

ICS 65.020.01

CCS B 04

NY

中华人民共和国农业行业标准

NY/T 2882.11-202X

农药登记 环境风险评估指南 第 11 部分： 农药代谢物

Pesticide registration—Guidance on environmental risk assessment—
Part 11:
Pesticide metabolites

(征求意见稿)

在提交反馈意见时，请将您知道的相关专利连同支持性文件一并附上。

XXXX -XX-XX 发布

XXXX -XX-XX 实施

中华人民共和国农业农村部 发布

前 言

本文件按照GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

本文件是NY/T 2882《农药登记 环境风险评估指南》的第11部分。NY/T 2882分为11个部分：

- 第1部分：总则；
- 第2部分：水生生态系统；
- 第3部分：鸟类；
- 第4部分：蜜蜂；
- 第5部分：家蚕；
- 第6部分：地下水；
- 第7部分：非靶标节肢动物；
- 第8部分：土壤生物；
- 第9部分：混配制剂；
- 第10部分：植物无人飞机施药；
- 第11部分：农药代谢物。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由农业农村部种植业管理司提出。

本文件由全国农药标准化技术委员会（SAC/TC 133）归口。

本标准起草单位：农业农村部农药检定所

本标准主要起草人：

引 言

为减少农药使用对生态环境的影响，在农药登记时需开展环境风险评估明确农药对鸟类、鱼类等非靶标生物的风险。NY/T 2882《农药登记 环境风险评估指南》是指导我国农药环境风险评估的指南标准，旨在规范农药环境风险评估工作，提高农药环境风险评估的科学性，拟由11个部分构成。

——第1部分：总则。目的在于给出农药环境风险评估的原则、程序和方法。

——第2部分：水生生态系统。目的在于提供农药对水生生态系统风险评估基本原则、评估程序和方法，以及风险降低措施等方面的指导。

——第3部分：鸟类。目的在于提供农药对鸟类风险评估基本原则、评估程序和方法，以及风险降低措施等方面的指导。

——第4部分：蜜蜂。目的在于提供农药对蜜蜂风险评估基本原则、评估程序和方法，以及风险降低措施等方面的指导。

——第5部分：家蚕。目的在于提供农药对水生生态系统风险评估基本原则、评估程序和方法，以及风险降低措施等方面的指导。

——第6部分：地下水。目的在于提供农药对地下水风险评估基本原则、评估程序和方法，以及风险降低措施等方面的指导。

——第7部分：非靶标节肢动物。目的在于提供农药对非靶标节肢动物风险评估基本原则、评估程序和方法，以及风险降低措施等方面的指导。

——第8部分：土壤生物。目的在于提供农药对土壤生物风险评估基本原则、评估程序和方法，以及风险降低措施等方面的指导。

——第9部分：混配制剂。目的在于提供农药混配制剂环境风险评估基本原则、评估程序和方法，以及风险降低措施等方面的指导。

——第10部分：植保无人飞机施药。目的在于提供植保无人飞机施药环境风险评估基本原则、评估程序和方法，以及风险降低措施等方面的指导。

——第11部分：农药代谢物。目的在于提供农药代谢物环境风险评估基本原则、评估程序和方法等方面的指导。

农药登记 环境风险评估指南 第 11 部分：农药代谢物

1 范围

本文件提供了农药代谢物对水生生态系统、蜜蜂、家蚕和地下水的风险评估基本原则、评估程序和方法等方面的指导。

本文件适用于对农药代谢物的环境风险评估。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；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。

NY/T 2882.1 农药登记 环境风险评估指南 第1部分：总则

NY/T 2882.2 农药登记 环境风险评估指南 第2部分：水生生态系统

NY/T 2882.4 农药登记 环境风险评估指南 第4部分：蜜蜂

NY/T 2882.5 农药登记 环境风险评估指南 第5部分：家蚕

NY/T 2882.6 农药登记 环境风险评估指南 第6部分：地下水

NY/T 3150 农药登记 环境降解动力学评估及计算指南

NY/T XXXX 农药主要代谢物毒理评价程序

3 术语和定义

NY/T 2882.1界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

3.1

关注代谢物 *concerned metabolite*

对保护对象存在暴露可能性、具有毒理学或生态毒性意义，需要开展环境风险评估的代谢物。

3.2

相关代谢物 *relevant metabolite*

风险评估表明具有与母体相当或更高风险的代谢物。

3.3

代谢物转化率 *metabolite formation fraction*

某一底物在代谢过程中转化为特定代谢物的比例。

4 总则

农药代谢物的环境风险评估遵循以下原则：

——保护目标与农药母体相同；

——采用分级评估方法，用风险商值（RQ）表征风险；

——最大风险原则，对于使用查询数据或本文件未给出明确指导的特殊情况，选择风险最高的情况进行评估。

5 需考虑的因素

5.1 水生生态系统

5.1.1 确定关注代谢物。根据农药环境代谢试验资料及公开文献资料，对所有代谢物进行评估分析，筛选关注代谢物：

a) 母体土壤好氧代谢试验、土壤厌氧代谢试验、水-沉积物好氧代谢试验、旱田田间消散试验、水体田间消散试验中的主要代谢物为关注代谢物；

b) 母体土壤好氧代谢试验、土壤厌氧代谢试验和水-沉积物好氧代谢试验中在试验结束时大于5%AR且未出现减少趋势的代谢物为关注代谢物；

c) 有证据表明具有与母体相当的生物活性，或具有致癌、致畸、致突变或内分泌干扰的结构特征，或具有较高毒性或生态毒性的代谢物为关注代谢物；

d) 当母体土壤好氧代谢、土壤厌氧代谢和水-沉积物好氧代谢50%降解时间（DT₅₀）均大于180 d（一级动力学模型，20℃，按NY/T 3150计算）时，母体水中光解试验和土壤表面光解试验的主要代谢物为关注代谢物；

e) 以下代谢物不作为关注代谢物，不需要进行进一步的试验和风险评估：

1) CO₂；

2) 无机物（重金属除外）；

3) 仅由C、H、N、O原子组成，C原子数不多于4个，且不含环氧、亚硝胺、腈等已知有毒性结构的脂肪族化合物。

5.1.2 关注代谢物的暴露分析。根据农药的使用方法和环境归趋数据，利用环境暴露模型按NY/T 2882.2计算关注代谢物在地表水中的预测暴露浓度（PEC），其中：

a) 当缺少代谢物土壤代谢速率、土壤吸附系数、水中溶解度等数据时，可默认值，也可采用可靠的定量构效关系（QSAR）等非试验方法预测相关数据。其中土壤吸附系数（ K_{row} ）默认值为0.0001， $1/n=1.0$ 。确保代谢物涵盖在QSAR模型的应用域中对于QSAR的科学性和有效性是至关重要的；

b) 代谢物转化率按附录A确定；

c) 当农药母体或代谢物的土壤代谢或吸附与土壤pH存在相关性（判定系数R²大于0.7）时，按土壤pH将土壤代谢或土壤吸附数据分为酸性土壤和碱性土壤两组并分别运行环境暴露模型，也可选择最糟糕情况运行环境暴露模型；

d) 当环境暴露模型不能自动计算代谢物的PEC时，按公式（1）计算代谢物的施用量并手动输入环境暴露模型。

$$AR_m = AR_p \times f_{p-m} \times \frac{M_m}{M_p} \dots\dots\dots (1)$$

式中：

AR_m ——代谢物的使用量，单位为克有效成分每公顷（g a. i./hm²）；

AR_p ——农药母体的使用量，单位为克有效成分每公顷（g a. i./hm²）；

f_{p-m} ——代谢物的转化率；

M_m ——代谢物的分子量，单位为克每摩尔（g/mol）；

M_p ——母体的分子量，单位为克每摩尔（g/mol）。

5.1.3 关注代谢物的效应分析

按NY/T 2882.2计算关注代谢物的预测无效应浓度（PNEC），可通过以下途径确定关注代谢物风险评估中使用的水生生态毒性终点：

a) 代谢物存在于农药母体水生生物毒性试验药液中，且浓度足以评估代谢物的影响时，可认为母体试验的效应源自代谢物，以母体的该项生态毒性试验的数据开展评估；

b) 当农药母体对水生生物急性LC₅₀/EC₅₀大于10 mg/L、慢性NOEC大于1 mg/L，且农药母体风险商值（RQ）不大于0.1时，对于结构中已明确不含毒性基团的代谢物，可假设代谢物对水生生物的急慢性毒性与母体相当并使用母体的生态毒性数据开展评估，也可采用可靠的QSAR等非试验方法获得其水生生物毒性数据。确保代谢物涵盖在QSAR模型的应用域中对于QSAR的科学性和有效性是至关重要的。QSAR工具包括：ECOSAR、OECD (Q)SAR toolbox、Danish (Q)SAR Database、DEMETRA、TOPKAT、ChemProp等；至少使用两种QSAR工具并在风险评估中使用QSAR结果的低值。QSAR结果表明代谢物对某种水生生物急性LC₅₀/EC₅₀小于10 mg/L或慢性NOEC小于1 mg/L时，开展该代谢物相应项目的试验是十分必要的；

c) 开展试验或通过公开文献获得代谢物对鱼、溞的急性毒性和对绿藻的毒性。原药数据表明对鱼、溞、藻等试验生物的某一种为敏感种（比其他生物敏感100倍以上）时，可仅确定代谢物对敏感种的毒性数据，但已有数据表明代谢物对其他物种的毒性与母体相当或高于母体时，在效应分析中使用该数据是十分必要的；

d) 如代谢物对鱼、溞的急性毒性和对绿藻的毒性低于母体，且缺少代谢物对水生生物的慢性毒性数据时，可假设代谢物对水生生物的慢性毒性与母体相当，使用母体的慢性生态毒性数据确定其慢性PNEC；

e) 当代谢物对鱼类的急性毒性与母体相当或高于母体，且LC₅₀小于10 mg/L时，开展试验或通过公开文献获得该代谢物的鱼类早期生活阶段毒性；当代谢物对大型溞的急性毒性与母体相当或高于母体，且EC₅₀小于10 mg/L时，开展试验或通过公开文献获得该代谢物的大型溞繁殖毒性试验资料；当除草剂的代谢物对绿藻的毒性与母体相当或高于母体，且EC₅₀小于10 mg/L时，开展试验或通过公开文献获得该代谢物的穗状狐尾藻或浮萍毒性；

f) 当已有代谢物对水生生物的急性或慢性生态毒性数据时, 使用该数据; 当代谢物使用母体毒性数据或QSAR结果进行评估风险不可接受时, 使用代谢物的毒性数据或开展高级阶段试验是十分必要的;

g) 对于不稳定的有效成分(原药24 h水解率大于90%), 宜以稳定的代谢物代替母体开展慢性水生生态毒性试验。如果母体没有慢性水生生态毒性数据且代谢物在水中稳定, 开展代谢物的慢性毒性试验是十分必要的;

h) 对于在水中稳定且正辛醇/水分配系数($\log P_{ow}$)大于3的代谢物, 首先用QSAR预测生物富集系数(BCF), 也可以考虑母体生物富集/生物蓄积试验或动物代谢试验中代谢物生物富集方面的信息。当QSAR预测的BCF大于500时, 开展代谢物的生物富集试验是十分必要的。

5.1.4 关注代谢物的风险表征。按NY/T 2882.2开展关注代谢物对水生生态系统的风险表征。

5.2 蜜蜂

5.2.1 确定关注代谢物。原药对蜜蜂急性经口半致死剂量(LD_{50})小于2 微克/蜂的农药, 根据农药环境代谢和植物代谢试验资料及公开文献资料, 对所有代谢物进行评估分析, 筛选关注代谢物:

a) 在花粉、雄蕊或花蜜的迁移试验(^{14}C 标记)中大于10%总残留放射性(TRR)且大于0.01 mg/kg的代谢物为关注代谢物;

b) 缺少花粉、雄蕊或花蜜的迁移试验数据时, 植物代谢试验中大于10% TRR且大于0.01 mg/kg的代谢物为关注代谢物;

b) 对于母体具有内吸性的种子处理剂、颗粒剂, 土壤好氧代谢试验中的主要代谢物及试验结束时大于5%AR且未出现减少趋势的代谢物也作为关注代谢物; 对于用于水稻的, 土壤厌氧代谢试验和水-沉积物系统好氧代谢试验中的主要代谢物及试验结束时大于5%AR且未出现减少趋势的代谢物也作为关注代谢物。但如资料表明代谢物无内吸性, 或在施药方式为毒土法的植物代谢试验中小于10% TRR或0.01 mg/kg, 可不作为关注代谢物;

c) 已开展半田间或田间试验表明对蜜蜂的风险可接受, 且根据试验设计判断试验已包含代谢物的毒性效应时, 不需进一步试验和评估;

d) 以下代谢物不作为关注代谢物, 不需要进行进一步的试验和风险评估:

1) CO_2 ;

2) 无机物(重金属除外);

3) 仅由C、H、N、O原子组成, C原子数不多于4个, 且不含环氧、亚硝胺、腈等已知有毒性结构的脂肪族化合物。

5.2.2 关注代谢物的暴露分析按NY/T 2882.4进行, 按公式(1)计算代谢物的施用量。

5.2.3 关注代谢物的效应分析按NY/T 2882.4进行。可通过以下途径确定关注代谢物风险评估中使用的毒性终点:

a) 结构中已明确不包含毒性基团的代谢物, 不需进一步试验和评估;

b) 假定代谢物的毒性高于母体10倍, 开展风险评估, 如风险可接受, 不需进一步试验和评估; 风险不可接受的, 开展试验确定代谢物对蜜蜂的急性经口毒性, 并开展风险评估。

5.2.4 关注代谢物的风险表征。按 NY/T 2882.4 开展关注代谢物对蜜蜂的风险表征。

5.3 家蚕

5.3.1 确定关注代谢物。直接用于桑树的农药，根据农药环境代谢和植物代谢试验资料及公开文献资料，对所有代谢物进行评估分析，筛选关注代谢物：

a) 植物代谢试验中大于 10% TRR 且大于 0.01 mg/kg 的代谢物作为关注代谢物；

b) 对于母体具有内吸性的种子处理剂、颗粒剂，土壤好氧代谢试验中的主要代谢物及试验结束时大于 5% AR 且未出现减少趋势的代谢物也作为关注代谢物。但如资料表明代谢物无内吸性，或在施药方式为毒土法的植物代谢试验中小于 10% TRR 或 0.01 mg/kg，可不作为关注代谢物；

c) 以下代谢物不作为关注代谢物，不需要进行进一步的试验和风险评估：

1) CO₂；

2) 无机物（重金属除外）；

3) 仅由 C、H、N、O 原子组成，C 原子数不多于 4 个，且不含环氧、亚硝胺、腈等已知有毒性结构的脂肪族化合物。

5.3.2 关注代谢物的暴露分析。根据桑叶残留试验确定关注代谢物在桑叶中的残留水平，以桑叶最终残留的最大值作为 PEC。如果桑叶残留试验中缺乏关注代谢物的残留数据，采用植物代谢或土壤好氧代谢试验中获得的母体与代谢物残留放射性的比例和母体的残留量估算关注代谢物的残留水平。

5.3.3 关注代谢物的效应分析。按 NY/T 2882.5 计算关注代谢物对家蚕的 PNEC，可通过以下途径确定关注代谢物风险评估中使用的毒性终点：

a) 假定代谢物的毒性高于母体 10 倍，开展风险评估，如风险可接受，不需进一步试验和评估；

b) 开展代谢物的家蚕急性毒性试验，开展风险评估，如风险可接受，不需进一步试验和评估；

c) 开展代谢物的家蚕慢性毒性试验，开展风险评估。

5.3.4 关注代谢物的风险表征。按 NY/T 2882.5 开展关注代谢物对家蚕的风险表征。

5.4 地下水

5.4.1 确定关注代谢物。根据农药环境代谢试验资料及公开文献资料，对所有代谢物进行评估分析，筛选关注代谢物：

a) 对于旱田作物，母体土壤好氧代谢试验、旱田田间消散试验中的主要代谢物及试验结束时大于 5%AR 且未出现减少趋势的代谢物为关注代谢物。当母体土壤好氧代谢 DT₅₀ 大于 180 d（一级动力学模型，20 °C，按 NY/T 3150 计算）时，母体土壤表面光解试验的主要代谢物也作为关注代谢物；

b) 对于水稻等水田作物，母体土壤好氧代谢试验、土壤厌氧代谢试验、水-沉积物好氧代谢试验、旱田田间消散试验、水体田间消散试验中的主要代谢物及试验结束时大于 5% AR 且未出现减少趋势的代谢物为关注代谢物。当母体土壤好氧代谢、土壤厌氧代谢和水-沉积物好氧代谢 DT₅₀ 均大于 180 d（一级动力学模型，20 °C，按 NY/T 3150 计算）时，母体水中光解试验和土壤表面光解试验的主要代谢物也作为关注代谢物；

c) 有证据表明具有与母体相当的生物活性，或具有致癌、致畸、致突变或内分泌干扰的结构特征，或具有较高毒性的代谢物为关注代谢物；

d) 以下代谢物不作为关注代谢物，不需要进行进一步的试验和风险评估：

1) CO₂；

2) 无机物（重金属除外）；

3) 仅由C、H、N、O原子组成，C原子数不多于4个，且不含环氧、亚硝胺、腈等已知有毒性结构的脂肪族化合物。

5.4.2 关注代谢物的暴露分析。根据农药的使用方法和环境归趋数据利用环境暴露模型按NY/T 2882.6 计算关注代谢物在地下水中的PEC，其中：

a) 当缺少代谢物土壤代谢速率、土壤吸附系数、水中溶解度等数据时，可使用默认值，也可采用可靠的QSAR等非试验方法预测相关数据。确保代谢物涵盖在QSAR模型的应用域中对于QSAR的科学性和有效性是至关重要的；

b) 代谢物转化率按附录A确定；

c) 当农药母体或代谢物的土壤代谢或吸附与土壤 pH 存在相关性（判定系数 R² 大于 0.7）时，按土壤 pH 将土壤代谢或土壤吸附数据分为酸性土壤和碱性土壤两组并分别运行环境暴露模型，也可选择最糟糕情况运行环境暴露模型。

5.4.3 关注代谢物的效应分析。按 NY/T XXXX 确定关注代谢物的每日允许摄入量（ADI）或安全阈值，使用 ADI 或安全阈值按 NY/T 2882.6 计算关注代谢物的 PNEC。

5.4.4 关注代谢物的风险表征。按 NY/T 2882.6 开展关注代谢物对地下水的风险表征，农药的风险商值为农药母体与关注代谢物的风险商值之和。

5.5 确定环境残留物定义

5.5.1 环境风险评估残留物定义包含母体和所有关注代谢物。

5.5.2 环境监测残留物定义包含母体和相关代谢物。

附 录 A
(规范性)
确定代谢物转化率

A.1 使用试验数据计算代谢物的转化率

对于一级动力学模型 (SFO)，按公式 (A.1) 计算代谢物的转化率，也可在降解动力学评估时由 CAKE、KinGUII 等计算机软件计算得出。对于多组分一级动力学模型 (FOMC)、平行双一级动力学模型 (DFOP)，代谢物的转化率可在降解动力学评估时由 CAKE、KinGUII 等计算机软件迭代得出。

$$f_{P-M_1} = \frac{k_{P-M_1}}{k_{P-M_1} + k_{P-M_2} + \dots + k_{P-M_n} + k_{P-S}} \dots\dots\dots (A.1)$$

式中：

- f_{P-M_1} ——代谢物 1 的转化率；
- k_{P-M_1} ——农药母体代谢为 M_1 的代谢速率常数；
- k_{P-M_2} ——农药母体代谢为 M_2 的代谢速率常数；
- k_{P-M_n} ——农药母体代谢为 M_n 的代谢速率常数；
- k_{P-S} ——农药母体代谢为消失部分的代谢速率常数。

A.2 环境暴露分析中代谢物转化率的使用

环境代谢试验中，每个代谢物可计算出在多种土壤中的转化率，可按以下规则确定环境风险评估中使用的转化率：

- a) 使用默认值 1，但 1 mol 母体可代谢为多于 1 mol 该代谢物的情况除外；
- b) 使用多种土壤中转化率的最大值；
- c) 当明确转化率与土壤有机质含量、黏粒含量、pH 等理化性质不相关时，使用多种土壤（包括转化率为 0 的土壤）中转化率的算数平均值。

参 考 文 献

- [1] EFSA. Guidance on tiered risk assessment for plant protection products for aquatic organisms in edge-of-field surface waters[J]. EFSA Journal 2013;11(7):3290
- [2] European Food Safety Authority. EFSA Guidance Document on the risk assessment of plant protection products on bees (*Apis mellifera*, *Bombus* spp. and solitary bees)[J]. EFSA Journal 2013;11(7) :3295, 26
- [3] FOCUS. Guidance Document on Estimating Persistence and Degradation Kinetics from Environmental Fate Studies on Pesticides in EU Registration. Report of the FOCUS Work Group on Degradation Kinetics, EC Document Reference Sanco/10058/2005 version 2.0
- [4] EFSA Panel on Plant Protection Products and their Residues. Scientific Opinion on the science behind the guidance for scenario selection and scenario parameterisation for predicting environmental concentrations in soil[J]. EFSA Journal 2012;10(2):2562
- [5] EFSA. EFSA Guidance Document for predicting environmental concentrations of active substances of plant protection products and transformation Products of these active substances in soil[J]. EFSA Journal 2015;13(4):4093
- [6] US EPA. Guidance for Residues of Concern in Ecological Risk Assessment. [EB/OL]. (2012-12) [2019-9-6]. <https://www.epa.gov/pesticide-science-and-assessing-pesticide-risks/guidance-residues-concern-ecological-risk>
-