯酚 4- <i>n</i> -Propylphenol	645-56-7	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	136.20	NA	NA	158.6	170.0	0.06635	0.6925
39	2-异丙基苯酚 2-Isopropylphenol	88-69-7	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	136.20	NA	NA	158.6	170.0	0.06635	0.6925
40	对异丙基苯酚 4-Isopropylphenol	99-89-8	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	136.20	60.0	NA	158.6	170.0	0.06635	0.6925
41	4-丁基苯酚 4- <i>n</i> -Butylphenol	1638-22-8	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O	150.22	NA	NA	179.2	192.2	0.06230	0.6221

42	2-仲丁基苯酚 2- <i>sec</i> -Butylphenol	89-72-5	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O	150.22	NA	NA	179.2	192.2	0.06230	0.6221
43	邻叔丁基苯酚 2- <i>tert</i> -Butylphenol	88-18-6	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O	150.22	NA	NA	179.2	192.2	0.06230	0.6221
44	3-叔丁基苯酚 3- <i>tert</i> -Butylphenol	585-34-2	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O	150.22	41.0	NA	179.2	192.2	0.06230	0.6221
45	对仲丁基苯酚 4- <i>sec</i> -Butylphenol	99-71-8	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O	150.22	61.0	241.0	179.2	192.2	0.06230	0.6221
46	4-叔丁基苯酚 4- <i>tert</i> -Butylphenol	98-54-4	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O	150.22	99.0	239.5	179.2	192.2	0.06230	0.6221
47	5-叔丁基-2-甲基苯酚 2-Methyl-5- <i>tert</i> - Butylphenol	NA	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> O	164.25	NA	NA	199.7	214.4	0.05891	0.5606
48	2,6-二叔丁基苯酚 2,6-Di- <i>sec</i> -Butylphenol	128-39-2	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	206.33	NA	NA	261.2	281.0	0.05122	0.4136
49	3,5-二叔丁基苯酚 3,5-Di- <i>tert</i> -Butylphenol	1138-52-9	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	206.33	NA	NA	261.2	281.0	0.05122	0.4136
50	2,6-二叔丁基-4-甲基苯酚 2,6-Di- <i>t</i> -butyl-4- Methylphenol	128-37-0	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O	220.36	71.0	NA	281.8	303.2	0.04923	0.3735



Table C.7. (Cont.).

No.	污染物名称 Chemical	CAS No.	分子式 Molecular Formula	摩尔质量 Molecular Weight (g mol <sup>-1</sup> )	熔点 Melting Point (°C)	沸点 Boiling Point (°C)	分子体积 Molecular Volume	摩尔体积 Le Bas Molar Volume (cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> )	空气中的扩散系数 Diffusivity in Air D <sub>a</sub> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	水中的扩散系数 Diffusivity in Water D <sub>w</sub> × 10 <sup>5</sup> (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
51	3-戊基苯酚 3-Pentylphenol	NA	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> O	164.25	NA	NA	199.7	214.4	0.05891	0.5606
52	4-己基苯酚 4-Hexylphenol	2446-69-7	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> O	178.28	32.0	NA	220.2	236.6	0.05599	0.5063
53	2-庚基苯酚 2-Heptylphenol	NA	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> O	192.30	NA	NA	240.7	258.8	0.05346	0.4576
54	4-庚基苯酚 4-Heptylphenol	1987-50-4	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> O	192.30	NA	NA	240.7	258.8	0.05346	0.4576
55	4-辛基酚 4-Octylphenol	1806-26-4	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	206.33	41.0	NA	261.2	281.0	0.05122	0.4136
56	对特辛基苯酚 4- <i>tert</i> -Octylphenol	140-66-9	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	206.33	81.0	NA	261.2	281.0	0.05122	0.4136
57	对壬基酚 4-Nonylphenol	104-40-5	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O	220.36	96.0	NA	281.8	303.2	0.04923	0.3735
58	1-萘酚 1-Naphthol	90-15-3	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O	144.17	96.0	282.5	147.0	155.0	0.06828	0.7464
59	2-萘酚 2-Naphthol	135-19-3	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O	144.17	122.0	NA	147.0	155.0	0.06828	0.7464
60	邻苯基苯酚 2-Phenylphenol	90-43-7	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> O	170.21	56.0	NA	183.4	192.0	0.06107	0.6227
61	间羟基联苯 3-Phenylphenol	588-51-8	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> O	170.21	77.0	NA	183.4	192.0	0.06107	0.6227
62	对羟基联苯 4-Phenylphenol	92-69-3	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> O	170.21	164.0	NA	183.4	192.0	0.06107	0.6227
63	2-烯丙基酚 2-Allylphenol	1745-81-9	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O	134.18	-6.0	220.0	154.0	162.6	0.06731	0.7184

<sup>a</sup>NA, not available