

The Guidelines for the Testing of Chemicals

化学品 测试方法

国家环境保护总局《化学品测试方法》编委会 主编

中国环境科学出版社

化学品测试方法

The Guidelines for the Testing of Chemicals

国家环境保护总局《化学品测试方法》编委会 主编

中国环境科学出版社·北京

图书在版编目(CIP)数据

化学品测试方法/国家环境保护总局《化学品测试方法》编委会主编.—北京:中国环境科学出版社,2004.5

ISBN 7-80163-712-7

I. 化… II. 国… III. 化学品-测试-方法 IV. IQ075

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 068609 号

出版发行 中国环境科学出版社
(100062 北京崇文区广渠门内大街 16 号)
网 址: <http://www.cesp.cn>
电子信箱: zongbianshi@cesp.cn

印 刷 北京市联华印刷厂
经 销 各地新华书店
版 次 2004 年 5 月第一版
印 次 2004 年 5 月第一次印刷
开 本 787×1092 1/16
印 张 48.75
字 数 1122 千字
定 价 180.00 元

【版权所有,请勿翻印、转载,违者必究】

《化学品测试方法》编委会成员

领导小组组长：尹 改 张力军

小组成员：胥树凡 赵维钧 魏晓琳 臧文超

编写组组长：沈英娃

编写组副组长：（以负责部分顺序排列）

江孝緯 尹 洧 高映新 曹洪法 江泉观

周宗灿 印木泉

第一部分 理化特性

主 编：江孝緯 尹 洧

编写人员：江孝緯 尹 洧 徐瑞清 谷晓昱

审 稿：齐文启 刘振义 储少岗

第二部分 生物系统效应

主 编：沈英娃 曹洪法

编写人员：沈英娃 宋 福 王 宏 卢 玲 王 波 王鲁昕 周 红

审 稿：谢凤君 杨 宁 孙振钧 龚瑞忠 蔡磊明

第三部分 降解与蓄积

主 编：高映新 曹洪法

编写人员：高映新 孙锦业 杨 力

审 稿：王永华 殷浩文

第四部分 健康效应

主 编：江泉观 周宗灿 印木泉

编写人员：江泉观 周宗灿 印木泉 孙 凯 张宝真 薛 彬 吕伯钦

李学明 刘 建

审 稿：霍本兴 高 星 肖希龙 廖明阳

出版说明

2000年4月13日，国家环境保护总局下达任务，要求国家环境保护总局化学品登记中心组织完成《化学品测试导则》环境标准的制定。《化学品测试方法》是该标准的规范性引用文件和重要的核心技术内容。经过近三年的努力，《化学品测试方法》正式出版了。这是全体编写人员辛勤劳动的结晶。

《化学品测试方法》是化学品测试方面环境标准的重要组成部分。该书为进行新化学物质危害性评估、现有化学物质风险评价而提交的测试数据提供了统一、规范的方法。为保证测试数据的高质量、准确性、可比性及可重复性，使得化学品测试数据在国际上、在国家之间的相互承认提供了必要的基础条件。

《化学品测试方法》主要参照经济合作与发展组织（OECD）以及美国国家环境保护局（UAEPA）和国际标准化组织（ISO）等化学品测试准则的框架和内容编制。包括了对化学品的理化特性、生物系统效应、降解与蓄积、健康效应四个方面的101个测试方法。所测试的对象主要包括纯化学物质和以产品出现的混合物、制剂，部分方法亦可用于环境样品的测试。

编制我国先进的、规范的、与国际接轨的化学品测试方法是一项长期而艰巨的任务。需要广大科技人员的倾力投入和测试人员的丰富实践经验的淀积。形成完善的测试方法体系也是一个长期的过程。我们衷心希望化学品测试的有关部门、单位，以及广大的科技人员，对本书提出宝贵的意见，以利下次再版时更新、完善。

国家环境保护总局

2003年11月

前 言

化学品测试是指为化学品管理而对化学品的理化特性、生物系统效应、降解和蓄积、健康效应进行测试。测试结果是对新化学物质危害性进行评估和对现有化学物质进行风险和安全性评价的基础，也是对化学物质进行风险管理的科学依据。

《化学品测试方法》（以下简称《方法》）是根据国家环境保护总局的环境标准计划编制的，是化学品测试相关环境标准的重要组成部分，也是化学品环境管理标准和技术规范系列中的一个重要文件。

一、编制原则

编制本《方法》的基本原则是与国际接轨。同时适当考虑与国情相结合、兼顾稳定与发展，以及先进与成熟等。

与国际接轨 与国际接轨的原则，即参考国际组织及发达国家的有关准则、标准。本方法修改采用了经济合作与发展组织（OECD）的《化学品测试准则》（OECD Guidelines for the Testing of Chemicals），同时参照国际标准化组织（ISO）、美国环保局（USEPA）等的化学品测试方法。其理由如下：

化学品的商品属性 与污染物控制、生态环境保护不同，化学品测试不注重地域性的差别，而强调方法的兼容性和可比性。这是由于化学品的商品属性所决定的。作为商品所具有的全球范围内的流通性，要求对化学品的测试数据实行有条件的相互承认。这一点已是国际贸易中的通行做法。所谓“有条件”，除了政府间签署有关文件和对测试实验室资质的要求之外，最重要的条件就是测试方法的同一，这是数据互认的前提。

OECD 测试准则的实际权威性 1981 年 OECD 首先制定了“化学品测试准则”，不仅为其成员国共同遵守的框架和各成员国之间在化学品贸易过程中数据互认法令（MAD）的技术基础，而且也占世界化学品生产和消费 75% 以上的 20 余个发达国家共同遵循。

我国已加入 WTO 在与 OECD 成员国进行化学品国际贸易过程中所提交的测试数据必须为其准则规定的方法。我国在加入 WTO 的谈判中，有关化学品方面做出的承诺是“在中国加入后一年内，制定和实施关于为保护环境而对化学品进行评估和控制的新法律和相关法律法规，该法律和法规应保证实行完全的国民待遇，并保证完全符合国际惯例”。因此，以 OECD 的准则为制定我国的化学品测试方法标准的主要参照，不失为一上佳选择。

适当考虑与国情相结合 我国为发展中国家，综合国力尚不雄厚。总体而言，化学品测试技术力量仍很薄弱。为使本《方法》能为国内有关专业人员接受，为之所用，我们对一些项目采用了推荐等效方法的处理，既可使用先进方法，同时也允许选用经典方法。测试实验室可根据自身的具体情况，加以选用。

兼顾稳定与发展 本《方法》为化学品环境管理的基础性技术文件，要求在项目、框架结构、编写体例、终点上相对稳定，以保证对测试机构测试能力要求的相对稳定和方法的连贯性及测试数据的可重复性；但科学技术是发展的，作为反映测试技术的方法文件，也必然不断推陈出新。因而，本《方法》是开放型的结构，将根据国内外变化发展的情况，对方法的内容进行不定期的修订，使本《方法》在整体水平上保持与国际同类文件同步的状态。在具体编制中，借鉴 OECD 准则的体例，采用理化特性、生物系统效应、降解和蓄积、健康效应四个部分独立成章，均是出于兼顾长期稳定与逐步发展的考虑。

注重成熟，兼顾先进 本《方法》属标准范畴，要求所采用的方法应是优秀且先进的；同时其规范性更要求所推荐的方法是成熟的。所谓成熟有两层含义：一是指所推荐的方法本身业已为国内外同行专业人士所认可，是权威的方法；二是指将由该方法所获结果应用于风险评价、安全评价或环境质量评价时，也无太多异议。否则，暂时不予收录。例如，目前，国内外在健康效应评价方面，开展了许多体外试验，这些方法很先进，方法学本身也已成熟，但将所获的结果应用于风险评价和风险管理时，却有分歧和争议，因此没有收入本《方法》中。

应当指出，本《方法》为从事化学品测试的机构提供了可遵循的方法依据，但本《方法》并非为“标准操作规程”（Standard Operation Procedures, SOPs），许多细节难以涉及。因此，各测试机构，应在本《方法》的基础上，根据各自实验室的具体情况制定相应的 SOPs。

二、编制结构

本《方法》共有测试项目 90 项，方法 101 个。其中理化特性 20 项，生物系统效应 18 项（个），降解与蓄积 6 项（17 个），健康效应 46 项（个）。采用了与 OECD 测试准则相似的开放式结构。测试项目编号，以三位阿拉伯数字为主，辅以大写英文字母。其中理化特性为 1xx 系列，生物系统效应为 2xx 系列，降解与蓄积为 3xx 系列，健康效应为 4xx 系列。大写英文字母为相同测试项目的几个等效试验方法。除个别项目外，编号同 OECD 准则。以便于使用者对照利用。要求在具体引用时，注明具体方法的首次发布或修订时间。

采用编号式，有利于使用者查找和使用方便，也使方法更具有开放性，有利于日后对个别测试项目的增加、删除或更新。既可保持整个方法的系统性，又可保证每一项目修改的灵活性。

由于所涉及的测试项目分属四大学科领域，具有相对独立性和各自的特点，因此并未作出完全统一的要求。但同一部分的系列方法尽量保持了一致的结构。四个部分分别有一概论，是为方法的使用者提供的相关背景知识材料，要求在进行测试前应认

真阅读。各方法基本内容包括项目名称、受试物必备资料、测试目的或意义、测试原理或原则、定义、仪器设备或/和材料、操作方法与程序、质量保证与质量控制、主要参考文献。

三、术语说明

本《方法》的术语分别出现在前言、各部分的概论，以及各个具体方法中。

前言中给出了基本的术语。这些术语，在测试的四个部分多有涉及。有些并非为纯粹专业或严格学术意义上的术语。

各部分概论中规定了在各自专业方面的术语。这些术语，在本方法中一般限于某一特定专业方面的若干方法中。如生物系统效应中的“静态”、“半静态”和“流水式”。

各测试方法中规定了仅限于某一方法中的术语与定义。这些术语与定义，多具有严格学术意义上的特殊含义。

本方法的基本术语如下：

化学品 化学物质 化合物 chemicals

新化学物质申报、现有化学物质风险评价所涉及的纯化学物质及其产品。

测试 test

获得受试物理化特性、生物系统效应、降解与蓄积、健康效应的一个或一组实验。

测试系统 test system

测试中使用的任何动物的、植物的、微生物的、多种细胞或亚细胞的、物理的或化学的系统及其组合。

试验生物 受试生物 test organisms

测试系统中的动物、植物和微生物。

受试物 待测物 待测样 test chemicals/materials

被测试的单一化学品或混合物。

参比物 参照物质 对照物 reference substances

在测试中为证实或否定受试物的某种特性或判断测试系统有效性而使用的化学物质或混合物。

样品 sample

用于测试的含有受试物或参比物的液体、固体、气体或生物材料。

原始数据 raw data

作为测试原始观察和活动结果的所有初始实验室记录和文件或检验过的复印件。

降解 degradation

在生物的和/或非生物的因素作用下，受试物逐步分解。

快速生物降解性 ready biodegradability

在限定的时间内，受试物与接种的微生物接触，表现出的生物降解能力。

固有生物降解性 inherent biodegradability

在最佳试验条件下，受试物长时间与接种的微生物接触，表现出的生物降解潜力。

生物蓄积 bioaccumulation

化学物质在生物体各组织器官内的聚积。

最大耐受剂量/浓度 maximum tolerance dose/concentration (MTD, LD₀ 或 MTC, LC₀)

一组受试生物中, 不引起受试生物死亡的最大剂量或浓度。

无明显毒作用水平 (剂量) no observed effect level (NOEL)

指在测试期间未观察到与染毒有关的有害效应的最高毒物剂量水平。

效应浓度/剂量 x effective concentration/dose x (EC_x/ED_x)

引起一组受试生物中的 x%生物出现某观察效应的浓度/剂量。这是一个通过统计学处理计算得到的数值。

致死浓度/剂量 x lethal concentration/dose x (LC_x/LD_x)

引起一组受试生物出现 x%生物死亡的浓度/剂量。这是一个通过统计学处理计算得到的数值。其中最为常用的是 LC₅₀/LD₅₀, 即引起 50%的试验生物出现死亡的浓度/剂量, 称为“半数致死浓度/剂量”。

编 者

2003 年 2 月 12 日

目 录

第一部分 理化特性

理化特性概论	3
101 紫外-可见吸收光谱 (UV-VIS Absorption Spectra)	
分光光度法 (Spectrophotometric Method)	6
102 熔点/熔点范围 (Melting Point/Melting Range)	10
103 沸点 (Boiling Point)	18
104 蒸气压 (Vapour Pressure)	25
105 水溶解度 (Water Solubility)	40
106 吸附/解吸 (Adsorption/Desorption)	47
107 分配系数 (正辛醇/水) ——摇瓶法 [Partition Coefficient (<i>n</i> -octanol/water) — Shake Flask Method]	62
108 在水中形成配位化合物的能力——极谱法 (Complex Formation Ability in Water — Polarographic Method)	66
109 液体和固体的密度 (Density of Liquids and Solids)	71
110 颗粒物粒度分布/纤维长度和直径分布 (Particle Size Distribution/Fibre Length and Diameter Distributions)	76
111 与 pH 有关的水解作用 (Hydrolysis as a Function of pH)	82
112 在水中的离解常数 (Dissociation Constants in Water)	99
113 热稳定性和空气中稳定性的筛选试验 (Screening Test for Thermal Stability and Stability in Air)	104
114 液体的粘度 (Viscosity of Liquids)	110
115 水溶液的表面张力 (Surface Tension of Aqueous Solutions)	115
116 固态和液态物质的脂溶性——烧瓶法 (Fat Solubility of Solid and Liquid Substances—Flask Method)	120
117 分配系数 (正辛醇/水) ——高效液相色谱法 (HPLC) [Partition Coefficient (<i>n</i> -octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method]	125
118 凝胶渗透色谱法 (GPC) 测定聚合物的数均分子量及分子量分布 (Determination of the Number Average Molecular Weight and the Molecular Weight Distribution of Polymers Using Gel Permeation Chromatography)	134

119 凝胶渗透色谱法 (GPC) 测定聚合物低分子量部分的含量 (Determination of the Low Molecular Weight Content of a Polymer Using Gel Permeation Chromatography)	148
120 聚合物在水中的溶解/萃取行为 (Solution/Extraction Behaviour of Polymers in Water)	161

第二部分 生物系统效应

生物系统效应概论	167
201 藻类生长抑制试验 (Alga Growth Inhibition Test)	172
202 溞类 24h EC ₅₀ 急性活动抑制试验 (Daphnia sp. 24h EC ₅₀ Acute Immobilization Test)	182
203 鱼类急性毒性试验 (Fish Acute Toxicity Test)	188
204 鱼类 14 天延长毒性试验 (Fish, Prolonged Toxicity Test: 14-day Study)	194
205 鸟类日粮毒性试验 (Avian Dietary Toxicity Test)	199
206 鸟类繁殖试验 (Avian Reproduction Test)	206
207 蚯蚓急性毒性试验 (Earthworm, Acute Toxicity Test)	215
208 陆生植物生长试验 (Terrestrial Plants, Growth Test)	220
209 活性污泥呼吸抑制试验 (Activated Sludge, Respiration Inhibition Test)	224
210 鱼类早期生活阶段毒性试验 (Fish, Early-life Stage Toxicity Test)	230
211 大型溞繁殖试验 (<i>Daphnia magna</i> Reproduction Test)	238
212 鱼类胚胎—卵黄囊吸收阶段的短期毒性试验 (Fish, Short-term Toxicity Test on Embryo and Sac-fry Stages)	254
213 蜜蜂急性经口毒性试验 (Honeybees, Acute Oral Toxicity Test)	265
214 蜜蜂急性接触毒性试验 (Honeybees, Acute Contact Toxicity Test)	270
215 鱼类幼体生长试验 (Fish, Juvenile Growth Test)	275
216 土壤微生物: 氮转化测试 (Soil Microorganisms: Nitrogen Transformation Test)	285
217 土壤微生物: 碳转化测试 (Soil Microorganisms: Carbon Transformation Test)	293
299 种子发芽和根伸长毒性试验 (Seed Germination/Root Elongation Toxicity Test)	300

第三部分 降解与蓄积

降解与蓄积概论	309
301 快速生物降解性 (Ready Biodegradability)	315
301A DOC 消减试验 (DOC Die-Away Test)	329
301B CO ₂ 产生试验 (CO ₂ Evolution Test)	337
301C 改进的 MITI 试验 (I) (Modified MITI Test I)	344
301D 密闭瓶试验 (Closed Bottle Test)	350
301E 改进的 OECD 筛选试验 (Modified OECD Screening Test)	357

301F 呼吸计量法试验 (Manometric Respirometry Test)	363
302A 改进的半连续活性污泥(SCAS)试验 (Inherent Biodegradability: Modified SCAS Test)	370
302B 赞恩-惠伦斯试验 (Zahn-Wellens Test)	375
302C 改进的 MITI 试验 (II) (Inherent Biodegradability: Modified MITI Test II)	382
303A 模拟试验——好氧污水处理: 偶联单元试验 (Simulation Test—Aerobic Sewage Treatment: Coupled Units Test)	386
304A 土壤固有生物降解能力 (Inherent Biodegradability in Soil)	394
305 流水式鱼类试验 (Bioconcentration: Flow-Through Fish Test)	400
305A 连续静态鱼类试验 (Bioconcentration: Sequential Static Fish Test)	419
305B 半静态鱼类试验 (Bioconcentration: Semi-Static Fish Test)	426
305C 鱼类生物富集试验 (Bioconcentration: Test for the Degree of Bioconcentration in Fish)	432
305D 静态鱼类试验 (Bioconcentration: Static Fish Test)	439
399 吸收和蓄积试验 (Update and Accumulation Test)	444

第四部分 健康效应

健康效应概论	451
401 急性经口毒性试验 (Acute Oral Toxicity Test)	458
402 急性经皮毒性试验 (Acute Dermal Toxicity Test)	463
403 急性吸入毒性试验 (Acute Inhalation Toxicity Test)	467
404 急性皮肤刺激性/腐蚀性试验 (Acute Dermal Irritation/Corrosion Test)	472
405 急性眼刺激性/腐蚀性试验 (Acute Eye Irritation/Corrosion Test)	477
406 皮肤致敏试验 (Skin Sensitization Test)	485
407 啮齿类动物 28 天反复经口毒性试验 (Repeated Dose 28-day Oral Toxicity Study in Rodents)	490
408 啮齿类动物亚慢性 (90 天) 经口毒性试验 (Repeated Dose 90-day Oral Toxicity in Rodents)	497
409 非啮齿类动物亚慢性 (90 天) 经口毒性试验 (Repeated Dose 90-day Oral Toxicity in Nonrodents)	503
410 反复经皮毒性: 21/28 天试验 (Repeated Dose Dermal Toxicity: 21/28-day Study)	509
411 亚慢性经皮毒性: 90 天试验 (Subchronic Dermal Toxicity: 90-day Study)	514
412 反复吸入毒性: 28 天或 14 天试验 (Repeated Dose Inhalation Toxicity: 28/14-day Study)	520
413 亚慢性吸入毒性: 90 天试验 (Subchronic Inhalation Toxicity: 90-day Study)	526
414 致畸试验 (Teratogenicity)	532
415 一代繁殖毒性试验 (One-Generation Reproduction Toxicity Study)	539
416 两代繁殖毒性试验 (Two-Generation Reproduction Toxicity Study)	544

417	毒物动力学试验 (Toxicokinetics Study)	549
418	有机磷化合物急性染毒的迟发性神经毒性试验 (Delayed Neurotoxicity of Organophosphorus Substances Following Acute Exposure)	561
419	有机磷化合物亚慢性 (28 天) 染毒的迟发性神经毒性实验 (Delayed Neurotoxicity of Organophosphorus Substances: 28-Day Repeated Dose Study)	566
420	急性经口毒性: 固定剂量法 (Acute Oral Toxicity—Fixed Dose Method)	572
421	生殖和发育毒性筛选试验 (Reproduction/Developmental Toxicity Screening Test)	578
422	结合反复染毒毒性研究的生殖发育毒性筛选试验 (Combined Repeated Dose Toxicity Study with the Reproduction/Developmental Toxicity Screening Test)	584
423	急性经口毒性: 急性毒性的阶层法 (Acute Oral Toxicity—Acute Toxic Class Method)	592
424	啮齿类动物的神经毒性试验 (Neurotoxicity Study in Rodents)	603
425	急性经口毒性: 上下增减剂量法 (Acute Oral Toxicity: Up and Down Procedure)	614
451	致癌试验 (Carcinogenicity Studies)	620
452	慢性毒性试验 (Chronic Toxicity Studies)	627
453	慢性毒性与致癌性联合试验 (Combined Chronic Toxicity/Carcinogenicity Studies)	633
471 472	细菌回复突变试验 (Bacterial Reverse Mutation Test)	640
473	体外哺乳动物细胞染色体畸变试验 (<i>In vitro</i> Mammalian Chromosome Aberration Test)	647
474	哺乳动物红细胞微核试验 (Mammalian Erythrocyte Micronucleus Test)	653
475	哺乳动物骨髓染色体畸变试验 (Mammalian Bone Marrow Chromosome Aberration Test)	659
476	体外哺乳动物细胞基因突变试验 (<i>In vitro</i> Mammalian Cell Gene Mutation Test)	665
477	黑腹果蝇伴性隐性致死试验 (Sex-linked Recessive Lethal Test in <i>Drosophila Melanogaster</i> , SLRL)	671
478	啮齿类动物显性致死试验 (Rodent Dominant Lethal Test)	677
479	哺乳类动物细胞姐妹染色单体互换体外试验 (<i>In vitro</i> Sister Chromatid Exchange Assay in Mammalian Cells)	682
480	酿酒酵母基因突变试验 (<i>Saccharomyces cerevisiae</i> , Gene Mutation Assay)	686
481	酿酒酵母有丝分裂重组试验 (<i>Saccharomyces cerevisiae</i> Mitotic Recombination Assay)	690
482	哺乳类动物细胞 DNA 损害与修复/程序外 DNA 合成体外试验 (DNA Damage and Repair/Unscheduled DNA Synthesis in Mammalian Cells <i>in vitro</i>)	694
483	哺乳动物精原细胞染色体畸变试验 (Mammalian Spermatogonial Chromosome Aberration Test)	698
484	小鼠斑点试验 (Mouse Spot Test)	704

485	小鼠可遗传易位试验 (Mouse Heritable Translocation Assay)	708
486	体内哺乳动物肝细胞程序外 DNA 合成 (UDS) 试验 (Unscheduled DNA Synthesis (UDS) Test with Mammalian Liver Cells <i>in vivo</i>)	712
490	空斑形成细胞试验 (PFC) (Plaque Forming Cell Assay)	718
491	迟发型超敏反应试验 (Delayed Type Hypersensitivity Test)	723
492	自然杀伤细胞活性试验 (Natural Killer Cell Activity Assay)	726
	中英文索引	732
	英中文索引	746

第一部分 理化特性

主 编：江孝绰 尹洧

编写人员：江孝绰 尹洧 徐瑞清 谷晓昱

理化特性概论

有关化学品试验的几点说明

1. 化学品的理化特性试验参数用于评估化学品对环境的潜在危害

人类的生产和生活活动，会使化学品在环境中释放，从而引起人们意想不到的化学和生物作用。化学物质对环境产生的危害，来源于化学物质在环境中的浓度和暴露，而它们又很大程度取决于化学物质的理化特性，取决于反映其理化特性的各种参数，这些参数最突出的有：

释放（Release，在环境中的“排放速率”）、在环境中物质的迁移率（Mobility）、在环境中的降解（Degradation，包括生物降解和非生物降解）、聚积趋势（Accumulation potential，包括生物的和非生物的）。另外，还应考虑其它因素，如：释放入环境中的方式，气候的、气象的和地区的条件，微生物、动植物、人口的密度等。迄今为止，还没有一种可靠的综合性的环境模式来评估化学品对环境的潜在危害。因此，评估时常常使用“最坏的可能情况”（即最坏的可能环境浓度的估计），以提供环境危害预评估的上限。

释放：有关化学物质理化特性的知识，可帮助评估其在环境中释放的程度和可能性。例如化学物质的物理状态、蒸气压、水溶解度、密度、颗粒大小等等。这些性质，可以用于影响生态系统的预测。

迁移率：物质在环境中的迁移率定义为物质在环境中的移动能力。它是采用测定物质在环境介质（空气、水、土壤）中的扩散行为和在不同介质之间的传输行为来体现的。理化特性参数有：蒸气压曲线、水溶解度、吸附与解吸、水溶液的挥发性、形成配合物的能力、液体和固体的密度、颗粒大小分布、液体的粘度、水溶液的表面张力等。

一种物质释放到环境中后，在空气、水和土壤之间的扩散可以进行评估。因此，对于一种在文献中没有描述过的新物质，要想对它的危害性进行预测，了解它的理化特性就极为重要。当然，使用理化特性的知识去对新物质的环境行为进行预测，仍然是有限度的，只能进行粗略的评估。

原则上，从物质理化特性参数的知识去估计一种物质的扩散作用是可能的，此时，可忽略在同一时间内的积累效应，也可忽略在单一空间或相互间隔的多个空间中的降