



中华人民共和国国家标准

GB/T 36700.6—2018

化学品 水生环境危害分类指导 第 6 部分：定量结构活性关系(QSAR)

Chemicals—Guidance on hazard classification to the aquatic environment—
Part 6: Quantitative structure-activity relationship(QSAR)

2018-09-17 发布

2019-04-01 实施

国家市场监督管理总局
中国国家标准化管理委员会 发布

前 言

GB/T 36700《化学品 水生环境危害分类指导》分为以下 8 个部分：

- 第 1 部分：引言；
- 第 2 部分：统一分类方法；
- 第 3 部分：水生毒性；
- 第 4 部分：降解；
- 第 5 部分：生物富集；
- 第 6 部分：定量结构活性关系(QSAR)；
- 第 7 部分：金属和金属化合物分类；
- 第 8 部分：金属和金属化合物在水介质中的转化/溶解指导。

本部分为 GB/T 36700 的第 6 部分。

本部分按照 GB/T 1.1—2009 给出的规则起草。

本部分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。

本部分起草单位：中华人民共和国安徽出入境检验检疫局、环境保护部固体废物与化学品管理技术中心、中华人民共和国常州出入境检验检疫局、中国化工经济技术发展中心、上海化工研究院有限公司、华峰集团有限公司、北京国石安康科技有限公司、清华大学、江阴澄星日化有限公司。

本部分主要起草人：温劲松、卢玲、汪蓉、季汝武、张蕾、卞学东、田宇、王馨晨、孙昊、滕晓明、曹梦然、贺少鹏、黄俊、王斌。

化学品 水生环境危害分类指导

第 6 部分:定量结构活性关系(QSAR)

1 范围

GB/T 36700 的本部分规定了化学品对水生环境危害分类涉及定量结构活性关系(QSAR)方法使用中导致危险低估的试验因素、模型选择、使用。

本部分适用于化学品水生环境危害分类涉及 QSAR 使用的指导。

2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件,仅注日期的版本适用于本文件。凡是不注日期的引用文件,其最新版本(包括所有的修改单)适用于本文件。

GB/T 21853 化学品 分配系数(正辛醇-水) 摇瓶法试验

GB/T 29882 杂项危险物质和物品分类试验方法 正辛醇/水分配系数

GB 30000.28 化学品分类和标签规范 第 28 部分:对水生环境的危害

3 术语和定义、缩略语

3.1 术语和定义

GB 30000.28 界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

3.1.1

过剩毒性 excess toxicity

物质表现出的超过预测值的毒性。

3.2 缩略语

下列缩略语适用于本文件。

BCF:生物富集系数(Bioconcentration factor)

K_{ow} :正辛醇-水分配系数(*n*-octanol-water partition coefficient)

LFER:线性自由能关系(Linear free-energy relationship)

QSAR:定量结构活性关系(Quantitative structure-activity relationship)

4 导致危险低估的试验因素

4.1 非电解性物质

除非是试验因素导致测试结果偏小,否则一些非电解性物质的毒性比 QSAR 预测值更大。这些试验因素,例如容易在试验过程中挥发的碳氢化合物,以及强疏水性化合物在急性毒性试验中由于试验时间不足难以使水相浓度(水族箱试验溶液)与产生麻醉效应的内疏水性位点浓度之间达到稳定状态。只要在试验时间内能建立这种平衡,则低反应性非电解性物质的 $\lg K_{ow}$ 与 $\lg C$ 关系曲线为线性关系。此