



中华人民共和国国家标准

GB/T 21852—2008

化学品 分配系数(正辛醇-水) 高效液相色谱法试验

Chemicals—Partition coefficient(n-octanol/water)—
High performance liquid chromatography(HPLC)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
中国国家标准化管理委员会 发布

前 言

本标准等同采用经济合作与发展组织化学品测试导则 No. 117(2004 年)《分配系数(正辛醇-水): 高效液相色谱法》(英文版)。

本标准作了下列编辑性修改:

——将原正文中推荐的参比物表调整到增加的附录 A;

——将计量单位改为我国法定计量单位。

本标准的附录 A、附录 B 为资料性附录。

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:沈阳化工研究院安全评价中心、环境保护部南京环境科学研究所、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:季诚、刘纯新、葛海虹、蔡磊明、李莹、孔德洋、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) 高效液相色谱法试验

1 范围

本标准规定了化学品分配系数(正辛醇-水)的高效液相色谱法试验的方法概述、试验系统、试验程序、质量保证与质量控制、数据与报告。

本标准适用于测定 $\lg P_{ow}$ 值为 0~6 范围内化学品的分配系数^{[1],[2],[3],[4],[5]}, 特殊情况下也可以扩展至 $\lg P_{ow}$ 为 6~10 的化学品。本标准不适用于强酸、强碱、金属络合物、与洗脱液发生反应的化合物和表面活性剂。

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 方法概述

3.1 原理

反相高效液相色谱是在分析柱上进行分离的过程。受试物进入色谱柱后, 随着流动相在溶剂流动相和烃类固定相之间进行分配。化合物在柱中的保留值与其烃-水分配系数成比例, 亲水性化合物先洗脱, 亲脂性化合物后洗脱。保留时间以容量因子 k 表示, 见式(1)。

$$k = \frac{t_R - t_0}{t_0} \dots\dots\dots (1)$$

式中:

t_R ——受试物的保留时间, 单位为分(min);

t_0 ——死时间, 即溶剂分子通过柱子的平均时间, 单位为分(min)。

本方法无需定量的分析方法, 只需测定保留时间值。

受试物的正辛醇-水分配系数可以通过试验测定其容量因子 k , 代入式(2)计算得出。

$$\lg P_{ow} = a + b \times \lg k \dots\dots\dots (2)$$

式中:

P_{ow} ——正辛醇-水分配系数;

a, b ——线性回归系数。

式(2)由参比物的 $\lg P_{ow}$ (正辛醇-水分配系数)对其 $\lg k$ (容量因子)作线性回归所得。

对于离子型化合物可以测定其在非离子形态(游离酸或游离碱)下的分配系数, 此时试验介质为适当的缓冲液。对于游离酸, 缓冲液的 pH 值低于 pKa; 对于游离碱, 缓冲液 pH 值高于 pKa。

另外, pH-metric 法也可用于测定离子型化合物的分配系数^[6]。如果 $\lg P_{ow}$ 值用于环境危害分级或