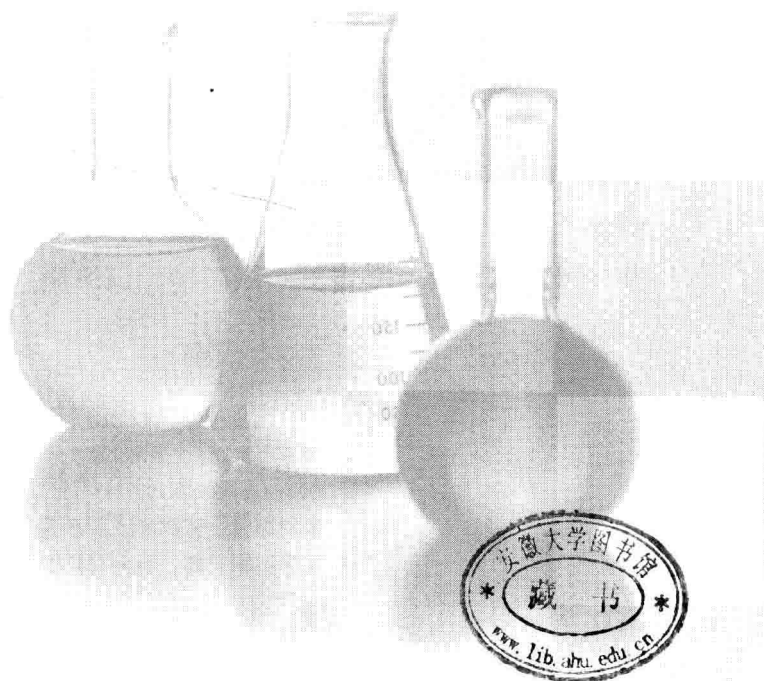


经济合作与发展组织 化学品测试准则

OECD Guidelines for the
Testing of Chemicals

经济合作与发展组织 化学品测试准则



中国农业出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

经济合作与发展组织化学品测试准则 / 《经济合作
与发展组织 (OECD) 化学品测试准则》编译委员会编译
. —北京: 中国农业出版社, 2013. 4
ISBN 978 - 7 - 109 - 17644 - 7

I. ①经… II. ①经… III. ①经济合作与发展组织—
化工产品—测试—标准 IV. ①TQ075 - 65

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2013) 第 025219 号

中国农业出版社出版
(北京市朝阳区农展馆北路 2 号)
(邮政编码 100125)
策划编辑 张洪光 阎莎莎
文字编辑 郭 科 马广源

北京通州皇家印刷厂印刷 新华书店北京发行所发行
2013 年 8 月第 1 版 2013 年 8 月北京第 1 次印刷

开本: 880mm×1230mm 1/16 印张: 92.75
字数: 2980 千字
定价: 300.00 元

(凡本版图书出现印刷、装订错误, 请向出版社发行部调换)

编 译 委 员 会

主任委员：隋鹏飞 刘永泉
副主任委员：刘杰民 顾宝根 叶纪明 魏启文 刘 学 季 颖
臧文超 孟智启

主 编：陈铁春 蔡磊明 高映新
副主 编：陶传江 姜 辉 李国平 李友顺 单正军
编 委（按姓氏音序排列）：
蔡磊明 陈铁春 高映新 顾宝根 季 颖 姜 辉
姜宜飞 李富根 李国平 李钟华 李友顺 刘 学
刘纯新 刘光学 刘杰民 刘苹苹 刘绍仁 刘永泉
孟智启 聂晶磊 单炜力 单正军 沈英娃 沈根祥
宋俊华 隋鹏飞 孙锦业 谭 红 陶传江 王 强
魏启文 吴厚斌 阎莎莎 杨 峻 叶贵标 叶纪明
于 荣 臧文超 张文君 张宏军 赵永辉 宗伏霖
周 红
主 审：叶纪明 蔡磊明

第一篇

主 编：李国平 李友顺 宋俊华 刘苹苹
副主 编：赵永辉 于 荣 姜宜飞 吴进龙 吴厚斌
编译人员（按姓氏音序排列）：
侯松岷 姜宜飞 李 莹 李国平 李红霞 李友顺
刘苹苹 路彩红 薄 瑞 宋俊华 王 玥 王胜翔
王小丽 温华珍 吴厚斌 吴进龙 杨 锚 于 荣
赵永辉

第二篇

主 编：沈英娃 赵玉艳 林荣华
副主 编：汤保华 严大为 袁善奎
编译人员（按姓氏音序排列）：
安雪花 蔡 翔 陈 翔 陈丽萍 丁新军 胡双庆
李 岗 李 璇 林荣华 卢 玲 沈英娃 舒耀皋
汤保华 田亚男 王 宏 王润欢 王 星 王彦华
吴声敢 吴颖慧 严大为 杨海荣 俞瑞鲜 袁善奎
张陆伟 赵 燕 赵学平 赵玉艳 周 红 周艳明

第三篇

主 编：刘纯新 张亚楠 王晓军

副 主 编：石利利 聂晶磊 曲薏薏

编 译 人 员（按姓氏音序排列）：

陈 光	丁 琦	段亚玲	韩 雪	蒋金华	李柏余
刘纯新	刘新洋	路 伟	聂晶磊	朴秀英	石利利
孙锦业	王鲁昕	王一喆	吴剑英	杨 力	于丽娜
袁 野	张亚楠	赵清华	曲薏薏	王晓军	

第四篇

主 编：由宇润 张丽英 王智琴

副 主 编：姚宝玉 廖 雪 陶岭梅

编 译 人 员（按姓氏音序排列）：

陈 聪	李 梅	李 敏	廖 雪	吕耀中	孟宇晰
任 雁	孙常松	陶岭梅	王智琴	魏 敏	邢立国
闫艺舟	杨 微	姚宝玉	由宇润	于 巍	张 炫
张华春	张丽英	张玉彪	赵 剑		

第五篇

主 编：简 秋 龚 勇 秦冬梅 谭 尽

副 主 编：王 鹏 朱光艳 郑尊涛 段丽芳

编 译 人 员（按姓氏音序排列）：

蔡 芸	蔡晓明	陈跃乐	段丽芳	龚 勇	谷 旭
何红梅	胡秀卿	简 秋	李冉红	刘东辉	刘丰茂
穆 兰	平立凤	秦冬梅	宋稳成	谭 尽	王 鹏
吴 珉	张昌朋	张春荣	赵 华	郑尊涛	朱光艳

序

经济合作与发展组织（OECD）成立于1961年，由30个工业化国家组成，是由第二次世界大战后的马歇尔计划成立的欧洲经济合作组织演变而来。OECD主要工作目标是促进经济持续发展、扩大就业、提高生活标准和推动贸易自由化。随着贸易全球化，化工产品、农药、医药、兽药及化妆品国际贸易迅速增长，化学品安全问题及其影响日益受到关注，加强对农药等化学品安全性的评估和监控，减少其对环境、人类和动植物健康安全带来的危害，已经成为全世界普遍的共识。OECD为了促进全球贸易一体化，避免非关税贸易壁垒，于1981年通过“化学品评价数据相互认可（以下简称MAD）多边协议”，要求各成员国须遵循化学品安全评价良好实验室规范（GLP）原则、并按照《经济合作与发展组织化学品测试准则》进行试验，最终实现数据相互认可，其目的旨在促进化学品及农药登记资料要求的协调一致，减少昂贵的、重复的试验，降低产品登记成本，提高企业经济效益。据OECD统计，OECD成员国政府及化工企业每年至少节约6 000万美元的评价费用。目前OECD 30个成员的安全性评价资料在该体系下已实现互认。由于这种资料互认具有互惠互利的优越性，非OECD成员国对该互认体系的兴趣日益增大，目前已经有南非、以色列、新加坡、巴西、阿根廷及印度等非OECD国家成为OECD资料相互认可的正式履约方。

2010年我国石油和化工行业总产值达88 800亿元，其中化学工业产值突破7 700亿美元，超越美国（7 340亿美元）成为全球最大生产国。同时，我国还是农药生产、使用和出口大国，2011年农药出口140.87万吨，出口金额61.87亿美元。但由于我国的化学品安全性评价GLP体系尚未加入OECD MAD体系，相关实验室出具的测试数据无法获得OECD成员国以及其他国家的认可，农药境外登记需提交GLP实验室出具的试验数据，导致登记时间长、费用高。同时，由于我国农药的毒理、残留等试验数据得不到联合国粮食与农业组织（FAO）、世界卫生组织（WHO）等国际组织和OECD成员的认可，也影响了我国在农药残留限量国际标准制定、农产品国际贸易争端处置等方面的参与深度和话语权。因此，从中国农药工业健康发展和走向国际市场需求等方面看，推进GLP建设与管理、实现安全评价数据国际互认势在必行。

为系统了解和掌握OECD化学品测试准则相关的测试方法，农业部农药检定所、环境保护部化学品登记中心、浙江省农业科学院共同组织专家编译了《经济合作与发展组织化学品测试准则》。该书的出版，将有助于深入了解和掌握国际化学品安全评价测试准则，提升我国化学品及农药安全性评价技术水平，在推动化学品安全评价数据的国际互认、保护环境和人类健康及国际贸易中发挥积极作用。

农业部农药检定所所长



2012年12月6日

前 言

《经济合作与发展组织化学品测试准则》是由经济合作与发展组织（简称 OECD）负责制定，由各成员国、相关企业以及独立实验室相互认可，用于测试各类化学品如农药、医药和医用化学品、兽药、食品添加剂安全性的一系列试验方法。测试方法由 OECD 环境委员会组织协调各成员的专家制定，涵盖化学品的物理化学性质、对人类健康的影响、对环境生物的影响、在环境中的降解与蓄积以及其他测试原则等 5 方面。这套测试方法已用于许多化学品登记测试和研究的广泛领域。自 1981 年起，这套测试方法已成为 OECD 成员以及许多非成员国家和地区化学品测试及其潜在危害性评价工作认同的参考工具，也是 OECD 成员化学品数据相互认可（mutual acceptance of data, MAD）的重要内容。目前，这套测试方法已作为国际标准而被广泛采用。

OECD 化学品测试准则主要包括化学品的理化特性（physical chemical properties）、生物系统效应（effects on biotic systems）、降解与蓄积（degradation and accumulation）、健康效应（health effects）和其他测试准则（other OECD test guidelines）5 篇，其中第五篇目前主要涉及农药残留化学（pesticide residue chemistry）。

由于化学品安全评价技术的不断进步和安全评价理念的更新，OECD 不断推出新的测试准则，并对原有的准则进行修订。本书结合 OECD 2011 年 7 月前最新公布的化学品测试准则，对理化性质、生物系统效应、降解与蓄积、健康效应和残留化学 5 部分的 155 项试验方法进行了编译。其中，理化性质部分 22 项方法、生物系统效应部分 35 项方法、降解与蓄积部分 25 项方法、健康效应部分 64 项方法、其他测试原则部分 9 项方法。本书内容不仅反映了国际化学品测试方法的最新动态和发展趋势，也为我国化学品和农药安全评价试验数据的国际认可提供了较为可靠的技术支撑。

本书得到“十一五”国家科技支撑计划《农药创制工程》（课题编号：2006BAE01A00）的资助，得到了科技部高新技术发展及产业化司、中化化工科学技术总院有关领导的亲切关怀和大力支持。在此表示衷心的感谢。同时本书的编译也得到了中国农业出版社的大力支持，在此谨致以诚挚的谢意。

由于时间仓促和水平有限，译文中可能存在一些不足，恳请广大读者对本书中的不当之处批评指正，以便不断完善。

编译者

2012 年 11 月

关于《经济合作与发展组织 化学品测试准则》的说明

(OECD's Guidelines for the Testing of Chemicals)

《经济合作与发展组织化学品测试准则》是经济合作与发展组织（简称 OECD）负责制订，由各成员、相关企业以及独立实验室相互认可，用于测试各类化学品如农药、医药和医用化学品、兽药、食品添加剂安全性的一系列试验方法。方法具体由 OECD 环境委员会组织协调各成员的专家制定，包括化学品的物理化学性质、对人类健康的影响、对环境的影响、在环境中的降解与蓄积 5 方面的内容。这套测试方法已在许多化学品项目研究中广泛使用。自 1981 年起，这套测试方法已成为 OECD 成员以及许多非成员国家和地区化学品测试及其潜在危害性评价工作认同的参考工具，也是 OECD 成员化学品数据相互认可（mutual acceptance of data, MAD）的重要内容。目前这套测试方法已作为国际标准而被广泛采用。

OECD 化学品测试方法主要包括化学品的理化特性（physical chemical properties）、生物系统效应（effects on biotic systems）、降解与蓄积（degradation and accumulation）、健康效应（health effects）和其他测试准则（other OECD test guidelines）5 篇内容，其中第五篇目前主要涉及农药残留化学（pesticide residue chemistry）。

本书根据 OECD 最新颁布的化学品测试准则，分别对化学品的理化性质、生物系统效应、降解与蓄积、健康效应和残留化学 5 部分的 155 项试验方法进行了编译。其中，理化性质部分 22 项方法，生物系统效应部分 35 项方法，降解与蓄积部分 25 项方法，健康效应部分 64 项方法，其他测试准则部分 9 项方法。本书内容不仅反映了国际化学品测试方法的最新动态和发展趋势，也为我国农药、化学品安全评价试验数据的国际认可提供了可靠的技术支撑。

目 录

序
前言
关于《经济合作与发展组织化学品测试准则》的说明

第一篇 理化性质 1

OECD 物理化学专家组报告摘要 1

101 紫外—可见 (UV - VIS) 吸收光谱 (分光光度法) 7

102 熔点/熔程 10

103 沸点 16

104 蒸气压 21

105 水溶解度 32

106 吸附/解吸附——批平衡法 36

107 分配系数 (正辛醇/水)——摇瓶法 64

108 水中络合物形成作用——极谱法 67

109 液体和固体密度 70

110 粒度分布/纤维长度和直径分布 74

111 与 pH 有关的水解作用 79

112 水中解离常数 (滴定法、分光光度法、电导法) 89

113 热稳定性和空气中稳定性的筛选试验 92

114 液体黏度 96

115 水溶液表面张力 100

116 固体和液体化合物脂溶性 104

117 分配系数 (正辛醇/水) —— 高效液相色谱法 (HPLC) 108

118 聚合物的数均分子质量及分子质量分布测定——凝胶渗透色谱法 (GPC) 116

119 聚合物低分子质量部分的含量测定——凝胶渗透色谱法 (GPC) 122

120 聚合物在水中的溶解或萃取行为 128

121 土壤和污泥吸附系数 (K_{oc}) 的估算——高效液相色谱法 (HPLC) 131

122 分配系数 (正辛醇/水)——慢速搅拌法 138

第二篇 生物系统效应 147

OECD 生态毒理专家组报告摘要 147

201 藻类 (淡水绿藻和蓝藻) 生长抑制试验 152

202 溞类急性活动抑制试验 168

203 鱼类急性毒性试验 174

204 鱼类 14d 延长毒性试验 180

205 鸟类饲喂毒性试验 184

206 鸟类繁殖试验 188

207 蚯蚓急性毒性试验 193

208 陆生植物: 幼苗萌芽和生长试验 197

209	活性污泥呼吸抑制试验（碳和铵氧化）	217
210	鱼类早期生活阶段毒性试验	228
211	大型溞繁殖试验	238
212	鱼类胚胎—卵黄囊吸收阶段的短期毒性试验	252
213	蜜蜂急性经口毒性试验	263
214	蜜蜂急性接触毒性试验	268
215	鱼类幼体生长试验	273
216	土壤微生物：氮转化测试	282
217	土壤微生物：碳转化测试	289
218	采用加标沉积物的沉积物—水体摇蚊毒性试验	296
219	采用加标水的沉积物—水体摇蚊毒性试验	309
220	线蚓繁殖试验	321
221	浮萍生长抑制试验	334
222	蚯蚓繁殖试验	348
223	鸟类急性经口毒性试验	357
224	厌氧细菌活性抑制试验——厌氧消化污泥气体生成量减少测定法	370
225	采用加标沉积物的沉积物—水体带丝蚓毒性试验	381
226	捕食螨（尖狭下盾螨）在土壤中的繁殖试验	400
227	陆生植物活力试验	414
228	化学品对双翅目粪蝇（黄粪蝇、秋家蝇）发育毒性试验	432
229	短期鱼类繁殖试验	441
230	鱼类雌激素、雄激素活性与芳香酶活性抑制 21d 短期筛选试验	460
231	两栖类动物变态发育试验	479
232	跳虫（弹尾目）在土壤中的繁殖试验	502
233	沉积物—水体系（加标水或加标沉积物）的摇蚊生命周期毒性试验	513
234	鱼类性分化试验	529
235	摇蚊急性抑制试验	553
第三篇 降解与蓄积		563
概论		563
301	快速生物降解试验	573
301A	DOC 消减试验	578
301B	CO ₂ 生成试验	583
301C	改进的 MITI 试验（I）	587
301D	密闭瓶试验	591
301E	改进的 OECD 筛选试验	596
301F	压力呼吸计量试验	600
302A	固有生物降解性：改进的 SCAS 试验	608
302B	固有生物降解性：赞恩—惠伦斯试验	611
302C	固有生物降解性：改进的 MITI 试验（II）	616
303	模拟试验——好氧污水处理：303A 偶联单元法及 303B 生物膜法	625
304A	土壤固有生物降解性	653
305	生物蓄积：流水式鱼类试验	658
306	海水中生物降解性	672
307	土壤中的好氧和厌氧转化	687

308	水沉积物系统中的好氧和厌氧转化	698
309	地表水的有氧矿化——模拟生物降解试验	709
310	快速生物降解——密闭瓶 CO ₂ 法（顶空试验）	721
311	硝化污泥中有机化合物的厌氧生物降解性：气体生成法	732
312	土壤柱淋溶	744
313	防腐剂处理的木材向环境的释放评价：裸露与接触淡水或海水木制品的室内方法	754
314	排放污水中化学品的生物降解性模拟试验	760
315	沉积物底栖寡毛纲生物的生物蓄积	794
316	化合物在水中的光转化：直接光解	814
317	陆生寡毛类动物生物蓄积	845
第四篇 健康效应		863
OECD 长期和短期毒理专家组报告摘要		863
401	急性经口毒性试验	869
402	急性经皮毒性试验	870
403	急性吸入毒性试验	873
404	急性皮肤刺激性/腐蚀性试验	884
405	急性眼刺激性/腐蚀性试验	891
406	皮肤致敏试验	900
407	啮齿类动物 28d 重复经口毒性试验	905
408	啮齿类动物 90d 重复经口毒性试验	912
409	非啮齿类动物 90d 重复经口毒性试验	918
410	21d/28d 重复经皮毒性试验	924
411	90d 亚慢性经皮毒性试验	928
412	28d 亚急性吸入毒性试验	932
413	90d 亚慢性吸入毒性试验	941
414	孕期发育毒性试验	951
415	一代繁殖毒性试验	958
416	两代繁殖毒性试验	961
417	毒代动力学试验	969
418	有机磷化合物急性染毒迟发性神经毒性试验	981
419	有机磷化合物迟发性神经毒性试验：28d 重复给药	986
420	急性经口毒性试验：固定剂量法	991
421	生殖和发育毒性筛选试验	1000
422	结合重复染毒毒性研究的生殖/发育毒性筛选试验	1007
423	急性经口毒性试验：急性毒性阶层法	1015
424	啮齿类动物神经毒性试验	1022
425	急性经口毒性试验：上下增减剂量法（UDP）	1031
426	神经发育毒性试验	1049
427	皮肤吸收：体内试验	1066
428	皮肤吸收：体外试验	1071
429	皮肤致敏：局部淋巴结试验	1076
430	体外皮肤腐蚀性：经皮电阻试验	1088
431	体外皮肤腐蚀性：人类皮肤模型试验	1096
432	体外 3T3 NRU 光毒性试验	1101

435	体外膜屏障皮肤腐蚀试验	1111
436	急性吸入毒性试验：急性毒性阶层法	1120
437	眼腐蚀/强刺激性试验：离体牛眼法	1133
438	眼腐蚀/强刺激性试验：离体鸡眼法	1143
439	体外皮肤刺激：重组人表皮模型试验	1153
440	啮齿类子宫生物分析：类雌激素作用短期筛选试验	1164
441	大鼠 Hershberger 生物测定：（抗）雄激素短期筛选试验	1176
442A	皮肤过敏：局部淋巴结试验：DA 法	1189
442B	皮肤致敏：局部淋巴结试验：BrdU - ELISA 法	1198
443	一代繁殖毒性扩展试验	1207
451	致癌试验	1223
452	慢性毒性试验	1232
453	慢性毒性与致癌合并试验	1241
455	检测化学品雌激素活性的稳定转染人类雌激素受体—— α 转录激活试验	1253
456	H295R 类固醇分析	1263
471	细菌回复突变试验	1276
473	体外哺乳动物细胞染色体畸变试验	1283
474	哺乳动物红细胞微核试验	1289
475	哺乳动物骨髓染色体畸变试验	1295
476	体外哺乳动物细胞基因突变试验	1301
477	遗传毒性：黑腹果蝇伴性隐性致死试验	1308
478	遗传毒性：啮齿类动物显性致死试验	1311
479	遗传毒性：体外哺乳动物细胞姐妹染色单体交换试验	1314
480	遗传毒性：酿酒酵母基因突变试验	1317
481	遗传毒性：酿酒酵母有丝分裂重组试验	1320
482	遗传毒性：哺乳动物细胞 DNA 损害与修复/程序外 DNA 合成体外试验	1323
483	哺乳动物精原细胞染色体畸变试验	1326
484	小鼠斑点试验	1332
485	小鼠可遗传易位试验	1335
486	体内哺乳动物肝细胞程序外 DNA 合成（UDS）试验	1338
487	体外哺乳动物细胞微核试验	1344
488	转基因啮齿类动物体细胞和生殖细胞基因突变试验	1358
第五篇	其他测试准则	1367
A 部分	农药残留化学	1367
501	农作物中的代谢	1368
502	后茬农作物中的代谢	1380
503	家畜体内的代谢	1391
504	后茬农作物中的残留测定（田间残留限量的研究）	1403
505	家畜中的残留	1409
506	储藏商品中农药残留的稳定性	1420
507	加工产品中农药残留特性——高温水解	1426
508	加工产品中农药残留量	1434
509	农作物田间试验	1443
附录	OECD 试验准则开发中有关动物福利的相关说明	1468

第一篇 理化性质

OECD 物理化学专家组报告摘要

OECD 物理化学专家组组织专家拟定了理化试验的试验导则草稿（附录中列出参加者名单）。草稿在 1979 年 10 月由主导国（联邦德国）在最终报告中发布，这个报告中包括对于理化试验方法详尽的专家组的观点、试验导则目标和通用原则。以下内容是对这些观点的概要总结，同时也可作为 OECD 试验导则使用者应该了解的背景信息。

1 通则

理化专家组早在其两年的研究中即做出决定，要统一国际间化学品的检定，尤其是新化学品，用来测试和评价化学品的技术设备要达到可实现的最高专业水平。

专家组对重要的物理化学性质仔细筛选后，从国内和国际组织收集了大量的背景资料。筛选后的理化性质如下：

- a) 在风险评估中可直接输入的参数（如：影响分配性质的参数，包括饱和蒸气压、水溶解度、吸附/解吸）。
- b) 进行相关试验所要求预知的已知参数（如：进行水中生物和非生物降解试验前，需预先了解化学品水溶解度）。
- c) 对优化相关试验所需要了解的指导信息（如：进行光解试验前，需了解 UV-VIS 光谱信息）。

专家组的目标是仔细研究测定物理化学性质试验方法的科学技术细节，同时研究它们与降解、移动、富集和有害作用之间的关系。

对于每一个认为重要的物理化学性质，试验导则就被开发为既有试验方法描述又有结果评估的导则。其中，选择了一系列参比物进行方法间的比较和方法的校准。在将来，这些参比物质的选择将会给试验结果间的比较提供较好的有价值的基础。

在工作组工作期间，发现新形成的试验导则不得不以草稿的形式出现，因为现有的标准、明确的方法或文献报道不能完全满足工作组所选方法的要求，原因在于这些方法要应用到所有的或最新的化学物质上。

2 应用物理化学性质评估潜在环境危害

一些人类活动会造成化学品释放到环境中，这些化学品会在环境中造成一些人类并不希望发生的化学或生物反应。

在环境中暴露的化学品形成的危害与几个因素相互作用有关，在这些因素中，物理化学性质对化学物质浓度和暴露程度起主要作用。

化学物质浓度和暴露程度决定于输入因素的多变性，在这些因素中起主要作用的因素为：

- a) 释放（排放到环境中的速率）。
- b) 环境中化学物质的移动性。
- c) 环境中化学物质的降解特性（非生物和生物的）。
- d) 潜在的蓄积性（生物和非生物的）。

另外，也必须考虑其他因素，例如释放到环境中的方式，季节、气候、地理条件，生物密度（微生物，植物，动物，人类）。然而，现在仍没有可靠的综合性的环境模型可以使用，因此，“最坏情况估计（所估计的造成最坏可能性的环境浓度）”经常被用来在环境风险评估中提供上限。

2.1 释放

目前，估计化学品的“释放速率”只能最粗略地靠投放到市场上的用量、化学品的使用和其处理方式进行估计。

然而很明显，理化性质的知识可帮助评估释放的可能性，例如：物理状态、蒸气压、水溶解度、密度、粒径等参数。这些参数可以预测化学物质能够对生态系统的哪一部分产生影响，同时也能表明化学物质可能存在的形式。

2.2 移动性

化学物质在环境中的移动性被定义为化学物质在环境中的移动能力。它是由化学物质在环境介质（空气、水、土壤）中的分布行为和介质中的转移行为共同决定的。下列理化参数如：

- a) 蒸气压曲线。
- b) 水溶解度。
- c) 吸附/解吸。
- d) 水溶液中的挥发性。
- e) 液体和固体密度。
- f) 粒径。
- g) 液体黏度。
- h) 溶液表面张力。

可以用来估计化学物质释放到环境中后，其在空气、水和土壤中的分布。这样，如果已知一个新化学物质（在已有文献中未出现的物质）的物理化学常数，将会对预测其危害作用起到重要作用。

而目前就我们已有的知识，怎样运用物理化学性质来预测分配仍然是十分有限而且只能进行粗略地估计。

原则上，只要蓄积作用可以忽略，同时降解也是可以忽略的因素之一（如对于持久性化合物）时，是可以能够对化学物质的分布进行估测的。如果有化学物质在每个介质中降解速率的知识，也可对非持久性化学物质的行为进行估测。然而，在这个领域的进步一定要等到环境模型取得公认的进展和得到可靠的环境降解速率测定的数据才能进行。

目前，甚至对于高持久性化合物，只有粗略的计算是合适的。而且对这些化学物已经建立了几个环境模型。

数学模型已经在一个数量级的水平上成功地对化学物质在空气、水和土壤间的分布进行了估测。

2.3 降解和蓄积

为对化学物质环境暴露进行估测，在估测其移动性时要同时考虑消失（降解、矿化）和特定地点的蓄积性。

专家组认为一些理化试验可以用来作为降解，尤其是蓄积性的“筛选”试验。例如，正辛醇/水的分配系数可以用来估测化学物质的蓄积行为，而化学物质的水解行为可以作为估测当化学物质与水接触时是否降解的重要参数。

3 试验导则及其应用

在建立试验导则的过程中，专家组发现，没有哪种情况专家组可以直接应用现有的试验描述。但是在很多情况下，已有的标准足以作为试验导则建立的基础。

主要的原因是，现有的试验方法不是为所有不同种类的（包括新的）化学物质所设计，而是为特定种类的化学品所设计（如有限的压力范围）。

同时，试验导则代表了现有的技术水平。OECD 理化专家组建议，OECD 应该寻找能为将来在方法提高和新方法建立提供基础的途径。在新旧方法的连接中，应该强调新扩增的试验导则仍面临着一致性问题。因此，只有已经被证明比现有试验导则更好或相关的试验参数无试验导则时（例如：操作更简单、更精确，试验费用更低）才能被选出来。

4 实验室间比对研究

专家组决定提供一些新设计的试验导则作为实验室间的比对研究，目的是确定其可操作性并得到其所用费用的信息。

在比对程序中，下列导则在欧盟委员会合作实验室被部分地进行了验证。

- a) 固体和液体物质的脂溶性。
- b) 水溶解度。
- c) 蒸气压曲线。
- d) 分配系数（正辛醇/水）。
- e) 液体黏度。
- f) 液体和固体密度。
- g) 水溶液表面张力。
- h) 吸附/解吸。
- i) 水解。

比对程序的结果和专家对参加实验室的评价会在建立最终试验导则版本中认真考虑。

4.1 预要求和指导信息

专家组将预要求定义为在实验室恰当应用试验导则前必须知道的信息（通常这些信息是从其他试验中得到的）。

指导信息是指可用来帮助选择相关试验，在有可能的最好条件下进行试验和结果解释提供的有用的信息。对于大多数专家组所建立的试验导则，已经确认了预先要求的试验参数和指导信息，并将其总结在表 1 中。

表 1

理化性质	预要求	指导信息
UV-VIS 吸收光谱		分子结构式
熔点/熔程		
沸点/沸程		
蒸气压曲线		沸点+熔点，相对分子质量
水溶解度		分子结构式，蒸气压曲线，解离常数，水解（预先）
吸附/解吸	水溶解度	沸点，蒸气压曲线
分配系数（正辛醇/水）	解离常数，水溶解度，水解（预先）	
complex formation ability	水溶解度，解离常数	结构式
液体和固体密度		沸点+熔点
粒径	水溶解度，在电子显微镜下纤维形状的稳定性和产品中纤维的自然情况	熔点
水解	水溶解度	蒸气压曲线
水中解离常数	水溶解度	结构式，电导率
热稳定性和空气中稳定性筛选试验		蒸气压曲线，熔点+沸点，结构式
液体黏度	密度	熔点+沸点
液体表面张力	水溶解度	结构式，水解（预先），临界胶束浓度
固体和液体物质的脂溶性	①	分配系数，水溶解度，结构式，蒸气压曲线，50℃ 的稳定性

① 必须有合适的专属性的分析方法。

4.2 样品纯度

事实上，所有投放到市场上的商品化的物质都含有与该物质有关的杂质（例如，杂质来源于粗品）。在某些情况下，按照重量或体积大小比较，杂质甚至超过物质本身。另外，一些化工企业只有将稳定剂加入到产品中后，才能将产品投放市场。

因此在进行理化试验时，一定要考虑到杂质会造成的问题：

a) 物质的鉴定试验：因为化合物结构扫描光谱、相对分子质量、熔点和沸点是作为物质“鉴定卡”的重要参数，所以，一定要用纯物质进行上述参数的测定，否则无用的信息会使试验结果变得很混乱。

b) 杂质影响到试验灵敏度的情况：某些理化试验会对某种特定的杂质显示出固有的灵敏度。专家组认为，在某些情况下，已经证明甚至只有 1% 水平的杂质也会对试验结果产生很大的影响。

c) 在环境中杂质潜在影响的情况：虽然用于理化试验的物质是纯化过的物质，但存在于环境中的与杂质相关的试验结果仍可能被忽略（例如，某个杂质可能溶于正辛醇，而这刚好与供试物质在正辛醇/水中的分配结果相反）。

5 附加意见

5.1 结构预测理化性质

有经验的化学家很熟悉一些特殊的分子结构与其理化性质有一定的相关性（例如，化学物质的结构与水溶解度和蒸气压均有相关性），同样的，其他学科的科学家的（例如，生物学家、毒理学家）经常会用“构效关系”来作为指导信息。然而，在比较一些典型物质生物特性与结构的相关性时，并没有经常发现它们之间有显著差别。

如果要测定新化学物质，构效关系结果可以作为指导信息（一定范围内），但同时也要谨慎处理。实质上，不进行任何试验而使用构效关系作为结果是否能够足以说明问题还有待确定。

因为，对于已有化学物质（市场上流通的物质），构效关系是用来从大量的化学物质中选择那些想要做试验的物质最有用的指导信息类型。

5.2 参照方法和参比物质

使用参比物质是从其他实验室获得可靠的，同时具有兼容性和可比性数据的一个重要途径。在测试兼容性时，这个参比物质可以是任何材料、设备、物理化学系统，它们被用来将某一特性与某一数值相结合，并且可以用来校正某一测定流程。在这种情况下，参比物质可以是一个物质或一个稳定的金属合金（例如，含有一定量的镉）。例如，在一个化学系统中测定准确度和重现性，通过使用参比物质，分析和测定化学物质兼容性和一致性会很容易达到。

这同时要求合适的参比物质与参照方法相结合。

与 OECD 化学品测试程序其他专家组合作过程中，已制定了校准/比较用化学物质列表。

专家组认为，任何实验室绝对有必要用该实验室的测定方法来建立能够准确测定相关参比物质数值或可以解释系统偏差的方法程序。这个程序可以用来在 GLP 条件下进行内部控制。

Agencies Providing Standards

ISO – Standards

International Organisation for Standardisation,

1, rue de Varembé, B. P. 56 CH – 1211 Geneva, Switzerland

ASTM Standards

American Society for Testing and Materials,

1916, Race Street, Philadelphia, Pa. 19103 – 1187, U. S. A.

BSI Standards

British Standards Institution,

2, Park Street, London, W1A 2BS, United Kingdom

DIN Standards

Deutsches Institut für Normung,
Burggrafenstr. 6, Postfach 1107 D- 1000 Berlin, 30, Germany
JISC Standards

Japanese Industrial Standards Committee,
c/o Standards Department
Agency of Industrial Science and Technology, MTTI
1-3-1, Kasumigaseki, Chiyoda-ku Tokyo 100, 100, Japan
NF Standards

L' Association Française de Normalisation (AFNOR),
Tour Europe, Cedex 7, 92049 Courbrvoie, France
PTB Method

Physikalisch - Technische Bundesanstalt,
Bundesallee 100, Postfach 3345 D- 3300 Braunschweig, Germany
NEN Standards

Nederlands Normalisatie Institute,
Kalfjeslaan 2, P. O. Box 5059 2600 GB, Delft, Netherlands
GEN Standards

European Committee for Standardization
36, rue de Stassat, B- 1050 Brussels, Belgium

OECD PHYSICAL CHEMISTRY GROUP
LIST OF PARTICIPANTS

J. D. Bell ^①	(Australia)	Invited Experts	
H. Van Looy ^①	(Belgium)		
W. M. J. Strachan	(Canada)	T. Arndt ^①	(Germany)
M. R. Cabridenc	(France)	G. Brummer ^①	(Germany)
W. Klopffer	(Germany)	K. Figge ^①	(Germany)
H. W. Marquart ^①	(Germany)	T. Grewer ^①	(Germany)
H. J. Poremski	(Germany)	H. J. Heinrich	(Germany)
F. Schmidt - Bleek	(Germany)	H. J. Kretzschmar ^①	(Germany)
Chairman		M. Schlieper ^①	(Germany)
W. Weppner ^①	(Germany)	D. Schuller	(Germany)
P. Crawford ^①	(Italy)	B. Sewekow	(Germany)
D. Misiti	(Italy)	G. Synnatschke ^①	(Germany)

① 表示仅仅参加了部分会议。