



中华人民共和国国家标准

GB/T 21845—2008

化学品 水溶解度试验

Chemicals—Water solubility test

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(OECD)化学品测试导则 105(1995)《水溶解度》(英文版)。

本标准做了下列编辑性修改：

——增加了范围部分；

——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：中国检验检疫科学研究院。

本标准主要起草人：周新、陈会明、王军兵、于文莲、王立峰、郝楠、孙鑫、王峥。

本标准首次发布。

OECD 引言

本标准是 1981 年的原始的 OECD 105 方法的一个修订版本。新版和 1981 年版在化学物质上没有区别。主要格式被改变了。本版本也基于 EC 方法“水溶解度”^[1]做了修改。

物质的水溶解度受杂质的影响很大。本方法是对纯物质水溶解度测定的方法,该物质须在水中是稳定的且不易挥发。在测定水溶解度之前,得到化合物的一些初步信息是有益的,比如说结构式、蒸气压、解离常数和在 pH 条件下的水解能力。

本标准介绍了两种方法:柱洗提法和烧瓶法,在本标准中,他们各自适用于溶解度小于和大于 10^{-2} g/L 的化学品。本标准还介绍了一种简单的预试验。在预试验进行最后一步试验时,所用样品的数量是粗略的,同时要使溶液达到饱和也需要一定的时间。

化学品 水溶解度试验

1 范围

本标准规定了化学品水溶解度试验的范围、定义和单位、参照物、试验方法、数据与报告。
本标准适用于测定化学品的水溶解度。

2 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

2.1

水溶解度 water solubility

水溶解度是一种物质在给定温度下在水中的饱和质量浓度。水溶解度以单位体积溶液中的溶质的质量表示,其标准单位为 kg/m^3 ,但通常使用的单位为 g/L 。

3 参照物

本标准不需要参照物。

4 试验方法

4.1 试验条件

试验应在 $20^\circ\text{C} \pm 0.5^\circ\text{C}$ 下进行,应使所有设备的有关部分均处于恒定的择定温度下。

4.2 预试验

在室温条件下,在 10 mL 具玻璃磨口塞的量筒中加入约 0.1 g 的待测样品(固体物质必须研磨成粉末),逐渐增加水的体积,在每次加入一定量水后,搅拌混合 10 min,用肉眼检查是否存在有样品不溶。如果加水 10 mL 后,样品或样品中某些部分仍不溶时,试验应在 100 mL 量筒中继续进行。在表 1 中是样品发生全溶时的近似溶解度(g/L)。当溶解度小,溶解样品需要时间长时,允许至少 24 h。如果 24 h 后物质仍未溶解,允许用更长时间(可长达 96 h)或尝试继续解释,并确定是否采用柱洗提法或烧瓶法。

表 1 初步试验待测物质近似溶解度表

在“x”毫升水中溶解 0.1 g 样品	0.1	0.5	1	2	10	100	>100
近似的溶解性/(g/L)	>1 000	1 000~200	200~100	100~50	50~10	10~1	<1

4.3 柱洗提法

4.3.1 原理

在一微型柱内填充了预先覆盖着过量被测物质的载体,柱洗提法就是从微型柱中用水洗提测试物,随着时间的改变^[2],当流出的洗提液的质量浓度达到一个稳定值时,就是水溶解度。

4.3.2 装置

装置中有保持恒温的微型柱(图 1),它既联接在一个回流泵上(图 2),又联接在一个调节水平面的容器上(图 3)。微型柱含有惰性载体,并被固定在一个用于过滤微粒的玻璃棉塞上。用做载体的物质可以是玻璃球,也可以是硅藻土或其他惰性物质。

微型柱如图 1 所示,装配在回流泵上,它有一柱头空间提供了 5 个样品床层的体积(试验开始时不用)和 5 个样品的体积(试验中分析取样用)。如果试验中将水加入到系统中取代初始的 5 个样品床层,以除去杂质的话,可以减小微型柱的尺寸。将微型柱与惰性物质制成的管子连接到回流泵,流速可达到