



中华人民共和国国家标准

GB/T 21853—2008

化学品 分配系数(正辛醇-水) 摇瓶法试验

Chemicals—Partition coefficient(n-octanol/water)—
Shake flask method

2008-05-12 发布

2008-09-01 实施

中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局 发布
中国国家标准化管理委员会

中 华 人 民 共 和 国
国 家 标 准
化 学 品 分 配 系 数 (正 辛 醇 - 水)
摇 瓶 法 试 验

GB/T 21853—2008

*

中 国 标 准 出 版 社 出 版 发 行
北 京 复 兴 门 外 三 里 河 北 街 16 号
邮 政 编 码 : 100045

网 址 www.spc.net.cn

电 话 : 68523946 68517548

中 国 标 准 出 版 社 秦 皇 岛 印 刷 厂 印 刷
各 地 新 华 书 店 经 销

*

开 本 880×1230 1/16 印 张 0.5 字 数 7 千 字
2008 年 8 月 第 一 版 2008 年 8 月 第 一 次 印 刷

*

书 号 : 155066 · 1-32647

如 有 印 装 差 错 由 本 社 发 行 中 心 调 换
版 权 专 有 侵 权 必 究
举 报 电 话 : (010)68533533

前 言

本标准等同采用经济合作与发展组织(OECD)化学品测试导则 No. 107(1995 年)《正辛醇-水分配系数:摇瓶法》(英文版)。

本标准做了下列编辑性修改:

——将计量单位改为我国法定计量单位。

本标准由全国危险化学品管理标准化技术委员会(SAC/TC 251)提出并归口。

本标准负责起草单位:环境保护部化学品登记中心。

本标准参加起草单位:环境保护部南京环境科学研究所、沈阳化工研究院安全评价中心、上海市环境科学研究院、中国环境科学研究院。

本标准主要起草人:聂晶磊、刘纯新、卢玲、刘济宁、孔德洋、赵凌菲、沈根祥、李捍东。

本标准为首次制定。

化学品 分配系数(正辛醇-水) 摇瓶法试验

1 范围

本标准规定了化学品分配系数(正辛醇-水)摇瓶法试验的方法概述、试验程序、质量保证与质量控制、数据与报告。

本标准适用于测试非表面活性剂类化学品的正辛醇-水的分配系数。

本标准适用于正辛醇-水分配系数为 $10^{-2} \sim 10^4$ 范围的化学品的测定。

2 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

2.1

分配系数 partition coefficient

受试物在互不相溶的两相介质中达到平衡时的浓度之比。

2.2

正辛醇-水分配系数 octanol-water partition coefficient

受试物在正辛醇-水两相介质中达到平衡时的浓度之比,以 P_{ow} 表示。 P_{ow} 无量纲,通常用以 10 为底的对数($\lg P_{ow}$)表示。

3 受试物信息

- a) 分子式;
- b) 结构式;
- c) 水中溶解度;
- d) 正辛醇中溶解度;
- e) 解离常数(pK);
- f) 水解性;
- g) 表面张力。

4 方法概述

4.1 原理

在恒温、恒压和一定的 pH 条件下,当溶质在任何一相中的浓度不超过 0.01 mol/L 时,其在两种纯溶剂中的分配遵循能斯特(Nernst)定律。通过一定时间的连续振摇,使化学品在脂溶性有机溶剂(正辛醇)与水相中的分配达到平衡,测定平衡时两相中化学品的浓度,可确定化学品的分配系数。

对于可能发生解离的化学品,应采用适当的缓冲溶液。对于自由酸,缓冲液的 pH 值至少为 $pK-1$;对于自由碱,缓冲液的 pH 值至少为 $pK+1$,以确保化学品呈分子状态。

表面活性剂类化学品的分配系数可采用其在水中和在正辛醇中的溶解度来计算。

4.2 参比物

本标准无推荐参比物。