



中华人民共和国国家标准

GB/T 24776—2009

化学物质分组和交叉参照法

Grouping and read-across methods of chemicals

2009-12-15 发布

2010-07-01 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

本标准参考了联合国《全球化学品分类和标记制度》(GHS)第一修订版和欧盟《化学品注册、评估、授权和限制法规》(REACH)指南文件 3.2《化学品安全评估和信息要求》(英文版),相关技术内容与上述文件完全一致。

本标准附录 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:国家质检总局进出口化学品安全研究中心。

本标准参加起草单位:中国检验检疫科学研究院、中化化工标准化研究所、江苏出入境检验检疫局、山东出入境检验检疫局、江西出入境检验检疫局。

本标准主要起草人:王立峰、陈会明、于文莲、王晓兵、梅建、周新、孙鑫、王琤。

本标准首次发布。

引 言

欧盟于 2007 年 6 月 1 日立法通过化学品的注册、评估、授权和限制法规(以下简称 REACH 法规),并于 2008 年 6 月 1 日正式实施。该法规实施以后对进入欧盟市场上的化学品进行统一管理。我国为应对欧盟 REACH 法规,制定了化学品安全系列标准,等同转化了欧盟 REACH 法规的相关技术内容。本标准参考了联合国《全球化学品分类和标记制度》(GHS)第一修订版和欧盟《化学品注册、评估、授权和限制法规》(REACH)指南文件 3.2《化学品安全评估和信息要求》(英文版),其有关的技术内容与上述文件完全一致,建立了化学物质分组和交叉参照的指南。

化学物质分组和交叉参照法

1 范围

本标准给出了化学物质试验数据空缺时使用分组和交叉参照法预测化学物质终点数据的指南。
本标准适用于利用分组和交叉参照法预测化学物质缺失的终点数据。

2 术语和定义

以下术语和定义适用于本标准。

2.1

交叉参照法 read-across

根据源化学物质的终点信息预测另外一种结构相似的化学物质相同终点信息的方法。

2.2

化学物质类别 chemical category

一个化学物质类包含一组具有相似的结构或结构特征的化学物质,由于结构的相似性,它们的理化特征、健康毒性特征或环境毒性特征也具有一定的相似性,或按一定规律变化。

2.3

(定量)构效关系 (quantitative) structure-activity relationships; (Q)SARs

物质效应和分子描述符之间的(定量)关系。

2.4

相似物 analogue

满足结构相似性特征,用于交叉参照目标化学物质的化学物质。

2.5

目标化学物质 target chemical

缺少终点数据,需要被预测的化学物质。

2.6

源化学物质 source chemical

对目标化学物质进行预测时,所参照的化学物质。

3 化学物质的分组

3.1 分组原理

对化学物质分组的过程,就是将具有相似化学结构,同时由于具有相似的化学结构而具有相似的或按一定规律变化的理化特征、健康毒性特征或环境毒性特征的物质归为一个化学物质类别的过程。将化学物质分为一组之后,便可在此基础上进行交叉参照。

3.2 结构相似性

结构相似性表现在以下几个方面:

- 各化学物质具有相同的官能团(如醛类、环氧化物、酯类、特殊金属离子物质);
- 各化学物质具有相同的组分或被归为相同的危害级别,具有相似的碳链长度。本条主要是指未知或可变组分物质、复杂反应产物或生物材料物质(UVCB);
- 各化学物质在结构上(如碳链长度)呈现递增或保持不变的特征,这种特征可以通过观察各化学物质的理化特性(如沸程)得到;