

ЕВРАЗИЙСКИЙ СОВЕТ ПО СТАНДАРТИЗАЦИИ, МЕТРОЛОГИИ И СЕРТИФИКАЦИИ
(EASC)

EURO-ASIAN COUNCIL FOR STANDARDIZATION, METROLOGY AND CERTIFICATION
(EASC)



МЕЖГОСУДАРСТВЕННЫЙ
СТАНДАРТ

ГОСТ
32291–
2013

**МЕТОДЫ ИСПЫТАНИЙ ХИМИЧЕСКОЙ
ПРОДУКЦИИ, ПРЕДСТАВЛЯЮЩЕЙ ОПАСНОСТЬ
ДЛЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ**

**Определение коэффициента распределения н–
октанол/вода методом медленного перемешивания**

(OECD, Test No123:2006, IDT)



Издание официальное

Зарегистрирован

№ 8072

«5» сентября 2013 г.



Минск
Евразийский совет по стандартизации, метрологии и сертификации

Предисловие

Евразийский совет по стандартизации, метрологии и сертификации (ЕАСС) представляет собой региональное объединение национальных органов по стандартизации государств, входящих в Содружество Независимых Государств. В дальнейшем возможно вступление в ЕАСС национальных органов по стандартизации других государств.

Цели, основные принципы и основной порядок проведения работ по межгосударственной стандартизации установлены в ГОСТ 1.0–92 «Межгосударственная система стандартизации. Основные положения» и ГОСТ 1.2–2009 «Межгосударственная система стандартизации. Стандарты межгосударственные, правила, рекомендации по межгосударственной стандартизации. Правила разработки, принятия, обновления и отмены»

Сведения о стандарте

1 РАЗРАБОТАН Федеральным государственным унитарным предприятием «Всероссийский научно-исследовательский центр стандартизации, информации и сертификации сырья, материалов и веществ» (ФГУП «ВНИЦСМВ»); Межгосударственным техническим комитетом по стандартизации МТК № 339 «Безопасность сырья, материалов и веществ» Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии

2 ВНЕСЕН Федеральным агентством по техническому регулированию и метрологии Российской Федерации

3 ПРИНЯТ Евразийским советом по стандартизации, метрологии и сертификации по переписке (протокол № 58-П от 28 августа 2013 г.)

За принятие проголосовали:

Краткое наименование страны по МК (ИСО 3166) 004–97	Код страны по МК (ИСО 3166) 004–97	Сокращенное наименование национального органа по стандартизации
Армения	AM	Минэкономики Республики Армения
Беларусь	BY	Госстандарт Республики Беларусь
Кыргызстан	KG	Кыргызстандарт
Молдова	MD	Молдова-Стандарт
Российская Федерация	RU	Росстандарт
Таджикистан	TJ	Таджикстандарт
Узбекистан	UZ	Узстандарт

4 Настоящий стандарт идентичен международному документу OECD Test 123: «Partition Coefficient (1-Octanol/Water): Slow-Stirring Method» (ОЭСР Тест №. 123 «Коэффициент распределения (н –октанол/вода), метод медленного перемешивания»).

Перевод с английского языка (en).

Степень соответствия – идентичная (IDT).

5 ВВЕДЕН ВПЕРВЫЕ

Информация о введении в действие (прекращении действия) настоящего стандарта и изменений к нему на территории указанных выше государств публикуется в указателях Национальных (государственных) стандартов, издаваемых в этих государствах, а также в сети Интернет на сайтах соответствующих органов по стандартизации.

В случае пересмотра, изменения или отмены настоящего стандарта соответствующая информация также будет опубликована в сети Интернет на сайте межгосударственного совета по стандартизации, метрологии и сертификации в каталоге «Межгосударственные стандарты».

Исключительное право официального опубликования настоящего стандарта на территории указанных выше государств принадлежит национальным (государственным) органам по стандартизации этих государств

МЕТОДЫ ИСПЫТАНИЙ ХИМИЧЕСКОЙ ПРОДУКЦИИ, ПРЕДСТАВЛЯЮЩЕЙ ОПАСНОСТЬ ДЛЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ**Определение коэффициента распределения *n*-октанол/вода методом медленного перемешивания**

Testing of chemicals of environmental hazard.
Partition Coefficient (*n*-octanol/water): Slow-Stirring Method

Дата введения –

1 Область применения

Настоящий стандарт устанавливает методы испытаний для определения коэффициента распределения *n*-октанол/вода методом медленного перемешивания.

2 Термины и определения

В настоящем стандарте применимы термины с соответствующими определениями:

2.1 коэффициент распределения *n*-октанол/вода (K_{ow}): Соотношение равновесных концентраций вещества, растворенного в двухфазной системе, состоящей из двух практически несмешивающихся растворителей

2.2 Log K_{ow} : Логарифм K_{ow} .

2.3 ВЭЖХ: Высокоэффективная жидкостная хроматография.

3 Основные положения**3.1. Введение**

3.1.1 Значения K_{ow} выше $\log K_{ow}$ 8,2 были точно определены в ряде экспериментов методом медленного перемешивания. Поэтому этот метод является подходящим экспериментальным подходом для прямого определения K_{ow} высоко гидрофобных веществ.

3.1.2 Другие методы, описывающие определение коэффициента распределения, приведены в [2] и [3]. Первый относится к методу «встряхивания во флаконе», а последний описывает определение коэффициента распределения из индекса удержания обращенно-фазовой ВЭЖХ. Метод встряхивания во флаконе склонен к искажению, в связи с переходом микрокапель октанола в водную фазу. С ростом значений коэффициента распределения наличие этих капель в водной фазе приводит к увеличению завышения концентрации испытуемого вещества в воде. Таким образом, его использование ограничено для веществ с $\log K_{ow}$ меньше четырех. Второй метод основан на достоверных данных непосредственно установленных значений K_{ow} для градуировки взаимосвязи между индексом удержания ВЭЖХ и измеренными значениями K_{ow} .

3.1.3 Это руководство было разработано в Нидерландах. Точность метода в данном принципе была утверждена и оптимизирована в ходе кольцевого теста, в котором приняли участие 15 лабораторий.

3.2 Первоначальные положения

3.2.1 Для инертных органических веществ была обнаружена весьма значительная взаимосвязь между K_{ow} и их биоаккумуляцией в рыбе. Более того, было доказано, что коэффициент распределения взаимосвязан с токсичностью для рыб, также, как с сорбцией химических веществ в твердых телах, таких как почве и осадках.

3.2.2 Был доказан широкий спектр взаимосвязей между K_{ow} и другими свойствами веществ, имеющих отношение к экотоксикологии и химии. Как следствие, K_{ow} сформировался, как ключевой параметр в оценке рисков химических веществ для окружающей среды, а также в диагностике поведения химических веществ в окружающей среде.

3.2.3 Полагают, что метод медленного перемешивания способствует уменьшению образования микрокапель из капель *n*-октанола в водной фазе. Как следствие, в этом случае не происходит завышение водной концентрации вследствие того, что молекулы тестируемого вещества связаны с такими каплями. Поэтому, метод медленного перемешивания особенно подходит для определения

K_{ow} для веществ с ожидаемыми значениями $\log K_{ow}$ равным пяти и выше, для которых метод перемешивания во флаконе склонен давать ошибочные результаты.

3.3 Определение и единицы измерения

Коэффициент распределения веществ между водой и липофильным сольвентом (н – октанол) характеризует равновесное распределение химических веществ между двумя фазами. Коэффициент распределения между водой и н–октанолом (K_{ow}) определяется, как отношение равновесных концентраций тестируемого вещества в н - октаноле насыщенном водой (C_o) и воде, насыщенной 1-октанолом (C_w) по формуле (1).

$$K_{ow} = \frac{C_o}{C_w}. \quad (1)$$

Так как это соотношение концентраций, то данный показатель является безразмерным. Наиболее часто он приводится в виде логарифма по основанию 10 ($\log K_{ow}$). Коэффициент распределения зависит от температуры и отчетная информация должны содержать температуру измерений.

3.4 Принцип метода

3.4.1 Для определения коэффициента разделения, вода, н-октанол и тестируемое вещество уравниваются друг с другом при постоянной температуре. Тогда концентрация тестируемого вещества определяется в двух фазах.

3.4.2 Сложности проведения эксперимента, связанные с образованием микрокапель во время метода «встряхивание во флаконе» могут быть снижены при использовании предлагаемого здесь, эксперимента медленного перемешивания.

3.5 Применимость метода

3.5.1 Поскольку присутствие других веществ, отличных от тестируемого вещества, может повлиять на коэффициент активности тестируемого вещества, то тестируемое вещество должно быть протестировано, как чистое вещество. Для эксперимента н – октанол/вода должны быть использованы вещества высокой степени чистоты, доступные для приобретения.

3.5.2 Данный метод применим для чистых веществ, которые не диссоциируют или ассоциируют, и которые не проявляют значительной активности на поверхности раздела фаз. Он может применяться для определения коэффициента разделения н – октанол/вода для подобных веществ и смесей. Когда метод используется для смесей, коэффициент распределения н – октанол/вода определяется условно и зависит от химического состава тестируемой смеси, а состав электролита используется в качестве водной фазы. При условии, что будут предприняты дополнительные меры, данный метод может быть применен к диссоциируемым или ассоциируемым соединениям (см. 3.5.3).

3.5.3 Из-за многократного повторения условий фазового равновесия в воде и н–октанол, участвующего в разделении диссоциирующих веществ, таких как органические кислоты и фенолы, органические основания, и металлоорганические вещества, коэффициент распределения является условно постоянной величиной и сильно зависит от состава электролита. Поэтому определение коэффициента распределения н – октанол/вода требует, чтобы рН и электролитный состав контролировались при проведении экспериментов и приводился в отчетности. Для оценки этого отношения должна использоваться экспертная оценка. Используя значение константы диссоциации, должны быть выбраны соответствующие значения рН таким образом, чтобы отношение разделения определялось для каждого ионизированного состояния. Для тестирования металлоорганических соединений должны использоваться некомплексообразующие буферы. Принимая во внимание существующие знания в области химии растворов (константа комплексообразования, константа диссоциации), экспериментальные условия должны выбираться таким образом, чтобы состав тестируемого вещества в водной фазе можно было бы оценить. С помощью использования фонового электролита, ионная сила должна быть одинакова во всех экспериментах.

3.5.4 Сложности тестирования могут возрасти при проведении тестирования веществ с низким показателем растворимости или высоким показателем K_{ow} из-за того, что концентрации в воде становятся очень низкими в связи с чем их точное определение затрудняется. В настоящем стандарте приводится руководство, как решить эту проблему.

3.6 Информация о тестируемом веществе

3.6.1 Используемые в опыте химические реактивы должны быть степени ч.д.а. или высокой степени чистоты. Предпочтительно использование не меченых радиоактивным изотопом химических веществ с известным химическим составом по крайней мере 99 % чистоты или рекомендовано использование меченых веществ с известным составом радиохимической чистоты. В случае