

化審法における優先評価化学物質に関する
リスク評価の技術ガイダンス

X. 性状等に応じた暴露評価における
扱い

Ver.1.0

令和2年5月

厚生労働省・経済産業省・環境省

改訂履歴

Version	日付	改訂内容
Ver .1.0	令和2年5月	初版

目次

X. 性状等に応じた暴露評価における扱い.....	1
X.1 はじめに.....	1
X.1.1 本章の位置づけ.....	1
X.2 解離性物質の評価.....	2
X.2.1 はじめに.....	2
X.2.2 解離性物質の評価の準備.....	7
X.2.3 解離性物質の排出量推計.....	22
X.2.4 解離性物質の暴露評価.....	22
X.3 付属資料.....	29
X.3.1 解離性物質の評価.....	29
X.4 出典.....	113

1 X. 性状等に応じた暴露評価における扱い

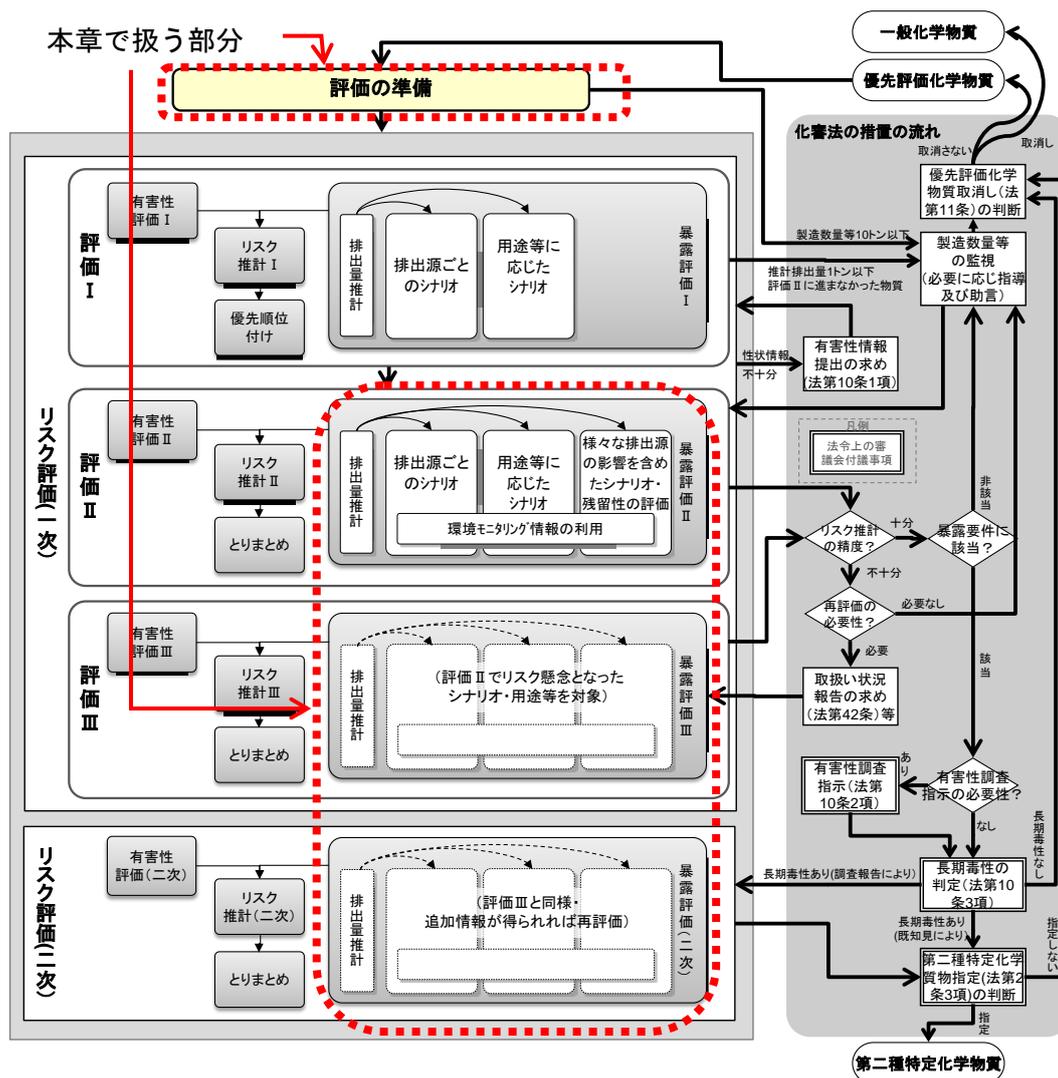
2 X.1 はじめに

3 X.1.1 本章の位置づけ

4 本章では、優先評価化学物質のリスク評価における暴露評価のうち、性状等に応じた暴
5 露評価手法が必要になるケースについて記載する。例えば、解離性物質の場合である。

6 図表 X-1 に、リスク評価の手順フロー全体における本章で扱う部分を示す。リスク評価
7 の準備は、リスク評価段階に応じて実施する。評価Ⅱ以降のリスク評価の準備では、解離
8 性物質等に特有な物理化学的性状等データを収集する。評価Ⅱ以降の暴露評価では、解離
9 性物質等に特有な環境中動態推計を実施する。

10 本章では、性状等に応じた暴露評価手法が必要になるケースごとに、物理化学的性状等
11 データに関する留意点及び暴露評価で用いる数理モデルの一部の数式やパラメータの変更
12 点について説明する。今後、新たに性状等に応じた暴露評価を行う必要が生じた場合は、
13 随時その評価手法を検討し、この X 章に追記していくこととする。



図表 X-1 リスク評価の手順フローにおいて本章で扱う部分

X.2 解離性物質の評価

X.2.1 はじめに

(1) 他の章との関係

解離性物質の暴露評価では、基本的には I~IX 章に示した共通の評価手法を用いる。本節では、解離性物質に特有の評価の準備方法と暴露評価手法について、評価 II 以降で必要となる部分を記載する。図表 X-2 に、共通の評価手法が示されている他の章とそれに対応する本章の該当箇所との対応表を示す。また、本文中でも適宜、該当する章を引用するので詳細はそちらを参照されたい。

なお、「VIII 章 環境モニタリング情報を用いた暴露評価」については、解離性物質についても同章に記載されている方法で暴露を評価する。

1

2

図表 X-2 他の章と本章における該当箇所の対応表

他の章	本章の該当箇所とその概要	
I 章 評価の準備	・ 本編: X.2.2 解離性物質の評価の準備	評価Ⅱにおける、物理化学的性状及び生物蓄積性データの精査とキースタディの見直しにあたり、考慮すべき解離性物質特有の留意点や推計手法について解説する。
IV 章 排出量推計	・ 本編: X.2.3 解離性物質の排出量推計	評価Ⅱにおける、解離性物質の環境中への排出量推計手法について解説する。
V 章 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～	・ 本編: X.2.4 解離性物質の暴露評価 ・ 付属資料 (数式・パラメータ): X.3.1.2 排出源ごとの暴露シナリオにおける解離性モデルの数式とパラメータ ・ 付属資料 (導入の経緯): X.3.1.3 排出源ごとの暴露シナリオにおける解離性モデル設定の経緯等	評価Ⅱ以降において、解離性物質特有の動態を考慮できるように、排出源ごとの暴露シナリオの評価用数理モデルやパラメータの一部を解離性物質用に変更したモデルについて解説する。
VI 章 暴露評価～用途等に応じた暴露シナリオ～	・ 本編: X.2.4.2 用途等に応じた暴露シナリオにおける解離性物質の推計	評価Ⅱ以降において、解離性物質特有の動態を考慮できるように、用途等に応じた暴露シナリオの評価用数理モデルやパラメータの一部を解離性物質用に変更したモデルについて解説する。
VII 章 暴露評価～様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ及び残留性の評価～	・ 本編: X.2.4.3 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ及び残留性の評価における解離性物質の推計	評価Ⅱ以降において、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ及び残留性の評価では、解離性物質特有の動態を考慮する。

3

4

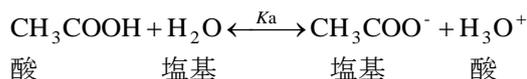
(2) 解離性物質とは

5

本章で取り扱う解離性物質は、Brønsted-Lowry の酸塩基理論に従って、環境中の水¹中で一塩基酸又は一酸塩基となりうる物質である。Brønsted-Lowry の酸塩基の定義によれば、酸はプロトン供与体であり、塩基はプロトン受容体である²。例えば、水中では、中性種³の酢酸は水分子にプロトンを供与し、自身はアニオンとなる一塩基酸である。

9

10



11

¹ 本章では、河川水、海水、土壌や底質の間隙水、大気中に存在する水を環境中の水とする。

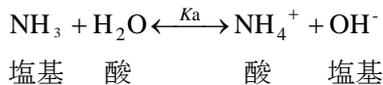
² 日本化学会 (2004) 化学便覧 改訂 5 版, 基礎編. 丸善.

³ 本章では、電氣的に中性な非解離種に加えて、一つの分子内に正電荷と負電荷を持っていても、全電荷数が 0 の双性イオン種も中性種とする。

この解離平衡における酸解離定数 (Ka)は次式¹で表される²。

$$Ka = Ka'[H_2O] = \frac{[CH_3COO^-][H_3O^+]}{[CH_3COOH]}$$

一方、典型的な塩基であるアンモニアは、水中で以下のように解離する。中性のアンモニアはプロトンを受容し、自身はカチオンとなる一酸塩基である。



この場合、アンモニウムイオン (NH_4^+)が、定義により酸となり、アンモニウムイオンの酸解離定数 (Ka)³は、次のようになる。

$$Ka = Ka' \frac{[H_3O^+][OH^-]}{[H_2O]} = \frac{[NH_3][H_3O^+]}{[NH_4^+]}$$

上記の酸解離定数 (Ka)は通常、逆数の常用対数をとって、 pKa の形で用いられる。

$$pKa = pH - \log \left[\frac{[CH_3COO^-]}{[CH_3COOH]} \right]$$

$$pKa = pH - \log \left[\frac{[NH_3]}{[NH_4^+]} \right]$$

式 X-1

ここで、 pH は、水素イオン濃度指数であり、以下の式で表される。

$$pH = -\log[H_3O^+]$$

式 X-1 から明らかのように、 $pH = pKa$ の時に、非解離種とイオン種の濃度が等しくなる。そして、酢酸等の酸では、 pH が高くなるにつれてイオン種が増加し、逆に、アンモニア等の塩基では、 pH が高くなるにつれて非解離種が増加する。

¹ 水分子は圧倒的な量が存在しており、一定とみなせるのでこれを左辺に移動する。

² 本章では、理想希薄溶液であることを前提に記載しており、 $[CH_3COO^-]$ 等はモル濃度を表す。

³ $[H_3O^+][OH^-]$ 、水素イオン濃度と水酸イオン濃度の積 (水のイオン積)は、温度一定であれば定数である ($10^{-k} \approx 10^{-14}$ 正確には、 $k=13.995$ (25℃)、 14.000 (24℃)、 14.9435 (0℃)、 13.5348 (40℃)である)。

1 なお、Brønsted–Lowry の酸塩基の定義に従えば、酢酸ナトリウムのような弱酸と強塩基
2 の塩も水中では塩基となる¹。酢酸ナトリウムを水に溶解すると水中で解離して、酢酸アニ
3 オンはプロトンを受容し、酢酸となり、プロトン濃度が下がるため、水溶液は塩基性を示
4 す。

5



7

8 逆に、塩化アンモニウムのような強酸と弱塩基の塩では、アンモニアが生成し、プロト
9 ン濃度が増加するため、水溶液は酸性を示す（姫野と市村, 2009²）。

10

11 本章で取り扱う解離性物質は、上記のように、環境中の水中で一塩基酸又は一酸塩基と
12 なりうる物質であるが、複数の酸解離基を分子内に有する多塩基酸や複数の塩基解離基を
13 分子内に有する多酸塩基であっても、環境中の水中では 1 段しか解離せず、一塩基酸又は
14 一酸塩基とみなしうる物質も本章での取り扱いの対象となる。

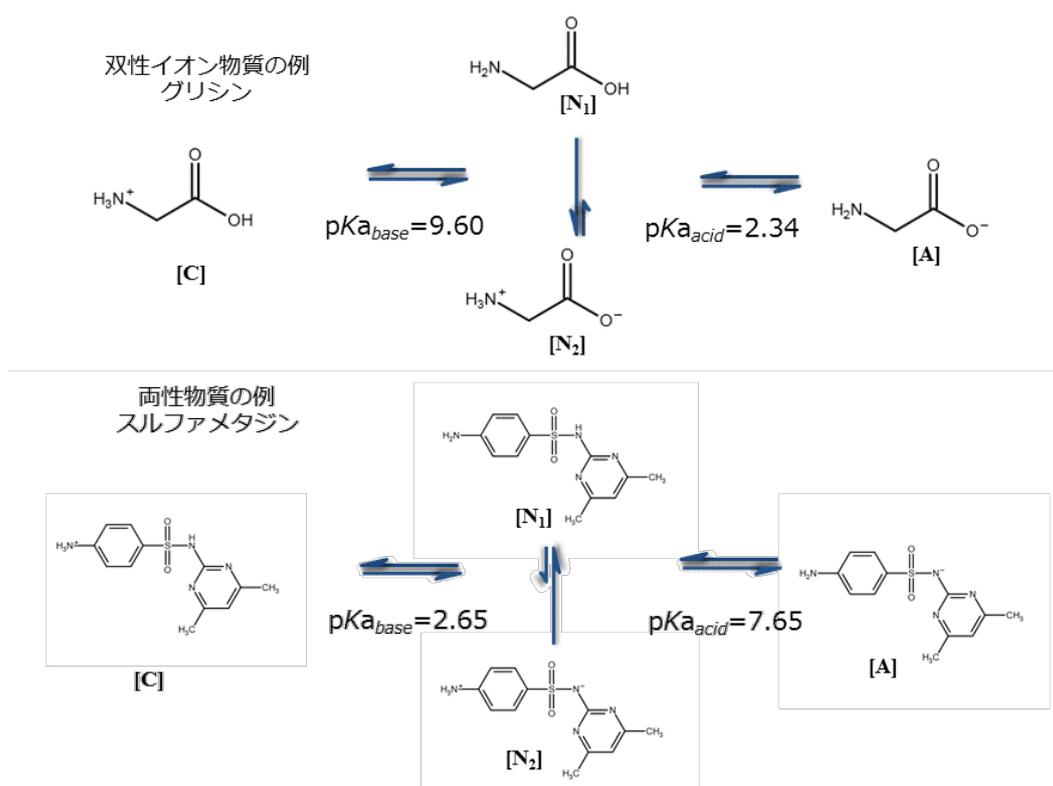
15

16 解離性物質には、上記の物質に加えて、酸解離基と塩基解離基の両方を一分子内に含む
17 双性イオン物質と両性物質がある（図表 X-3）。

18

¹ 酢酸ナトリウムを塩基とは言わない。本文では「水溶液中では」という限定付で使用している。

² 姫野貞之, 市村彰男 (2009) 溶液内イオン平衡に基づく分析化学 第2版, 化学同人.



図表 X-3 双性イオン物質と両性物質の例

グリシンの pK_a 値は HSDB、スルファメタジンの pK_a 値は PubChem からの情報である。

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17

双性イオン物質は分子内イオンとも呼ばれ、中性種は分子内の酸解離基と塩基解離基の両方が解離しているが、電気的に中性となっている。本章では、双性イオン物質の酸官能基又は塩基官能基のいずれかのみが解離した状態のものをイオン種とする。酸解離基の酸解離定数 ($pK_{a_{acid}}$)、塩基解離基の酸解離定数 ($pK_{a_{base}}$)及び水溶液の pH の間に、 $pK_{a_{acid}} < \text{pH} < pK_{a_{base}}$ の関係が成り立つ解離性物質が双性イオン物質となる¹。図表 X-3 のグリシン ($pK_{a_{acid}} = 2.34$, $pK_{a_{base}} = 9.60$) の場合、pH7 では、水酸基 (-OH) は解離しアニオン種 (A) に、アミノ基 (-NH₂) はプロトンが付加しカチオン種 (C) となっており、双性イオン型 (N₂) の中性種として存在する。双性イオン物質は、中性種が酸解離基と塩基解離基の両方が解離した状態にあるため、本章での取り扱いの対象外である。

両性物質は、その中性種において両官能基が非解離で、低pHでは正荷電を、高pHでは負荷電を持つ物質とする²。 $pK_{a_{acid}}$ 、 $pK_{a_{base}}$ 及び水溶液のpHの間に、 $pK_{a_{base}} < \text{pH} < pK_{a_{acid}}$ の関係が成り立つ物質が両性物質となる²。図表 X-3 のスルファメタジン ($pK_{a_{acid}} = 7.65$ 、

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals. Environ. Chem., 27(10), 1995–2004.

² 「両性物質 (amphoteric substances)」、「双性イオン (zwitterions)」、「双極イオン (dipolar ions)」の定義はあいまいで、人によりさまざまである (IUPAC Gold, zwitterions; 標準化学用語辞典 第2版, 双極イオン、双性イオン、両性イオン)。本章では、双性イオン物質と両性物質を、Franco and Trapp (2008)と同様の定義で解釈する。

1 $pK_{a_{base}} = 2.65$)の場合、pH7では、NH基は解離せず、NH₂基にプロトンも付加せず、非解
2 離型 (N₁)の中性種として存在し、両性イオン物質となる。本章では、非解離の中性種が存
3 在し、環境中の水中では1段しか解離せず、一塩基酸又は一酸塩基とみなしうる両性物質も
4 取り扱いの対象である。

5
6 環境中の水の pH は環境媒体ごとに変化する¹ため、解離性物質の非解離種とイオン種
7 (カチオン種とアニオン種をまとめてイオン種とする)の存在率 (化学種分率)は、環境媒体ご
8 とに異なる比率で存在する²。酸解離定数 (pKa)と物質を取り囲む水の pH から、その水中
9 での、化学物質の全量に対する非解離種分率 (ϕ_n)、アニオン種分率 (ϕ_a)及びカチオン種
10 分率 (ϕ_c)が、Henderson-Hasselbalch 式により算出できる (詳細は X.3.1.2 (2) 化学種分
11 率の計算を参照)。ある環境媒体中の解離性物質のモル濃度 [mol/m³]を C とし、非解離種分
12 率を ϕ_n 、アニオン種分率を ϕ_a 、カチオン種分率 ϕ_c をすると、非解離種及び各イオン種の
13 濃度 [mol/m³]は、以下の式で表される。

$$C_n = \phi_n \times C \quad \text{式 X-2}$$

$$C_i = \phi_i \times C \quad (i = a \text{ 又は } c)$$

$$C = \sum_k C_k \quad (k = n, a \text{ 及び } c) \quad \text{式 X-3}$$

17
18 非解離種とイオン種では水に対する溶解度、1-オクタノールと水との間の分配係数等の物
19 理化学的性状等の値が異なるため、環境中の動態も異なる。例えば、イオン種は一般に、
20 ガス態としては存在できないため、従来の暴露評価モデル (V 章の排出源ごとの暴露シナリ
21 オで用いる数理モデル)で、解離性物質を非解離性の物質として評価すると大気中及び土壤
22 空気中のガス態濃度を過大に推計する可能性がある。また、非解離種は土壤や底質中の有
23 機物や生体内の脂質に対する親和性が高いが、イオン種は水と水素結合しやすく、水に溶
24 解しやすくなる一方、正電荷と負電荷を持つ土壤鉱物等との親和性も高くなる傾向にある。
25 このような傾向は、分子種によって顕著になる場合とそうでない場合がある。さらに、ア
26 ニオンとカチオンでは、生体内の電場でその振る舞いは逆転する。

27 次項以降に、上記のような特徴を有する解離性物質の定量的な暴露評価を進めるにあた
28 って必要となる事項について、順次解説する。

30 X.2.2 解離性物質の評価の準備

31 本項では、「I. 評価の準備」の「I.4 評価IIのための準備」、「I.4.4 物理化学的性状及び
32 生物蓄積性データの精査と選定」、「I.4.4.3 精査を踏まえたキースタディの見直し」におけ

¹ 環境中の水の pH については、X.3.1.2 (1)③ii)を参照されたい。水の pH として、3~8.2 の値
が媒体ごとに設定されている。

² 化学種分率の計算については、X.3.1.2 (2)を参照されたい。

1 項目別の精査について、精査とキースタディの見直しにあたり、考慮すべき解離性物質
2 特有の留意点や推計方法について述べる。

3 なお、第I章の他の項目については、解離性物質についても同章に記載されている方法で
4 評価する。

5

6 X.2.2.1 物理化学的性状・生物蓄積性及び分解性データの収集及び精査

7 解離性物質は、水中で解離して、非解離種とイオン種が生じるため、解離性物質の水に
8 対する溶解度、1-オクタノールと水との間の分配係数、有機炭素補正土壌吸着係数、ヘンリ
9 ー係数、酸解離定数及び生物濃縮係数は、水のpHにより値が変化する。これらの解離性物
10 質特有のデータに関する留意点などを以下に示す。

11

12 (1) 水に対する溶解度

13 非解離種とイオン種で水に対する溶解度は異なり、解離性物質の水に対する溶解度は一
14 般にpHにより異なる。イオン種は、非解離種よりも数桁、水に対する溶解度が高い。

15 本章で扱う解離性モデルでは、環境媒体中pHで補正した水に対する溶解度を用いる。各
16 媒体を構成する要素(xe)¹ごとの見かけの水に対する溶解度(WS_{xe})は、非解離種の水に対
17 する溶解度(WS_n)と非解離種のxewごとの非解離種分率($\phi_{xew,n}$)から式X-4で求めること
18 ができる(Schwarzenbach et al., 2003²)。

19

$$20 \quad WS_{xe} = \frac{WS_{n,mol}}{\phi_{xew,n}} \quad \text{式 X-4}$$

21

記号	説明	単位	値	出典・参照先
WS_{xe}	xeごとの見かけの水に対 する溶解度 [*]	mol/L	—	—
$WS_{n,mol}$	非解離種の水に対する溶 解度	mol/L	—	—
$\phi_{xew,n}$	xewごとの非解離種分率 [*]	—	—	酸、塩基、両性物質 に対してそれぞれ、 X.3.1.2 (2)の式を適 用する。

22 ※ WS_{xe} は、環境媒体の構成要素の水(xew)pHにおける化学種分率(ϕ_{xew})を用いて計算する。 ϕ_{xew} につい
23 ては、X.3.1.2 (2)を参照されたい。本式で対象にする環境媒体の構成要素の水(xew)は、土壌間隙水
24 (sw)、淡水域の水(wfw)、海水域の水(wsw)である。

25

¹ 本章では、環境媒体(xm)として、大気、土壌、水域、底質を考慮する。また、植物体内の媒
体(xm)として、細胞質、木部、液胞を、牛体内の媒体(xm)として、牛の小腸を考慮する。環
境媒体を構成する要素(xe)としては水(xew)と粒子及びその近傍水(xep)に分けて考える。
なお、xmとxeの総称としてxを用いることがある。詳細については、付属資料X.3.1.2 (1)
②の図表X-12 (36ページ)を参照されたい。

² Schwarzenbach, R. P., Gschwend, P. M. and Imboden, D. M. (2003) Environmental
Organic Chemistry, 2nd ed. John Wiley and Sons. New York.

1 実測値を収集する場合には、測定時の pH を把握し、望ましくは環境中 pH の範囲内で測
2 定されているデータを選択し、式 X-4 により適切な pH における WS に補正する。

3 4 ① 測定値

5 REACH IR & CSA R.7a (ECHA, 2008)¹では、水に対する溶解度に関する統合試験戦略
6 (ITS: Integrated Testing Strategy)において、 pK_a が 3~10 の酸や塩基は、環境中の pH (例
7 えば 4~9 程度)での水に対する溶解度を測定できるように pH 緩衝液を用いることが推奨さ
8 れている。また、REACH IR & CSA R.7a (ECHA, 2015)²では、水に対する溶解度と pH
9 との関係を把握することが望ましく、測定時の pH を最低限把握するようにと記述されてい
10 る。また、 pK_a が 8 に近い物質の海域における評価を実施する際には、海水にて測定され
11 たデータが必要かもしれないと記述されている。

12 OECD (1995)の試験ガイドライン No105³や U.S. EPA の OPPTS 830.7840⁴ (両ガイド
13 ラインともにカラム抽出法とフラスコ法)には、pH を報告するようにとの記述がある。また、
14 U.S. EPA の OPPTS 830.7860⁵ (水溶解度ジェネレータカラム法)では、酸解離定数 (pK_a)
15 又は塩基解離定数 (pK_b)が 3~11 の物質については、pH5.0、7.0、9.0 等で水に対する溶
16 解度を測定するようにとの記述がある。

17 解離性物質については、環境中の pH 範囲での水に対する溶解度データを収集し、採用の
18 可否を検討する。

19 20 ② 推計値

21 水に対する溶解度の推計に使用される EPI Suite (U.S. EPA, 2012)⁶には、WSKOWWIN
22 と WATERNT の二つの推計法が搭載されている。(WSKOWWIN と WATERNT の詳細に
23 ついては、I.7.3 参照)

24 非解離種の水に対する溶解度 (WS_n)を推計する場合には、信頼できる非解離種の Pow
25 (Pow_n)測定値を用い、なければ、KOWWIN に非解離種の構造を示す SMILES を入力し、
26 非解離種の Pow 値 (Pow_n)を推計する。次に WSKOWWIN に非解離種の Pow 値 (Pow_n)
27 を入力し、非解離種の水に対する溶解度 (WS_n)を推計する。

28 イオン種の水に対する溶解度 (WS)を推計する場合には、同様に、KOWWINに解離種の
29 構造を示す SMILES を入力し (U.S. EPA, 2012, SMILES Help, Estimating Dissociated

¹ ECHA (2008) Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment Chapter R.7a: Endpoint Specific Guidance.

² ECHA (2015) Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment Chapter R.7a: Endpoint Specific Guidance, Version 4.1.

³ OECD (1995) TG 105: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Water Solubility. No. 105.

⁴ U.S. EPA (1998b) Product Properties Test Guidelines: OPPTS 830.7840 Water Solubility: Column Elution Method; Shake Flask Method.

⁵ U.S. EPA (1996) Product Properties Test Guidelines: OPPTS 830.7860 Water Solubility (Generator Column Method).

⁶ U.S. EPA (2012) Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11.

1 Structures in EPI Suite Programs¹⁾、イオン種の Pow (Pow_i) を推計し、これを
2 WSKOWWINに入力し、イオン種の水に対する溶解度 (WS) を推計する。イオン種の Pow_i
3 に、信頼できる測定値や推計値がない場合には、X.2.2.1 (2)②に示す簡易推計式を用いるこ
4 とも可能である。

5 なお、KOWWINによる Pow_i の推計、WSKOWWINによる WS_i の推計を順次実施する代
6 わりに、WSKOWWINにイオン性種の構造を示すSMILESを直接入力することによっても
7 イオン種の水に対する溶解度 (WS) を推計できる (U.S. EPA, 2012¹⁾。

8

9 (2) 1-オクタノールと水との間の分配係数²

10 解離性物質の1-オクタノールと水との間の分配係数は、pHとその物質の pK_a 値により変
11 動し、主に非解離種で存在する場合と比較すると、見かけの分配係数 ($\log D$) の値は、解離
12 状態では低くなる (U.S. EPA, 2012¹⁾。

13 解離性物質については、非解離種の1-オクタノールと水との間の分配係数 (Pow_n) とイオ
14 ン種の1-オクタノールと水との間の分配係数 (Pow_i) を収集する。1-オクタノールと水との
15 間の分配係数の測定は、非解離状態での測定が推奨されている(OECD, 1995, 試験ガイドラ
16 イン No.107³; OECD, 2004, 試験ガイドライン No.117⁴)。強酸や強塩基では非解離状態で
17 の測定が困難なため、pH=7 で $\log D$ が測定されている場合がある (厚労省/経産省/環境省
18 2014⁵)⁶。また、医薬品データとして、生理学的に重要な pH 7.4 での測定値が報告されてい
19 る場合がある。

20

21 ① Pow_n

22 i) 測定値

23 収集した測定値とともに、測定 pH が記載されており、非解離種の値であることが確認で
24 きる場合は、この値を非解離種の測定値とする。なお、酸の場合、測定 pH が、 pK_a より、
25 2 以上低い時、塩基の場合、測定 pH が、 pK_a より 2 以上高い時は、非解離種の値と判断し
26 てよい。

27 収集した測定値が、解離状態の値で、測定 pH が記載されている $\log D$ 値の場合は、酸に

¹ U.S. EPA (2012) Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11.

² 1-オクタノールと水との間の分配係数の略号としては $\log Pow$ が用いられるが、 $\log Pow$ が非解離種のオクタノール-水分配係数として用いられている場合もある。そのため、解離性物質を扱う本章では非解離種とイオン種の存在比で重み付けした見かけのオクタノール-水分配係数を $\log D$ と記す。

³ OECD (1995) TG 107: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method. No.107.

⁴ OECD (2004) TG 117: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method. No.117.

⁵ 厚労省/経産省/環境省 (2014) イオン性を有する新規化学物質の生物蓄積性の判定について (お知らせ)。

⁶ Pow の値は、化審法で高濃縮性の判断に使用されるが、一部の強酸、強塩基等では、pH 7 での測定値による高濃縮性の判断がなされる場合がある。

1 ついては、式 X-5、塩基については、式 X-6 で非解離種の $\log Pow_n$ を推計する¹。

2

$$3 \quad \log Pow_n = \log D + \log(1 + 10^{\text{pH} - \text{p}K_{a_{acid}}}) \quad \text{式 X-5}$$

$$4 \quad \log Pow_n = \log D + \log(1 + 10^{\text{p}K_{a_{base}} - \text{pH}}) \quad \text{式 X-6}$$

5

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\log Pow_n$	非解離種の 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	—
$\log D$	見かけの 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	—
pH	測定 pH	—	—	—
$\text{p}K_{a_{acid}}$	酸解離基の $\text{p}K_a$	—	—	X.2.2.1 (5)
$\text{p}K_{a_{base}}$	塩基解離基の $\text{p}K_a$	—	—	X.2.2.1 (5)

6

7 pH と $\text{p}K_a$ の違いが 1 以上であれば、 $\log D$ にこの違いを足すだけで良い (Hansch and
8 Leo, 1995²) という記述もある。

9

10 ii) 推計値

11 適切な 1-オクタノールと水との間の分配係数値が得られない場合は、物性推算ソフトを
12 使用する³。EPI Suite 搭載の KOWWIN では、通常は非解離性物質として推算が行われる
13 ため、推計値を Pow_n としてよいが、例外もある。例えば、ヘキサン酸 (CAS: 142-62-1) の
14 KOWWIN 推計値は 2.05 であるのに対して、その塩であるヘキサン酸ナトリウム (CAS:
15 10051-44-2) の KOWWIN の推計値は -1.76 と大きく異なる。なお、ヘキサン酸とヘキサン
16 酸ナトリウムの $\log Pow$ 測定値はそれぞれ、1.92 及び -2.17 と KOWWIN に掲載されている。

17

18 ② Pow_i

19 イオン種の Pow_i は、信頼できる測定値や EPI Suite などによる推計値があれば、それを
20 用いる。ない場合は、次の推計式を用いる。双性イオン物質でない場合、以下の式を用い
21 る (Franco and Trapp, 2008⁴; Trapp and Horobin, 2005⁵)。

22

$$23 \quad \log Pow_i = \log Pow_n - 3.5 \quad \text{式 X-7}$$

24

¹ これらの式は、オクタノール相に分配される解離種が無視できるとした近似式である (Kah and Brown, 2008 Hansch and Leo, 1995)。

² Hansch, C. and Leo, A. (1995) Exploring QSAR: Volume 1: Fundamentals and Applications in Chemistry and Biology. American Chemical Society, Washington, DC.

³ U.S. EPA KOWWIN 又は ACD/LogP

⁴ Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals. Environ. Chem., 27(10), 1995–2004.

⁵ Trapp, S. and Horobin, W. (2005) A Predictive Model for the Selective Accumulation of Chemicals in Tumor Cells. Eur. Biophys. J., 34(7), 959–966.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\log Pow_i$	イオン種の1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	Franco and Trapp (2008) ¹ ; Trapp and Horobin (2005) ²
$\log Pow_n$	非解離種の1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	—

1

2 双性イオン物質の場合の式を参考に示す(Trapp, 2009³)。

3

4 $\log Pow_i = \log Pow_n - 2.3$ 式 X-8

5

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\log Pow_i$	イオン種の1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	Trapp (2009 ³)
$\log Pow_n$	非解離種の1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	—

6

7 また、KOWWIN に、解離種の構造を表す SMILES 形式で入力することによっても推計
8 できる (U.S. EPA, 2012, SMILES Help⁴)。

9

10 ③ $\log D$

11 環境媒体の構成要素と植物及び牛体内媒体 (x) ごとくの見かけの1-オクタノールと水との
12 間の分配係数 ($\log D_x$) は、次式で計算した値の常用対数値である。

13

14 $D_x = \phi_{x,n} \times Pow_n + \phi_{x,i} \times Pow_i$ 式 X-9

15

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\log D_x$	x ごとくの見かけの1-オクタノールと水との間の分配係数*	—	—	—
$\phi_{x,n}$	x ごとく非解離種分率*	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
$\log Pow_n$	非解離種の1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	—
$\phi_{x,i}$	x ごとくイオン種分率*	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals. Environ. Chem., 27(10), 1995–2004.

² Trapp, S. and Horobin, W. (2005) A Predictive Model for the Selective Accumulation of Chemicals in Tumor Cells. Eur. Biophys. J., 34(7), 959–966.

³ Trapp, S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299–353.

⁴ U.S. EPA (2012) Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\log Pow_i$	イオン種の1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	—

※ $\log D_x$ は、環境媒体の構成要素と植物及び牛体内媒体 (x) pHにおける化学種分率 (ϕ_x)を用いて計算する。 ϕ_x については、X.3.1.2 (2)を参照されたい。本式で対象にする環境媒体の構成要素と植物及び牛体内媒体 (x)は、土壌間隙水 (sw)、牛の小腸 (cow)である。

(3) 有機炭素補正土壌吸着係数

有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)値は、吸着平衡時の土壌粒子と水中の化学物質濃度から計算される土壌吸着係数 (Kd)の値をその土壌粒子の有機炭素含有率 ($OCsos$)で除した値である。 Kd 値は、土壌によるばらつきが大きい (U.S. EPA, 2012, KOCWIN User Guide¹)が、 $OCsos$ で土壌による非極性有機化学物質の Kd 値の差異をよく説明できるため、 Koc が物質の特性値として用いられている。(OECD, 2000, 試験ガイドライン No106²)

土壌粒子は、高いカチオン交換容量とアニオン交換容量を有している (松中, 2003³)ため、解離性物質のイオン種の固体吸着メカニズムは非解離種とは異なり、解離性物質の Koc は、pHによって大きく変動する。OECD (2000), 試験ガイドライン No. 106²では、解離性物質の吸着に対して土壌 pHは重要なパラメータであるため、様々な土壌 pHでの測定を求めている。REACH IR & CSA R.7a (ECHA, 2015)⁴では、解離性物質については、通常、測定値が必要であり、環境媒体中の pHに応じて補正が必要であるとしているが、補正方法の記述はない。

EUでは、REACHのITSを具体化するためのプロジェクト OSIRIS (Optimized Strategies for Risk Assessment of Industrial Chemicals through Integration of Non-Test and Test Information)の中で、解離性物質の環境動態モデルの研究が進められていた。いくつかの物質の REACHに基づく化学安全アセスメント書を含む登録書 (REACH Resistration Dossier)⁵には、プロジェクトの成果として、開発されたモデル (Franco and Trapp, 2008)⁶による、異なる環境 pHに対する Koc 推計値が報告されている。

なお、 Koc は、土壌での粒子と土壌間隙水との間の物質の分配だけでなく、水域懸濁粒子や底質粒子と水相との間の分配の計算にも使用される。また、Francoらは、大気中の浮遊粒子固体と粒子水分の間での分配の計算にも Koc を使用している。ここでは、 Koc を粒子固体 (有機炭素で補正した値)と粒子水分の間の分配を表す式と考える。

¹ U.S. EPA (2012) Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11.

² OECD (2000) TG 106: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Adsorption - Desorption Using a Batch Equilibrium Method. No.106.

³ 松中照夫 (2003) 土壌学の基礎 生成・機能・肥沃度・環境. 農山魚村文化協会.

⁴ ECHA (2015) Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment Chapter R.7a: Endpoint Specific Guidance, Version 4.1.

⁵ ECHA, REACH Resistered Dossier, N-(3-aminopropyl)iminodiethanol (CAS: 4985-85-7), Adsorption/desorption.

⁶ Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals. Environ. Chem., 27(10), 1995–2004.

① *Koc* と *Kd*

式 X-10に示すように、*Koc*は、*Kd*値を *OCsos*で除した値である (OECD, 2000, 試験ガイドラインNo. 106¹)。

$$Koc = Kd \times \frac{1}{OCsos} \quad \text{式 X-10}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
<i>Koc</i>	有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	—
<i>Kd</i>	土壌吸着係数	L/kg	—	—
<i>OCsos</i>	土壌粒子の有機炭素含有率	—	—	—

前述のとおり *Koc* は、土壌粒子だけでなく、大気粒子 (浮遊粒子)、水域の懸濁粒子、底質粒子にも適用される。大気粒子、土壌粒子、水域の懸濁粒子、底質粒子の有機炭素含有率については、付属資料 X.3.1.2 (1)③vi)を参照されたい。

② 測定値

Koc の測定には、有機炭素含有量が 0.3%以上の土壌を使用することが推奨されており、解離性物質に対しては、非解離種とイオン種の吸着を確認するために、広い pH 範囲の複数の土壌を使用することが推奨されている (OECD, 2000, 試験ガイドライン No. 106¹)。しかし、広い pH 範囲の土壌サンプルで測定値が報告されている例はほとんどなく、また、測定 pH が記載されていないことも多い。

Koc を収集する際には、有機炭素含有率及び測定 pH をあわせて収集することが望ましく、*Kd* 値の場合には、測定粒子種もあわせて収集することが望ましい。

解離性物質については、測定値が得られた場合でも、念のために、次に述べる Franco らの推計式による計算も実施し、両方の計算結果を比較して採用の可否を検討することが望ましい。

③ 推計値

解離性物質の *Koc* を限定的な物性情報から推計できる手法は、Franco and Trapp (2008)² のみである。これには、彼らの提案した *Koc* 回帰式を推計に用いる。なお、この回帰式は、オランダ RIVM の暴露評価モデル SimpleBox のバージョン 4.0 に組み込まれているもの

¹ OECD (2000) TG 106: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Adsorption - Desorption Using a Batch Equilibrium Method. No.106.

² Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals. Environ. Chem., 27(10), 1995–2004.

1 と同じである。

2 Franco and Trapp (2008)¹⁾は、解離性物質の *Koc* データを収集し、回帰式を作成²⁾している。
3 回帰に用いた物質数は、酸の場合はトレーニングセットとして 63 物質及びバリデーシ
4 ョンセットとして 31 物質、塩基の場合はトレーニングセットとして 43 物質及びバリデー
5 ションセットとして 22 物質であり、非解離種、カチオン、アニオンに対してそれぞれ、*Koc*
6 値と *Pow_n* 値の回帰式を作成した³⁾。さらに、両性物質に関してもバリデーションを行って
7 いる (物質数 4)。しかし、他の一酸塩基や一塩基酸に比べて、根拠となる *Koc* 測定データ
8 が少ないため信頼性は高くない。

9 トレーニングセットとバリデーションセットに対する回帰式における決定係数は、酸に
10 対して $R^2=0.54$ (0.44)、塩基に対して $R^2=0.76$ (0.55) (カッコ内の値はバリデーションセッ
11 トに対する値)と報告されている。

12 *Koc* の推計には、非解離種の 1-オクタノールと水との間の分配係数 *Pow_n*⁴⁾、塩基に対す
13 る *pKa* 値、環境 pH に依存する化学種分率が必要となる。実際の環境での粒子と水相の間
14 の分配の計算に際しては、X.3 付属書に詳細を記述するように、環境中の構成要素 (*xe*)ごと
15 に計算する。

16

17 i) pH7 における *D* 値 D_7

18 pH7 における 1-オクタノールと水との間の分配係数 ($\log D_x$) の非対数値である *D* 値 (D_7)
19 は、塩基と両性物質の *Koc* 推計時のみ使用する。

20

$$21 \quad D_7 = \phi_{n7} \times Pow_n + \phi_{c7} \times Pow_c \quad \text{式 X-11}$$

22

記号	説明	単位	値	出典・参照先
D_7	pH7 における <i>D</i> 値	L/kg	—	Franco and Trapp (2008) ¹⁾
ϕ_{n7}	pH7 における非解離種の化学種分率	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
$\log Pow_n$	非解離種の 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	X.2.2.1 (2)①
ϕ_{c7}	pH7 におけるカチオン種の化学種分率	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。

¹⁾ Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals. Environ. Chem., 27(10), 1995–2004.

²⁾ 広い pH 範囲での *Koc* 測定データがあれば回帰式の精度を高めることができるが、得られる *Koc* のデータは OECD TG の要求からすると不十分なものが多い。Franco and Trapp (2008) の回帰式はそれを前提に作成されている。

³⁾ 塩基の回帰式は最終的に、*pKa* も独立変数となる。

⁴⁾ この値は、環境に依存しない物質固有の値である。

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\log Pow_c$	カチオン種の1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	X.2.2.1 (2)②

1

2 ii) 【参考】非解離種 Koc (回帰式)

3 Franco and Trapp (2010)¹が公開している解離性物質への適用が可能な多媒体モデル
4 MAMI (a Multimedia Activity Model applicable to neutral and Ionizable molecules)の
5 Excel版で使用されている非解離種の $\log Koc$ の推計式である Sabljic の式を参考に示す。

6

$$7 \quad \log Koc_{nonionizable.sabljić} = 0.81 \times \log Pow_n + 0.1 \quad \text{式 X-12}$$

8

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$Koc_{nonionizable.sabljić}$	非解離性物質の有機炭素補正土壌吸着係数 (Sabljic 法による推計)	L/kg	—	Sabljić et al. (1995) ²
$\log Pow_n$	非解離種の1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	X.2.2.1 (2)①

9

10 iii) 酸 Koc (回帰式)

11 環境媒体を構成する要素 (xe)における酸の Koc_{xe} は、次式で計算する。

12

$$13 \quad Koc_{xe} = \phi_{xep.n} \times Koc_n + \phi_{xep.a} \times Koc_a \quad \text{式 X-13}$$

$$14 \quad Koc_n = 10^{0.54 \times \log Pow_n + 1.11} \quad \text{式 X-14}$$

$$15 \quad Koc_a = 10^{0.11 \times \log Pow_n + 1.54} \quad \text{式 X-15}$$

16

記号	説明	単位	値	出典・参照先
Koc_{xe}	環境媒体を構成する要素 (xe)における有機炭素補正土壌吸着係数 [※]	L/kg	—	Franco and Trapp (2010) ¹
$\phi_{xep.n}$	xep ごとの非解離種分率 [※]	—	—	酸に対して、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
Koc_n	非解離種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	—
$\phi_{xep.a}$	xep ごとのアニオン種分率 [※]	—	—	酸に対して、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
Koc_a	アニオン種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	—
$\log Pow_n$	非解離種の1-オクタノール	—	—	X.2.2.1 (2)①

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

² Sabljic, A., Güsten, H., Verhaar, H. and Hermens, J. (1995) QSAR Modelling of Soil Sorption. Improvements and Systematics of log KOC vs. log KOW Correlations. Chemosphere, 31(11–12), 4489–4514.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
----	----	----	---	--------

ルと水との間の分配係数

1 ※ KOC_{xe} は、環境媒体の構成要素の粒子及びその近傍水 (xep)pH における化学種分率 (ϕ_{xep})を用いて
 2 計算する。 ϕ_{xep} については、X.3.1.2 (2)を参照されたい。本式で対象にする環境媒体の構成要素の粒
 3 子及びその近傍水 (xep)は、大気中の粒子固体 (ap)、土壌中の粒子 (sp)、淡水域の懸濁粒子 (wfp)、
 4 海水域の懸濁粒子 (wsp)、淡水域の底質粒子 (efp)、海水域の底質粒子 (esp)である。

5

6 iv) 塩基 Koc (回帰式)7 環境媒体を構成する要素 (xe)における塩基の KOC_{xe} は、次式で計算する。

8

$$9 \quad KOC_{xe} = \phi_{xep,n} \times KOC_n + \phi_{xep,c} \times KOC_c \quad \text{式 X-16}$$

$$10 \quad KOC_n = 10^{0.37 \times \log Pow_n + 1.70} \quad \text{式 X-17}$$

$$11 \quad KOC_c = 10^{pKa_{base}^{0.65} \times \left(\frac{D_7}{D_7+1}\right)^{0.14}} \quad \text{式 X-18}$$

12

記号	説明	単位	値	出典・参照先
KOC_{xe}	環境媒体を構成する要素 (xe)における有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	Franco and Trapp (2010) ¹
$\phi_{xep,n}$	xep ごとの非解離種分率※	—	—	塩基に対して、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
KOC_n	非解離種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	—
$\phi_{xep,c}$	xep ごとのカチオン種分率※	—	—	塩基に対して、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
KOC_c	カチオン種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	—
$\log Pow_n$	非解離種の 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	X.2.2.1 (2)①
pKa_{base}	塩基の pKa	—	—	X.2.2.1 (5)
D_7	pH7 における D 値	L/kg	—	X.2.2.1 (3)③i)

13 ※ KOC_{xe} は、環境媒体の構成要素の粒子及びその近傍水 (xep)pH における化学種分率 (ϕ_{xep})を用いて
 14 計算する。 ϕ_{xep} については、X.3.1.2 (2)を参照されたい。本式で対象にする環境媒体の構成要素の粒
 15 子及びその近傍水 (xep)は、大気中の粒子固体 (ap)、土壌中の粒子 (sp)、淡水域の懸濁粒子 (wfp)、
 16 海水域の懸濁粒子 (wsp)、淡水域の底質粒子 (efp)、海水域の底質粒子 (esp)である。

17

18 v) 両性物質 Koc (回帰式)19 環境媒体を構成する要素 (xe)における両性物質の KOC_{xe} は、次式で計算する。

20

$$21 \quad KOC_{xe} = \phi_{xep,n} \times KOC_n + \phi_{xep,a} \times KOC_a + \phi_{xep,c} \times KOC_c \quad \text{式 X-19}$$

$$22 \quad KOC_n = 10^{0.50 \times \log Pow_n + 1.13} \quad \text{式 X-20}$$

$$23 \quad KOC_a = 10^{0.11 \times \log Pow_n + 1.54} \quad \text{式 X-21}$$

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

$$KOC_c = 10^{pKa_{base} \times 0.65 \times \left(\frac{D_7}{D_7+1}\right)^{0.14}} \quad \text{式 X-22}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
KOC_{xe}	環境媒体を構成する要素 (xe) における有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	Franco and Trapp (2010) ¹
$\phi_{xep.n}$	xep ごとの非解離種分率	—	—	両性物質に対して、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
KOC_n	非解離種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	—
$\phi_{xep.a}$	xep ごとのアニオン種分率※	—	—	両性物質に対して、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
KOC_a	アニオン種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	—
$\phi_{xep.c}$	xep ごとのカチオン種分率※	—	—	両性物質に対して、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
KOC_c	カチオン種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	—
$\log Pow_n$	非解離種の 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	X.2.2.1 (2)①
pKa_{base}	塩基の pKa	—	—	X.2.2.1 (5)
D_7	pH7 における D 値	—	—	X.2.2.1 (3)③i)

※ KOC_{xe} は、環境媒体の構成要素の粒子及びその近傍水 (xep)pH における化学種分率 (ϕ_{xep})を用いて計算する。 ϕ_{xep} については、X.3.1.2 (2)を参照されたい。本式で対象にする環境媒体の構成要素の粒子及びその近傍水 (xep)は、大気中の粒子固体 (ap)、土壌中の粒子 (sp)、淡水域の懸濁粒子 (wfp)、海水域の懸濁粒子 (wsp)、淡水域の底質粒子 (efp)、海水域の底質粒子 (esp)である。

(4) ヘンリー係数

解離性物質は、環境中の水相で非解離種とイオン種を生成する。気相にはイオン種が存在しえないため、気相中と水相中の非解離種の濃度の比が一定となる。非理想溶液²では、ヘンリー係数は気相濃度を活量³で除した値になる。気相の活量は、平衡状態では水相の非解離種の活量と等しい (Trapp et al., 2010⁴)。

このため、見かけの無次元のヘンリー係数と非解離種の無次元のヘンリー係数は、式 X-23 で関連づけられる。

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

² 溶媒についてラウールの法則が成り立ち、溶質についてヘンリーの法則が成り立つ溶液を理想希薄溶液という。これに該当しない溶液をここでは、非理想溶液とする。

³ 活量は活量係数と濃度の積 ($a = \gamma \times C$)であり、 γ により理想希薄溶液と非理想溶液の違いを表す。

⁴ Trapp, S., Franco, A. and Mackay, D. (2010) Activity-Based Concept for Transport and Partitioning of Ionizing Organics. Environ. Sci. Technol., 44, 6123–6129.

$$H_n = \left(\frac{C_{n,a}}{A_{ct,a}} \right)_{eq} = \left(\frac{C_a}{A_{ct,w}} \right)_{eq} = \frac{C_{n,a}}{\gamma_n \times C_{n,w,eq,a}} = \frac{C_a}{A_{ct,w} \times \phi_n} = \frac{HENRY}{\phi_n} \quad \text{式 X-23}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
H_n	非解離種の無次元ヘンリー係数	—	—	—
$C_{n,a}$	非解離種の気相濃度	mg/m ³	—	—
$A_{ct,a}$	気相活量	mg/m ³	—	—
C_a	気相濃度	mg/m ³	= $C_{n,a}$	—
$A_{ct,n,w}$	非解離種水相活量 (溶媒が純水の場合の値)	mg/m ³	= $A_{ct,a}$ (平衡状態において)	—
γ_n	活量係数 (非解離種)	—	—	—
$C_{n,w,eq,a}$	気相と平衡状態にある非解離種の水相濃度	mg/m ³	—	—
$A_{ct,w}$	水相総活量	mg/m ³	—	—
ϕ_n	非解離種分率	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
$HENRY$	見かけの無次元ヘンリー係数	—	—	—

収集する解離性物質のヘンリー係数が測定値の場合には、測定 pH と、できれば、イオン強度も併せて収集しておく必要がある。

非解離種の値であることが確認できれば、その値を用いる。環境中 pH において解離した状態である場合には、式 X-23 を用いて非解離種の値に補正する。

本章で解説する解離性モデルは、Franco らのモデルに倣って、活量、活量係数、活量容量に基づいた計算を行っており、活量はヘンリー係数に基礎を置いている。

ヘンリー係数は、環境条件下では、気相と水相の間の特定の物質が希薄水溶液に存在する時の当該物質の平衡係数である。典型的には、希薄水溶液のモル分率は 0.001 ~ 0.01 であり、これは 100 g/mol のモル質量の物質の場合に 5 ~ 50 g/L の濃度以下を意味する (Staudinger and Roberts, 2001¹)。

測定値が得られない場合は、HENRYWIN を用いて、非解離種の値を推計し (ガイドス I.7.3 (7)を参照されたい)、式 X-26 (33 ページ)で非解離種の無次元ヘンリー係数 (H_n) に変換後、使用する。

(5) 酸解離定数

酸解離定数 (pK_a)の値と、環境中の水の pH から、化学種分率が決定される。

対象物質の酸官能基及び塩基官能基ごとに、その種別と pK_a を収集する。また、併せて当該物質のイオン種 i の電荷 (z)を設定する必要がある。本章では、多塩基酸や多酸塩基で

¹ Staudinger, J. and Roberts, P. V. (2001) A Critical Compilation of Henry's Law Constant Temperature Dependence Relations for Organic Compounds in Dilute Aqueous Solutions. Chemosphere, 44(4), 561-576.

1 あっても、環境の水中では1段しか解離せず、一塩基酸又は一酸塩基とみなしうる物質を
2 対象としているため、酸であれば-1、塩基であれば+1を用いる。

3 4 ① 実測値

5 pKa値は、I章に示したように、各種の物性データベースやデータハンドブックから得る
6 ことができる。

7 実測値を収集する場合には、測定したpKaごとに、対象物質の酸官能基及び塩基官能基
8 を把握しておくことが望ましい。

9 10 ② 推計値

11 SPARC¹、ACD/Percepta²等の推算ソフトにより、pKaの推計値と化学種分率を得ること
12 が可能である。

13 14 (6) 生物濃縮係数

15 一般的に、化学物質の魚類における生物濃縮性は、鰓の呼吸細胞経由の受動拡散が主要
16 な吸収経路であり、logBCFとlogPowとの間に相関関係があることが知られている。他方、
17 解離性物質の生物濃縮性は、水分子との水和による水相でのエネルギー的安定化や生体膜
18 とのイオン性相互作用の働きなどによって、単純な受動拡散によって生体内に取り込まれ
19 る化学物質とは生物濃縮挙動が異なり、logBCFとlogPowとの相関が弱く、生物濃縮され
20 にくいと考えられている。ただし、パーフルオロカルボン酸 (PFCA)及びパーフルオロスル
21 ホン酸 (PFOS)は、他の解離性化学物質とは生物濃縮挙動が異なり、経験的に高濃縮性が懸
22 念される。このPFCA又はPFOSの高濃縮傾向は、魚類の血清中のタンパク質と結合しや
23 すく、生体内から排せつされにくいことに起因している。

24 また、解離性物質の生体内への取り込み速度 (*k_I*)は、pHの影響を受けることも知られて
25 いる。Saarikoski et al. (1986)³は、グッピーにおけるpH=3~9下での4-Phenylbutyric acid
26 などのアニオン性化学物質の*k_I*を測定し、pHの増加に伴い*k_I*が減少したことを報告して
27 いる。この試験結果から、解離性の化学物質の生物濃縮性はpHによって異なることが示唆
28 されている。また、この試験結果においてpHの増加に伴い*k_I*が減少したことなどから、
29 解離性物質は一般的にイオン化状態では生体内に取り込まれにくく、水中のカウンターイ
30 オンとペアを形成した中性種として生体内に取り込まれると考えられている。また、生体
31 膜はホスファチジルコリンなどのリン酸で構成されており、膜表面の電荷がマイナスであ

1 詳細は以下 URL で紹介されている。

(<http://www.archemcalc.com/sparc.html>, 2016/12/13 アクセス)

2 詳細は以下 URL で紹介されている。

(<http://www.acdlabs.com/products/percepta/>, 2017/3/28 アクセス)

3 Saarikoski, J., Lindström, R., Tyynelä M, Viluksela M. (1986) Factors Affecting the Absorption of Phenolics and Carboxylic Acids in the Guppy (Poecilia Reticulata). Ecotoxicol. Environ. Saf., 11(2), 158-173.

1 るから、カチオン性の化学物質は生体膜へ吸着しやすい傾向にある。(NITE, 2012¹)

2

3 ① 測定値

4 非解離性物質と同様に、化審法における生物濃縮性の判定がある場合やその他の信頼性
5 が高い測定値がある場合には、それらの値を優先する。

6

7 ② 推計値

8 I 章では、評価IIにおける *BCF* の精査とキースタディ見直しに用いる推計法として、
9 NITE カテゴリーアプローチ、EPI Suite の *BCFBAF* (U.S. EPA, 2012²)、*BCF* base-line
10 モデル (OASIS Catalogic)があげられている。

11 解離性物質は、NITE カテゴリーアプローチのカテゴリーIIIになる。NITE (2012)¹では、
12 カテゴリーIIIの「イオン性の官能基を持つ物質」として、「化学物質と生体分子との相互作用
13 において、イオン性相互作用が主要な分子間相互作用として働く物質」のカテゴリーア
14 プローチによる生物濃縮性予測についてまとめている。同書において、カテゴリーIIIの物
15 質は、さらに以下の5つの物質群に分類されている。

16 (i) アニオン性物質

17 (ii) カチオン性物質

18 (iii) 双性イオン性物質

19 (iv) パーフルオロカルボン酸 (PFCA)

20 (v) パーフルオロスルホン酸 (PFSA)

21 NITE (2012)¹では、カテゴリーIIIの物質について、*logPow*や*pKa*などを用いた生物濃縮
22 性予測式を統計的に求めたが、相関性が良いパラメータは見つからず、予測式を用いた定
23 量的な*BCF*の予測は困難であったと結論づけられている。このため、カテゴリーIIIに属す
24 る物質については、以下の2つの手法を用いた生物濃縮性予測が示されている。

25

26 手法1：物質群 (i)と (ii)については、 $\log BCF < 3$ とする。

27 手法2：Read-across (類推)による定量的又は定性的な予測を行う。

28

29 NITE (2012)¹では、26物質の解離性物質データを用いて、EPI Suiteの*BCFBAF* (U.S.
30 EPA, 2012²)及び*BCF* base-lineモデル (OASIS Catalogic)の検証を行っている。この結果、
31 $\log BCF$ の予測値と実測値との間の決定係数 (R^2)が、EPI Suiteの*BCFBAF* (U.S. EPA,
32 2012²)では 8.0×10^{-5} 、*BCF* base-lineモデル (OASIS Catalogic)では 8.6×10^{-3} となっており、
33 相関性は非常に低く、予測精度は低い傾向にあったとされている。

34

本章では、解離性物質の *BCF*に関する情報が得られない場合には、適宜 Read Across (類

¹ NITE (2012) カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測に関する報告書 (カテゴリーIII).

² U.S. EPA (2012) Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11.

1 推)を実施することとした¹。

2

3 X.2.3 解離性物質の排出量推計

4 上述したとおり解離性物質は水中で解離し、中性の非解離種とイオン種を生じ、それら
5 の存在比率は使用状況 (pH 等)に依存する。このため、物理化学的性状が大きく変化する可
6 能性があり、現実に応じた排出量推計を行うためには、実際に解離性物質が使用されてい
7 る状況での物理化学的性状等に従い排出係数を設定することが必要になる。一方、化審法
8 で得られる情報には、使用状況等に関する情報等はほぼ含まれていない。

9 評価Ⅱでは安全側のシナリオとして、原則、水域への排出については最大水溶解度区分²、
10 大気への排出については非解離状態の蒸気圧区分の排出係数を採用する。また、使用状況
11 等の情報がある場合には、排出係数区分を見直すことで現実の値に近づくと考えられる。

12 なお、考えうるシナリオについて、非解離種とイオン種の存在比の観点から以下の①～
13 ③が考えられたが、現実の使用実態が不明のため、安全側のシナリオとして排出係数は上
14 記の仮想的区分を用いることとした。

15 ① 非解離状態で使用されている場合

16 非解離状態の場合には、蒸気圧及び水に対する溶解度は非解離種の値であると考えら
17 れるため、排出係数を決定する際の物理化学的性状区分は非解離種の物理化学的性状に
18 該当する区分となる。

19 ② 完全に解離している状態で使用されている場合

20 完全に解離している場合には、全量がイオン種として水に溶解していると考えられる
21 ことから、水溶解度は大きく、また、みかけの蒸気圧については限りなく小さくなると
22 考えられることから、排出係数を決定する際の物理化学的性状区分は、最大水溶解度区
23 分²及び最小蒸気圧区分²となる。

24 ③ 一部が解離し、非解離種とイオン種が共存する状態で使用されている場合

25 一部が解離している場合には、イオン種は水により溶解しやすく、蒸発しにくくなる
26 ため、非解離状態と比べ、水溶解度は大きく、みかけの蒸気圧は小さくなると考えられ
27 る。しかし、使用状況により非解離種とイオン種の存在比が異なるため、一つの水溶解
28 度及び蒸気圧に特定することはできない。

29

30 X.2.4 解離性物質の暴露評価

31 解離性物質の非解離種は、非解離性物質と同様の環境中動態を示すが、イオン種は、異

¹ 類推の結果、類縁物質が2物質以上となった場合、基本的には、それらの物質の算術平均値を用いる。

² IV章 (IV.3.2.4 物理化学的性状データが得られない優先評価化学物質の扱い)に詳細を記しているが、特定の詳細用途においては、排出係数の値がハイフン「-」となっている場合がある。その場合は、当該詳細用途のハイフンを除いた最大又は最小の区分を採用することとする。

1 なる動態を示す場合がある。例えば、イオン種は揮発しづらいため、大気中では、エアロ
2 ゴルや霧、雨、雪などに分配している (Trapp et al., 2010¹)。また、静電相互作用により粒
3 子に強く吸着する性質がある (van Beelen, 1998²)。

4 土壌中では、非解離種のように有機物質に浸透し、鉱物質表面に保持されるほか、逆の
5 電荷を持つ表面部に吸着される (Schwarzenbach et al., 2003³)。

6 生体内への取込についても、イオン種は、非解離種では主な取込経路と考えられる受動
7 拡散以外の水和による水相でのエネルギー的安定化や生体膜とのイオン性相互作用など
8 による影響を受けると考えられる (NITE, 2012⁴)。非解離種として生体膜を通過した物質が体
9 内でイオン種となり、体外に排出されにくくなり、体内に蓄積されるイオン種が起
10 こる可能性なども考えられている (Bromilow and Chamberlain, 2000⁵)。

11 このような解離性物質を環境中濃度等推計モデルに適用する方法は、二つに大別できる。
12 一つは、環境中濃度等推計モデルに用いられる物理化学的性状の値をイオン種や非解離種
13 の存在割合などにより補正するか、イオン種の特性を考慮した方法で推計して一般的な有
14 機化学物質と同様に計算する方法である。もう一つはイオン種と非解離種をそれぞれ別の
15 種として扱い、環境中動態を並行して推計する方法である。

16 一つ目の方法の例として、ECB (2003)⁶に示された解離性物質の環境評価方法や USES
17 (van Beelen, 1998²; 2000⁷)、多媒体モデルの RAIDAR (Arnot and Mackay, 2007⁸)及び水
18 系2コンパートメントモデル SAFECAS (Yoshida et al., 1987⁹)では、イオン種に対してパ
19 ラメータを補正している。

20 二つ目の方法の例として、解離性物質への適用が可能な多媒体モデル MAMI では、非解
21 離種とイオン種の動態も考慮可能である (Franco and Trapp, 2010¹⁰)。EUSES (European
22 Union System for the Evaluation of Substances)にも組み込まれている多媒体モデル

¹ Trapp, S., Franco, A. and Mackay, D. (2010) Activity-Based Concept for Transport and Partitioning of Ionizing Organics. *Environ. Sci. Technol.*, 44, 6123–6129.

² van Beelen, P. (1998) Environmental Risk Evaluation of Difficult Substances in USES 2.0. RIVM report 679102045.

³ Schwarzenbach, R. P., Gschwend, P. M. and Imboden, D. M. (2003) *Environmental Organic Chemistry*, 2nd ed. John Wiley and Sons. New York.

⁴ NITE (2012) カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測に関する報告書 (カテゴリーIII).

⁵ Bromilow, R. H. and Chamberlain, K. (2000) Principles Governing Uptake and Transport of Chemicals. In: Trapp, S. and Mc Farlane, C. (ed.), *Plant Contamination; Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes*, Lewis/CRC Press, Boca Raton, FL, 37–68.

⁶ ECB (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment, Part II.

⁷ van Beelen, P. (2000) The Risk Evaluation of Difficult Substances in USES 2.0 and EUSES. A Decision Tree for Data Gap Filling of Kow, Koc and BCF. RIVM report 679102050.

⁸ Arnot, J. and Mackay, D. (2007) Risk Prioritization for a Subset of Domestic Substances List Chemicals Using the RAIDAR Model. CEMC Report, No.200703.

⁹ Yoshida, K., Shigeoka, T. and Yamauchi, F. (1987) Evaluation of Aquatic Environmental Fate of 2,4,6-Trichlorophenol with a Mathematical Model. *Chemosphere*, 16(10–12), 2531–2544.

¹⁰ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. *Environ. Toxicol. Chem.*, 29(4), 789–799.

1 Simplebox のバージョン 4.0 では、MAMI の一部の計算式を取り入れて、解離性物質の環
2 境中動態推計を可能にしている。

3 一つ目の方法では、イオン種特有の動態を考慮することは難しい。本章では、イオン種
4 の影響が大きい物質も評価できるように、イオン種と非解離種をそれぞれ別の種として扱
5 い、環境中動態を並行して推計する方法を導入する。

6 本項では、V 章、VI 章及び VII 章に記載されている数理モデル¹において、各暴露シナ
7 リオごと、また使用している各モデルごとに解離性物質の環境中動態を推計する方法を記
8 載する。

9

10 X.2.4.1 排出源ごとの暴露シナリオにおける解離性物質の推計

11 排出源ごとの暴露シナリオにおいて、解離性物質特有の動態を考慮できるように、V 章の
12 排出源ごとの暴露シナリオで用いる数理モデル（以下、「従来の暴露評価モデル」という）
13 の一部の数式やパラメータを変更したモデル（以下、「解離性モデル」という）について解説
14 する。

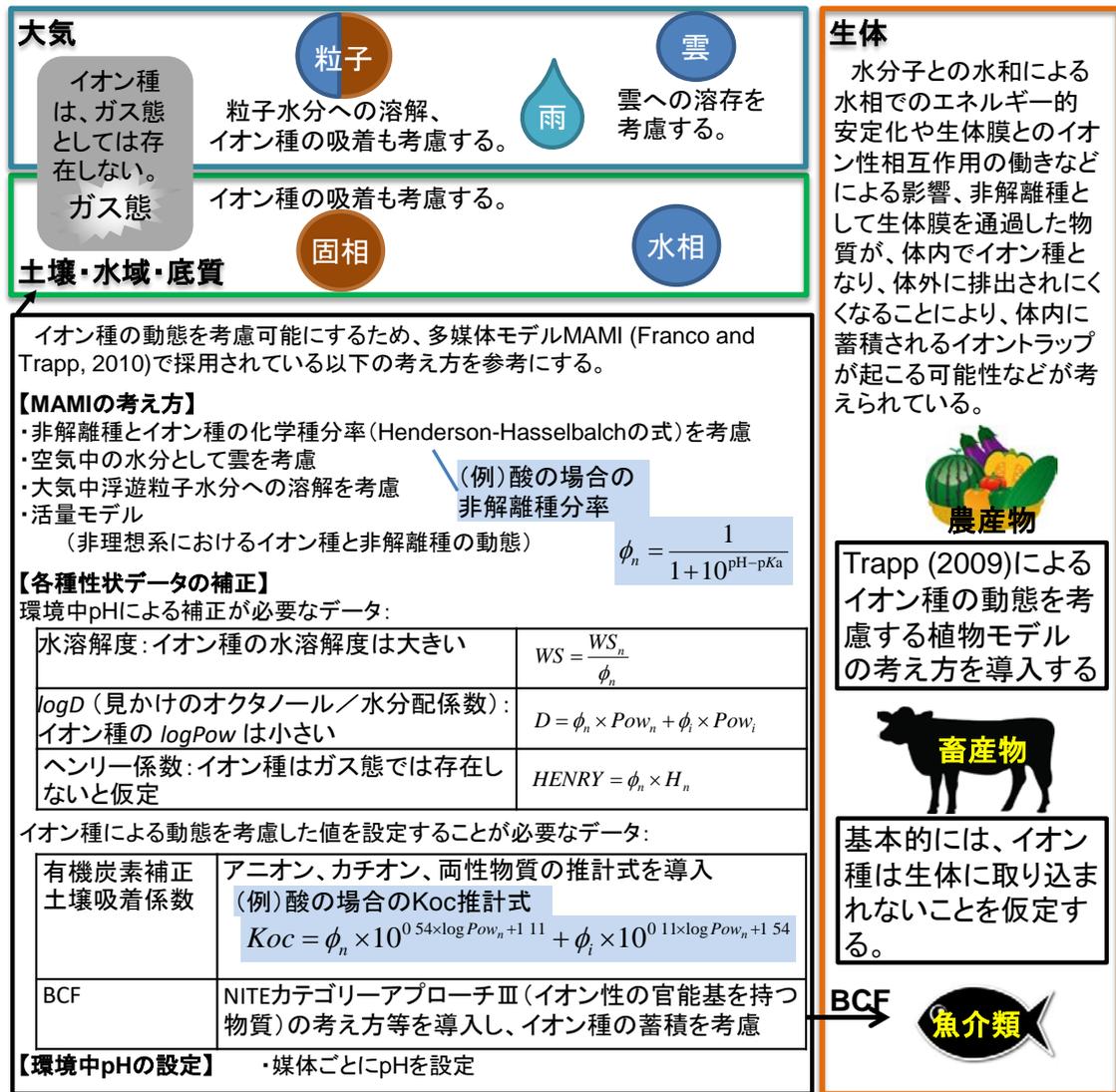
15 従来の暴露評価モデルについては、「V.3.3 環境中濃度推計」及び「V.7.3 環境中濃度
16 推計に用いる数理モデル」を参照されたい。

17 なお、解離性モデルは暴露評価Ⅱ以降に適用される。よって、暴露評価Ⅰでは、V 章に記
18 載されている方法で評価する。また、暴露評価Ⅱ以降では、本章において解離性モデルに
19 ついて記載した箇所以外は、V 章に記載されている方法で評価する。

20 イオン種の環境中動態を考慮できる数式を従来の暴露評価モデルに組み込むため、図表
21 X-4 に示すように、Franco and Trapp (2010)²の MAMI の考え方をモデルに導入する。

¹ 化審法リスク評価ツール (PRAS-NITE)により、本数理モデルと同等の数式を用いた計算を
実施することができる(評価Ⅰ及び評価Ⅱ(一部))。以下 URL からダウンロード可能である。
(<http://www.nite.go.jp/chem/risk/pras-nite.html>, 2017/1/20 アクセス)

² Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds:
Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim.
Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.



図表 X-4 イオン種の環境中動態とその濃度推計手法の概要

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12

MAMI は、多媒体モデルであり、局所モデルである従来の暴露評価モデルとは、想定している環境条件や計算のための仮定などが異なる。そのため、従来の暴露評価モデルに、イオン種の環境中動態を考慮するために必要となる MAMI の考え方や計算式を一部導入した。解離性物質は、環境中において非解離種とイオン種として存在する。イオン種は、非解離性の有機化合物や非解離種とは異なる性状を持つ。このため、本章で導入した考え方では、非解離種とイオン種の動態をそれぞれに適した方法で推計するため、環境媒体ごとの pH における非解離種とイオン種の化学種分率を計算し、推計に用いる物理化学的性状・生物蓄積性及び分解性データについては、必要に応じて、非解離種とイオン種それぞれの値を準備するか、化学種分率をあらかじめ考慮するための補正を行う。また、環境媒体ご

1 とのイオン強度による影響も考慮する。さらに、大気において、イオン種はガス態として
2 は存在せず、粒子や霧、雨、雪などに分配しやすい傾向にある (Trapp et al., 2010¹)ため、
3 従来の暴露評価モデルでは考慮していなかった大気中浮遊粒子中の水分や大気中雲への溶
4 解を考慮する。また、非解離種では、土壤吸着係数と有機炭素の存在割合との相関が高い
5 と考えられているが、イオン種では、土壤中の有機及び無機の粒子表面の電荷による影響
6 も考えられる。このため、X.2.2.1 (3)に解離性物質の有機炭素補正土壤吸着係数に関する留
7 意点を示したように、本章では解離性物質の特性を考慮した方法で環境中の粒子への吸着
8 を考慮する。(詳細は付属資料 X.3.1.2 (1)~X.3.1.2 (6)、X.3.1.2 (9)を参照されたい)

9 解離性物質は、生体への蓄積に対して、解離やイオントラップ、電気的な誘引と反発に
10 による影響がある (Trapp, 2009²)。イオン種は、非解離種と比較して、細胞膜を通過しにく
11 いため、環境中において非解離種として存在する化学物質が、植物体内に吸収されて植物
12 体内でイオン種として解離すると、そこに蓄積される場合がある。このような状態を「イ
13 オントラップ」という (Bromilow and Chamberlain, 2000³)。このため、弱い電解質の物
14 質は、そうでない物質と比較して植物体内に蓄積されやすい傾向がある (Trapp, 2000⁴)。

15 本章では、農産物については、Trapp (2009)²による解離性物質の植物モデルに関する考
16 え方や計算式を一部導入した。この手法では、環境中と同様に、非解離種とイオン種の動
17 態をそれぞれに適した方法で推計するため、植物体内の媒体ごとの pH における非解離種と
18 イオン種の化学種分率を考慮し、それぞれの物理化学的性状・生物蓄積性及び分解性デー
19 タを用いて、植物体内の動態を推計する。この時、植物体内の各媒体の pH の違いによる化
20 学種分率の違いを考慮することにより、イオントラップを推計する。非解離種の媒体間の
21 拡散は、濃度勾配を駆動力とする Fick の第一法則に基づいて計算するが、イオン種の拡散
22 は、濃度勾配の他に電位勾配も考慮にいった Nernst 式に基づいて計算する。また、根から
23 の土壤間隙水の取り込みや葉からの大気中のガス態の化学物質の取り込み、植物体内の分
24 配の計算時には、植物体内の媒体ごとのイオン強度による影響も考慮する。(詳細は付属資
25 料 X.3.1.2 (7)を参照されたい)。

26 畜産物については、U.S. EPA (2005)⁵の HHRAP (Human Health Risk Assessment
27 Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities)と同様に、小腸内の pH を考慮した
28 見かけの 1-オクタノールと水との間の分配係数 ($\log D$)を用いて、基本的にはイオン種は生
29 体に取り込まれないことを仮定して、牛肉及び牛乳への移行係数を推計する。(詳細は付属

¹ Trapp, S., Franco, A. and Mackay, D. (2010) Activity-Based Concept for Transport and Partitioning of Ionizing Organics. Environ. Sci. Technol., 44, 6123–6129.

² Trapp, S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299–353.

³ Bromilow, R. H. and Chamberlain, K. (2000) Principles Governing Uptake and Transport of Chemicals. In: Trapp, S. and Mc Farlane, C. (ed.), Plant Contamination; Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes, Lewis/CRC Press, Boca Raton, FL, 37–68.

⁴ Trapp, S. (2000) Modelling Uptake into Roots and Subsequent Translocation of Neutral and Ionisable Organic Compounds. Pest. Manag. Sci., 56(9), 767–778.

⁵ U.S. EPA (2005) Human Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities Final, EPA530-R-05-006.

1 資料 X.3.1.2 (8)を参照されたい)

2 魚介類中濃度については、従来の暴露評価モデルと同様の方法で推計する。ただし、生
3 物濃縮倍率 (BCF)は、X.2.2.1 (6)に示してある物質の解離性を考慮した値を用いる。

4

5 X.2.4.2 用途等に応じた暴露シナリオにおける解離性物質の推計

6 評価Ⅱの用途等に応じた暴露シナリオにおいて、解離性物質特有の動態を考慮する方法
7 について、解説する。

8 従来の水系の非点源シナリオの暴露評価に用いる数理モデルでは、VI章の「VI.2 水系
9 の非点源シナリオ」、「VI.2.1 水系の非点源シナリオの暴露評価 I」、「VI.2.1.4 水系の非
10 点源シナリオの環境中濃度の推計」及び「VI.6.2 水系の非点源シナリオ」に示されている
11 ように、V章の環境中濃度推計に用いる数理モデルの式を用いている。解離性物質について
12 は、X.2.4.1 に示すような解離性物質の環境中動態を考慮し、従来の暴露評価モデルと同様
13 の方法で推計する。

14 従来の大気系の非点源シナリオの暴露評価に用いる数理モデルは、VI章の「VI.3 大気
15 系の非点源シナリオ」、「VI.3.1 大気系の非点源シナリオの暴露評価 I」、「VI.3.1.4 大気
16 系の非点源シナリオの環境中濃度の推計」及び「VI.6.3 大気系の非点源シナリオ」、
17 「VI.6.3.1 環境中濃度の推計」に示されているように、V章の環境中濃度推計に用いる数
18 理モデルの式を用いている。解離性物質については、X.2.4.1 に示すような解離性物質の環
19 境中動態を考慮し、従来の暴露評価モデルと同様の方法で推計する。

20 地下水汚染の可能性シナリオの暴露評価に用いる数理モデルも同様に、「VI.4 地下水汚
21 染の可能性シナリオ」及び「VI.6.4 地下水汚染の可能性シナリオ」に示されているように
22 V章の環境中濃度推計に用いる数理モデルの式を用いている。解離性物質については、
23 X.2.4.1 に示すような解離性物質の環境中動態を考慮し、従来の暴露評価モデルと同様の方
24 法で推計する。また、「VI.6.4.3 地下水へ移行の可能性がある物質の抽出と順位付け」、
25 「VI.6.4.3 (1) 地下水へ移行する可能性がある物質の抽出」、「VI.6.4.3 (1)② $\log K_{oc}$ を用
26 いた地下水へ以降する可能性がある物質の抽出」においてふるい分けに用いている $\log K_{oc}$
27 (X.2.2.1 (3)で説明した有機炭素補正土壌吸着係数 (K_{oc})の常用対数値)は、土壌間隙水にお
28 ける値を用いる。

29 船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオの暴露評価は、本章に示したような解離性物質特有
30 の性質について、十分に考慮したうえで、基本的には「VI.5 船底塗料用・漁網用防汚剤シ
31 ナリオ」の手法のとおり実施する。例えば、船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオで用い
32 るソフトウェアには、 K_{oc} 推計モジュールがあるが、基本的にはX.2.2.1 (3)に記載した値を
33 用いる。

34

35 X.2.4.3 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ及び残留性の評価における解離性 36 物質の推計

37 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ及び残留性の評価で用いるモデルやデータに

1 応じて、X.2.4.1 に示すような解離性物質の環境中動態を考慮する。

2

1 X.3 付属資料

2 X.3.1 解離性物質の評価

3 X.3.1.1 はじめに

4 この付属資料では、X.2.4.1 に解説した排出源ごとの暴露シナリオにおける解離性モデル
5 の数式とパラメータ及びその設定の経緯等について説明する。X.3.1.2 (1)～X.3.1.2 (4)では、
6 各環境媒体中濃度の計算で共通して用いられるパラメータや計算式について説明し、
7 X.3.1.2 (5)以降では、環境媒体中濃度の計算方法について説明する。X.3.1.3 では、推計式
8 と環境中 pH の設定経緯について説明する。

9 解離性モデルでは、解離性物質特有の性質を留意 (X.2.2.1)して収集及び精査された化学
10 物質に関するデータ (X.3.1.2 (1)①)を用い、必要に応じて pH により補正する (X.3.1.2 (3))。
11 各媒体中濃度は、基本的には従来の暴露評価モデルと同様に推計するが、水中では pH に応
12 じた化学種分率 (X.3.1.2 (2))を考慮し、イオン種の動態を推計する数式を導入する。

13 イオン種の環境中動態を考慮するためには、図表 X-5 に示すように、Franco and Trapp
14 (2010)¹ の MAMI の考え方をモデルに導入する。導入した数式については、以下のとおり
15 である。

16

- 17 ・ 大気中濃度及び沈着量 : X.3.1.2 (5)
- 18 ・ 土壌中濃度及び土壌間隙水濃度 : X.3.1.2 (6)
- 19 ・ 水域濃度及び底質中濃度 : X.3.1.2 (9)

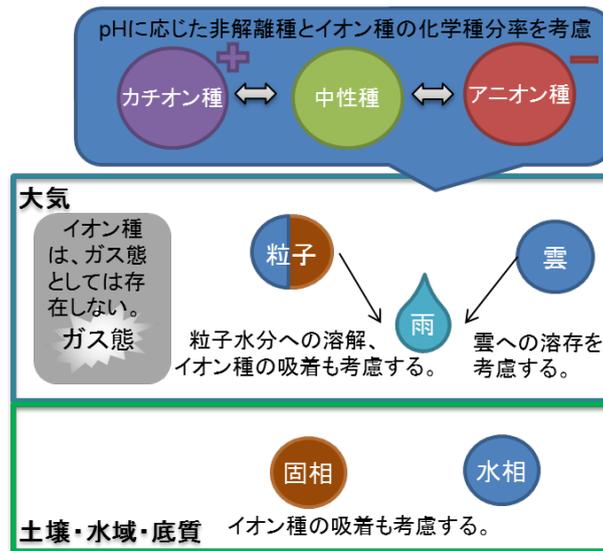
20

21 イオン種がガス態として存在せずに、粒子吸着態の他、粒子水分や雲への溶存態として
22 存在することを計算するため、対応する環境構成要素として大気粒子水分と雲を追加する。
23 本章で対象とする環境構成要素については、X.3.1.2 (1)②に説明し、計算に用いる環境構成
24 要素の特性データについて X.3.1.2 (1)③で説明する。また、これらの環境構成要素間におけ
25 る化学物質の分配を推計するためには、活量モデルを用いる。活量モデルについては、
26 X.3.1.3 (1)①で説明する。また、新たに使用することになった大気粒子固体-水分配係数
27 (K_{sw})については、X.3.1.2 (4)で説明する。

28 これらの環境中動態モデルの設定経緯については、X.3.1.3 (1)で説明する。

29

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.



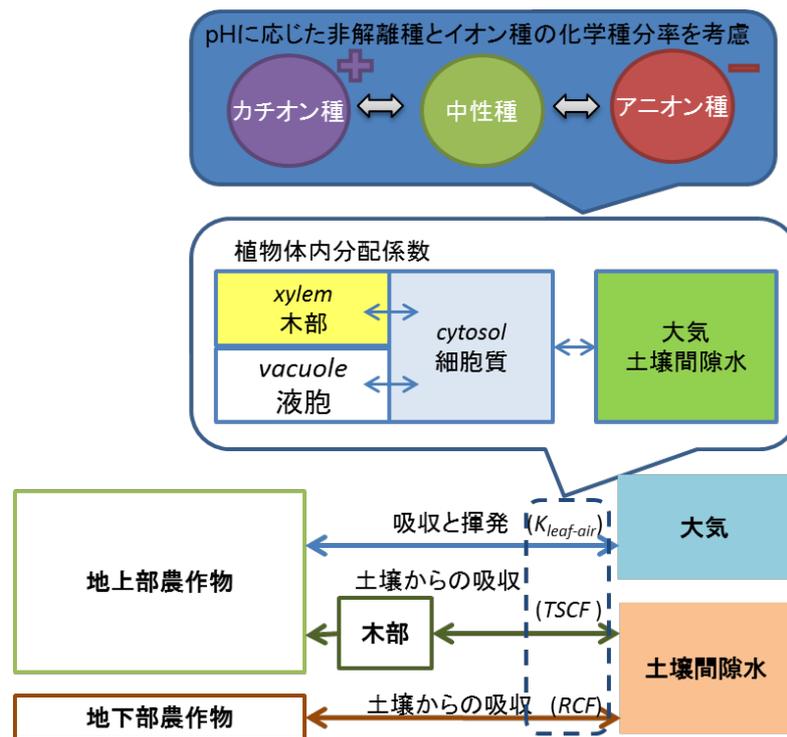
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14

図表 X-5 イオン種環境中動態とその推計式の導入

農作物については、非解離種として生体膜を通過した物質が、体内でイオン種となり、体外に排出されにくくなることにより、体内に蓄積されるイオントラップなどを考慮するため、Trapp (2009)¹の考え方をモデルに導入する。Trapp (2009)¹は、植物体内の分配係数の計算の際に、植物体内構成要素ごとの pH による化学種分率と非解離種とイオン種の動態の違いを考慮し、活量モデルを用いている。

本章でも図表 X-6 に示すように、この植物体内分配係数を大気中のガス態物質の葉・茎への濃縮係数 ($K_{leaf-air}$)、植物の導管を流れる水分と土壌中水分の間の分配係数 ($TSCF$)及び地下部農作物濃縮係数 (RCF)の推計に用いる。分配係数を適用する植物体内の構成要素については、X.3.1.2 (1)②iv)で説明する。また、計算式は X.3.1.2 (7)④に示し、その導入方法は X.3.1.3 (2)⑤に示す。

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.



図表 X-6 イオン種植物体内動態とその推計式の導入

畜産物については、U.S. EPA (2005)の HHRAP¹にあるように、解離性物質の牛肉及び牛乳への移行係数 (BTF_{meat} 及び BTF_{milk})を推計するために、見かけの 1-オクタノールと水との間の分配係数 ($\log D$)を用いる。計算式は X.3.1.2 (8)に、その設定経緯は X.3.1.3 (3)で説明する。

魚介類については、X.3.1.2 (9)③に説明するように、解離性物質特有の性質を留意した生物濃縮係数 (BCF)を用いて従来どおりの式で計算する。

X.3.1.2 排出源ごとの暴露シナリオにおける解離性モデルの数式とパラメータ

(1) 数理モデルに用いるパラメータ

① 化学物質に関するデータ

本章で解説する数理モデルは、評価の準備 (I 章及び X.2.2)で選定された化学物質のデータの数値を用いる。

¹ HHRAP : U.S.EPA (2005) Humam Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities Final, EPA530-R-05-006.

1 図表 X-7 数値モデルに使用する化学物質のデータ

記号	説明	単位	出典・参照先
<i>MW</i>	分子量	—	—
<i>MP</i>	融点	℃	I 章
<i>VP</i>	蒸気圧	Pa	I 章
<i>WS_n</i>	非解離種の水に対する溶解度 ^{*1}	mg/L	X.2.2.1 (1)
<i>logPow_n</i>	非解離種の 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	X.2.2.1 (2)
<i>logPow_i</i>	イオン種の 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	X.2.2.1 (2)
<i>Henry_n</i>	非解離種のヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	X.2.2.1 (4)
<i>Koc</i>	有機炭素補正土壌吸着係数 ^{*2}	L/kg	X.2.2.1 (3)
<i>Kd</i>	土壌吸着係数 ^{*2}	L/kg	X.2.2.1 (3)
<i>BCF</i>	生物濃縮係数	L/kg	X.2.2.1 (6)
<i>BMF</i>	生物蓄積係数	—	I 章、V 章
<i>pKa_{acid}</i>	酸の酸解離定数	—	X.2.2.1 (5)
<i>pKa_{base}</i>	塩基の酸解離定数	—	X.2.2.1 (5)
<i>z</i>	当該物質のイオン種の電荷 ^{*3}	—	X.2.2.1 (5)
<i>t_{1/2,sobio}</i>	土壌における生分解の半減期	day	I 章
<i>t_{1/2,sowater}</i>	土壌における加水分解の半減期	day	I 章
<i>t_{1/2,sototal}</i>	土壌における総括分解半減期	day	I 章

- 2 ※1 「混和」の場合、pH で補正せず、最大値又は 1×10^6 mg/L¹ として扱う。
- 3 ※2 *Koc* の実測値が入手できない場合には、*logPow_n* 及び *pKa_{acid}*、*pKa_{base}* を用いて、X.2.2.1 (3)③ に示した方法で、*Koc_n* と *Koc_i* を推計する。また、入手した実測値が *Kd* の場合には、式 X-10 で *Koc* を計算する。有機炭素含有率 (*OC*) は、入手した *Kd* 測定時の有機炭素含有率、又はデフォルトとして X.3.1.2 (1)③vi) の *OC_{sp}* を用いる。
- 7 ※3 本章では、多塩基酸や多酸塩基であっても、環境の水中では 1 段しか解離せず、一塩基酸又は一酸塩基とみなしうる物質を対象としているため、酸であれば-1、塩基であれば+1 を用いる。

10 本章では、質量濃度ではなく、モル濃度で計算する。質量とモル間の換算には、モル質量を用いる。非解離種の水に対する溶解度 (*WS_n*) もモルに換算して扱う。

$$13 \quad M = MW \quad \text{式 X-24}$$

$$14 \quad WS_{n,mol} = \frac{WS_n}{M \times 1000} \quad \text{式 X-25}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
<i>M</i>	モル質量	g/mol	—	
<i>MW</i>	分子量	—	—	化学物質情報
<i>WS_{n,mol}</i>	非解離種の水に対する溶解度(モル)	mol/L	—	
<i>WS_n</i>	非解離種の水に対する溶解度	mg/L	—	化学物質情報

¹ 水と混和する物質について計算するときには、参考値として 1×10^6 mg/L を用いる。EPI Suite の WSKOWWIN (U.S. EPA, 2012) の推計手法をまとめた文献 (Meylan and Howard, 1994) では、推計に用いる回帰式を求める際に、水に混和する物質の溶解度を 1×10^6 mg/L としている。また、水に対する溶解度の推計結果が 1×10^6 mg/L を超える場合には、最大値として 1×10^6 mg/L を出力するとしている。

非解離種の無次元ヘンリー係数 (H_n)は、図表 X-7 の非解離種のヘンリー係数 ($Henry_n$)と式 X-26 で関係づけられる。

$$H_n = \frac{Henry_n}{R \times T} \quad \text{式 X-26}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
H_n	非解離種の無次元ヘンリー係数	—	—	Franco and Trapp (2010) ¹
$Henry_n$	非解離種のヘンリー係数	Pa·m ³ /mol	—	化学物質情報
R	気体定数	J/mol/K	8.314	—
T	絶対温度における環境温度	K	293.15	V章 p.67

② 環境の構成要素

環境及び植物と牛体内の媒体及びそれらを構成する要素について説明する。

i) 大気

大気は、その容積のほとんどを占める空気と、微量の浮遊粒子で構成される。浮遊粒子は、一般的に、硫酸、炭素（煤）、多種類の微量金属、そして水から成る（Kim and Seinfeld,1993²）。

従来の暴露評価モデルでは、図表 X-8に示すように、晴天時にはガス態と粒子への吸着を考慮し、雨天時には、さらにそれぞれの雨水への取り込みを考慮している。イオン種が大気中水分へ分配することを考慮するため、本章のモデルでは、Franco and Trapp (2010)¹に倣って、大気中の浮遊粒子中水分と雲への分配についてもモデル化する。大気中の浮遊粒子は、均質な水と均質な固体で構成されており、これらに化学物質が分配されるとしている。また、雲³を新たに均質な水⁴から成る大気の構成要素として組み込んでいる。浮遊粒子の水分と雲の中で解離性物質は解離しうる。

以下に示すように、本章のモデルでは、晴天時の大気は、空気 (*aa*)、粒子固体（浮遊粒子固体）(*aps*)及び粒子水分（浮遊粒子水分）(*apw*)で構成されるとする。一方、雨天時の大気は、空気 (*aa*)、粒子固体 (*aps*)、粒子水分 (*apw*)及び雲 (*ac*)で構成されるとする。

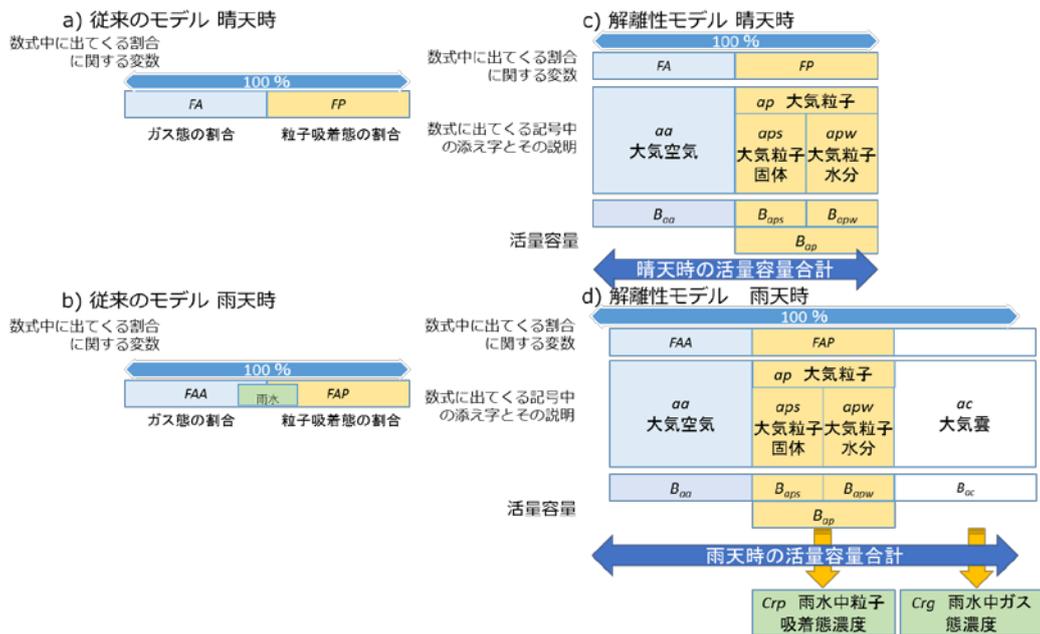
¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

² Kim, Y. P., Seinfeld, J. H. and Saxena, P. (1993) Atmospheric Gas-Aerosol Equilibrium I. Thermodynamic model. Aerosol Sci. Tech., 19(2), 157–181.

³ Franco and Trapp (2010)では、大気中水蒸気量の想定値と大気柱雲水量/大気柱水蒸気量比の積を大気中の雲の体積分率としている。

⁴ 様々な物質を溶解した均質な水であり、温度は20℃、密度は1 kg/L、pHは4.8、イオン強度は 2×10^{-4} mol/Lとする。

1



ここで、 B は、媒体構成要素での活量容量¹である。

図表 X-8 大気の構成要素

2

3

4

5

6 晴天時と雨天時の大気中での質量分布比を従来の暴露評価モデルと同様に、以下のよう
 7 に定義する。

8 FA : 晴天時に大気空気 (aa)中に存在する物質量/大気中に存在する物質全量 ($=1-FP$)

9 FP : 晴天時に大気粒子 ($aps+apw$) 中に存在する物質量/大気中に存在する物質全量

10 FAA : 雨天時に大気空気 (aa)中に存在する物質量/大気中に存在する物質全量

11 FAP : 雨天時に大気粒子 ($aps+apw$)中に存在する物質量/大気中に存在する物質全量

12

13 ii) 土壌

14 土壌については、従来の暴露評価モデルと解離性モデルの構成要素で違いはない (図表
 15 X-9)。

16

¹ 活量容量：フガシチーモデルで、濃度 (C)を、フガシチー (f)とフガシチー容量 (Z)の積で計算するのと同様に、解離性モデルでは、濃度 (C)を、活量 (a)と活量容量 (B)の積として計算している (Franco and Trapp, 2010)。本章で解説する解離性モデルでは、環境媒体を構成する各要素への質量分布比を計算する際に、活量容量 B 値を使用している。



図表 X-9 土壌の構成要素

質量分布比は従来の暴露評価モデルと同様に、以下のように定義する。

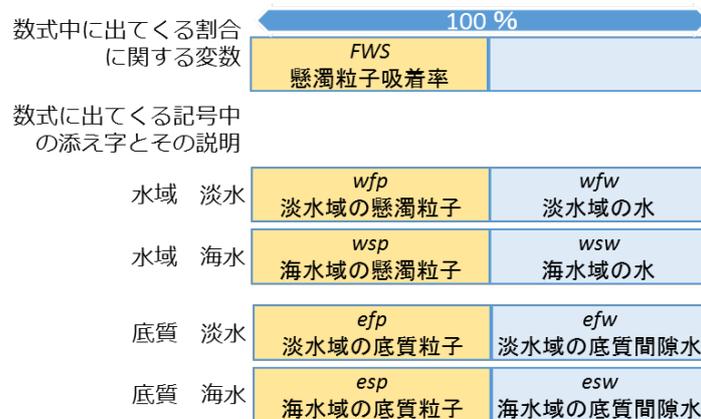
FSOA: 土壌空気中の物質質量/土壌中に存在する物質全量 (ガス態質量分布比)

FSOS: 土壌粒子中の物質質量/土壌中に存在する物質全量 (粒子吸着態質量分布比)

FSOW: 土壌間隙水中の物質質量/土壌中に存在する物質全量 (溶存態質量分布比)

iii) 水域及び底質

水域及び底質については、淡水域と海水域のpHの違いを考慮することを除き、従来の暴露評価モデルの構成要素に違いはない (図表 X-10)。



図表 X-10 水域及び底質の構成要素

iv) 植物

植物の解離性モデルでは、植物体内の電荷や pH によるイオン種への影響を考慮するため、Trapp (2009)¹に倣って、植物体内の細胞小器官を含めてモデル化する。Trapp (2009)¹では、植物細胞は細胞質と液胞で構成されると考えている。細胞の外は、アポプラスト (細胞膜の外側にある細胞壁と空間)である。また、植物は、植物細胞を構成する細胞質と液胞の他、

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

1 木部と師部から構成されるとしている。土壌間隙水は、毛根から植物体内に吸収され、油
2 性のカスパリー線の外側に存在する表皮細胞間の隙間（つまりアポプラスト）を自由に通る
3 ことができる（Mc Farlane, 1995¹）。根から吸収された水分を葉や茎へ運ぶ木部と葉から養
4 分を運ぶ師部は、このカスパリー線内側に存在する。

5 本章でも同様に、図表 X-11 に示すように、植物は細胞質、液胞、木部から構成されると
6 し、環境中化学物質は、細胞質を通じて植物体内に取り込まれるとする。師部は果実のモ
7 デル化のため使われているため、本章では考慮しない。



図表 X-11 本章における植物体内の構成要素

12 図表 X-12 に環境媒体 (xm)やそれを構成する要素 (xe)を示し、図表 X-13 に植物及び牛
13 体内の媒体 (xm)を示す。本章では数式中では、これらの媒体や要素を特定するために、変
14 数の添え字としてここで示した記号を用いる。なお、 xm と xe の総称として x を用いるこ
15 とがある。

③ 環境及び環境構成要素の特性データ

18 解離性モデルで考慮する環境及び植物等の構成要素の特性には、体積分率 (f)、pH、イ
19 オン強度 (I)、活量係数 (γ)、有機炭素含有率 (OC) がある。いずれも、図表 X-12 と図表
20 X-13 に示した各媒体やその構成要素ごとの値である。

図表 X-12 環境中の媒体 (xm)と構成要素 (xe)

環境媒体 (xm)		構成要素 (xe)			
	記号		構成要素の水 (xew) [*]	構成要素の粒子及びその近傍水 (xep) [*]	記号
大気	a	空気			aa
		粒子			ap
		水分 固体	○	○	apw aps

¹ Mc Farlane, J.C. (1995) Anatomy and Physiology of Plant Conductive Systems. In: Trapp, S. and Mc Farlane, C. (ed.), Plant Contamination; Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes, Lewis/CRC Press, Boca Raton, FL, 13-34.

			雲	○		<i>ac</i>
土壌	<i>s</i>		空気			<i>sa</i>
			水	○		<i>sw</i>
			粒子		○	<i>sp</i>
水域	淡水	<i>wf</i>	水	○		<i>wfw</i>
			懸濁粒子		○	<i>wfp</i>
	海水	<i>ws</i>	水	○		<i>wsw</i>
			懸濁粒子		○	<i>wsp</i>
底質	淡水	<i>ef</i>	水	○		<i>efw</i>
			懸濁粒子		○	<i>efp</i>
	海水	<i>es</i>	水	○		<i>esw</i>
			懸濁粒子		○	<i>esp</i>

※ 本章の解離性モデルで取り扱う環境構成要素であることを示す。

また、植物及び牛体内の媒体 (xm)は、図表 X-13 に示すとおりである。

図表 X-13 植物及び牛体内の媒体 (xm)

植物及び牛体内の媒体 (xm)		記号
植物	細胞質	<i>cytosol</i>
	木部	<i>xylem</i>
	液胞	<i>vacuole</i>
牛	牛の小腸	<i>cow</i>

i) 体積分率 (f)

環境媒体中の各要素 (xe)の体積分率 (f_{xe})を図表 X-14 に示す。

図表 X-14 環境媒体中の構成要素 (xe)の体積分率 (f_{xe})

記号	説明	単位	値	出典・参照先
f_{aa}	大気空気の体積分率	—	≒1	Franco and Trapp (2010), Sup. Table S1 ¹
f_{apw}	大気粒子水分の体積分率 (従来の暴露評価モデルでは0に設定)	—	2×10^{-11}	Franco and Trapp (2010), Sup. Table S1 ¹
f_{aps}	大気粒子固体の体積分率	—	2×10^{-11}	Franco and Trapp (2010), Sup. Table S1 ¹
f_{ac}	大気雲の体積分率 (従来の暴露評価モデルでは0に設定)	—	雨天時: 3×10^{-7}	Franco and Trapp (2010), Sup. Table S1 ^{1*} (晴天時は0とした)
f_{wfw}	淡水域の水の体積分率	—	≒1	Franco and Trapp

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
f_{wsw}	海水域の水の体積分率	—	—	(2010) ¹
f_{wfp}	淡水域の懸濁粒子の体積分率	—	2×10^{-5}	=CW _{ss} /RHO _{solid} V 章 p.102、p.106
f_{wsp}	海水域の懸濁粒子の体積分率	—	—	—
f_{efw}	淡水域の底質間隙水の体積分率	—	0.9	=Fwater _{susp} V 章 p.106
f_{esw}	海水域の底質間隙水の体積分率	—	—	—
f_{efp}	淡水域の底質粒子の体積分率	—	0.1	=Fsolid _{susp} V 章 p.106
f_{esp}	海水域の底質粒子の体積分率	—	—	—

※ Franco and Trapp (2010)¹では、大気中水蒸気量の想定値(7.5×10^{-6} [m³/m³])と大気柱雲水量 / 大気柱水蒸気量比 (900 [g/m²] / (2×10^4) [g/m²])の積を大気中の雲の体積分率(3×10^{-7})としている。

ii) 水素イオン濃度指数 (pH)

環境媒体中の構成要素の水 (xew)の pH_{xew} を図表 X-15 に示す。

図表 X-15 環境媒体中の構成要素の水 (xew)の pH_{xew}

記号	説明	単位	値	出典・参照先
pH_{apw}	大気粒子水分の pH	—	3	Franco and Trapp (2010) , Sup. Table S1 ¹
pH_{ac}	大気雲の pH	—	4.8	X.3.1.3 (4)
pH_{sw}	土壌間隙水の pH	—	5.9	X.3.1.3 (4)
pH_{wfw}	淡水域の水の pH	—	7.6	X.3.1.3 (4)
pH_{wsw}	海水域の水の pH	—	8.2	X.3.1.3 (4)
pH_{efw}	淡水域の底質間隙水の pH	—	7.6	X.3.1.3 (4)
pH_{esw}	海水域の底質間隙水の pH	—	8.2	X.3.1.3 (4)

Franco and Trapp (2010)¹は、土壌と底質では粒子中の有機物の影響により、それらの粒子近傍水とバルク水のpHは異なると仮定している。粒子近傍水のpHには、X.2.2.1 (3)③iii)～X.2.2.1 (3)③v)に示したK_{oc}回帰式のpHを調整して、最適化したpHを採用している (Franco and Trapp, 2008², Franco and Trapp, 2010¹)。

本章でも同様に、環境媒体中の構成要素の粒子近傍水 (xep)の pH_{xep} に Franco and Trapp (2010)¹の値を設定する。

大気と水域の粒子及びその近傍水 pH_{xep} は、その粒子が含まれる環境媒体要素の水の

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

² Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals. Environ. Chem., 27(10), 1995–2004.

1 pH_{xew} と同じとする。

2

3 $\text{pH}_{xep} = \text{pH}_{xew}$ 式 X-27

4

記号	説明	単位	値	出典・参照先
pH_{xep}	xep ごとの pH ^{※1}	—	—	Franco and Trapp (2010) ¹ , Franco et.al (2009) ² , Franco and Trapp (2008) ³
pH_{xew}	xew ごとの pH ^{※2}	—	—	図表 X-15

5 ※1 本式で対象にする環境媒体の構成要素の粒子及びその近傍水 (xep)は、大気中の粒子固体 (aps)、淡

6 水域の懸濁粒子 (wfp)、海水域の懸濁粒子 (wsp)である。

7 ※2 本式で対象にする環境媒体の構成要素の水 (xew)は、大気中の粒子水分 (apw)、淡水水 (wfw)、海水

8 水 (wsw)である。

9

10 土壌と底質粒子及びその近傍水の pH_{xep} は、以下の式で、その粒子が含まれる環境媒体要

11 素の水の pH_{xew} を用いて計算する。

12

13 酸：

14 $\text{pH}_{xep} = \text{pH}_{xew} - 0.6$ 式 X-28

15 塩基：

16 $\text{pH}_{xep} = 4.5$ 式 X-29

17 両性物質：

18 $\text{pH}_{xep} = 5$ 式 X-30

記号	説明	単位	値	出典・参照先
pH_{xep}	xep ごとの pH ^{※1}	—	—	Franco and Trapp (2010) ¹ , Franco et.al (2009) ² , Franco and Trapp (2008) ³
pH_{xew}	xew ごとの pH ^{※2}	—	—	図表 X-15

19 ※1 本式で対象にする環境媒体の構成要素の粒子及びその近傍水 (xep)は、土壌中の粒子 (sp)、淡水域の

20 底質粒子 (efp)、海水域の底質粒子 (esp)である。

21 ※2 本式で対象にする環境媒体の構成要素の水 (xew)は、土壌間隙水 (sw)、淡水域の底質間隙水 (efw)、

22 海水域の底質間隙水 (esw)である。

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

² Franco, A., Fu, W. and Trapp, S. (2009) Influence of Soil pH on the Sorption of Ionizable Chemicals: Modeling Advances. Environ. Tech. Chem., 28(3), 458–464.

³ Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals. Environ. Chem., 27(10), 1995–2004.

植物及び牛体内の媒体 (xm)ごとの pH_{xm} を図表 X-16 に示す。

図表 X-16 植物及び牛体内の各媒体 (xm)の pH_{xm}

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$pH_{cytosol}$	細胞質の pH	—	7	X.3.1.3 (2)⑦
$pH_{vacuole}$	液胞の pH	—	5.5	X.3.1.3 (2)⑦
pH_{xylem}	木部の pH	—	5.5	X.3.1.3 (2)⑦
pH_{cow}	牛の小腸の pH	—	7	X.3.1.3 (3)

iii) イオン強度 (I)

イオン強度 (I)は、溶液中の各イオン種 (ion) のモル濃度を (m_{ion} [mol/L])、その電荷を (Z_{ion})とした時、次式で表される。

$$I = \frac{1}{2} \times \sum_{ion} (m_{ion} \times z_{ion}^2) \quad (ion = \text{全てのイオン種}) \quad \text{式 X-31}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
I	イオン強度	mol/L	—	日本化学会, 2004 ¹
m_{ion}	溶液中の各イオンのモル濃度	mol/L	—	—
Z_{ion}	溶液中の各イオンの電荷	—	—	—

イオン強度は、環境媒体の要素の水分ごとの特性値である。本章では、Franco and Trapp (2010)²と同様に、大気中の粒子水分、雲、雨は同じイオン強度をもつことを仮定する。環境媒体 (xm)ごとのイオン強度 (I_{xm})を図表 X-17 に示す。

図表 X-17 環境媒体 (xm)のイオン強度 (I_{xm})

記号	説明	単位	値	出典・参照先
I_a	大気中のイオン強度	mol/L	2×10^{-4}	Franco and Trapp (2010), Sup. Table S1 ²
I_s	土壌のイオン強度	mol/L	0.03	Franco and Trapp (2010), Sup. Table S1 ²
I_{wf}	淡水域のイオン強度	mol/L	0.003	Franco and Trapp (2010), Sup. Table S1 ²
I_{ws}	海水域のイオン強度	mol/L	0.5	Franco and Trapp (2010), Sup. Table S1 ²
I_{ef}	淡水域底質のイオン強度	mol/L	0.003	Franco and Trapp (2010), Sup. Table S1 ²
I_{es}	海水域底質のイオン強度	mol/L	0.5	Franco and Trapp

¹ 日本化学会 (2004) 化学便覧 改訂 5 版, 基礎編. 丸善.

² Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
(2010), Sup. Table S1 ¹				

植物体内の媒体 (xm)ごとのイオン強度 (I_{xm})を図表 X-18 に示す。

図表 X-18 植物体内の各媒体 (xm)のイオン強度 (I_{xm})

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$I_{cytosol}$	細胞質のイオン強度	mol/L	0.3	X.3.1.3 (2)⑦ 図表 X-32
$I_{vacuole}$	液胞のイオン強度	mol/L	0.3	X.3.1.3 (2)⑦ 図表 X-32
I_{xylem}	木部のイオン強度	mol/L	0.01	X.3.1.3 (2)⑦ 図表 X-32

iv) 活量係数 (γ)

活量係数は、環境媒体の要素の水分ごとの特性値であり、粒子近傍水 (xep)の活量係数は、同じ要素の水に等しいと仮定する。イオン強度(I_{xm})は環境媒体 (xm)ごとの値であり、イオン強度から計算される活量係数も、 xm ごとの値である。非解離種 (n)の活量係数 ($\gamma_{xm,n}$)及びイオン種 (i) の活量係数 ($\gamma_{xm,i}$)は、それぞれ Setchenov 式である式 X-32 及び Debye-Hückel 式の Davis 近似式である式 X-33 で計算する。

$$\gamma_{xm,n} = 10^{k_s \times I_{xm}} \quad \text{式 X-32}$$

$$\log \gamma_{xm,i} = -A \times z_i^2 \times \left(\frac{\sqrt{I_{xm}}}{\sqrt{I_{xm}} + 1} - 0.3 \times I_{xm} \right) \quad \text{式 X-33}$$

ここで、 xm は、環境媒体 ($xm = a, s, wf, ws, ef, es$)、植物体内の各媒体 ($xm = cytosol, xylem, vacuole$)又は測定環境を表す。

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\gamma_{xm,n}$	xm ごとの非解離種活量係数	—	—	Franco and Trapp (2010) ¹
$\gamma_{xm,i}$	xm ごとのイオン種活量係数	—	—	Franco and Trapp (2010) ¹
k_s	Setchenov 係数	L/mol	0.3	Franco and Trapp (2010) ¹
A	Debye-Hückel 式定数	—	0.5	Franco and Trapp (2010) ¹ (20°C、1 気圧 における値)
Z_{ion}	当該物質のイオン種 (i)の電荷	—	—	化学物質情報
I_{xm}	xm ごとのイオン強度	mol/L	—	図表 X-17、図表 X-18

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

1 v) 粒子の密度 (ρ)

2 各環境媒体を構成する要素の粒子 (xep)の密度 (ρ_{xep})を図表 X-19 に示す。

3

4 図表 X-19 環境媒体を構成する粒子要素の密度 (ρ_{xep})

記号	説明	単位	値	出典・参照先
ρ_{aps}	大気粒子固体の密度	kg/L	1.5	= ρ_p [kg/m ³]/1000 V章 p.67
ρ_{sp}	土壌粒子の密度	kg/L	1.5	=DENsos V章 p.67
ρ_{efp}	淡水域の底質粒子の密度	kg/L	2.5	=RHOsolid[kg/m ³] /1000 V章 p.106、 p.107
ρ_{esp}	海水域の底質粒子の密度	kg/L	2.5	=RHOsolid[kg/m ³] /1000 V章 p.106、 p.107

5

6 vi) 有機炭素含有率 (OC)

7 各環境媒体を構成する要素の粒子 (xep)の有機炭素含有率 (OC_{xep})を図表 X-20 に示す。

8

9 図表 X-20 粒子 (xep)の有機炭素含有率 (OC_{xep})

記号	説明	単位	値	出典・参照先
OC_{aps}	大気粒子固体の有機炭素含有率	—	0.1	Franco and Trapp (2010) Sup. Table S1 ¹
OC_{sp}	土壌粒子の有機炭素含有率	—	0.04	=OCsos V章 p.67
OC_{wfp}	淡水域の懸濁粒子の有機炭素含有率	—	0.1	=FOCsusp V章 p.67
OC_{wsp}	海水域の懸濁粒子の有機炭素含有率	—	0.1	=FOCsusp V章 p.67
OC_{efp}	淡水域の底質粒子の有機炭素含有率	—	0.1	=FOCsusp V章 p.67
OC_{esp}	海水域の底質粒子の有機炭素含有率	—	0.1	=FOCsusp V章 p.67

10

11 (2) 化学種分率の計算

12 解離性物質は水中で一部又は完全に解離して、非解離種やイオン種を生じる。その化学
13 種の生じる割合、化学種分率 (ϕ)は、水の pH と酸及び塩基の酸解離定数 ($pK_{a,acid}$ 、
14 $pK_{a,base}$)から Henderson-Hasselbalch 式で算出できる。

15 非解離種 (n)、アニオン (a)及びカチオン (c)の化学種分率は、図表 X-21 に示す環境媒

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

1 体の構成要素と植物及び牛体内媒体 (x)ごとに計算する。x ごとの pH_xは、環境媒体の構成
2 要素の粒子及びその近傍水 (xep)については、式 X-27～式 X-30 (39～39 ページ)の方法で
3 推計し、それら以外については、図表 X-15 (38 ページ)及び図表 X-16 (40 ページ)の値を用
4 いる。

6 図表 X-21 化学種分率 (φ)を計算する環境媒体と植物及び牛体内媒体及びその構成要素 (x)

環境媒体と植物及び牛体内媒体 (xm)		構成要素 (xe)	構成要素の水 (xew)	構成要素の粒子及びその近傍水 (xep)	記号
大気		粒子	○	○	apw aps
		水分 固体			
		雲	○		ac
土壌		粒子		○	sp
		水	○		sw
水域	淡水	懸濁粒子		○	wfp
		水	○		wfw
	海水	懸濁粒子		○	wsp
		水	○		sws
底質	淡水	懸濁粒子		○	efp
		水	○		efw
	海水	懸濁粒子		○	esp
		水	○		esw
植物	細胞質	—	—	—	cytosol
	木部	—	—	—	xylem
	液胞	—	—	—	vacuole
牛	牛の小腸	—	—	—	cow

7
8 非解離性物質の計算を実施する場合には、x ごとの非解離種分率 (φ_{x,n})、アニオン種分率
9 (φ_{x,a})及びカチオン種分率 (φ_{x,c})はそれぞれ 1、0、0 となる。酸、塩基及び両性物質につい
10 ては、式 X-34～式 X-43 で計算する。

11
12 酸： 酸解離基をもつ物質

14
$$\phi_{x,n} = \frac{1}{1 + 10^{\text{pH}_x - \text{pK}_{a\text{acid}}}}$$
 式 X-34

15
$$\phi_{x,a} = 1 - \phi_{x,n}$$
 式 X-35

16
$$\phi_{x,c} = 0$$
 式 X-36

17
18
19

記号	説明	単位	値	出典・参照先
φ _{x,n}	x ごとの非解離種分率*	—	—	Franco and Trapp

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\phi_{x.a}$	x ごとのアニオン種分率 [*]	—	—	(2010) ¹ Franco and Trapp
$\phi_{x.c}$	x ごとのカチオン種分率 [*]	—	0	(2010) ¹ Franco and Trapp
pH_x	x ごとの pH [*]	—	—	(2010) ¹ 図表 X-15、図表 X-16、式 X-27～式 X-30
$\text{p}K_{a_{acid}}$	酸の酸解離定数	—	—	化学物質情報

※ 本式で対象にする媒体やそれを構成する要素 (x)は、大気中の粒子水分 (apw)、大気中の雲 (ac)、土壌間隙水 (sw)、淡水域の水 (wfw)、海水域の水 (sws)、大気中の粒子固体 (ap)、土壌中の粒子 (sp)、淡水域の懸濁粒子 (wfp)、海水域の懸濁粒子 (wsp)、淡水域の底質粒子 (efp)、海水域の底質粒子 (esp)、植物の細胞質 ($cytosol$)、植物の液胞 ($vacuole$)、植物の木部 ($xylem$)、牛の小腸 (cow)である。

塩基：塩基解離基をもつ物質

$$\phi_{x.n} = \frac{1}{1 + 10^{\text{p}K_{a_{base}} - \text{pH}_x}} \quad \text{式 X-37}$$

$$\phi_{x.a} = 0 \quad \text{式 X-38}$$

$$\phi_{x.c} = 1 - \phi_{x.n} \quad \text{式 X-39}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\phi_{x.n}$	x ごとの非解離種分率	—	—	Franco and Trapp (2010) ¹
$\phi_{x.a}$	x ごとのアニオン種分率	—	0	Franco and Trapp (2010) ¹
$\phi_{x.c}$	x ごとのカチオン種分率	—	—	Franco and Trapp (2010) ¹
$\text{p}K_{a_{base}}$	塩基の酸解離定数	—	—	化学物質情報
pH_x	x ごとの pH	—	—	図表 X-15、図表 X-16、式 X-27～式 X-30

※ 本式で対象にする環境媒体やそれを構成する要素 (x)は、大気中の粒子水分 (apw)、大気中の雲 (ac)、土壌間隙水 (sw)、淡水域の水 (wfw)、海水域の水 (sws)、大気中の粒子固体 (ap)、土壌中の粒子 (sp)、淡水域の懸濁粒子 (wfp)、海水域の懸濁粒子 (wsp)、淡水域の底質粒子 (efp)、海水域の底質粒子 (esp)、植物の細胞質 ($cytosol$)、植物の液胞 ($vacuole$)、植物の木部 ($xylem$)、牛の小腸 (cow)である。

両性物質 (双性イオン以外)：酸解離基と塩基解離基をもつ物質²

$$\phi_{x.n} = \frac{1}{1 + 10^{\text{pH}_x - \text{p}K_{a_{acid}}} + 10^{\text{p}K_{a_{base}} - \text{pH}_x}} \quad \text{式 X-40}$$

$$\phi_{x.a} = \phi_{x.n} \times 10^{\text{pH}_x - \text{p}K_{a_{acid}}} \quad \text{式 X-41}$$

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

² 両性物質の詳細については、X.2.1(2)を参照されたい。

$$\phi_{x,c} = \phi_{x,n} \times 10^{\text{p}K_{a,\text{base}} - \text{pH}_x} \quad \text{式 X-42}$$

2
3

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\phi_{x,n}$	x ごとの非解離種分率	—	—	Franco and Trapp (2010) ¹
$\phi_{x,a}$	x ごとのアニオン種分率	—	—	Franco and Trapp (2010) ¹
$\phi_{x,c}$	x ごとのカチオン種分率	—	—	Franco and Trapp (2010) ¹
pH_x	x ごとの pH	—	—	図表 X-15、図表 X-16、式 X-27～式 X-30
$\text{p}K_{a,\text{acid}}$	酸の酸解離定数	—	—	化学物質情報
$\text{p}K_{a,\text{base}}$	塩基の酸解離定数	—	—	化学物質情報

4 ※ 本式で対象にする環境媒体やそれを構成する要素 (x)は、大気中の粒子水分 (apw)、大気中の雲 (ac)、
5 土壌間隙水 (sw)、淡水域の水 (wfw)、海水域の水 (sw)、大気中の粒子固体 (ap)、土壌中の粒子 (sp)、
6 淡水域の懸濁粒子 (wfp)、海水域の懸濁粒子 (wsp)、淡水域の底質粒子 (efp)、海水域の底質粒子 (esp)、
7 植物の細胞質 ($cytosol$)、植物の液胞 ($vacuole$)、植物の木部 ($xylem$)、牛の小腸 (cow)である。

8

9 イオン種分率は、式 X-43 の示すようにアニオン種分率とカチオン種分率の和である。

10

$$\phi_{x,i} = \phi_{x,a} + \phi_{x,c} \quad \text{式 X-43}$$

12

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\phi_{x,i}$	x ごとのイオン種分率	—	—	—
$\phi_{x,a}$	x ごとのアニオン種分率	—	—	式 X-35、式 X-38、式 X-41
$\phi_{x,c}$	x ごとのカチオン種分率	—	—	式 X-36、式 X-39、式 X-42

13 ※ 本式で対象にする環境媒体やそれを構成する要素 (x)は、大気中の粒子水分 (apw)、大気中の雲 (ac)、
14 土壌間隙水 (sw)、淡水域の水 (wfw)、海水域の水 (sw)、大気中の粒子固体 (ap)、土壌中の粒子 (sp)、
15 淡水域の懸濁粒子 (wfp)、海水域の懸濁粒子 (wsp)、淡水域の底質粒子 (efp)、海水域の底質粒子 (esp)、
16 植物の細胞質 ($cytosol$)、植物の液胞 ($vacuole$)、植物の木部 ($xylem$)、牛の小腸 (cow)である。

17

18 (3) pH で補正が必要な化学物質に関するデータ

19 各媒体を構成する要素 (x)ごとの見かけの水に対する溶解度 ($WS_{x,e}$)は、非解離種の水に
20 対する溶解度 (モル) ($WS_{n,mol}$)を、式 X-4 (8 ページ)を用い pH で補正して求める。環境媒
21 体の構成要素と植物及び牛体内媒体 (x)ごとの見かけの 1-オクタノールと水との間の分配
22 係数 ($\log D_x$)は、非解離種及びイオン種の 1-オクタノールと水との間の分配係数 ($\log Pow_n$
23 と $\log Pow_i$)を、式 X-9 (12 ページ)を用い pH で補正して求める。補正には、対応する環境
24 媒体やその構成要素の pH (38 ページの図表 X-15 及び 40 ページの図表 X-16)を用いる。

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

1 なお、有機炭素補正土壌吸着係数 (K_{oc})には、実測値があればそれを用い、実測値がない
2 場合には、X.2.2.1 (3)③に示した回帰式により求めた非解離種とイオン種それぞれの K_{oc}
3 値を用いる。

5 (4) 大気粒子固体-空気分配係数 (K_{pn})と粒子固体-水分配係数 (K_{sw})

6 本章では大気粒子固体への分配を計算するために、粒子固体-水分配係数 (K_{sw})を用いる
7 (詳細は X.3.1.3 (1)②に説明)。非解離種の K_{sw} 算出には、大気粒子固体-空気分配係数 (K_{pn})
8 を用いる。 K_{pn} の算出には、V章のモデルで用いた Junge 式に基づく式 (式 X-45)を使用
9 する。また、参考までに、Harner と Bidleman の式に基づく Franco の式 (式 X-46)
10 (Harner and Bidleman,1998¹; Franco and Trapp,2008²)も以下に示す。

$$12 \quad K_{pn} = K_{pn,Junge} \quad \text{or} \quad K_{pn,Harner_and_Bidleman} \quad \text{式 X-44}$$

$$13 \quad K_{pn,Junge} = \frac{CJ \times SP}{VPL \times f_{aps}} \quad \text{式 X-45}$$

14 【参考】 Harner と Bidleman の式に基づく Franco の式

$$16 \quad K_{pn,Harner_and_Bidleman} = 0.54 \times \frac{Pow_n}{H_n} \times OC_{aps} \times \rho_{aps} \quad \text{式 X-46}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
K_{pn}	大気粒子固体-空気分配係数 [※]	—	—	X.3.1.3 (1)②
$K_{pn,Junge}$	Junge 式による K_{pn}	—	—	X.3.1.3 (1)②
$K_{pn,Harner_and_Bidleman}$	Harner and Bidleman 式による K_{pn}	—	—	X.3.1.3 (1)②
$CJ \times SP$	Junge 式の定数 (CJ)と浮遊粒子の表面積 (SP)の積	Pa	0.0001	V章 p.71
VPL	液体状態の 20℃における飽和蒸気圧又は過冷却液体状態の飽和蒸気圧	Pa	—	式 V-43、式 V-44
f_{aps}	大気粒子固体の体積分率	—	2×10^{-11}	図表 X-14
Pow_n	非解離種の 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	化学物質情報
H_n	非解離種の無次元ヘンリー係数	—	—	式 X-26
OC_{aps}	大気粒子固体の有機炭素含有率	—	0.1	図表 X-20
ρ_{aps}	大気粒子固体の密度	kg/L	1.5	図表 X-19

18 ※ K_{pn} の定義は以下のとおり。

¹ Harner, T. and Bidleman, T. F. (1998) Octanol-Air Partition Coefficient for Describing Particle/Gas Partitioning of Aromatic Compounds in Urban Air. Environ. Sci. Technol., 32(10), 1494–1502.

² Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals. Environ. Chem., 27(10), 1995–2004.

1 大気における粒子容量あたりの粒子吸着態の化学物質の濃度を $C_{adsorption/particle}$ [mg/m³-particle]、大気
2 におけるガス態の化学物質の濃度を C_g [mg/m³-air] とすると、 $Kp_n = C_{adsorption/particle} / C_g$

3
4 **Junge** 式の計算に用いる液体状態の 20℃における飽和蒸気圧又は過冷却液体状態の飽和
5 蒸気圧 (VPL)は、従来の暴露評価と同様に式 V-43 及び式 V-44 で計算する。

6 大気粒子固体 (aps)における、非解離種 (n)とイオン種 (i)の粒子固体-水分配係数
7 (Ksw_{aps})は、式 X-47 及び式 X-48 若しくは式 X-49 で計算する。 Ksw の単位は、粒子重量
8 当たりの化学物質質量[mg/kg]と、水中濃度[mg/L]の比[L/kg] として表されることも多いが、
9 本章では、Franco and Trapp (2010)¹に倣い、無次元量[L/L]としている。

10
11 非解離種の Ksw :

$$12 \quad Ksw_{aps,n} = Kp_n \times H_n \quad \text{式 X-47}$$

13
14 イオン種の Ksw :

15 Koc 又は Kd の実測値がある場合は、以下の式で算出する。

$$16 \quad Ksw_{aps,i} = Koc \times OC_{aps} \times \rho_{aps} \quad \text{式 X-48}$$

17
18 Koc 又は Kd の実測値がない場合は、以下の式で算出する。

$$19 \quad Ksw_{aps,i} = Koc_i \times OC_{aps} \times \rho_{aps} \quad \text{式 X-49}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$Ksw_{aps,n}$	非解離種の大気粒子固体- 水分配係数*	—	—	X.3.1.3 (1)②
$Ksw_{aps,i}$	イオン種の大気粒子-水分 分配係数*	—	—	X.3.1.3 (1)②
Kp_n	大気粒子固体-空気分配係 数	—	—	式 X-44
H_n	非解離種の無次元ヘンリ 一係数	—	—	式 X-26
Koc	有機炭素補正土壌吸着係 数	L/kg	—	化学物質情報
Koc_i	イオン種の有機炭素補正 土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
OC_{aps}	大気粒子固体の有機炭素 含有率	—	0.1	図表 X-20
ρ_{aps}	大気粒子固体の密度	kg/L	1.5	図表 X-19

23 ※ Ksw_{aps} の定義は以下のとおり。

24 大気における粒子容量あたりの粒子吸着態の化学物質の濃度を $C_{adsorption/particle}$ [mg/m³-particle]、水へ
25 の溶存態の化学物質の濃度を C_w [mg/m³-air] とすると、 $Ksw_{aps} = C_{adsorption/particle} / C_w$

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

1

2 (5) 大気中濃度及び沈着量の推計

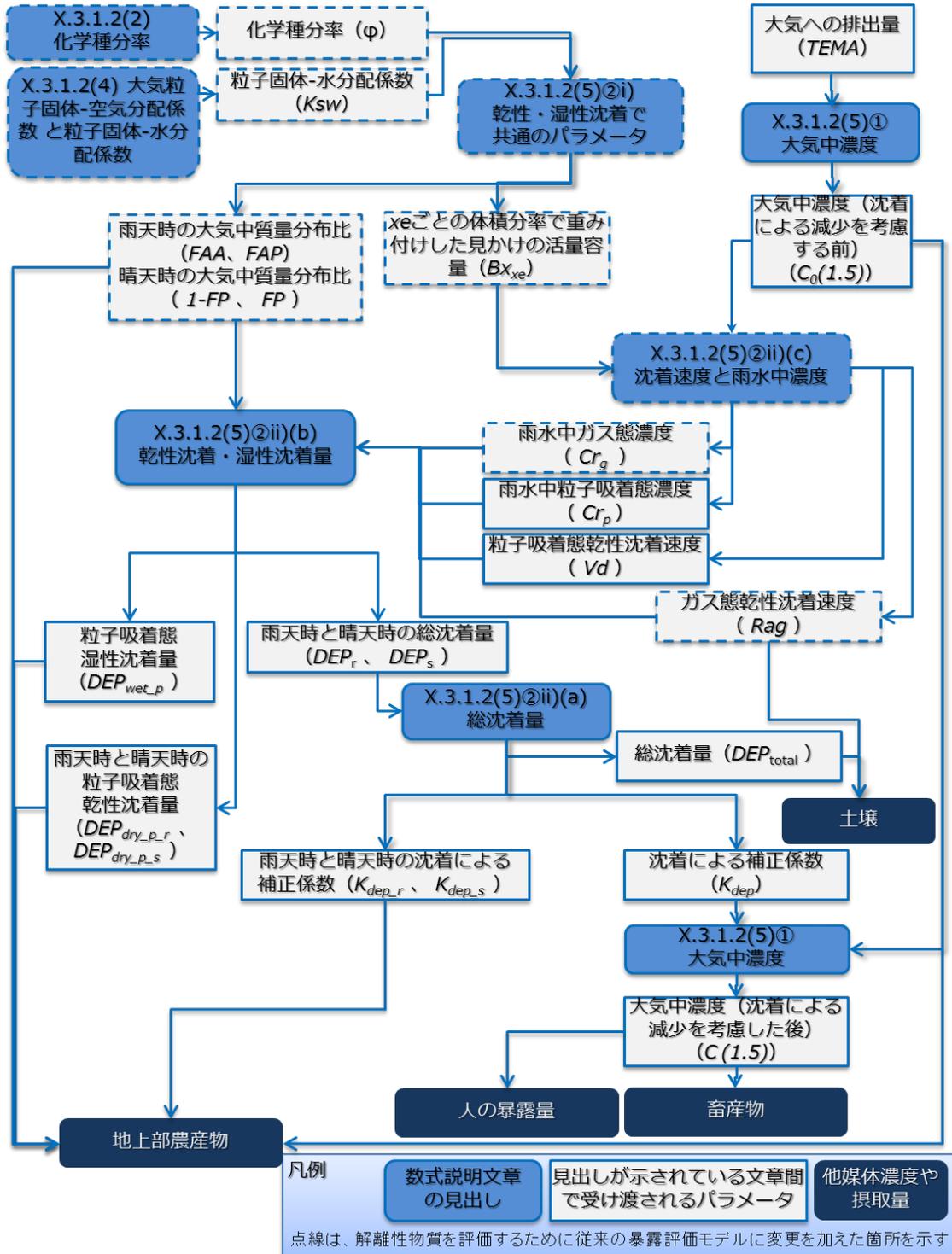
3 X.3.1.2 (5)では、大気中濃度及び沈着量の推計に用いる数式やパラメータについて説明す
4 る。

5 大気中濃度及び沈着量の推計の手順を図表 X-22 に示す。

6 従来の暴露評価モデルでは、大気中濃度（沈着による減少を考慮する前）($C_0(1.5)$)を計算
7 し、それに沈着による補正係数 (K_{dep})を考慮して、大気中濃度（沈着による減少を考慮した
8 後）($C(1.5)$)を計算している。また、土壌中濃度や地上部農作物中濃度の推計に、沈着量を
9 用いている。解離性モデルでは、沈着量の計算時に用いている大気における質量比 (FAA 、
10 FAP 、 $1-FP$ 、 FP)や雨水中ガス態濃度 (Cr_g)、ガス態乾性沈着速度 (Rag)等の計算に Franco
11 and Trapp (2010)¹の考え方を導入する。

12 なお、導入にあたっての考え方や方法については、X.3.1.3 (1)に述べる。

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.



図表 X-22 大気中濃度の計算手順要約図

① 大気中濃度

参照： V.7.3.1 大気中濃度と沈着量の推計

(1) 大気中濃度

大気中濃度（沈着による減少を考慮する前）($C_0(1.5)$)、排出量 (Q') [t/year]、大気中濃度

1 (沈着による減少を考慮した後) ($C(1.5)$)は、従来の暴露評価モデルと同様に式 V-38～式
2 V-40 によりモル濃度で計算する。

3

$$4 \quad C_0(1.5) = \frac{a \times Q'}{1000 \times M} \quad \text{式 V-38 置換 式 X-50}$$

$$5 \quad Q' = TEMA \times 10^{-3} \quad \text{再掲 式 V-39}$$

$$6 \quad C(1.5) = C_0(1.5) \times K_{dep} \quad \text{再掲 (単位を修正) 式 V-40}$$

7

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_0(1.5)$	大気中濃度 (沈着による減少を考慮する前)	mol/m ³	—	V 章 p.69
a	大気中濃度換算係数※1	mg/m ³ /(t/year)	※2	V 章 p.70
Q'	排出量	t/year	—	V 章 p.69
M	モル質量	g/mol	—	式 X-24
$TEMA$	評価対象物質の大気への排出量	kg/year	—	IV 章、V 章 p.69
$C(1.5)$	大気中濃度 (沈着による減少を考慮した後)	mol/m ³	—	V 章 p.69
K_{dep}	沈着による補正係数	—	—	式 V-52

8 ※1 アメダス気象観測データと METI-LIS (経済産業省—低煙源工場拡散モデル)を用いて計算した値

9 ※2 評価エリア半径により変化する (V.7.3.1(1) 図表 V-38)

10

11 ② 大気から土壌への沈着量

12 i) 乾性・湿性沈着で共通のパラメータ

13

参照： V.7.3.1 大気中濃度と沈着量の推計

14

(2) 大気から土壌への沈着量

15

① 乾性・湿性沈着で共通のパラメータ

16 大気中ガス態物質の質量分布比¹、大気中粒子吸着態物質の質量分布比² (雨に捕捉され
17 た粒子吸着物質を含まない) は、晴天時と雨天時で異なる。

18 晴天時の大気中ガス態質量分布比は、大気中ガス態質量分布比 ($FA=1-FP$)であり、雨天
19 時の場合は、雨天時の大気中ガス態質量分布比 (FAA)である。晴天時の大気中粒子吸着態
20 質量分布比は、大気粒子吸着態質量分布比 (FP)であり、雨天時の場合は、雨天時の大気中
21 粒子吸着態質量分布比 (FAP)である。

22 従来の暴露評価モデルは、晴天時にはガス態と粒子吸着態を考慮し、雨天時にはこれら
23 に加えて雨水を考慮している。解離性モデルでは、雲と粒子吸着態の水相への吸着を考慮
24 する。さらに、各媒体における非解離種とイオン種の存在割合を考慮し、X.3.1.3 (1)①で説
25 明するように、Franco and Trapp (2010)³ で導入された活量容量の考え方を取り入れて、

¹ 大気空間全体に存在する物質質量に対する、大気空気中存在する物質質量の比

² 大気空間全体に存在する物質質量に対する、大気粒子固体中存在する物質質量の比

³ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

1 以下の式 X-51～式 X-54 でこれら 4 つの質量比を計算する。

2 なお、式 X-51 ～式 X-54 の右辺の Bx_{xe} は xe ごとの体積分率で重み付けした見かけの
3 活量容量であり、式 X-55～式 X-58 で計算する。なお、 FP と $1-FP$ の右辺の分母は晴天時
4 の大気総活量容量、 FAA と FAP の右辺の分母は雨天時の大気総活量容量である。

5

$$6 \quad FP = \frac{Bx_{aps} + Bx_{apw}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw}} \quad \text{式 V-41 置換 式 X-51}$$

$$7 \quad 1 - FP = \frac{Bx_{aa}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw}} \quad \text{式 V-42 置換 式 X-52}$$

$$8 \quad FAA = \frac{Bx_{aa}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw} + Bx_{ac}} \quad \text{式 V-45 置換 式 X-53}$$

$$9 \quad FAP = \frac{Bx_{aps} + Bx_{apw}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw} + Bx_{ac}} \quad \text{式 V-46 置換 式 X-54}$$

10

記号	説明	単位	値	出典・参照先
FP	大気中粒子吸着態質量分布比	—	—	X.3.1.3 (1)④
$FA=1-FP$	大気中ガス態質量分布比	—	—	X.3.1.3 (1)④
FAA	雨天時の大気中ガス態質量分布比	—	—	X.3.1.3 (1)④
FAP	雨天時の大気中粒子吸着態質量分布比	—	—	X.3.1.3 (1)④
Bx_{xe}	xe ごとの体積分率で重み付けした見かけの活量容量 [※]	—	—	xe ごとに参照 aa : 式 X-55 aps : 式 X-56 apw : 式 X-57 ac : 式 X-58

11 ※ 本式で対象とする環境媒体の構成要素 (xe)は、大気中の空気 (aa)、大気中の粒子固体 (aps)、大気中
12 の粒子水分 (apw)、大気中の雲 (ac)である。

13

14 大気中の各構成要素における体積分率で重み付けした見かけの¹活量容量 (Bx_{xe})は以下
15 の式で計算する。

16

17 ガス態：

$$18 \quad Bx_{aa} = f_{aa} \times H_n \times \phi_{ac,n} \quad \text{式 X-55}$$

19 粒子固体：

$$20 \quad Bx_{aps} = f_{aps} \times \left(\frac{Ksw_{aps,n} \times \phi_{apw,n}}{\gamma_{an}} + \sum \frac{Ksw_{aps,i} \times \phi_{apw,i}}{\gamma_{ai}} \right) \quad \text{式 X-56}$$

21 粒子水分：

¹ 非解離種とイオン種の合計なので「見かけの」としている。

$$Bx_{apw} = f_{apw} \times \left(\frac{\phi_{apw.n}}{\gamma_{a.n}} + \sum \frac{\phi_{apw.i}}{\gamma_{a.i}} \right) \quad \text{式 X-57}$$

雲 :

$$Bx_{ac} = f_{ac} \times \left(\frac{\phi_{ac.n}}{\gamma_{a.n}} + \sum \frac{\phi_{ac.i}}{\gamma_{a.i}} \right) \quad \text{式 X-58}$$

4

記号	説明	単位	値	出典・参照先
BX_{xe}	xe ごとの体積分率で重み付けした見かけの活量容量 ^{※1}	—	—	X.3.1.3 (1)④
f_{xe}	xe ごとの体積分率 ^{※1}	—	xe ごとの値 $aa : \doteq 1$ $aps : 2 \times 10^{-11}$ $apw : 2 \times 10^{-11}$ $ac : 3 \times 10^{-7}$	図表 X-14
H_n	非解離種の無次元ヘンリー係数	—	—	化学物質情報
$\phi_{xe.n}$	xe ごとの非解離種分率 ^{※1}	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
$\phi_{xe.i}$	xe ごとのイオン種分率 ^{※1}	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
$K_{swaps.n}$	大気粒子固体における非解離種の粒子-水分配係数	—	—	式 X-47
$K_{swaps.i}$	大気粒子固体におけるイオン種の粒子-水分配係数	—	—	式 X-48
$\gamma_{xm.n}$	xm ごとの非解離種活量係数 ^{※2}	—	—	式 X-32
$\gamma_{xm.i}$	xm ごとのイオン種活量係数 ^{※2}	—	—	式 X-33

5 ※1 本式で対象にする環境媒体の構成要素 (xe)は、大気中の空気 (aa)、大気中の粒子固体 (aps)、大気
6 中の粒子水分 (apw)、大気中の雲 (ac)である。

7 ※2 本式で対象にする環境媒体の構成要素 (xm)は、大気 (a)である。

8

9 雨の日の1日当たり平均降水量(日平均降水量)(TRF)は、式 V-48により計算する。

10

11 ii) 沈着量

12 (a) 総沈着量 DEP_{total}

13

参照：V.7.3.1 大気中濃度と沈着量の推計

14

(2) 大気から土壌への沈着量

15

② 沈着量の推計

16

i) 総沈着量の推計

17

18 総沈着量 (DEP_{total})は、式 V-49により計算する。雨天時の沈着による補正係数 ($K_{dep,r}$)、

19 晴天時の沈着による補正係数 ($K_{dep,s}$)は、式 X-59と式 X-60のように、モルに換算して計

算する。沈着による補正係数 (K_{dep})は、式 V-52 で雨天時と晴天時の沈着による補正係数を用いて、計算する。また、それらを計算するために用いる評価対象エリア面積 (SUA)と排出量 (Q_d)は、式 V-53 と式 V-54 で計算する。

$$DEP_{total} = \frac{rainyday}{365} \times DEP_r \times K_{dep_r} + (1 - \frac{rainyday}{365}) \times DEP_s \times K_{dep_s} \text{ 再掲(単位を修正) 式 V-49}$$

$$K_{dep_r} = \frac{Q_d}{DEP_r \times M \times 1000 \times SUA} \times (1 - \exp(-\frac{DEP_r \times M \times 1000 \times SUA}{Q_d})) \text{ 式 V-50 置換 式 X-59}$$

$$K_{dep_s} = \frac{Q_d}{DEP_s \times M \times 1000 \times SUA} \times (1 - \exp(-\frac{DEP_s \times M \times 1000 \times SUA}{Q_d})) \text{ 式 V-51 置換 式 X-60}$$

$$K_{dep} = \frac{rainyday}{365} \times K_{dep_r} + (1 - \frac{rainyday}{365}) \times K_{dep_s} \text{ 再掲 式 V-52}$$

$$SUA = \pi \times ((R \times 1000)^2 - 100^2) \text{ 再掲 式 V-53}$$

$$Q_d = TEMA \times 10^6 / 365 \text{ 再掲式 V-54}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
DEP_{total}	総沈着量	mol/day/m ²	—	V章 p.74
$rainyday$	雨天日数	day/year	100	V章 p.67
DEP_r	雨天時の総沈着量	mol/day/m ²	—	式 V-55
K_{dep_r}	雨天時の沈着による補正係数	—	—	式 V-50
DEP_s	晴天時の総沈着量	mol/day/m ²	—	式 V-56
K_{dep_s}	晴天時の沈着による補正係数	—	—	式 V-51
Q_d	排出量 (mg/day)	mg/day	—	—
SUA	評価対象エリア面積	m ²	—	—
M	モル質量	g/mol	—	式 X-24
K_{dep}	沈着による補正係数	—	—	—
R	評価対象半径	km	1~10	—
$TEMA$	評価対象物質の大気への排出量	kg/year	—	—

(b) 乾性沈着・湿性沈着量

参照： V.7.3.1 大気中濃度と沈着量の推計

(2) 大気から土壌への沈着量

② 沈着量の推計

ii) 乾性沈着量・湿性沈着量の推計

晴天時の総沈着量 (DEP_s)と雨天時の総沈着量 (DEP_r)は、式 V-55 と式 V-56 により計算する。

$$DEP_r = DEP_{dry_g_r} + DEP_{dry_p_r} + DEP_{wet_g} + DEP_{wet_p} \text{ 再掲 (単位を修正) 式 V-55}$$

$$DEP_s = DEP_{dry_g_s} + DEP_{dry_p_s} \text{ 再掲 (単位を修正) 式 V-56}$$

1

記号	説明	単位	値	出典・参照先
DEP_r	雨天時の総沈着量	mol/day/m ²	—	V章 p.75
DEP_s	晴天時の総沈着量	mol/day/m ²	—	V章 p.75
$DEP_{dry_g_r}$	雨天時のガス態乾性沈着量	mol/day/m ²	—	式 V-57
$DEP_{dry_p_r}$	雨天時の粒子吸着態乾性沈着量	mol/day/m ²	—	式 V-58
$DEP_{dry_g_s}$	晴天時のガス態乾性沈着量	mol/day/m ²	—	式 V-59
$DEP_{dry_p_s}$	晴天時の粒子吸着態乾性沈着量	mol/day/m ²	—	式 V-60
DEP_{wet_g}	ガス態湿性沈着量	mol/day/m ²	—	式 V-61
DEP_{wet_p}	粒子吸着態湿性沈着量	mol/day/m ²	—	式 V-62

2

3 雨天時のガス態乾性沈着量 ($DEP_{dry_g_r}$)、雨天時の粒子吸着態乾性沈着量 ($DEP_{dry_p_r}$)、
4 晴天時のガス乾性沈着量 ($DEP_{dry_g_s}$)、晴天時の粒子吸着態乾性沈着量 ($DEP_{dry_p_s}$)、ガス
5 態湿性沈着量 (DEP_{wet_g})及び粒子吸着態湿性沈着量 (DEP_{wet_p})は、式 V-57～式 V-62 によ
6 り計算する。

7

8	$DEP_{dry_g_r} = C_0(1.5) \times FAA \times Rag$	再掲 (単位を修正)	式 V-57
9	$DEP_{dry_p_r} = C_0(1.5) \times FAP \times V_d$	再掲 (単位を修正)	式 V-58
10	$DEP_{dry_g_s} = C_0(1.5) \times (1 - FP) \times Rag$	再掲 (単位を修正)	式 V-59
11	$DEP_{dry_p_s} = C_0(1.5) \times FP \times V_d$	再掲 (単位を修正)	式 V-60
12	$DEP_{wet_g} = Cr_g \times TRF$	再掲 (単位を修正)	式 V-61
13	$DEP_{wet_p} = Cr_p \times TRF$	再掲 (単位を修正)	式 V-62

14

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$DEP_{dry_g_r}$	雨天時のガス態乾性沈着量	mol/day/m ²	—	V章 p.75-76
$DEP_{dry_p_r}$	雨天時の粒子吸着態乾性沈着量	mol/day/m ²	—	V章 p.75-76
$DEP_{dry_g_s}$	晴天時のガス態乾性沈着量	mol/day/m ²	—	V章 p.75-76
$DEP_{dry_p_s}$	晴天時の粒子吸着態乾性沈着量	mol/day/m ²	—	V章 p.75-76
DEP_{wet_g}	ガス態湿性沈着量	mol/day/m ²	—	V章 p.75-76
DEP_{wet_p}	粒子吸着態湿性沈着量	mol/day/m ²	—	V章 p.75-76
$C_0(1.5)$	大気中濃度 (沈着による減少を考慮する前)	mol/m ³	—	式 V-38
FAA	雨天時の大気中ガス態質量分布比	—	—	式 X-53
FAP	雨天時の大気中粒子吸着態質量分布比	—	—	式 X-54
Rag	ガス態乾性沈着速度	m/day	—	式 X-61
V_d	粒子吸着態乾性沈着速度 (1日当たり)	m/day	—	式 V-65
FP	大気中粒子吸着態質量分布比	—	—	式 X-51

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$I-FP$	大気中ガス態質量分布比	—	—	式 X-52
Cr_g	雨水中ガス態濃度	mol/m ³	—	式 X-62
Cr_p	雨水中粒子吸着態濃度	mol/m ³	—	式 V-68
TRF	日平均降水量	m/day	0.015	式 V-48

(c) 沈着速度と雨水中濃度

参照：V.7.3.1 大気中濃度と沈着量の推計

(2) 大気から土壌への沈着量

② 沈着量の推計

iii) 沈着速度と雨水中濃度の推計

ガス態乾性沈着量の計算に用いるガス態乾性沈着速度 (R_{ag})は、解離性を考慮した式 X-61 を用いて計算する。

$$R_{ag} = \frac{KG \times KASLSA + \frac{KG \times KASLSW}{H_n \times \phi_{sw,n}}}{KG + KASLSA + \frac{KASLSW}{H_n \times \phi_{sw,n}}} \quad \text{式 V-63 置換 式 X-61}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
R_{ag}	ガス態乾性沈着速度	m/day	—	X.3.1.3 (1)④
KG	気相質量移動係数	m/day	—	式 V-64
$KASLSA$	土壌中空気質量移動係数	m/day	0.48	V章 p.77、p.83
$KASLSW$	土壌中水質量移動係数	m/day	4.8×10^{-5}	V章 p.77、p.83
H_n	非解離種の無次元ヘンリー係数	—	—	化学物質情報
$\phi_{sw,n}$	土壌間隙水の非解離種分率	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。

気相質量移動係数 (KG)、粒子吸着態乾性沈着速度 (Vd)及び重力沈降速度 (Vs)は、式 V-64、式 V-65、式 V-66 により計算する。

雨水中ガス態濃度 (Cr_g)は、雲中のガス態濃度と同じであるとし、式 X-62 で計算する。
雨水中粒子吸着態濃度 (Cr_p)は、従来どおり、大気粒子の一部が雨水中に捕集されるとして、式 V-68 により計算する。

$$Cr_g = Ca_0 \times \frac{Bx_{ac}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw} + Bx_{ac}} \times \frac{1}{f_{ac}} \quad \text{式 V-67 置換 式 X-62}$$

$$Cr_p = Ca_0 \times FAP \times CEP \quad \text{再掲 (単位を修正) 式 V-68}$$

$$Ca_0 = \frac{C_0(1.5)}{Kc} \quad \text{再掲 (単位を修正) 式 V-69}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
Cr_g	雨水中ガス態濃度	mol/m ³	—	X.3.1.3 (1)④

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{rp}	雨水中粒子吸着態濃度	mol/m ³	—	V章 p.79
C_{ao}	大気柱 ^{※1} 中化学物質平均濃度 (沈着による減少を考慮する前)	mol/m ³	—	V章 p.79
B_{xe}	xe ごとの体積分率で重み付けした見かけの活量容量 ^{※2}	—	—	xe ごとに参照 aa : 式 X-55 aps : 式 X-56 apw : 式 X-57 ac : 式 X-58
f_{xe}	xe ごとの体積分率 ^{※2}	—	xe ごとの値 aa : ≈ 1 aps : 2×10^{-11} apw : 2×10^{-11} ac : 3×10^{-7}	図表 X-14
FAP	雨天時の大気中粒子吸着態量分布比	—	—	式 X-54
CEP	浮遊粒子の捕集率	—	2×10^5	V章 p.79
Kc	大気柱 ^{※1} 中濃度への換算係数	—	2.4	V章 p.79
$C_0(1.5)$	大気中濃度 (沈着による減少を考慮する前)	mol/m ³	—	式 V-38

1 ※1 雨水中濃度を求める際には、地表から十分な高さまでの大気中の柱を想定し、その柱の中の濃度平均値
2 である「大気柱中化学物質平均濃度」 C_{ao} を用いる。

3 ※2 本式で対象にする環境媒体の構成要素 (xe)は、大気中の空気 (aa)、大気粒子固体 (aps)、大気粒
4 子水分 (apw)、雲 (ac)である。

5

6 (6) 土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計

7 X.3.1.2 (6)では土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計に用いる数式やパラメータにつ
8 いて説明する。土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計の手順を図表 X-23 に示す。

9 従来の暴露評価モデルでは、大気からの総沈着量 (DEP_{total})と土壌における消失の1次速
10 度定数 (k)から土壌中濃度を推計し、土壌-水分配係数 ($K_{soil\ water}$)を用いて土壌間隙水中濃
11 度を推計している。

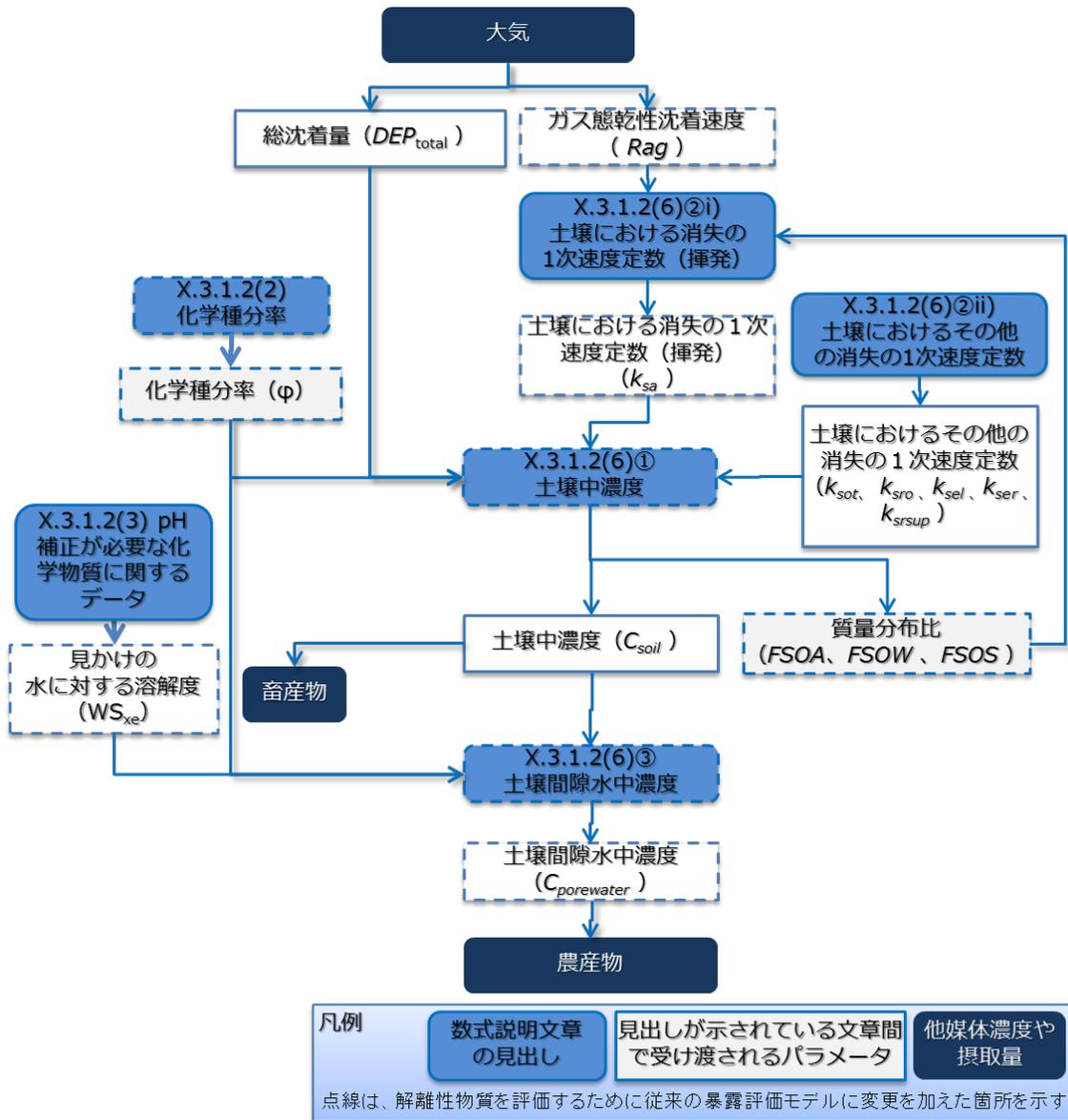
12 解離性モデルでは、土壌における消失の1次速度定数 (揮発) (k_{sa})の計算や土壌における
13 質量分布比 ($FSOA$ 、 $FSOW$ 、 $FSOS$)、土壌-水分配係数 ($K_{soil\ water}$)等の計算に Franco and
14 Trapp (2010)¹の考え方を導入する。

15 なお、導入にあたっての考え方や方法については、X.3.1.3 (1)に述べる。

16

17

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.



図表 X-23 土壌中濃度の計算手順要約図

① 土壌中濃度 C_{soil}

参照： V.7.3.2 土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計

(1) 土壌中濃度

沈着量から土壌中濃度 (10年平均) (C_{soil})と総沈着量 (土壌 1kg 当たり) (D_{air})は、式 V-74 と式 V-73 により計算する。

$$C_{soil} = \frac{D_{air}}{k_{soil}} - \frac{D_{air} \times (1 - e^{-k_{soil} \times T})}{k_{soil}^2 \times T}$$

再掲 (単位を修正) 式 V-73

1
$$D_{air} = \frac{DEP_{total}}{BD_{soil} \times DEP_{so}}$$
 再掲 (単位を修正) 式 V-74

2
3

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{soil}	土壌中濃度 (10年平均)	mol/kg	—	V章 p.80-81
D_{air}	総沈着量 (土壌 1kg 当たり)*	mol/kg/day	—	式 V-74
k_{soil}	土壌における消失の総1次速度定数	1/day	—	式 V-76
T	平均化期間	day	3650	V章 p.81
DEP_{total}	総沈着量	mol/day/m ²	—	式 V-49□
BD_{soil}	土壌バルク密度	kg/m ³	—	—
DEP_{so}	土壌深度	m	0.2	—

4 ※ 総沈着量は地表面積 1 [m²] 当たり、土壌 1 [kg] 当たりの総沈着量を示す。

5

6 土壌バルク密度 (BD_{soil})は、式 V-75 により計算する。

7 土壌における消失の総 1 次速度定数 (k_{soil})も従来と同様に、式 V-76 で計算する。

8

9
$$k_{soil} = k_{sa} + (k_{sro} + k_{sle}) \times FSOW + (k_{srsup} + k_{ser}) \times FSOS + k_{sot}$$
 再掲 (一部数式を修正) 式 V-76

10

記号	説明	単位	値	出典・参照先
k_{soil}	土壌における消失の総 1 次速度定数	1/day	—	V章 p.81-82
k_{sa}^{**}	土壌における消失の 1 次速度定数 (揮発)	1/day	—	= K_{sa} 、式 V-80、式 X-69
k_{sro}^{**}	土壌における消失の 1 次速度定数 (表面流出)	1/day	—	= K_{sro} 、式 V-89
k_{sle}^{**}	土壌における消失の 1 次速度定数 (溶脱)	1/day	—	= K_{sle} 、式 V-91
$FSOW$	溶存態質量分布比	—	—	式 X-64、式 X-67
k_{srsup}^{**}	土壌における消失の 1 次速度定数 (巻上げ)	1/day	—	= K_{srsup} 、式 V-95
k_{ser}^{**}	土壌における消失の 1 次速度定数 (浸食)	1/day	—	= K_{ser} 、式 V-94
$FSOS$	粒子吸着態質量分布比	—	—	式 X-65、式 X-68
k_{sot}^{**}	土壌における消失の 1 次速度定数 (分解)	1/day	—	= K_{sot} 、式 V-85、式 V-86、式 V-87

11 ※ V章では、これらの速度定数を大文字の K で表記したが、本章では速度定数には小文字の k
12 を用いる。

13

14 土壌におけるガス態、溶存態及び粒子吸着態への化学物質の質量分布比 ($FSOA$ 、 $FSOW$ 、
15 $FSOS$)は、 Koc の実測値の有無により、式 X-63、式 X-64、式 X-65 又は式 X-66、式 X-67、
16 式 X-68 で計算する。

17

18 Koc 又は Kd の実測値がある場合は、以下の式で算出する。

19

20
$$FSOA = \frac{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF}{(H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp})}$$
 式 V-77 置換 式 X-63

$$FSOW = \frac{SOWF}{(H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp})} \quad \text{式 V-78 置換 式 X-64}$$

$$FSOS = \frac{Koc \times OC_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}}{(H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp})} \quad \text{式 V-79 置換 式 X-65}$$

Koc 又は *Kd* の実測値がない場合は、以下の式で算出する。

$$FSOA = \frac{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF}{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + \left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{s,n}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{s,i}} \right) \times SOWF + \left(\frac{Koc_n \times OC_{sp} \times \phi_{sp,n}}{\gamma_{s,n}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{sp} \times \phi_{sp,i}}{\gamma_{s,i}} \right) \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}} \quad \text{式 V-77 置換 式 X-66}$$

$$FSOW = \frac{\left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{s,n}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{s,i}} \right) \times SOWF}{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + \left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{s,n}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{s,i}} \right) \times SOWF + \left(\frac{Koc_n \times OC_{sp} \times \phi_{sp,n}}{\gamma_{s,n}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{sp} \times \phi_{sp,i}}{\gamma_{s,i}} \right) \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}} \quad \text{式 V-78 置換 式 X-67}$$

$$FSOS = \frac{\left(\frac{Koc_n \times OC_{sp} \times \phi_{sp,n}}{\gamma_{s,n}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{sp} \times \phi_{sp,i}}{\gamma_{s,i}} \right) \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}}{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + \left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{s,n}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{s,i}} \right) \times SOWF + \left(\frac{Koc_n \times OC_{sp} \times \phi_{sp,n}}{\gamma_{s,n}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{sp} \times \phi_{sp,i}}{\gamma_{s,i}} \right) \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}} \quad \text{式 V-79 置換 式 X-68}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
<i>FSOA</i>	ガス態質量分布比	—	—	X.3.1.3 (1)⑤
<i>FSOW</i>	溶存態質量分布比	—	—	X.3.1.3 (1)⑤
<i>FSOS</i>	粒子吸着態質量分布比	—	—	X.3.1.3 (1)⑤
<i>SOAF</i>	土壌空気容積比	—	0.2	V 章 p.67
<i>SOWF</i>	土壌間隙水容積比	—	0.3	V 章 p.67
<i>H_n</i>	非解離種の無次元ヘンリー係数	—	—	式 X-26
<i>Koc</i>	有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
<i>Koc_n</i>	非解離種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
<i>Koc_i</i>	イオン種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
<i>OC_{sp}</i>	土壌粒子の有機炭素含有率	—	0.04	図表 X-20
<i>ρ_{sp}</i>	土壌粒子の密度	kg/L	1.5	図表 X-19
<i>φ_{xe,n}</i>	<i>xe</i> ごとの非解離種分率※1	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
<i>φ_{xe,i}</i>	<i>xe</i> ごとのイオン種分率※1	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
<i>γ_{xm,n}</i>	<i>xm</i> ごとの非解離種活量係数※2	—	—	式 X-32
<i>γ_{xm,i}</i>	<i>xm</i> ごとのイオン種活量係数※2	—	—	式 X-33

※1 本式で対象にする環境媒体の構成要素 (*xe*)は、土壌間隙水 (*sw*)、土壌中の粒子 (*sp*)である。

※2 本式で対象にする環境媒体 (*xm*)は、土壌 (*s*)である。

② 土壌における消失の総1次速度定数 k_{soil}^1

i) 土壌における消失の1次速度定数(揮発) k_{sa}^1

参照： V.7.3.2 土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計

(2) 土壌における消失の総1次速度定数

① 土壌における揮発の1次速度定数(K_{sa})

土壌における消失の1次速度定数(揮発)(k_{sa})の算出には以下の式 X-69 を使用する。

$$k_{sa} = \frac{FSOA \times R_{ag}}{SOAF \times DEP_{SO}} \quad \text{式 V-80 置換 式 X-69}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
k_{sa}	土壌における消失の1次速度定数(揮発)	1/day	—	X.3.1.3 (1)⑥
$FSOA$	ガス態質量分布比	—	—	式 X-63、式 X-66
R_{ag}	ガス態乾性沈着速度	m/day	—	式 X-61
$SOAF$	土壌空気容積比	—	0.2	V章 p.67
DEP_{SO}	土壌深度	m	0.2	V章 p.67

ii) 土壌におけるその他の消失の1次速度定数 $k_{sot}, k_{sro}, k_{sel}, k_{ser}, k_{srsup}^1$

参照： V.7.3.2 土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計

(2) 土壌における消失の総1次速度定数

②～⑥

土壌における消失の1次速度定数(分解)(k_{sot})は、式 V-82～V-88 により計算する。土壌における消失の1次速度定数(表面流出)(k_{sro})は式 V-89 と V-90 により計算する。土壌における消失の1次速度定数(溶脱)(k_{sel})は式 V-91～V-93 により計算する。土壌における消失の1次速度定数(浸食)(k_{ser})は式 V-94 により計算する。土壌における消失の1次速度定数(巻上げ)(k_{srsup})は式 V-95 により計算する。

③ 土壌間隙水中濃度 $C_{porewater}$

参照： V.7.3.2 土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計

(3) 土壌間隙水中濃度

土壌間隙水中濃度($C_{porewater}$)は、式 V-96 により計算する。

$$C_{porewater} = \frac{C_{soil} \times \frac{BD_{soil}}{1000}}{K_{soil_water}} \quad \text{再掲 式 V-96}$$

¹ V章では1次速度定数を大文字の K で表していたが、本章では分配係数に用いる大文字の K との区別をするため小文字の k を用いる。

1

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{porewater}$	土壌間隙水中濃度	mol/L	※	V章 p.88
C_{soil}	土壌中濃度 (10年平均)	mol/kg	—	V章 p.80-81
BD_{soil}	土壌バルク密度	kg/m ³	—	式 V-75
$K_{soil-water}$	土壌-水分配係数	—	—	式 X-70
WS_{sw}	土壌間隙水での見かけの水に対する溶解度※	mol/L	—	X.3.1.2 (3)

2 ※ 本章では、土壌間隙水中濃度の上限値として、土壌間隙水での見かけの水に対する溶解度 (WS_{sw})
3 を採用する。

4

5 Koc 又は Kd の実測値がある場合は、以下の式で算出する。

6

$$K_{soil-water} = H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sp} \times \rho_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF)$$

式 V-97 置換 式 X-70

9

10 Koc 又は Kd の実測値がない場合は、以下の式で算出する。

11

$$K_{soil-water} = \frac{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + \left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{s,n}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{s,i}} \right) \times SOWF + \left(\frac{Koc_n \times OC_{sp} \times \phi_{sp,n}}{\gamma_{s,n}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{sp} \times \phi_{sp,i}}{\gamma_{s,i}} \right) \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}}{\left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{s,n}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{s,i}} \right)}$$

式 V-97 置換 式 X-71

13

14

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{soil-water}$	土壌-水分配係数	—	—	X.3.1.3 (1)⑦
H_n	非解離種の無次元ヘンリー係数	—	—	式 X-26
$SOAF$	土壌空気容積比	—	0.2	V章 p.67
$SOWF$	土壌間隙水容積比	—	0.3	V章 p.67
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
Koc_n	非解離種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
Koc_i	イオン種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
OC_{sp}	土壌粒子の有機炭素含有率	—	0.04	図表 X-20
ρ_{sp}	土壌粒子の密度	kg/L	1.5	図表 X-19
$\phi_{xe,n}$	xe ごとの非解離種分率※1	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
$\phi_{xe,i}$	xe ごとのイオン種分率※1	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
$\gamma_{xm,n}$	xm ごとの非解離種活量係数※2	—	—	式 X-32
$\gamma_{xm,i}$	xm ごとのイオン種活量係数※2	—	—	式 X-33

15 ※1 本式で対象にする環境媒体の構成要素 (xe)は、土壌間隙水 (sw)、土壌中の粒子 (sp)である。

1 ※2 本式で対象にする環境媒体 (xm)は、土壌 (s)である。

2

3 (7) 農作物中濃度の推計

4 X.3.1.2 (7) では、農作物中濃度の推計に用いる数式やパラメータについて説明する。農
5 作物中濃度の推計の手順を図表 X-24 に示す。

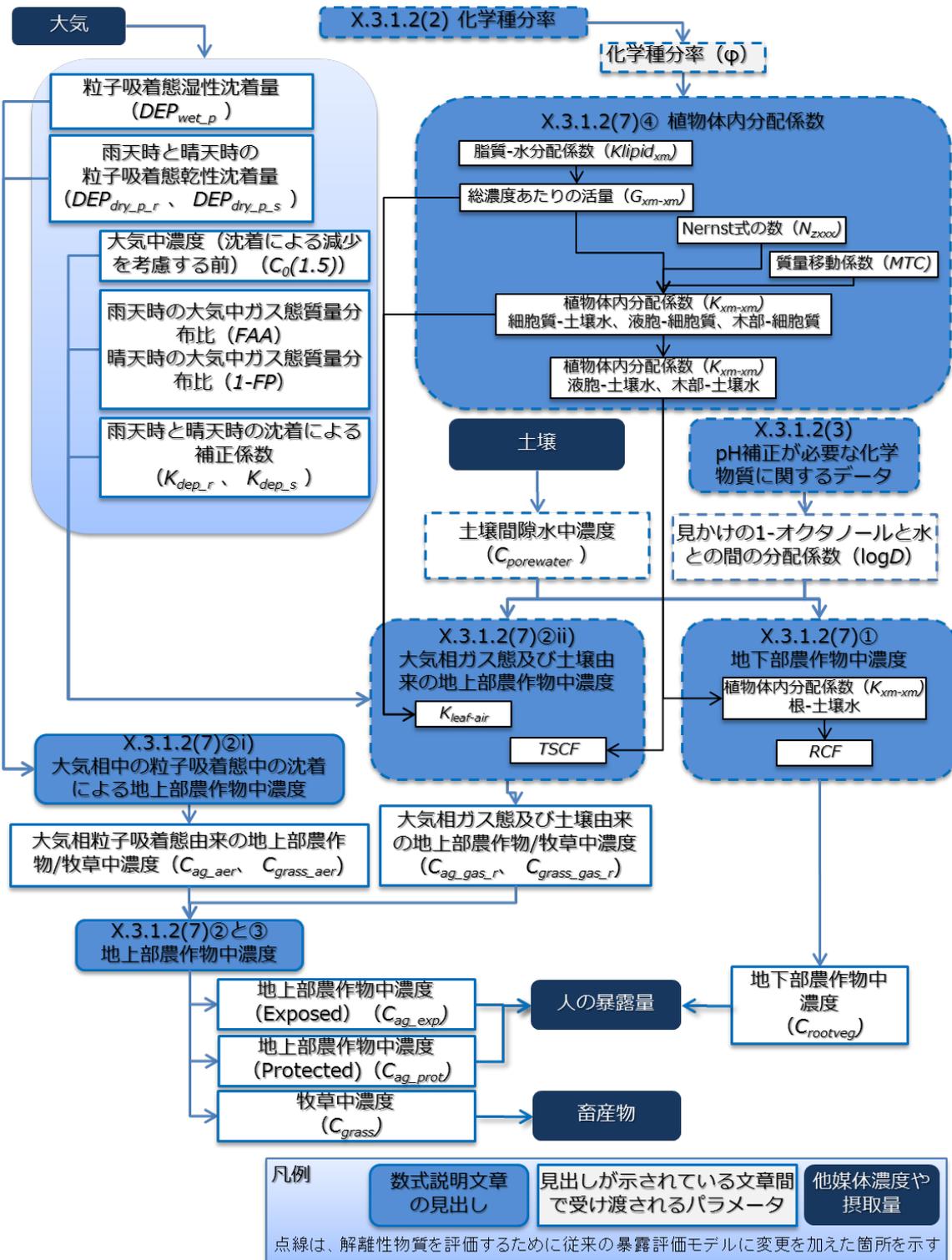
6 従来の暴露評価モデルでは、地上部農作物中濃度の推計時に、大気中の粒子吸着態物質
7 の沈着、ガス態物質の吸収及び根からの化学物質の吸収による取り込みを考慮している。

8 解離性モデルでは、粒子吸着態の沈着については従来どおりの方法で推計し、地下部農
9 作物中濃度の推計と地上部農作物中濃度推計において、ガス態の吸収 ($K_{leaf-air}$)及び根から
10 の吸収による取り込み ($TSCF$ 、 RCF)の計算に、Trapp (2009)¹による解離性物質の植物モ
11 デルを用いて計算した植物体内分配係数 (X.3.1.2 (7)④)を導入することにより、植物体内構
12 成要素ごとの pH による化学種分率、非解離種とイオン種の動態の違い及びイオン強度によ
13 る影響を考慮する。

14 なお、導入にあたっての考え方や方法については、X.3.1.3 (2)に述べる。

15

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.



図表 X-24 農作物中濃度計算手順

① 地下部農作物中濃度

参照：V.7.3.3 農作物中濃度の推計

(1) 地下部農作物中濃度

地下部農作物中濃度は、式 V-98 により計算する。

$$C_{rootveg} = C_{porewater} \times RCF \times VG_{rootveg} \quad \text{再掲 (単位を修正) 式 V-98}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{rootveg}$	地下部農作物中濃度	mol/kg	—	V 章 p.90
$C_{porewater}$	土壌間隙水中濃度	mol/L	—	式 V-96
RCF	地下部農作物濃縮係数	L/kg	—	式 X-72
$VG_{rootveg}$	地下部農作物の補正係数	—	※	HHRAP 5.3.3 ¹ Equation 5-20B

※ $VG_{rootveg}$ は、土壌間隙水 (pH5.9)での見かけの 1-オクタノールと水との間の分配係数 ($\log D_{sw}$) ≥ 4 の場合は「0.01」、 $\log D_{sw} < 4$ の場合は「1.0」とする。($\log D_{sw}$ の計算方法は X.3.1.2 (3)に記載)

従来の暴露評価モデルにおける非解離性物質の RCF を推計する式 V-99 と V-100 は、実測値に基づく回帰式である。解離性物質の RCF については、Trapp (2009)² の解離性物質の植物モデルから導出した式 X-72 により推計する。

$$RCF = K_{root-sw} \quad \text{V-99 と V-100 置換 式 X-72}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
RCF	地下部農作物濃縮係数	L/kg	—	X.3.1.3 (2)②
$K_{root-sw}$	根-土壌間隙水分配係数	L/kg	—	式 X-73

根-土壌間隙水分配係数 ($K_{root-sw}$) は式 X-73 により推計する。根の主要成分と仮定している液胞と細胞質の分配係数の容積による加重平均である。また、根の密度で補正し重量濃度となる様補正している。

$$K_{root-sw} = \frac{K_{cytosol-sw} \times V_{cytosol} + K_{vacuole-sw} \times V_{vacuole}}{V_{cytosol} + V_{vacuole}} \div \rho_{root} \quad \text{式 X-73}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{root-sw}$	根-土壌間隙水分配係数	L/kg	—	X.3.1.3 (2)②
$K_{cytosol-sw}$	木部-土壌間隙水分配係数	—	—	式 X-78
$V_{cytosol}$	細胞質体積	L	0.1	図表 X-32
$K_{vacuole-sw}$	液胞-土壌間隙水分配係数	—	—	式 X-76
$V_{vacuole}$	液胞体積	L	0.9	図表 X-32
ρ_{root}	根の密度	kg/L	1	Trapp (2000) ³

¹ HHRAP : U.S.EPA (2005) Humam Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities Final, EPA530-R-05-006. (section 5.3.3)

² Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

³ Trapp, S. (2000) Modelling Uptake into Roots and Subsequent Translocation of Neutral and Ionisable Organic Compounds. Pest. Manag. Sci., 56(9), 767-778.

② 地上部農作物中濃度 (Exposed)

参照：V.7.3.3 農作物中濃度の推計

(2) 地上部農作物中濃度 (Exposed)

解離性物質の地上部農作物中濃度 (Exposed) (C_{ag_exp})と牧草中濃度 (C_{grass})は、非解離性物質と同様に、式 V-101 と V-102 を用いて、大気中の粒子吸着態物質の沈着、ガス態物質の吸収及び根からの化学物質の吸収による取り込みを考慮して計算する。

i) 大気中の粒子吸着態物質の沈着による地上部農作物中濃度

参照：V.7.3.3 農作物中濃度の推計

(2) 地上部農作物中濃度 (Exposed)

① 大気相中の粒子吸着態中の化学物質の沈着による地上部農作物中濃度

粒子吸着態の化学物質の沈着については、粒子自体の植物への吸着をモデル化したものと考えられるため、従来と同様に式 V-106～V108 を用いて推計する。

$$C_{ag_aer} = \frac{DEP_{total_p_ag}}{Mf \times Rv} [1 - \exp(-Rv \times 60)] \quad \text{再掲 (単位を修正)式 V-106}$$

$$C_{grass_aer} = C_{ag_aer} \quad \text{再掲 (単位を修正)式 V-107}$$

$$DEP_{total_p_ag} = RES_{wetdep} \times \frac{rainyday}{365} \times DEP_{wet_p} \times K_{dep_r} + RES_{drydep} \times \left\{ \frac{rainyday}{365} \times DEP_{dry_p_r} \times K_{dep_r} + \left(1 - \frac{rainyday}{365}\right) \times DEP_{dry_p_s} \times K_{dep_s} \right\}$$

再掲 (単位を修正)式 V-108

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{ag_aer}	大気相粒子吸着態由来の地上部農作物中濃度	mol/kg	—	—
$DEP_{total_p_ag}$	農作物への粒子吸着態沈着量(乾性+湿性)	mol/day/m ²	—	—
Mf	生産性	kg/m ²	3.0	—
Rv	風化・枯死(老化)率	/day	0.03	—
C_{grass_aer}	大気相粒子吸着態由来の牧草中濃度	mol/kg	—	—
RES_{wetdep}	農作物への粒子吸着態湿性沈着のうち農作物上に残留する割合	—	0.3	—
$rainyday$	降雨日数	day/year	100	—
DEP_{wet_p}	粒子吸着態湿性沈着量※2	mol/day/m ²	—	式 V-62□
K_{dep_r}	降雨時の沈着による補正係数	—	—	式 V-50□
RES_{drydep}	農作物への粒子吸着態乾性沈着のうち農作物上に残留する割合	—	0.8	—
$DEP_{dry_p_r}$	降雨時の粒子吸着態乾性沈着量	mol/day/m ²	—	式 V-58□
$DEP_{dry_p_s}$	晴天時の粒子吸着態乾性沈着量	mol/day/m ²	—	式 V-60□
K_{dep_s}	晴天時の沈着による補正係数	—	—	式 V-51□

ii) 大気中のガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度

参照： V.7.3.3 農作物中濃度の推計

(2) 地上部農作物中濃度 (Exposed)

② 大気相ガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度

大気中のガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度 ($C_{ag_gas_r}$)は、式 V-112 により計算する。

$$C_{ag_gas_r} \text{ 及び } C_{grass_gas_r} = \frac{\left(\frac{C_{air_g} \times g_{plant} \times Area_{plant}}{V_{leaf} \times BD_{plant}} + \frac{C_{porewater} \times 1000[L/m^3] \times TSCF \times Q_{transp}}{V_{leaf} \times BD_{plant}} \right)}{\frac{Area_{plant} \times g_{plant}}{K_{leaf-air} \times V_{leaf}} + \lambda_E + \lambda_G} \left\{ 1 - e^{-\left[\frac{g_{plant} \times Area_{plant}}{K_{leaf-air} \times V_{leaf}} + \lambda_E + \lambda_G \right] \times 60} \right\} \times VG_{ag}$$

再掲 (単位を修正) 式 V-112

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{ag_gas_r}$	大気中のガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度	mol/kg	—	V章 p.93-94
$C_{grass_gas_r}$	大気中のガス態及び土壌由来の牧草中濃度	mol/kg	—	V章 p.93-94
C_{air_g}	大気中のガス態濃度	mol/m ³	—	式 V-113
g_{plant}	コンダクタンス	m/day	86.4	V章 p.94
$Area_{plant}$	葉の表面積	m ²	5	V章 p.94
V_{leaf}	葉の体積	m ³	0.002	V章p.94
$C_{porewater}$	土壌間隙水中濃度	mol/L	—	式 V-96
$TSCF$	植物の導管を流れる水分と土壌中水分の間の分配係数	—	—	式 X-75
Q_{transp}	蒸散流量	m ³ /day	0.001	V章p.94
$K_{leaf-air}$	大気中ののガス態物質の葉・茎への濃縮係数	m ³ /m ³	—	式 X-74
λE	消失速度係数 (代謝と光分解)	1/day	0	V章p.94
λG	成長速度係数	1/day	0.035	V章p.94
VG_{ag}	地上部農作物のための補正係数	—	※	HHRAP 5.3.2 ¹ Equation 5-18
BD_{plant}	植物のバルク密度	kg/m ³	800	Calamari et al. (1987) ²

※ VG_{ag} は土壌間隙水 (pH5.9)での見かけの 1-オクタノールと水との間の分配係数 ($\log D_{sw}$) ≥ 4 のとき「0.01」、 $\log D_{sw} < 4$ の場合「1.0」、牧草については常に「1.0」($\log D_{sw}$ の計算方法は X.3.1.2 (3)に記載)

大気中のガス態濃度 (C_{air_g})の推計には、非解離性物質の式 V-113 を用いる。

¹ HHRAP : U.S.EPA (2005) Humam Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities Final, EPA530-R-05-006. (section 5.3.2)

² Calamari, D., Vighi, M. and Bacci, E. (1987) The use of terrestrial plant biomass as a parameter in the fugacity model. Chemosphere, 16(10-12), 2359-2364.

$$C_{air-g} = \frac{rainyday}{365} \times C_0(1.5) \times K_{dep-r} \times FAA + (1 - \frac{rainyday}{365}) \times C_0(1.5) \times K_{dep-s} \times (1 - FP)$$

再掲 (単位を修正) 式 V-113

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{air-g}	大気中のガス態濃度	[mol/m ³]	—	V章 p.94-95
$rainyday$	降雨日数	[day/year]	100	V章 p.94
$C(1.5)$	大気中濃度 (沈着による減少を考慮する前)	[mol/m ³]	—	式 V-38
K_{dep-r}	雨天時の沈着による補正係数	—	—	式 V-50
FAA	雨天時の大気中ガス態質量分布比	—	—	式 X-53
K_{dep-s}	晴天時の沈着による補正係数	—	—	式 V-51
$1-FP$	大気中ガス態質量分布比	—	—	式 X-52

$K_{leaf-air}$ 及び $TSCF$ は、 RCF と同様に Trapp (2009)¹ の解離性物質の植物モデルを反映した式 X-74 及び式 X-75 により推計する。式 V-115 で推計する水-植物濃度換算係数 ($K_{plant-water}$) は、解離性モデルでは使用しない。

$$K_{leaf-air} = FPA + (1 - FPA) \times \frac{\left(\frac{V_{cytosol} + V_{vacuole} \times K_{vacuole-cytosol}}{V_{cytosol} + V_{vacuole}} \right)}{K_{air-water} \times G_{cytosol n}} \quad \text{式 V-114 置換 式 X-74}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{leaf-air}$	大気中のガス態物質の葉・茎への濃縮係数	—	—	X.3.1.3 (2)③
$K_{vacuole-cytosol}$	液胞-細胞質分配係数	—	—	式 X-78
$K_{air-water}$	空気-水分配係数	—	—	無次元ヘンリー係数と同じ値
$G_{cytosol.n}$	細胞質における総濃度あたりの非解離種活量	—	—	式 X-86
FPA	葉の空気含有割合	—	0.5	V章 p.95
$V_{cytosol}$	細胞質体積	L	0.1	図表 X-32
$V_{vacuole}$	液胞体積	L	0.9	図表 X-32

$$TSCF = K_{xylem-sw} \quad \text{式 V-116 置換 式 X-75}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$TSCF$	植物の導管を流れる水分と土壤中水分の間の分配係数	—	—	X.3.1.3 (2)③
$K_{xylem-sw}$	木部-土壌間隙水分配係数	—	—	式 X-77

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

③ 地上部農作物中濃度 (Protected)

参照： V.7.3.3 農作物中濃度の推計

(3) 地上部農作物中濃度 (Protected)

解離性物質の地上部農作物中濃度 (Protected) (C_{ag_prot})は、式 V-117 により計算する。

④ 植物体内分配係数

液胞-土壌間隙水分配係数 ($K_{vacuole-sw}$)及び木部-土壌間隙水分配係数 ($K_{xylem-sw}$)はそれぞれ式 X-76 及び式 X-77 により推計する。

$$K_{vacuole-sw} = K_{vacuole-cytosol} \times K_{cytosol-sw} \quad \text{式 X-76}$$

$$K_{xylem-sw} = K_{xylem-cytosol} \times K_{cytosol-sw} \quad \text{式 X-77}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{vacuole-sw}$	液胞-土壌間隙水分配係数	—	—	X.3.1.3 (2)②
$K_{vacuole-cytosol}$	液胞-細胞質分配係数	—	—	式 X-78
$K_{cytosol-sw}$	細胞質-土壌間隙水分配係数	—	—	式 X-78
$K_{xylem-sw}$	木部-土壌間隙水分配係数	—	—	X.3.1.3 (2)②
$K_{xylem-cytosol}$	木部-細胞質分配係数	—	—	式 X-78

図表 X-11 (36 ページ)に示すように、細胞質の外側には土壌間隙水、液胞や木部の外側には細胞質があると考え、細胞質-土壌間隙水分配係数 ($K_{cytosol-sw}$)、液胞-細胞質分配係数 ($K_{vacuole-cytosol}$)及び木部-細胞質分配係数 ($K_{xylem-cytosol}$)は、式 X-78 のように外側の媒体 (out)と内側の媒体 (in)の組み合わせにより推計する。

$$K_{in-out} = \frac{E_{(in)-out}}{E_{in-(out)}} \quad \text{式 X-78}$$

式 X-78 の分子 ($E_{(in)-out}$)は式 X-79 で推計し、分母 ($E_{in-(out)}$)は式 X-80 で推計する。

$$E_{(in)-out} = MTC_{membrane\ n} \times G_{out\ n} + MTC_{membrane\ i} \times \frac{N_{in-out}}{(\exp(N_{in-out})-1)} \times G_{out\ i} \quad \text{式 X-79}$$

$$E_{in-(out)} = MTC_{membrane\ n} \times G_{in\ n} + MTC_{membrane\ i} \times \frac{N_{in-out}}{(\exp(N_{in-out})-1)} \times \exp(N_{in-out}) \times G_{in\ i} \quad \text{式 X-80}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
K_{in-out}	内側の媒体-外側の媒体分配係数*	—	—	X.3.1.3 (2)⑤
$E_{(in)-out}$	内側の媒体-外側の媒体分配係数計算式の分子*	m/sec	—	X.3.1.3 (2)⑤

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$E_{in(out)}$	内側の媒体-外側の媒体分配係数計算式の分母 [*]	m/sec	—	X.3.1.3 (2)⑤
$MTC_{membrane.n}$	非解離種の外側の媒体から内側の媒体への質量移動係数 [*]	m/sec	—	式 X-81、式 X-83
$MTC_{membrane.i}$	イオン種の外側の媒体から内側の媒体への質量移動係数 [*]	m/sec	—	式 X-82、式 X-84
$G_{out.n}$	外側の媒体における総濃度あたりの非解離種活量 [*]	—	—	植物体内の媒体は式 X-86、土壌間隙水は式 X-87
$G_{out.i}$	外側の媒体における総濃度あたりのイオン種活量 [*]	—	—	式 X-88
$G_{in.n}$	内側の媒体における総濃度あたりの非解離種活量 [*]	—	—	植物体内の媒体は式 X-86、土壌間隙水は式 X-87
$G_{in.i}$	内側の媒体における総濃度あたりのイオン種活量 [*]	—	—	式 X-88
N_{in-out}	内側の媒体-外側の媒体間の Nernst 式の数 [*]	—	—	式 X-85

※ 本式で対象とする内側の媒体 (*in*)と外側の媒体 (*out*)、媒体間に存在する膜 (*membrane*)の組み合わせは、図表 X-11 (36 ページ)に示す以下の3通りである：

1 細胞質-土壌間隙水分配係数 ($K_{cytosol-sw}$)：

内側：細胞質 (*cytosol*)、外側：土壌間隙水 (*sw*)、膜：細胞壁と生体膜 (*cell*)

2 液胞-細胞質分配係数 ($K_{vacuole-cytosol}$)：

内側：液胞 (*vacuole*)、外側：細胞質 (*cytosol*)、膜：生体膜 (*biomembrane*)

3 木部-細胞質分配係数 ($K_{xylem-cytosol}$)：

内側：木部 (*xylem*)、外側：細胞質 (*cytosol*)、膜：生体膜 (*biomembrane*)

植物細胞は、細胞膜と細胞壁に包まれており、細胞外から細胞内への非解離種及びイオン種の質量移動係数¹は、式 X-81 及び式 X-82 により推計する。

$$MTC_{cell.n} = \frac{1}{\frac{1}{MTC_{biomembrane.n}} + \frac{1}{MTC_{cellwall}}} \quad \text{式 X-81}$$

$$MTC_{cell.i} = \frac{1}{\frac{1}{MTC_{biomembrane.i}} + \frac{1}{MTC_{cellwall}}} \quad \text{式 X-82}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$MTC_{cell.n}$	非解離種の植物細胞外から内への質量移動係数	m/sec	—	X.3.1.3 (2)⑤
$MTC_{cell.i}$	イオン種の植物細胞外から	m/sec	—	Trapp (2000) ²

¹ 原文には、pearmeability (*P*)とあったが、ここでは質量移動係数 (*MTC: Mass Transfer Coefficient*)とする。

² Trapp, S. (2000) Modelling Uptake into Roots and Subsequent Translocation of Neutral

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$MTC_{biomembrane.n}$	内への質量移動係数 非解離種の生体膜質量移動 係数	m/sec	—	式 X-83
$MTC_{biomembrane.i}$	イオン種の生体膜質量移動 係数	m/sec	—	式 X-84
$MTC_{cellwall}$	細胞壁質量移動係数	m/sec	0.00025	Trapp(2000) ¹

非解離種及びイオン種の生体膜質量移動係数 ($MTC_{biomembrane.n}$ と $MTC_{biomembrane.i}$) は、それぞれ式 X-83 及び式 X-84 により推計する。

$$MTC_{biomembrane.n} = 10^{\log Pow_n - 6.7} \quad \text{式 X-83}$$

$$MTC_{biomembrane.i} = 10^{-3.162} \times MTC_{biomembrane.n} = 6.89 \times 10^{-4} \times MTC_{biomembrane.n} \quad \text{式 X-84}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$MTC_{biomembrane.n}$	非解離種の生体膜質量移動係数	m/sec	※	X.3.1.3 (2)⑤
$MTC_{biomembrane.i}$	イオン種の生体膜質量移動係数	m/sec	—	X.3.1.3 (2)⑤; Trapp (2009) ²
$\log Pow_n$	非解離種の 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	化学物質情報

※ ただし、地下部農作物の計算時には、 $\log Pow_n$ の下限値は-0.57、上限値は 8.2 として、範囲外の値は下限値あるいは上限値に置き換える。また、地上部農作物の計算時には、下限値は-0.5、上限値は 4.5 とする。

Nernst式の数 (N_{x-x}) は、媒体間の電位差で決まる値で、Trapp (2009)² に示されている式 X-85により推計する。

$$N_{x-x} = \frac{z \times El_{x-x} \times F}{R \times T} \quad \text{式 X-85}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
N_{x-x}	Nernst 式の数 [※]	—	—	X.3.1.3 (2)⑤; Trapp (2009) ²
z	価数	—	—	化学物質情報
El_{x-x}	植物体内の電位差 [※]	V	細胞質-土壌間隙水間: -0.12 液胞-細胞質間: -0.02 木部-細胞質間: 0.12	X.3.1.3 (2)⑥
F	Faraday 定数	C/mol	96485	NIST ³ ,
R	気体定数	J/mol/K	8.314	—
T	絶対温度における環	K	293.15	V 章 p.67

and Ionisable Organic Compounds. Pest. Manag. Sci., 56(9), 767–778.

¹ Trapp, S. (2000) Modelling Uptake into Roots and Subsequent Translocation of Neutral and Ionisable Organic Compounds. Pest. Manag. Sci., 56(9), 767–778.

² Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

³ NIST, Reference on Constants, Units and Uncertainty, Fundamental Physical Constants, Faraday constant.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
----	----	----	---	--------

境温度

※ 本式で対象とする媒体やそれを構成する要素 (x)の組み合わせは以下の3通りである：

1 細胞質 (cytosol)・土壌間隙水 (sw)

2 液胞 (vacuole)・細胞質 (cytosol)

3 木部 (xylem)・細胞質 (cytosol)

植物体内の媒体 (xm)における総濃度あたりの非解離種活量 ($G_{xm.n}$)は、式 X-86 により推計する。土壌間隙水 (sw)における総濃度あたりの非解離種活量 ($G_{sw.n}$)については式 X-87 により推計する。また、xにおける総濃度あたりのイオン種活量 ($G_{x.i}$)は式 X-88 により推計する。

$$G_{xm.n} = \frac{1}{\frac{W_{xm}}{\gamma_{xm.n}} + \frac{Klipid_{xm.n}}{\gamma_{xm.n}} + (W_{xm} + Klipid_{xm.i}) \frac{\phi_{xm.i}}{\gamma_{xm.i} \times \phi_{xm.n}}} \quad \text{式 X-86}$$

$$G_{sw.n} = \frac{1}{\left(\frac{1}{\gamma_{s.n}} + \frac{\phi_{sw.i}}{\gamma_{s.i} \times \phi_{sw.n}} \right)} \quad \text{式 X-87}$$

$$G_{x.i} = G_{x.n} \times \frac{\phi_{x.i}}{\phi_{x.n}} \quad \text{式 X-88}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$G_{xm.n}$	xm ごとの総濃度あたりの非解離種活量 ^{※1}	—	—	X.3.1.3 (2)⑤
$G_{sw.n}$	土壌間隙水の総濃度あたりの非解離種活量	—	—	X.3.1.3 (2)⑤
$G_{x.i}$	x ごとの総濃度あたりのイオン種活量 ^{※2}	—	—	X.3.1.3 (2)⑤
W_{xm}	xm ごとの水分含有割合 ^{※1}	—	細胞質：0.943 液胞：0.943 木部：1	X.3.1.3 (2)⑦
$Klipid_{xm.n}$	xm ごとの非解離種の脂質-水分分配係数 ^{※1}	—	—	式 X-89
$Klipid_{xm.i}$	xm ごとのイオン種の脂質-水分分配係数 ^{※1}	—	—	式 X-90
$\gamma_{xm.n}$	xm ごとの非解離種活量係数 ^{※1}	—	—	式 X-32
$\gamma_{xm.i}$	xm ごとのイオン種活量係数 ^{※1}	—	—	式 X-33
$\phi_{xm.n}$	xm ごとの非解離種分率	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
$\phi_{xm.i}$	xm ごとのイオン種分率	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。

※1 本式で対象にする植物体内媒体 (xm)は、細胞質 (cytosol)、液胞 (vacuole)、木部 (xylem)である。

※2 本式で対象にする媒体やその構成要素(x)は、土壌間隙水 (sw)、細胞質 (cytosol)、液胞 (vacuole)、木部 (xylem)である。

環境媒体と植物及び牛体内媒体 (xm)における非解離種の脂質-水分配係数 ($Klipid_{xm,n}$) は、式 X-89 により推計する。また、 xm におけるイオン種の脂質-水分配係数 ($Klipid_{xm,i}$) は、式 X-90 により推計する。

$$Klipid_{xm,n} = L_{xm} \times (10^{\log Pow_n})^b \quad \text{式 X-89}$$

$$Klipid_{xm,i} = L_{xm} \times (10^{\log Pow_i})^b \quad \text{式 X-90}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$Klipid_{xm,n}$	xm^{*1} における非解離種の脂質-水分配係数	—	※2	X.3.1.3 (2) ⑤ ; Trapp (2009) ¹
$Klipid_{xm,i}$	xm^{*1} におけるイオン種の脂質-水分配係数	—	※2	X.3.1.3 (2) ⑤ ; Trapp (2009) ¹
L_{xm}	xm^{*1} における脂質含有割合	—	細胞質：0.02 液胞：0.02 木部：0	図表 X-32
$\log Pow_n$	非解離種類の 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	化学物質情報
$\log Pow_i$	イオン種の 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	化学物質情報
b	植物脂質と 1-オクタノール間の差に対する修正指数	—	地下部：0.77 地上部：0.95	Trapp(2009) ¹

※1 本式で対象にする環境媒体と植物体内媒体 (xm) は、細胞質 (*cytosol*)、液胞 (*vacuole*)、木部 (*xylem*)である。

※2 ただし、地下部農作物の計算時には、 $\log Pow_n$ 及び $\log Pow_i$ の下限値は-0.57、上限値は 8.2 として、範囲外の値は下限値あるいは上限値に置き換える。また、地上部農作物の計算時には、下限値は-0.5、上限値は 4.5 とする。

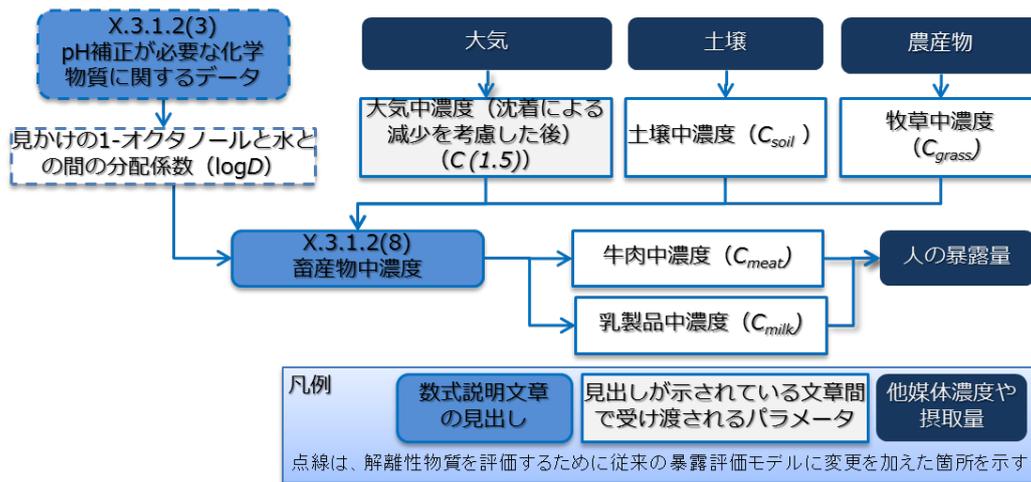
(8) 畜産物中濃度の推計

X.3.1.2 (8)では、畜産物中濃度の推計に用いる数式やパラメータについて説明する。畜産物中濃度の推計の手順を図表 X-25 に示す。

従来の暴露評価モデルでは、 $\log Pow$ を用いて推計した牛肉及び牛乳への移行係数 (BTF) を用いて畜産物中濃度を推計している。解離性モデルでも同様の方法で牛肉中濃度及び乳製品中濃度を計算するが、1-オクタノールと水との間の分配係数 ($\log Pow$)の代わりに X.3.1.2 (3)に説明するように、牛の小腸 pH (7.0)で補正する見かけの 1-オクタノールと水との間の分配係数 ($\log D_{cow}$)を用いる。

なお、導入にあたっての考え方や方法については、X.3.1.3 (3)に述べる。

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.



図表 X-25 畜産物中濃度計算手順

① 牛肉中濃度

参照： V.7.3.4 畜産物中濃度の推計
(1) 牛肉中濃度

牛肉中濃度は、式 V-118 により計算する。

$$C_{meat} = BTF_{meat} \times \{ (C_{grass} \times CTL_{grassN} \times CONWD) + (C_{soil} \times CTL_{soil} \times CONV_{soil}) + (C(1.5) \times CTL_{inhl}) \}$$

再掲 (単位を修正) 式 V-118

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{meat}	牛肉中濃度	mol/kg	—	V 章 p.97
BTF_{meat}	牛肉への移行係数	day/kg	—	式 X-91
C_{grass}	牧草中濃度	mol/kg	—	式 V-102
CTL_{grassN}	肉牛の牧草の 1 日当たりの摂取量 (乾燥重量当たり)	kg/day	8	V 章 p.97
$CONWD$	牧草の換算係数 (乾燥重量 → 湿潤重量)	—	4	V 章 p.97、p.98
C_{soil}	土壌中濃度 (10 年平均)	mol/kg	—	式 V-73
CTL_{soil}	牛の土壌の 1 日当たりの摂取量 (乾燥重量当たり)	kg/day	0.41	V 章 p.97、p.98
$CONV_{soil}$	土壌の換算係数 (乾燥重量 → 湿潤重量)	—	1.40	式 V-120
$C(1.5)$	大気中濃度 (沈着による減少を考慮した後)	mol/m ³	—	式 V-40
CTL_{inhl}	牛の吸入摂取量 (大気)	m ³ /day	122	V 章 p.97、p.98

牛肉への移行係数 (BTF_{meat})は、 $\log D_{cow}$ を用いて、式 X-91 で推計する。土壌の換算係数 (乾燥重量 → 湿潤重量) ($CONV_{soil}$)は、V-120 により計算する。

1 $BTF_{meat} = 10^{-7.6 + \log D_{cow}}$ 式 V-119 置換 式 X-91

2 $CONV_{soil} = \frac{BD_{soil}}{DEN_{SOS} \times SOSF}$ 再掲 式 V-120

3

記号	説明	単位	値	出典・参照先
BTF_{meat}	牛肉への移行係数	day/kg	※	V 章 p.97-98
$\log D_{cow}$	牛の小腸での見かけの1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	X.3.1.2 (3)、牛の小腸 pH (7)で補正
$CONV_{soil}$	土壌の換算係数 (乾燥重量→湿潤重量)	—	1.40	式 V-120
BD_{soil}	土壌バルク密度	kg/m ³	1050	V-75
DEN_{SOS}	土壌粒子密度	kg/L	1.5	V 章 p.67
$SOSF$	土壌中の粒子容積比	—	0.5	V 章 p.67

4 ※ $\log D_{cow}$ の下限値は 1.5、上限値は 6.5 として、範囲外の値は下限値あるいは上限値に置き換える。

5

6 ② 乳製品中濃度

7

参照： V.7.3.4 畜産物中濃度の推計

8

(2) 乳製品中濃度

9

V 章と同様に、牛乳中濃度を推計することで、乳製品中濃度の代表値とする。牛乳中濃度は、従来の暴露評価モデルと同様に式 V-121 で推計する。

10

11 $C_{milk} = BTF_{milk} \times \{ (C_{grass} \times CTL_{grassL} \times CONWD) + (C_{soil} \times CTL_{soil} \times CONV_{soil}) + (C(1.5) \times CTL_{inhl}) \}$

12 再掲 式 V-121

13

14

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{milk}	乳製品中濃度	mol/kg	—	V 章 p.98
BTF_{milk}	牛乳への移行係数	day/kg	—	式 X-92
C_{grass}	牧草中濃度	mol/kg	—	式 V-102
CTL_{grassL}	乳牛の牧草の1日当たりの摂取量 (乾燥重量当たり)	kg/day	16	V 章 p.98
$CONWD$	牧草の換算係数 (乾燥重量→湿潤重量)	—	4	V 章 p.97、p.98
C_{soil}	土壌中濃度 (10年平均)	mol/kg	—	式 V-73
CTL_{soil}	牛の土壌の1日当たりの摂取量 (乾燥重量当たり)	kg/day	0.41	V 章 p.97、p.98
$CONV_{soil}$	土壌の換算係数 (乾燥重量→湿潤重量)	—	1.40	式 V-120
$C(1.5)$	大気中濃度 (沈着による減少を考慮した後)	mol/m ³	—	式 V-40
CTL_{inhl}	牛の吸入摂取量 (大気)	m ³ /day	122	V 章 p.97、p.98

15

16 牛乳への移行係数 (BTF_{milk})は、 $\log D_{cow}$ を用いて、式 X-92 で推計する。

17

18

19 $BTF_{milk} = 10^{-8.1 + \log D_{cow}}$ V-122 置換 式 X-92

1

記号	説明	単位	値	出典・参照先
BTF_{milk}	牛乳への移行係数	day/kg	※	V章 p.99
$\log D_{cow}$	牛の小腸での見かけの1-オクタノールと水との間の分配係数	—	—	X.3.1.2 (3)、牛の小腸 pH (7)で補正

2

※1 $\log D_{cow}$ の下限値は3、上限値は6.5として、範囲外の値は下限値あるいは上限値に置き換える。

3

4

(9) 水域濃度、魚介類中濃度及び底質中濃度の推計

5

① 水域濃度、魚介類中濃度及び底質中濃度の計算手順

6

X.3.1.2 (9)では、水域濃度、魚介類中濃度及び底質中濃度の推計に用いる数式やパラメータについて説明する。水域濃度、魚介類中濃度及び底質中濃度の推計の手順を図表 X-26 に示す。

9

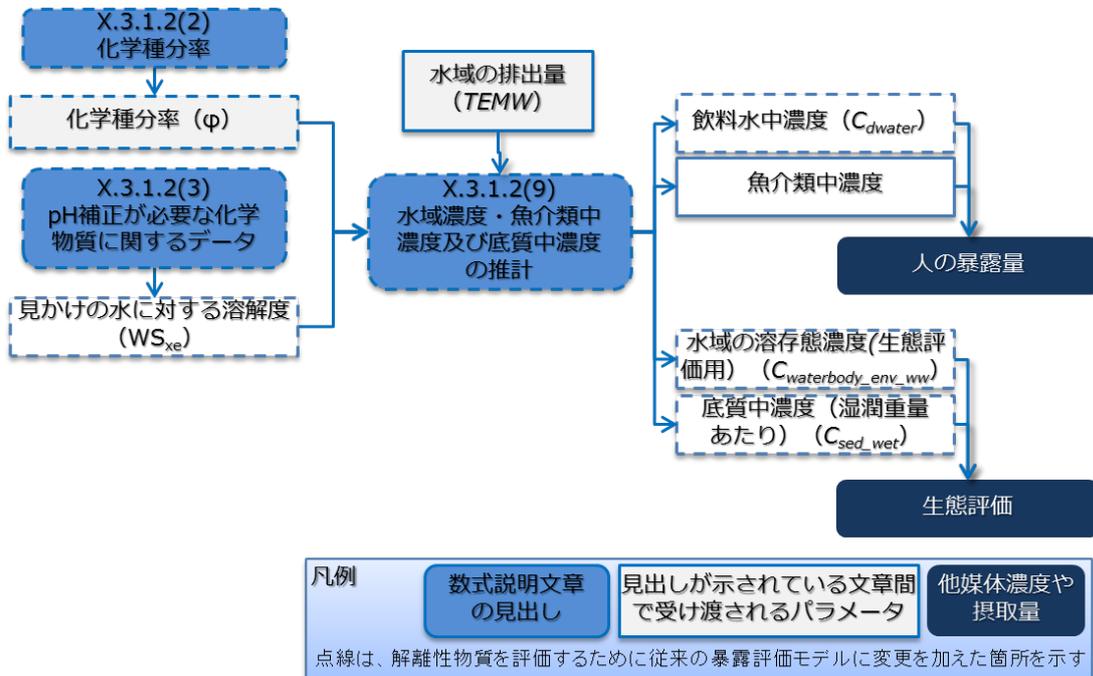
従来の暴露評価モデルでは、希釈と懸濁粒子への吸着を考慮して、水域濃度、魚介類中濃度及び底質中濃度を推計している。解離性モデルでは、懸濁粒子への吸着に Franco and Trapp (2010)¹の考え方を導入する。

12

なお、水域濃度及び底質中濃度の推計について、導入にあたっての考え方や方法については、X.3.1.3 (1)に示す。魚介類中濃度については、従来どおりの方法で推計する。

14

15



16

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

図表 X-26 水域濃度と底質中濃度の計算手順要約図

② 水域濃度 (人の健康に係わる評価) $C_{waterbody_man}$

参照: V.7.3.5 水域濃度・魚介類中濃度・底質中濃度の推計

(1) 河川水中濃度 (人の健康に係る評価)

水域濃度 (人の健康に係わる評価) ($C_{waterbody_man}$)は、以下のように、モル濃度で計算する。

排出量データに化審法推計排出量又は PRTR 届出排出量 (海域以外) を用いる場合:

河川水中濃度 (人評価用) (C_{river_man}): 式 X-93

海水中濃度 (人評価用) (C_{sea_man}): 式 V-124

排出量データに PRTR 届出排出量 (海域) を用いる場合:

河川水中濃度 (人評価用) (C_{river_man}): 0 mol/L

海水中濃度 (人評価用) (C_{sea_man}): 式 X-94

河川水及び海水中の溶存態濃度 (人評価用) ($C_{waterbody_man_ww}$)は、式 V-126 により計算する。

$$C_{river_man} = \frac{TEMW}{V_{river_man} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60) [year \rightarrow sec] \times M} \quad \text{式 V-123 置換 式 X-93}$$

$$C_{sea_man} = \frac{C_{river_man}}{DILUTION_{sea}} \quad \text{再掲 (一部数式を修正) 式 V-124}$$

$$C_{sea_man} = \frac{TEMW}{V_{sea_man} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60) [year \rightarrow sec] \times M} \quad \text{式 V-125 置換 式 X-94}$$

$$C_{waterbody_man_ww} = C_{waterbody_man} \times (1 - FWS_{xm}) \quad \text{再掲 (一部数式を修正) 式 V-126}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{waterbody_man}$	水域濃度 (人評価用) ※1	mol/L	—	X.3.1.3 (1)⑧
$TEMW$	評価対象物質の水域への排出量	kg/year	—	Ⅲ章
V_{river_man}	河川流量 (人評価用)	m ³ /sec	※3	V章 p.100
M	モル質量	g/mol	—	
$DILUTION_{sea}$	海域希釈率	—	10	V章 p.101
V_{sea_man}	海域流量 (人評価用)	m ³ /sec	43.5	V章 p.101
$C_{waterbody_man_ww}$	水域の溶存態濃度 (人評価用) ※1	mol/L	※4	V章 p.101-102
FWS_{xm}	xm ごとの水中懸濁粒子吸着態質量分布比 ※2	—	—	河川の場合 = FWS_{wf} 、海域の場合 = FWS_{ws} 、式 X-95、式 X-96
WS_{wfw}	淡水域又は海水域の水での見かけの水に対する溶解度 ※3	mol/L	—	化学物質情報
WS_{wsw}				

- 1 ※1 水域：河川又は海域、*waterbody*：*river* 又は *sea*
 2 ※2 河川の場合の環境媒体 (*xm*)は、淡水域 (*wf*)であり、海域の場合の環境媒体 (*xm*)は、海水域 (*ws*)
 3 である。
 4 ※3 排出量データの種類により以下の値を用いる。
 5 化審法推計排出量：20.85
 6 PRTR 届出排出量 (海域以外)：4.35
 7 ※4 ただし、本章では、水域の溶存態濃度の上限値として、水域での見かけの水に対する溶解度を採用
 8 する。(河川：淡水域での見かけの水に対する溶解度 (WS_{wf})、海域：海水域での見かけの水に対する溶
 9 解度 (WS_{ws})。)

10 解離性物質の水中懸濁粒子吸着態質量分布比 (FWS)は、淡水域 (*wf*)と海水域 (*ws*)それぞ
 11 れについて計算する。 Koc 又は Kd の実測値がある場合は、以下の式で算出する。

$$13 \quad FWS_{xm} = \frac{Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6})}{1 + Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6})} \quad \text{V-127 置換 式 X-95}$$

14
 15 Koc 又は Kd の実測値がない場合は、以下の式で算出する。

$$17 \quad FWS_{xm} = \frac{\left(\frac{Koc_n \times OC_{xep} \times \phi_{xep,n}}{\gamma_{xm,n}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{xep} \times \phi_{xep,i}}{\gamma_{xm,i}} \right) \times (CW_{ss} \times 10^{-6})}{\left(\frac{\phi_{xew,n}}{\gamma_{xm,n}} + \sum_i \frac{\phi_{xew,i}}{\gamma_{xm,i}} \right) \times f_{xew} + \left(\frac{Koc_n \times OC_{xep} \times \phi_{xep,n}}{\gamma_{xm,n}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{xep} \times \phi_{xep,i}}{\gamma_{xm,i}} \right) \times (CW_{ss} \times 10^{-6})}$$

18 V-127 置換 式 X-96

記号	説明	単位	値	出典・参照先
FWS_{xm}	<i>xm</i> ごとの水中懸濁粒子吸着態質量分布比 [※]	—	—	X.3.1.3 (1)⑧
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
Koc_n	非解離種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
Koc_i	イオン種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
OC_{xep}	<i>xep</i> ごとの有機炭素含有率 [※]	—	0.1	図表 X-20
CW_{ss}	水中懸濁粒子濃度	[mg/L]	50	MNSEM UM デフォルト
$\phi_{xep,n}$ $\phi_{xew,n}$	<i>xep</i> 又は <i>xew</i> ごとの非解離種分率 [※]	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
$\phi_{xep,i}$ $\phi_{xew,i}$	<i>xep</i> 又は <i>xew</i> ごとのイオン種分率 [※]	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
$\gamma_{xm,n}$	<i>xm</i> ごとの非解離種活量係数 [※]	—	—	式 X-32
$\gamma_{xm,i}$	<i>xm</i> ごとのイオン種活量係数 [※]	—	—	式 X-33
f_{xew}	<i>xew</i> ごとの体積分率 [※]	—	<i>xew</i> ごとの値	図表 X-14

記号	説明	単位	値	出典・参照先
			$wfw : 2 \times 10^{-5}$	
			$wsw : 2 \times 10^{-5}$	

※ 淡水域の場合は以下の組み合わせで計算する。
環境媒体 (xm) : 淡水域 (wf)、環境媒体中の構成要素の水 (xew) : 淡水域の水 (wfw)、環境媒体中の構成要素の粒子及び近傍水 (xep) : 淡水域の懸濁粒子 (wfp)

海水域の場合は以下の組み合わせで計算する。
環境媒体 (xm) : 海水域 (ws)、環境媒体中の構成要素の水 (xew) : 海水域の水 (wsw)、環境媒体中の構成要素の粒子及び近傍水 (xep) : 海水域の懸濁粒子 (wsp)

飲料水濃度 (C_{dwater})も、従来と同様に、式 V-128 で計算する。

③ 魚介類中濃度 C_{fish}

参照： V.7.3.5 水域濃度・魚介類中濃度・底質中濃度の推計

(2) 魚介類中濃度

魚介類中濃度は、式 V-129 及び式 V-130 により計算する。ただし、生物濃縮係数 (BCF) の収集及び精査時には、X.2.2.1 (6)に示すように、解離性物質特有の性質を留意する。

$$C_{fish_fresh} = C_{river_man_ww} \times BCF \times BMF \quad \text{再掲 (単位を修正)式 V-129}$$

$$C_{fish_sea} = C_{sea_man_ww} \times BCF \times BMF \quad \text{再掲(単位を修正)式 V-130}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{fish_fresh}	魚介類中濃度 (淡水域)	mol/kg	—	—
$C_{river_man_ww}$	河川水中の溶存態濃度 (人評価用)	mol/L	—	式 V 126□
BCF	生物濃縮係数	L/kg	—	化学物質情報
BMF	生物蓄積係数	—	—	—
C_{fish_sea}	魚介類中濃度 (海水域)	mol/kg	—	—
$C_{sea_man_ww}$	河川水中の溶存態濃度 (人評価用)	mol/L	—	式 V 126□

生物蓄積係数 (BMF)については、従来の暴露評価と同様に、実測値が得られない場合には図表 V-39 から選ぶことにする。図表 V-39 では、 $\log Pow$ 又は BCF の値から BMF を選択することになっている。解離性物質については非解離種の $\log Pow_n$ 又は BCF を用いて、同様に選択する。

④ 生活環境動植物に対する暴露評価

生活環境動植物に対する暴露評価は、基本的には、非解離性物質と同様に V.7.3.5(3)に示した手法で評価する。ただし、判定に用いる物化性状データや環境中濃度の推計手法の一部において、解離性を考慮する必要がある。ここでは、非解離性物質の評価手法と異なる部分について説明する。

i) 水生生物の暴露濃度 $C_{waterbody_env}$

参照： V.7.3.5 水域濃度・魚介類中濃度・底質中濃度の推計

(3) 生活環境動植物に対する暴露評価

① 水生生物の暴露濃度推計

水域濃度（生態評価用）（ $C_{waterbody_env}$ ）は、式 X-97 によりモル濃度で計算する。同様に、水域の溶存態濃度（生態評価用）（ $C_{waterbody_env_ww}$ ）も、式 V-132 により計算する。解離性物質の水中懸濁粒子吸着態質量分布比（ FWS ）については、式 X-95 又は式 X-96 で求める。

$$C_{waterbody_env} = \frac{TEMW}{V_{waterbody_env} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60) [year \rightarrow sec] \times M} \quad \text{式 V-131 置換 式 X-97}$$

$$C_{waterbody_env_ww} = C_{waterbody_env} \times (1 - FWS) \quad \text{再掲（一部数式を修正） 式 V-132}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{waterbody_env}$	水域濃度（生態評価用）※1	mol/L	—	X.3.1.3 (1)⑧
$TEMW$	評価対象物質の水域への排出量	kg/year	—	Ⅲ章
$V_{waterbody}$	生態の暴露量推算に係る水域流量	m ³ /sec	13.47	V章 p.105
M	モル質量	g/mol	—	—
$C_{waterbody_env_ww}$	水域の溶存態濃度（生態評価用）※1	mol/L	※2	V章 p.105
FWS	水中懸濁粒子吸着態質量分布比	—	—	式 X-95、式 X-96
WS_{wfw} WS_{wsw}	淡水域又は海水域の水での見かけの水に対する溶解度※2	mol/L	—	化学物質情報

※1 水域：河川又は海域、 $waterbody$ ： $river$ 又は sea

※2 ただし、本章では、水域の溶存態濃度の上限値として、水域での見かけの水に対する溶解度を採用する。（河川：淡水域での見かけの水に対する溶解度（ WS_{wfw} ）、海域：海水域での見かけの水に対する溶解度（ WS_{wsw} ）水に対する溶解度。

ii) 底生生物の暴露濃度 C_{sed}

参照：V.7.3.5 水域濃度・魚介類中濃度・底質中濃度の推計

(3) 生活環境動植物に対する暴露評価

② 底生生物の暴露濃度推計

底生生物への影響については、評価Ⅱ以降で非解離性物質と同様に V.7.3.5(3)②に示した方法で考慮する。非解離性物質では、 $\log Pow$ が3以上の物質は、評価Ⅱ以降で底生生物のリスク評価を行うこととしている。解離性物質については非解離種の $\log Pow_n$ を用いて、同様に判断する。

したがって、底質中濃度（湿潤重量当たり）（ C_{sed_wet} ）は、式 V-133 により計算する。

$$C_{sed_wet} = \frac{K_{susp-water}}{RHO_{susp}} \times C_{waterbody_env_ww} \times 1000 \quad \text{再掲 式 V-133}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{sed_wet}	底質中濃度（湿潤重量当たり）	mol/kg	WS_{wsw}	V章 p.106
K_{susp_water}	懸濁物質-水分配係数	—	—	河川の場合 = $K_{susp_water.wf}$ 式 X-98、式 X-99、海域の場合= $K_{susp_water.ws}$
RHO_{susp}	懸濁物質のバルク密度	kg/m ³	1150	V章 p.106、p.107
$C_{waterbody_env_ww}$	水域の溶存態濃度（生態評価用）※1	mol/L	WS_{wsw}	式 V-132

※1 水域：河川又は海域、*waterbody*：*river* 又は *sea*

解離性物質の懸濁物質-水分配係数 ($K_{susp-water}$)は、淡水域 (*wf*)と海水域 (*ws*)それぞれについて計算する。 Koc 又は Kd の実測値がある場合は、次式で算出する。

$$K_{susp-water\ xm} = F_{water\ susp} + F_{solid\ susp} \times Koc \times OC_{xep} \times \rho_{xep} \quad \text{式 V-134 置換 式 X-98}$$

Koc 又は Kd の実測値がない場合は、次式で算出する。

$$K_{susp-water\ xm} = F_{water\ susp} + F_{solid\ susp} \times \frac{\left(\frac{Koc_n \times OC_{xep} \times \phi_{xep.n}}{\gamma_{xm.n}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{xep} \times \phi_{xep.i}}{\gamma_{xm.i}} \right)}{\left(\frac{\phi_{xew.n}}{\gamma_{xm.n}} + \sum_i \frac{\phi_{xew.i}}{\gamma_{xm.i}} \right)} \times \rho_{xep}$$

V-134 置換 式 X-99

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{susp_water.xm}$	<i>xm</i> ごとの懸濁物質-水分配係数	—	—	X.3.1.3 (1)⑧
$F_{water\ susp}$	懸濁物質中の水の容積比率	—	0.9	V章 p.106
$F_{solid\ susp}$	懸濁物質中の懸濁粒子の容積比率	—	0.1	V章 p.106
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
Koc_n	非解離種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
Koc_i	イオン種の有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	化学物質情報
OC_{xep}	<i>xep</i> ごとの有機炭素含有率※1	—	0.1	図表 X-20
ρ_{xep}	<i>xep</i> ごとの底質粒子の密度※1	kg/L	2.5	図表 X-19
$\phi_{xep.n}$ $\phi_{xew.n}$	<i>xep</i> 又は <i>xew</i> ごとの非解離種分率※2	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適用する。
$\phi_{xep.i}$ $\phi_{xew.i}$	<i>xep</i> 又は <i>xew</i> ごとのイオン種分率※2	—	—	酸、塩基、両性物質に対してそれぞれ、X.3.1.2 (2)の式を適

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\gamma_{xm.n}$	xm ごとの非解離種活量係数 ^{※3}	—	—	用する。 式 X-32
$\gamma_{xm.i}$	xm ごとのイオン種活量係数 ^{※3}	—	—	式 X-33

※ 淡水域の場合は以下の組み合わせで計算する。

環境媒体 (xm) : 淡水域の底質 (ef)、環境媒体中の構成要素の水 (xew) : 淡水域の底質間隙水 (efw)、環境媒体中の構成要素の粒子及び近傍水 (xep) : 淡水域の底質粒子 (efp)

海水域の場合は以下の組み合わせで計算する。

環境媒体 (xm) : 海水域の底質 (ef)、環境媒体中の構成要素の水 (xew) : 海水域の底質間隙水 (efw)、環境媒体中の構成要素の粒子及び近傍水 (xep) : 海水域の底質粒子 (esp)

底質中濃度 (乾燥重量当たり) (C_{sed_dry})は、式 V-135 と式 V-136 により計算する。

$$C_{sed_dry} = C_{sed_wet} \times conv_{susp} \quad \text{再掲 式 V-135}$$

$$conv_{susp} = \frac{RHO_{susp}}{Fsolid_{susp} \times RHO_{solid}} \quad \text{再掲 式 V-136}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{sed_dry}	底質中濃度 (乾燥重量当たり)	mol/kg	—	V 章 p.106-107
C_{sed_wet}	底質中濃度 (湿潤重量当たり)	mol/kg	—	式 V-133
$conv_{susp}$	懸濁物質中の濃度の換算係数 (湿潤重量→乾燥重量)	—	—	V 章 p.107
RHO_{susp}	懸濁物質のバルク密度	kg/m ³	1150	V 章 p.106、p.107
$Fsolid_{susp}$	懸濁物質中の懸濁粒子の容積比率	—	0.1	V 章 p.106、p.107
RHO_{solid}	懸濁粒子の密度	kg/m ³	2500	V 章 p.106、p.107

(10) 暴露媒体中濃度

暴露媒体中濃度は、図表 X-27 に示す環境媒体中濃度にモル質量を乗じ、さらに 1000 倍することで単位換算して求める。

図表 X-27 暴露暴態中濃度と環境媒体中濃度

暴露媒体中濃度			環境媒体中濃度		
C_{exp_air}	大気	mg/m ³	$C(1.5)$	大気中濃度 (沈着による減少を考慮した後)	mol/m ³ 式 V-40
C_{exp_soil}	土壌	mg/kg	C_{soil}	土壌中濃度 (10年平均)	mol/kg 式 V-73
$C_{exp_rootveg}$	地下部農作物	mg/kg	$C_{rootveg}$	地下部農作物中濃度	mol/kg 式 V-98
$C_{exp_ag_exp}$	地上部農作物 Exposed	mg/kg	C_{ag_exp}	地上部農作物中濃度 (Exposed)	mol/kg 式 V-101□
$C_{exp_ag_prot}$	地上部農作物 Protected	mg/kg	C_{ag_prot}	地上部農作物中濃度 (Protected)	mol/kg 式 V-117□
C_{exp_meat}	肉類	mg/kg	C_{meat}	牛肉中濃度	mol/kg 式 V-118
C_{exp_milk}	乳製品	mg/kg	C_{milk}	乳製品中濃度	mol/kg 式 V-121

暴露媒体中濃度			環境媒体中濃度		
C_{dwater}	飲料水	mg/L	$C_{river_man_ww}$	河川水中の溶存態濃度 (人 評価用)	mol/L 式 V-126
$C_{exp_fish_fresh}$	淡水魚	mg/kg	C_{fish_fresh}	魚介類中濃度 (淡水域)	mol/kg 式 V-129□
$C_{exp_fish_sea}$	海水魚	mg/kg	C_{fish_sea}	魚介類中濃度 (海水域)	mol/kg 式 V-130□
$C_{exp_water_env}$	水中濃度 (生態)	mg/L	$C_{waterbody_env_ww}$	水域の溶存態濃度 (生態評 価用)	mol/L 式 V-132
C_{exp_sed}	底質中濃度 (生態)	mg/kg	C_{sed_dry}	底質中濃度 (乾燥重量当た り)	mol/kg 式 V-133

1

2

3 X.3.1.3 排出源ごとの暴露シナリオにおける解離性モデル設定の経緯等

4 X.3.1.2 に解説した排出源ごとの暴露シナリオにおける解離性モデルについて、従来の暴
5 露評価モデルの数式と対応する解離性モデルの数式を並べて表示し、変更した数式につい
6 ては、その経緯を説明する。なお、従来の暴露評価モデルと解離性モデルの数式比較のし
7 やすさのため、個々の数式で使用しているパラメータの説明は省き、数式の表示が小さく
8 なっている場合がある。各々の数式については、V章及びX.3.1.2を参照されたい。

9

10 (1) 大気中濃度、土壌中濃度、水域濃度及び底質中濃度推計式の設定経緯

11 ① 解離性物質の大気中濃度、土壌中濃度、水中濃度、底質中濃度推計方針

12

- 13 ・ Franco and Trapp (2010)¹は、環境中動態モデルで用いられているフガシチーの代わ
14 りに活量を用いて解離性物質の非解離種とイオン種の環境中動態を推計する多媒体
15 モデルMAMI (Multimedia Activity Model applicable to neutral and Ionizable
16 modules)を開発している。
- 17 ・ フガシチーモデルでは、濃度をフガシチーとフガシチー容量の積 ($C = f \times Z$)で計算
18 するのと同様に、活量モデルでは、濃度を活量と活量容量の積 ($C = a \times B$)として
19 計算する。蒸気圧がほぼ無視できるイオン種のような物質には、空気中のガス態存
20 在量を基準とするフガシチーモデルよりも、水中での存在量を基準とする活量モデ
21 ルでの計算が適している。
- 22 ・ 活量は、活量係数と濃度の積 ($a = \gamma \times C$)である。X.3.1.2 (1)③iv)に示すように、
23 非解離種の γ はイオン強度から、イオン種の γ はイオン強度とその電荷から計算す
24 る。各環境媒体の構成要素ごとに化学種分率を計算し、それらの化学種ごとに γ を
25 考慮して環境中動態を推計できるようにモデル化したパラメータが、活量容量 (B)
26 である。
- 27 ・ Franco and Trapp (2010)¹は、大気中の浮遊粒子中水分や雲への分配も考慮している。

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

1 • 本章では、Franco and Trapp (2010)¹による解離性物質の環境中動態モデルの考え方を
2 を取り入れ、環境媒体の構成要素ごとに pH を考慮して Henderson-Hasselbalch 式
3 (X.3.1.2 (2))で非解離種とイオン種の分率を計算する。また、イオン種がほぼガス態
4 として存在せずに、水分へ分配されるため、大気に新たに浮遊粒子水分と雲を構成
5 要素として追加する。そして、環境媒体を構成する各要素への質量分布比の計算に
6 は、活量容量 (B)を使用する。化学種分率の計算のしやすさのため、質量濃度からモ
7 ル濃度に変更する。

9 ② 粒子固体-水分分配係数 (X.3.1.2 (4)大気粒子固体-空気分配係数 (K_{pn})と粒子固体-水
10 分配係数 (K_{sw}))

- 12 • 粒子固体-水分分配係数 (K_{sw})は、大気における粒子容量あたりの粒子吸着態と水への
13 溶存態の化学物質の濃度比である。
- 14 • 従来の暴露評価モデルでは、大気における化学物質の粒子吸着態の割合の計算に
15 Junge 式²を使用している。Junge 式²は、大気における化学物質 (ガス態と粒子吸
16 着態として存在することを仮定)とガス態の化学物質の濃度比を、蒸気圧を用いて計
17 算する数式である。
- 18 • Franco and Trapp (2010)¹では、水中での存在量を基準とする活量モデルを用いて、
19 大気粒子固体への分配を考慮するため粒子固体-水分分配係数 (K_{sw})を用いている。非
20 解離種の粒子-水分分配係数 ($K_{sw_{aps.n}}$)は、大気粒子固体-空気分配係数 (K_{pn})とヘンリー
21 係数 (H_n)から計算し、 K_{pn} の計算には、Harner and Bidleman の式に基づいた式
22 を用いている。イオン種の粒子-水分分配係数 ($K_{sw_{aps.i}}$)は、 K_{oc} を用いて推計している。
- 23 • 本章では、大気における浮遊粒子固体への非解離種の吸着の推計に、従来の暴露評
24 価モデルと同様に Junge 式²を使用するため、 K_{pn} 推計式を Junge 式²から導出する。
25 そして、Franco and Trapp (2010)¹と同様に、 K_{pn} と H_n から $K_{sw_{aps.n}}$ を計算する。
- 26 • イオン種の $K_{sw_{aps}}$ は、 K_{oc} 又は K_d の実測値がない場合には、Franco and Trapp
27 (2010)¹による式を用いて推計する。 K_{oc} 又は K_d の実測値がある場合には、同式で
28 用いられているイオン種の有機炭素補正土壌吸着係数 (K_{oc})の代わりに、実測値を
29 用いる。

解離性モデル	$K_{p_n} = K_{p_{n,Junge}} \quad \text{or} \quad K_{p_{n,Harner_and_Bidleman}}$	式 X-44
--------	---	--------

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.
² Junge, C.E.(1977) Basic Considerations About Trace Constituents in the Atmosphere as Related to the Fate of Global Pollutants. In: Suffet, I. H. (ed.) Fate of Pollutants in the Air and Water Environments Part 1, John Wiley and Sons, New York, 7-25.

	$Kp_{n.Junge} = \frac{CJ \times SP}{VPL \times f_{aps}}$	式 X-45
	$Kp_{n.Harner_and_Bidleman} = 0.54 \times \frac{Pow_n}{H_n} \times OC_{aps} \times \rho_{aps}$	式 X-46
	$Ksw_{aps.n} = Kp_n \times H_n$	式 X-47
解離性モデル (<i>Koc</i> 又は <i>Kd</i> の実測値 がある場合)	$Ksw_{aps.i} = Koc \times OC_{aps} \times \rho_{aps}$	式 X-48
解離性モデル (<i>Koc</i> 又は <i>Kd</i> の実測値 がない場合)	$Ksw_{aps.i} = Koc_i \times OC_{aps} \times \rho_{aps}$	式 X-49

1

2 ③ 大気中濃度 (X.3.1.2 (5)①大気中濃度)

3

4 ・ 従来の暴露評価モデルでは、排出量 (*Q*)と大気中濃度換算係数 (*a*)から求めた大気中
5 濃度と沈着による補正係数 (*K_{dep}*)より、大気中濃度 (沈着による減少を考慮した後)
6 (*C*(1.5))を推計している。

7 ・ 本章でも従来どおりの方法で計算するが、質量濃度をモル濃度に変更する。

8

従来の暴露 評価モデル	$C_0(1.5) = a \times Q'$	式 V-38
解離性モデル	$C_0(1.5) = \frac{a \times Q'}{1000 \times M}$	式 X-50

9

従来の暴露 評価モデル	$Q' = TEMA \times 10^{-3}$	式 V-39
	$C(1.5) = C_0(1.5) \times K_{dep}$	式 V-40
解離性モデル	同式を使用。	

10

11 ④ 大気から土壌への沈着量 (X.3.1.2 (5)②大気から土壌への沈着量)

12

13 ・ 従来の暴露評価モデルでは、図表 X-8 (41 ページ)に示すように、晴天時に、化学物
14 質はガス態と粒子吸着態として存在するとし、雨天時にはこれらのガス態と粒子吸
15 着態の化学物質が、雨水中へ取り込まれるとしている。

- 1 • Franco and Trapp (2010)¹では、大気は図表 X-28 に示すように、空気 (*aa*)、粒子
2 固体 (*aps*)、粒子水分 (*apw*)及び雲 (*ac*)で構成されるとし、各構成要素への化学物
3 質の分配を考慮している。
4 • 本章でも、Franco and Trapp (2010)¹と同様の大気構成要素を考慮し、図表 X-8 (41
5 ページ)に示すように、晴天時の大気は空気と粒子 (固体と水分)で構成され、雨天時
6 の大気は空気、粒子 (固体と水分)及び雲で構成されるとする。従来の暴露評価モデル
7 では、大気中の水分として雨水が考慮されていたが、本章では大気中の水分は雲
8 であるとし、その一部が雨となり湿性沈着すると考える。
9



10

11 **図表 X-28 Franco and Trapp (2010)¹によるモデルにおける大気の構成要素**

12

- 13 • Franco and Trapp (2010)¹及び Trapp et al. (2010)²では、各媒体中濃度は、非解離
14 種とイオン種の合計活量と見かけのバルク活量容量 (複数化学種の合計なので「見か
15 けの」、複数の構成要素の合計なので「バルク」)の積 ($C = a \times Bx$)であるとしてい
16 る。媒体内の構成要素間には分配平衡が仮定されているため、媒体内の活量は同じ
17 値になる。このため、媒体中濃度とその構成要素中濃度の比は、活量 (*a*)が相殺され、
18 大気中濃度と大気の構成要素濃度の比は、大気の見かけのバルク活量容量とその構
19 成要素の体積分率で重み付けした見かけの活量容量 (*Bx*)の比で表すことができる。
20 • 本章でも、大気中濃度と大気の構成要素濃度の比は、大気の見かけのバルク活量容
21 量とその構成要素の体積分率で重み付けした見かけの活量容量 (*Bx*)の比とする。大
22 気構成要素ごと (空気 (*aa*)、粒子固体 (*aps*)、粒子水分 (*apw*)及び雲 (*ac*)の活量
23 容量の計算には、Franco and Trapp (2010)¹の手法を用いる。
24

24

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

² Trapp, S., Franco, A. and Mackay, D. (2010) Activity-Based Concept for Transport and Partitioning of Ionizing Organics. Environ. Sci. Technol., 44, 6123–6129.

従来の暴露評価モデル	$FP = \frac{CJ \times SP}{VPL + CJ \times SP}$	式 V-41
	$1 - FP = \frac{VPL}{VPL + CJ \times SP}$	式 V-42
	$FAA = \frac{1 - FP}{1 + \frac{RRT \times TRF}{V_{rain} - TRF}}$	式 V-45
	$FAP = \frac{FP}{1 + \frac{RRT \times TRF}{V_{rain} - TRF}}$	式 V-46
解離性モデル	$FP = \frac{Bx_{aps} + Bx_{apw}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw}}$	式 X-51
	$1 - FP = \frac{Bx_{aa}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw}}$	式 X-52
	$FAA = \frac{Bx_{aa}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw} + Bx_{ac}}$	式 X-53
	$FAP = \frac{Bx_{aps} + Bx_{apw}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw} + Bx_{ac}}$	式 X-54

1

解離性モデル	$Bx_{aa} = f_{aa} \times H_n \times \phi_{ac.n}$	式 X-55
	$Bx_{aps} = f_{aps} \times \left(\frac{K_{sw_{aps.n}} \times \phi_{apw.n}}{\gamma_{a.n}} + \sum \frac{K_{sw_{aps.i}} \times \phi_{apw.i}}{\gamma_{a.i}} \right)$	式 X-56
	$Bx_{apw} = f_{apw} \times \left(\frac{\phi_{apw.n}}{\gamma_{a.n}} + \sum \frac{\phi_{apw.i}}{\gamma_{a.i}} \right)$	式 X-57
	$Bx_{ac} = f_{ac} \times \left(\frac{\phi_{ac.n}}{\gamma_{a.n}} + \sum \frac{\phi_{ac.i}}{\gamma_{a.i}} \right)$	式 X-58

2

- 3
- 従来の暴露評価モデルでは、雨天時と晴天時の沈着量 (DEP_r と DEP_s) をそれぞれの
- 4
- 日数で重み付けして、総沈着量 (DEP_{total}) を計算している。また、沈着による大気中
- 5
- 濃度の減少を考慮するため、沈着による補正係数 ($K_{dep,r}$ と $K_{dep,s}$) を用いている。
- 6
- 本章でも従来どおりの方法で計算するが、質量濃度をモル濃度に変更する。

7

従来の暴露評価モデル	$DEP_{total} = \frac{rainyday}{365} \times DEP_r \times K_{dep-r} + (1 - \frac{rainyday}{365}) \times DEP_s \times K_{dep}$	式 V-49
解離性モデル	同式を使用。	

1

従来の暴露評価モデル	$K_{dep-r} = \frac{Q_d}{DEP_r \times SUA} \times (1 - \exp(-\frac{DEP_r \times SUA}{Q_d}))$	式 V-50
	$K_{dep-s} = \frac{Q_d}{DEP_s \times SUA} \times (1 - \exp(-\frac{DEP_s \times SUA}{Q_d}))$	式 V-51
解離性モデル	$K_{dep-r} = \frac{Q_d}{DEP_r \times M \times 1000 \times SUA} \times (1 - \exp(-\frac{DEP_r \times M \times 1000 \times SUA}{Q_d}))$	式 X-59
	$K_{dep-s} = \frac{Q_d}{DEP_s \times M \times 1000 \times SUA} \times (1 - \exp(-\frac{DEP_s \times M \times 1000 \times SUA}{Q_d}))$	式 X-60

2

従来の暴露評価モデル	$K_{dep} = \frac{rainyday}{365} \times K_{dep-r} + (1 - \frac{rainyday}{365}) \times K_{dep-s}$	式 V-52
	$SUA = \pi \times ((R \times 1000)^2 - 100^2)$	式 V-53
	$Q_d = TEMA \times 10^6 / 365$	式 V-54
解離性モデル	同式を使用。	

3

- 4 ・ 従来の暴露評価モデルでは、雨天時の総沈着量 (DEP_r)は、ガス態乾性沈着量
5 ($DEP_{dry-g-r}$)、粒子吸着態乾性沈着量 ($DEP_{dry-p-r}$)、ガス態湿性沈着量 (DEP_{wet-g})及
6 び粒子吸着態湿性沈着量 (DEP_{wet-p})を合計して求めている。晴天時の総沈着量
7 (DEP_s)は、湿性沈着量を除くガス態乾性沈着量 ($DEP_{dry-g-s}$)及び粒子吸着態乾性沈着
8 量 ($DEP_{dry-p-s}$)を合計して求めている。
9 ・ 本章でも従来どおりの方法で計算する。

10

従来の暴露評価モデル	$DEP_r = DEP_{dry-g-r} + DEP_{dry-p-r} + DEP_{wet-g} + DEP_{wet-p}$	式 V-55
	$DEP_s = DEP_{dry-g-s} + DEP_{dry-p-s}$	式 V-56
	$DEP_{dry-g-r} = C_0(1.5) \times FAA \times Rag$	式 V-57
	$DEP_{dry-p-r} = C_0(1.5) \times FAP \times V_d$	式 V-58
	$DEP_{dry-g-s} = C_0(1.5) \times (1 - FP) \times Rag$	式 V-59
	$DEP_{dry-p-s} = C_0(1.5) \times FP \times V_d$	式 V-60
	$DEP_{wet-g} = Cr_g \times TRF$	式 V-61
	$DEP_{wet-p} = Cr_p \times TRF$	式 V-62

解離性モデル	同式を使用。	
--------	--------	--

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11

- 従来 of 暴露評価モデルでは、ガス態乾性沈着量の計算のため、ガス態沈着速度 (R_{ag}) を用いている。
- Franco and Trapp (2010)¹ではイオン種はほとんど揮発しないと考えられることから、イオン種の大気-水分配係数 (ヘンリー係数) は 0 であるとしている。このため、水中からの揮発と大気からのガス態の沈着を考慮する際には、水中の非解離種と空气中ガス態が平衡に達しているとして、非解離種のヘンリー係数 (H_n : 大気中のガス態と水中の非解離種との間の分配係数) を用いている。
- 本章でも従来の暴露評価モデルと同様の方法で、ガス態沈着速度 (R_{ag}) を推計するが、Franco and Trapp (2010)¹と同様に非解離種のヘンリー係数 (H_n) を用いて計算する。

従来の暴露評価モデル	$R_{ag} = \frac{KG \times KASLSA + \frac{KG \times KASLSW}{HENRY}}{KG + KASLSA + \frac{KASLSW}{HENRY}}$	式 V-63
解離性モデル	$R_{ag} = \frac{KG \times KASLSA + \frac{KG \times KASLSW}{H_n \times \phi_{sw,n}}}{KG + KASLSA + \frac{KASLSW}{H_n \times \phi_{sw,n}}}$	式 X-61

12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23

- 従来 of 暴露評価モデルでは、大気中のガス態の物質が、雨水に分配されるとして、雨水中ガス態濃度 (Cr_g) を計算している。また、大気中の浮遊粒子が捕集されるとして、雨水中粒子吸着態濃度 (Cr_p) を計算している。
- Franco and Trapp (2010)¹では、湿性沈着量の計算時に、雲と粒子 (水分と固体) が、雨水に捕集される他、大気中のガス態の物質が雨水に分配されるとしている。しかし、同論文に基づいた計算ツールとして公開されている Microsoft® Excel ファイル (Franco, 2010²)では、大気中のガス態の物質が雨水に分配されることは考慮していない。また、雲が雨水に捕集されるのではなく、雲中ガス態物質と雨水に捕集された粒子中物質が沈着すると考えている。
- 本章では、雨水中ガス態は、Franco (2010)²と同様に、雨水中ガス態濃度と雲中ガス態濃度が同じであるとする。雲中に存在する物質の大気中濃度 (大気体積あたりの雲

¹ Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim. Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789–799.

² Franco, A. (2010) Multimedia Activity Model for organic neutral and Ionizable chemicals (Microsoft® Excel ファイル),

- 1 中物質質量)と大気中濃度の比は、雲と大気の体積分率で重み付けした見かけの活量容
2 量 (Bx)の比である。この雲中に存在する物質の大気中濃度から、雲中濃度 (雲体積
3 あたりの雲中物質質量)を求めるため、雲の体積分率 (f_{ac})で除する。
4 ・ 雨水中粒子吸着態濃度の計算は、従来の暴露評価モデルと同様に計算する。

従来の暴露 評価モデル	$Cr_g = Ca_0 \times FAA \times \frac{1}{HENRY}$	式 V-67
解離性モデル	$Cr_g = Ca_0 \times \frac{Bx_{ac}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw} + Bx_{ac}} \times \frac{1}{f_{ac}}$	式 X-62

従来の暴露 評価モデル	$Cr_p = Ca_0 \times FAP \times CEP$	式 V-68
	$Ca_0 = \frac{C_0(1.5)}{Kc}$	式 V-69
解離性モデル	同式を使用。	

7
8 ⑤ 土壌中濃度 (X.3.1.2 (6)①土壌中濃度 C_{soil})

- 9
10 ・ 従来の暴露評価モデルでは、大気から土壌への総沈着量 (D_{air})と揮発、分解、表面流
11 出、溶脱、浸食及び巻上げによる土壌における消失の総1次速度定数 (k_{soil})を用いて、
12 10年間の期間平均の土壌中濃度を推計している。
13 ・ 本章でも従来どおりの方法で計算する。

従来の暴露 評価モデル	$C_{soil} = \frac{D_{air}}{k_{soil}} - \frac{D_{air} \times (1 - e^{-k_{soil} \times T})}{k_{soil}^2 \times T}$	式 V-73
	$D_{air} = \frac{DEP_{total}}{BD_{soil} \times DEP_{so}}$	式 V-74
	$k_{soil} = K_{sa} + (K_{sro} + K_{sle}) \times FSOW + (K_{srsup} + K_{ser}) \times FSOS + K_{sot}$	式 V-76
解離性モデル	同式を使用。 K_{sa} 、 K_{sot} 、 K_{sro} 、 K_{sle} 、 K_{ser} 、 K_{srsup} は、 k_{sa} 、 k_{sot} 、 k_{sro} 、 k_{sle} 、 k_{ser} 、 k_{srsup} に記号を変更した。	

- 15
16 ・ 従来の暴露評価モデルでは、土壌におけるガス態、溶存態及び粒子吸着態の質量分
17 布比 ($FSOA$ 、 $FSOW$ 、 $FSOS$)を、それぞれの存在状態の濃度が平衡に達しているこ
18 とを仮定して、式 V-77～式 V-79 で推計している。
19 ・ 本章では、 Koc 又は Kd の実測値がある場合には、測定条件と環境中の活量係数等が

1 同じであると仮定して、その実測値と非解離種のヘンリー係数 (H_n)を用いて、ガス
2 態、溶存態及び粒子吸着態の質量分布比を従来の暴露評価モデルと同様に計算する。
3 ・ Koc 又は Kd の実測値がない場合には、ガス態、溶存態及び粒子吸着態の質量分布比
4 は、土壌の見かけのバルク活量容量とその構成要素の体積分率で重み付けした見か
5 かけの活量容量 (Bx)の比で計算する。ただし、ここでは表示の簡略化のため、 Bx をあ
6 らかじめ展開した数式を示す。

7

従来の暴露 評価モデル	$FSOA = \frac{HENRY \times SOAF}{(HENRY \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sos} \times (1 - SOAF - SOWF)) \times DEN_{sos}}$	式 V-77
	$FSOW = \frac{SOWF}{(HENRY \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sos} \times (1 - SOAF - SOWF)) \times DEN_{sos}}$	式 V-78
	$FSOS = \frac{Koc \times OC_{sos} \times (1 - SOAF - SOWF) \times DEN_{sos}}{(HENRY \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sos} \times (1 - SOAF - SOWF)) \times DEN_{sos}}$	式 V-79
解離性モデル (Koc 又は Kd の実測値 がある場合)	$FSOA = \frac{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF}{(H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF)) \times \rho_{sp}}$	式 X-63
	$FSOW = \frac{SOWF}{(H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF)) \times \rho_{sp}}$	式 X-64
	$FSOS = \frac{Koc \times OC_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}}{(H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF)) \times \rho_{sp}}$	式 X-65
解離性モデル (Koc 又は Kd の実測値 がない場合)	$FSOA = \frac{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF}{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + \left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{sn}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{si}} \right) \times SOWF + \left(\frac{Koc_n \times OC_{sp} \times \phi_{sp,n}}{\gamma_{sn}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{sp} \times \phi_{sp,i}}{\gamma_{si}} \right) \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}}$	式 X-66
	$FSOW = \frac{\left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{sn}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{si}} \right) \times SOWF}{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + \left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{sn}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{si}} \right) \times SOWF + \left(\frac{Koc_n \times OC_{sp} \times \phi_{sp,n}}{\gamma_{sn}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{sp} \times \phi_{sp,i}}{\gamma_{si}} \right) \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}}$	式 X-67
	$FSOS = \frac{\left(\frac{Koc_n \times OC_{sp} \times \phi_{sp,n}}{\gamma_{sn}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{sp} \times \phi_{sp,i}}{\gamma_{si}} \right) \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}}{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + \left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{sn}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{si}} \right) \times SOWF + \left(\frac{Koc_n \times OC_{sp} \times \phi_{sp,n}}{\gamma_{sn}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{sp} \times \phi_{sp,i}}{\gamma_{si}} \right) \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}}$	式 X-68

8

9 ⑥ 土壌における消失の総 1 次速度定数 (X.3.1.2 (6)②土壌における消失の総 1 次速度
10 定数 k_{soil})

11

12 ・ 土壌における揮発の 1 次速度定数 (k_{sa})を推計する式 V-80 は式 X-69 のように、変
13 換できる。本章では、表示の簡略化のため式 X-69 を用いる。

14

従来の暴露評価モデル	$K_{sa} = \frac{\frac{1}{\frac{1}{KG \times HENRY} + \frac{1}{KASLSA \times HENRY + KASLSW}}}{SOAF \times HENRY + SOWF + (1 - SOAF - SOWF) \times Koc \times OC_{SOS} \times DEN_{SOS}} \times DEP_{SO}$	式 V-80
解離性モデル	$k_{sa} = \frac{FSOA \times R_{ag}}{SOAF \times DEP_{SO}}$ <p>K_{sa} は、k_{sa} に記号を変更した。</p>	式 X-69

1

2 ・ 本章でも、従来の暴露評価モデルと同様の方法で、土壌におけるその他の消失の 1
3 次速度定数 (k_{sot} , k_{sro} , k_{sel} , k_{ser} , k_{srsup})を計算する。

4

5 ⑦ 土壌間隙水中濃度 (X.3.1.2 (6)③土壌間隙水中濃度 $C_{porewater}$)

6

- 7 ・ 従来の暴露評価モデルでは、土壌間隙水中濃度は、土壌-水分配係数 ($K_{soil-water}$)を用
8 いて求めている。
- 9 ・ 本章でも同様に、 $K_{soil-water}$ を用いる。 $K_{soil-water}$ の推計には、土壌における質量分布
10 比の推計と同様に、 Koc 又は Kd の実測値がある場合には、その実測値と非解離種の
11 ヘンリー係数 (H_n)を用いて、従来の暴露評価モデルと同様に計算する。また、 Koc
12 又は Kd の実測値がない場合には、土壌の見かけのバルク活量容量と土壌間隙水の見
13 かけのバルク活量容量の比を用いて計算する。

14

従来の暴露評価モデル	$C_{porewater} = \frac{C_{soil} \times \frac{BD_{soil}}{1000}}{K_{soil-water}}$	式 V-96
解離性モデル	同式を使用。	

15

従来の暴露評価モデル	$K_{soil-water} = HENRY \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{SOS} \times DEN_{SOS} \times (1 - SOAF - SOWF)$	式 V-97
解離性モデル (Koc 又は Kd の実測値 がある場合)	$K_{soil-water} = H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sp} \times \rho_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF)$	式 X-70
解離性モデル (Koc 又は Kd の実測値 がない場合)	$K_{soil-water} = \frac{H_n \times \phi_{sw,n} \times SOAF + \left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{sn}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{si}} \right) \times SOWF + \left(\frac{Koc_n \times OC_{sp} \times \phi_{sp,n}}{\gamma_{sn}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{sp} \times \phi_{sp,i}}{\gamma_{si}} \right) \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}}{\left(\frac{\phi_{sw,n}}{\gamma_{sn}} + \sum_i \frac{\phi_{sw,i}}{\gamma_{si}} \right)}$	式 X-71

16

17 ⑧ 水域濃度・底質中濃度 (X.3.1.2 (9)水域濃度、魚介類中濃度及び底質中濃度の推計)

18

- 19 ・ 人の健康に係わる評価及び生態評価に用いる水域濃度の推計については、基本的に

1 は従来の暴露評価と同様の計算方法とするが、質量濃度をモル濃度に変更する。
2

従来の暴露評価モデル	$C_{river_man} = \frac{TEMW \times 10^6 [kg \rightarrow mg]}{V_{river_man} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60) [year \rightarrow sec] \times 1000 [m^3 \rightarrow L]}$	式 V-123
	$C_{sea_man} = \frac{TEMW \times 10^6 [kg \rightarrow mg]}{V_{sea_man} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60) [year \rightarrow sec] \times 1000 [m^3 \rightarrow L]}$	式 V-125
	$C_{waterbody_env} = \frac{TEMW \times 10^6 [kg \rightarrow mg]}{V_{waterbody_env} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60) [year \rightarrow sec] \times 1000 [m^3 \rightarrow L]}$	式 V-131
解離性モデル	$C_{river_man} = \frac{TEMW}{V_{river_man} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60) [year \rightarrow sec] \times M}$	式 X-93
	$C_{sea_man} = \frac{TEMW}{V_{sea_man} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60) [year \rightarrow sec] \times M}$	式 X-94
	$C_{waterbody_env} = \frac{TEMW}{V_{waterbody_env} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60) [year \rightarrow sec] \times M}$	式 X-97

3

従来の暴露評価モデル	$C_{sea_man} = \frac{C_{river_man}}{DILUTION_{sea}}$	式 V-124
	$C_{waterbody_man_ww} = C_{waterbody_man} \times (1 - fwp_{waterbody})$	式 V-126
	$C_{waterbody_env_ww} = C_{waterbody_env} \times (1 - fwp_{waterbody})$	式 V-132
解離性モデル	同式を使用。ただし、 $fwp_{waterbody}$ は、 FWS_{xm} に記号を変更した。	

4

- 5 ・ 粒子への吸着に関するパラメータである水中懸濁粒子吸着質量分布比（水域）（ FWS ）
6 については、土壌中濃度や土壌間隙水中濃度と同様に、 Koc 又は Kd の実測値がある
7 場合には、それを用いて、従来の暴露評価モデルと同様に計算する。また、 Koc 又は
8 Kd の実測値がない場合には、水域の見かけのバルク活量容量と粒子吸着態の見かけ
9 の活量容量を用いて推計する。

10

従来の暴露評価モデル	$FWS_{xm} = \frac{Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6})}{1 + Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6})}$	式 V-127
解離性モデル (Koc 又は Kd の実測値がある場合)	$FWS_{xm} = \frac{Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6} [mg \rightarrow kg])}{1 + Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6} [mg \rightarrow kg])}$	式 X-95

解離性モデル (<i>Koc</i> 又は <i>Kd</i> の実測値がない場合)	$FWS_{xm} = \frac{\left(\frac{Koc_n \times OC_{xep} \times \phi_{xep,n}}{\gamma_{xm,n}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{xep} \times \phi_{xep,i}}{\gamma_{xm,i}} \right) \times (CW_{ss} \times 10^{-6})}{\left(\frac{\phi_{xew,n}}{\gamma_{xm,n}} + \sum_i \frac{\phi_{xew,i}}{\gamma_{xm,i}} \right) \times f_{xew} + \left(\frac{Koc_n \times OC_{xep} \times \phi_{xep,n}}{\gamma_{xm,n}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{xep} \times \phi_{xep,i}}{\gamma_{xm,i}} \right) \times (CW_{ss} \times 10^{-6})}$	式 X-96
--	---	--------

1
2
3
4
5
6
7
8
9

- ・ 生態評価に用いる底質中濃度の推計についても、基本的には従来の暴露評価と同様の計算方法とする。
- ・ 粒子への吸着に関するパラメータである懸濁物質-水分配係数 ($K_{susp\ water}$) の推計については、土壌中濃度や土壌間隙水中濃度と同様に、*Koc* 又は *Kd* の実測値がある場合には、それを用いて、従来の暴露評価モデルと同様に計算する。また、*Koc* 又は *Kd* の実測値がない場合には、懸濁物質の見かけのバルク活量容量と溶存態の見かけの活量容量を用いて推計する。

従来の暴露評価モデル	$C_{sed_wet} = \frac{K_{susp-water}}{RHO_{susp}} \times C_{waterbody_env_ww} \times 1000$	式 V-133
	$C_{sed_dry} = C_{sed_wet} \times conv_{susp}$	式 V-135
	$conv_{susp} = \frac{RHO_{susp}}{Fsolid_{susp} \times RHO_{solid}}$	式 V-136
解離性モデル	同式を使用。	

10

従来の暴露評価モデル	$K_{susp-water} = Fwater_{susp} + Fsolid_{susp} \times \frac{FOC_{susp} \times Koc}{1000} \times RHO_{solid}$	式 V-134
解離性モデル (<i>Koc</i> 又は <i>Kd</i> の実測値がある場合)	$K_{susp-water\ xm} = Fwater_{susp} + Fsolid_{susp} \times Koc \times OC_{xep} \times \rho_{xep}$	式 X-98
解離性モデル (<i>Koc</i> 又は <i>Kd</i> の実測値がない場合)	$K_{susp-water\ xm} = Fwater_{susp} + Fsolid_{susp} \times \frac{\left(\frac{Koc_n \times OC_{xep} \times \phi_{xep,n}}{\gamma_{xm,n}} + \sum_i \frac{Koc_i \times OC_{xep} \times \phi_{xep,i}}{\gamma_{xm,i}} \right)}{\left(\frac{\phi_{xew,n}}{\gamma_{xm,n}} + \sum_i \frac{\phi_{xew,i}}{\gamma_{xm,i}} \right)} \times \rho_{xep}$	式 X-99

11
12
13
14
15
16
17

(2) 農作物中濃度推計式の設定経緯

① 解離性物質の農作物中濃度推計方針

- ・ 解離性物質の大気中ガス態及び土壌由来の地上部農作物中モデルと地下部農作物中モデルには、従来の推計法を開発した Trapp が提唱する解離性物質の植物モデルの考え方を導入する。粒子吸着態の沈着については従来どおりの方法で推計する。

- 1 • Trapp は、「Plant Contamination」 (Trapp and Mc Farlan, 1995¹)を初めとする植
2 物モデルに関する多くの論文や書籍を執筆する等、植物モデルの開発の第一人者で
3 ある。インターネット上でも、植物モデルに関するサマースクールのテキスト
4 (Trapp, 2013a²)他、各種情報を公開している。Trapp の植物モデルは、EU のリスク
5 評価ツールの EUSES (European Union System for the Evaluation of Substances)
6 等にも採用されている。
- 7 • 解離性物質の植物モデルについては、Trapp (2009)³ にまとめられており、その基本
8 的な考え方 (Trapp, 2004⁴)や根モデル (Trapp, 2000⁵)については論文が発表されて
9 いる。さらに、これらのモデルの Microsoft ® Excel ファイル版 (Trapp, 2013b⁶)を
10 公開している。各文献や Excel ファイルにまとめられた情報は、完全に一致しない
11 ため、ここでは、Trapp (2009)³における記述を中心に検討を行い、不明な箇所は論
12 文 (Trapp, 2000⁵)やサマースクールのテキスト (Trapp, 2013a²)と Excel ファイル
13 (Trapp, 2013b⁶)等で補った。また、Trapp らによる論文や書籍などを活用して設定
14 根拠の確認を行ったうえで、定数や手法を設定し、従来の暴露評価モデルの前提や
15 計算結果にできる限り近づけた。
- 16 • Trapp (2009)³の植物モデルは、図表 X-29 に示すように、大きく根と葉の 2 つのコ
17 ンパートメントで構成される。そして、葉のコンパートメントでは、土壌からの蒸
18 散流による流入や大気からの吸収と大気への揮発、代謝による消失と成長による希
19 釈が考慮され、根のコンパートメントでは、土壌からの蒸散流による流入と葉への
20 流出、代謝による消失と成長による希釈が考慮されている。
- 21

¹ Trapp, S and Mc Farlane, C. (ed.) (1995) Plant Contamination; Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes, Lewis/CRC Press, Boca Raton, FL.

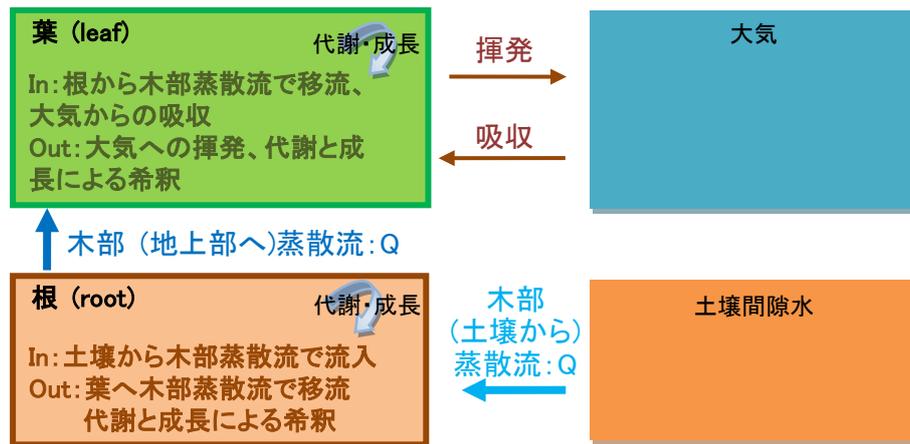
² Trapp, S. (2013a) Uptake of Organic Chemicals into Plants Models, Models, Equations and Exercises.

³ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

⁴ Trapp S. (2004) Plant Uptake and Transport models for Neutral and Ionic chemicals, Environ. Sci and Pollut. Res. 11(1), 33-39.

⁵ Trapp, S. (2000) Modelling Uptake into Roots and Subsequent Translocation of Neutral and Ionisable Organic Compounds. Pest. Manag. Sci., 56(9), 767-778.

⁶ Trapp, S. (2013b) 42 Standard Model for Ionics, Summer course 12906 Modeling of Plant Uptake(Microsoft ® Excel ファイル),

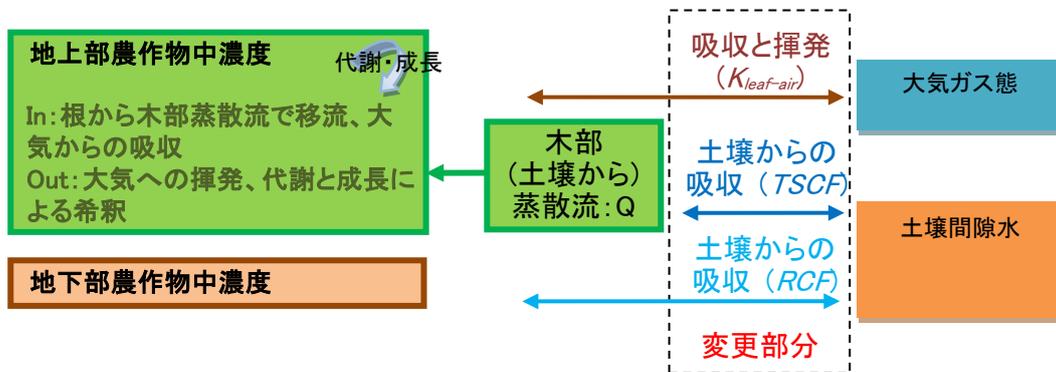


図表 X-29 Trapp による解離性物質の植物モデルイメージ図

- 従来曝露評価モデルでは、地下部農作物中濃度の推計に用いる地下部農作物濃縮係数 (*RCF*) を Briggs et al. (1982)¹ の実測値から求めた回帰式により計算しているが、この回帰式は解離性物質を対象としていない。
- 本章では、地下部農作物濃縮係数 (*RCF*) の計算に、Trapp (2009)² による解離性物質の植物モデルの考え方を導入する (図表 X-30)。
- 従来曝露評価モデルでは、地上部農作物中濃度の計算に Trapp and Matthies (1995)³ や Trapp and Matthies (1998)⁴ の式を用いている。これらのモデルでは、植物への粒子吸着態の沈着の影響は、非常に揮発しにくい物質に限られるとし、粒子吸着態の沈着は考慮していない (Trapp and Matthies, 1995³)。Trapp (2013a)⁵ によると、現在のモデルでは、粒子吸着態の沈着も考慮しているが、ガス態の吸収の計算に用いるコンダクタンスと粒子の沈着速度の値を揃えることで、ガス態と粒子吸着態の区別をせずに計算できるようになっている。解離性を考慮するため、環境中から植物体内への物質の取り込みの推計式を変更した Trapp (2009)² でも、ガス態と粒子吸着態の区別をせずに計算できるようになっている。
- 本章では、粒子吸着態の沈着については、従来どおりの方法で推計し、大気中ガス態からの吸収と揮発及び根からの吸収による取り込みの計算についてのみ Trapp

¹ Briggs, G. G., Bromilow, R. H. and Evans, A. A. (1982) Relationships Between Lipophilicity and Root Uptake and Translocation of Non-Ionised Chemicals by Barley., Pest Management Science, 13(5), 495-504.
² Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.
³ Trapp, S. and Matthies, M. (1995) Generic One-Compartment Model for Uptake of Organic Chemicals by Foliar Vegetation, Environ. Sci. Technol, 29, 2333-2338.
⁴ Trapp, S. and Matthies, M. (1998) 9.3 PLANT Model. In: Trapp, S. and Matthies, M., Chemodynamics and Environmental Modeling, Springer, Berlin, 118-123.
⁵ Trapp, S. (2013a) Uptake of Organic Chemicals into Plants Models, Models, Equations and Exercises.

(2009)¹による解離性物質の植物モデルの考え方を取り入れる。具体的には、大気中ガス態からの吸収と揮発については、大気中のガス態物質の葉・茎への濃縮係数 ($K_{leaf-air}$)と植物の導管を流れる水分と土壌中水分の間の分配係数 ($TSCF$)の推計に解離性モデルの考え方を導入する (図表 X-30)。



図表 X-30 従来の暴露評価モデルからの変更点

- Trapp (2009)¹の植物モデルは、生体膜の内外の移動を計算するために用いる植物体内分配係数を計算する際に、非解離種の媒体間の拡散は濃度勾配を駆動力とする Fick の第一法則に基づいて計算し、イオン種の拡散は濃度勾配の他に電位勾配も考慮にいたれた Nernst 式に基づいて計算する。また、植物体内の各媒体の pH の違いによる化学種分率の違いを考慮することにより、イオントラップを考慮する。活量モデルを用いることにより、植物体内の媒体ごとのイオン強度による影響も考慮する。
- 本章では、 $K_{leaf-air}$ 、 $TSCF$ 及び RCF の推計に植物体内分配係数を用いる。

② 地下部農作物中濃度 (X.3.1.2 (7)①地下部農作物中濃度)

- 従来の暴露評価モデルでは、Briggs et al. (1982)²の実測値から求めた回帰式により算出される地下部農作物中濃縮係数 (RCF : 土壌間隙水と根中濃度の比)を用いて地下部農作物中濃度を推計している。
- Trapp (2009)¹は、根モデルより求められた土壌中濃度と根中濃度の比を用いて、根中の濃度を計算している。
- 本章では、土壌間隙水中濃度と Trapp (2009)¹の解離性物質の根モデルにより求められる根中濃度の比を RCF として、地下部農作物中濃度を推計する。

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

² Briggs, G. G., Bromilow, R. H. and Evans, A. A. (1982) Relationships Between Lipophilicity and Root Uptake and Translocation of Non-Ionised Chemicals by Barley, Pest Management Science, 13(5), 495-504.

- 1 ・ Trapp (2009)¹では、根中の濃度の推計時に植物体内における代謝と成長による希釈
2 を考慮している。Briggs et al. (1982)²では、24 時間又は 48 時間化学物質に暴露さ
3 れた植物中濃度測定データを用いており、*RCF* の推計式にはその期間内の代謝や成
4 長の影響も含まれているとも考えられるが、代謝の影響は、小さかったとされてい
5 る。代謝・成長による影響を考慮した Trapp (2009)¹ のモデルを用いた *RCF* 推計結
6 果は、Briggs et al. (1982)² による式を用いた *RCF* 推計結果を大きく下回る結果とな
7 ったため、本章では代謝・成長による影響は考慮しない。
- 8 ・ Trapp (2009)¹ の根モデルにおいて、代謝・成長による影響を考慮しない場合、根中
9 濃度は土壌からの蒸散流中の物質の取り込みのみを考慮することになり、定常状態
10 における地下部農作物中濃縮係数 (*RCF*) は、Trapp (2009)¹ のモデルから求められる
11 根-土壌間隙水分配係数 ($K_{root-sw}$) になる。
- 12 ・ *RCF* 推計式における *logPow* の下限及び上限の範囲は、根-土壌間隙水分配係数
13 ($K_{root-sw}$) を推計する過程で使用する生体膜の質量移動係数 ($MTC_{biomembrane}$) 推計式
14 (式 X-83) 及び脂質-水分配係数 ($Klipid_{xm}$) の推計式 (式 X-89 及び式 X-90) 中の
15 *logPow* に対して設定する下限及び上限の範囲となる。

17 地下部農作物中濃度と *RCF* の推計

従来の暴露 評価モデル	$C_{rootveg} = C_{porewater} \times RCF \times VG_{rootveg}$	式 V-98
解離性モデル	同式を使用。	

従来の暴露 評価モデル	$-0.57 \leq \log Pow < 2$ のとき、 $RCF = 10^{0.77 \times \log Pow - 1.52} + 0.82$	式 V-99
	$2 \leq \log Pow \leq 8.2$ のとき、 $RCF = 10^{0.77 \times \log Pow - 1.52}$	式 V-100
解離性モデル	$RCF = K_{root-sw}$	式 X-72

- 19
- 20 ・ Trapp (2009)¹ には、根-土壌間隙水分配係数 ($K_{root-sw}$) は定義されていないが、Trapp
21 (2013b)³ による根-土壌間隙水分配係数 ($K_{root-sw}$) 推計式は、Trapp (2009)¹ の根中濃度
22 推計式を土壌間隙水中濃度で割り、展開した数式である。根は、細胞質と液胞から
23 なるかと仮定されており、根中濃度は、細胞質中濃度と液胞中濃度をそれぞれの容積

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

² Briggs, G. G., Bromilow, R. H. and Evans, A. A. (1982) Relationships Between Lipophilicity and Root Uptake and Translocation of Non-Ionised Chemicals by Barley, Pest Management Science, 13(5), 495-504.

³ Trapp, S. (2013b) 42 Standard Model for Ionics, Summer course 12906 Modeling of Plant Uptake (Microsoft® Excel ファイル).

1 で重み付けした平均値で求められる。細胞質及び液胞と土壌間隙水の濃度の間には
 2 平衡が仮定されているため、細胞質と液胞中濃度を土壌間隙水中濃度で割ったもの
 3 は、それぞれ細胞質・土壌間隙水分配係数 ($K_{cytosol-sw}$)と液胞・土壌間隙水濃度
 4 ($K_{vacuole-sw}$)である。

- 5 ・ 本章では、Trapp (2013b)¹⁾による根・土壌間隙水分配係数 ($K_{root-sw}$)推計式を採用する。

解離性モデル	$K_{root-sw} = \frac{K_{cytosol-sw} \times V_{cytosol} + K_{vacuole-sw} \times V_{vacuole}}{V_{cytosol} + V_{vacuole}} \div \rho_{root}$	式 X-73
--------	--	--------

7
 8 ③ 大気中の粒子吸着態物質の沈着による地上部農作物中濃度 (X.3.1.2 (7)②i)大気中
 9 の粒子吸着態物質の沈着による地上部農作物中濃度)

- 10
 11 ・ 従来の暴露評価モデルと同じ数式を用いて、農作物への大気中の粒子吸着を推計す
 12 る。

従来の暴露評価モデル	$C_{ag_aer} = \frac{DEP_{total_p_ag}}{Mf \times Rv} [1 - \exp(-Rv \times 60)]$	式 V-106
	$C_{grass_aer} = C_{ag_aer}$	式 V-107
	$DEP_{total_p_ag} = RES_{wetdep} \times \frac{rainyday}{365} \times DEP_{wet_p} \times K_{dep_r} + RES_{drydep} \times \left\{ \frac{rainyday}{365} \times DEP_{dry_p_r} \times K_{dep_r} + \left(1 - \frac{rainyday}{365}\right) \times DEP_{dry_p_s} \times K_{dep_s} \right\}$	式 V-108
解離性モデル	同式を使用。	

14
 15 ④ 大気中のガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度 (X.3.1.2 (7)②ii)大気中のガス
 16 態及び土壌由来の地上部農作物中濃度)

- 17 ・ 従来の暴露評価モデルでは、Trapp and Matthies (1998)²⁾によるモデルを用いている。
- 18 ・ Trapp (2009)³⁾では、同じモデルをベースに解離性物質にも適用できるようにするた
 19 めの数式変更のみがなされているため、本章でも同様の変更を行う。
- 20 ・ 従来の暴露評価モデルと Trapp (2009)³⁾による葉の濃度推計式を比較し、両者の違い
 21 は、大気でのガス態の化学物質の葉・茎への濃縮係数 ($K_{leaf-air}$)及び植物の導管を流
 22 れる水分と土壌中水分の間の分配係数 ($TSCF$)の推計方法の違いとして集約する。

¹ Trapp, S. (2013b) 42 Standard Model for Ionics, Summer course 12906 Modeling of Plant Uptake (Microsoft® Excel ファイル),

² Trapp, S. and Matthies, M. (1998) 9.3 PLANT Model. In: Trapp, S. and Matthies, M., Chemodynamics and Environmental Modeling, Springer, Berlin, 118-123.

³ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

- 1 ・ *TSCF* 推計式における *logPow* の下限及び上限の範囲は、木部-土壌間隙水分配係数
2 ($K_{xylem-sw}$)を推計する過程で使用する脂質-水分配係数 ($K_{lipid_{xm}}$) の推計式 (式 X-89
3 及び式 X-90)中の *logPow*に対して設定する下限及び上限の範囲となる。

従来の暴露評価モデル	$C_{ag_gas_r} \text{ および } C_{grass_gas_r} = \left(\frac{C_{air_g} \times g_{plant} \times Area_{plant} + \frac{C_{porewater} \times 1000 [L/m^3] \times TSCF \times Q_{transp}}{V_{leaf} \times BD_{plant}}}{V_{leaf} \times BD_{plant}} \right) \left\{ 1 - e^{-\left[\frac{g_{plant} \times Area_{plant}}{K_{leaf-air} \times V_{leaf}} \lambda_E \lambda_G \right] \times 60} \right\} \times VG_{ag}$ $\frac{Area_{plant} \times g_{plant}}{K_{leaf-air} \times V_{leaf}} + \lambda_E + \lambda_G$	式 V-112
	$C_{air_g} = \frac{rainyday}{365} \times C_0 (1.5) \times K_{dep_r} \times FAA + \left(1 - \frac{rainyday}{365} \right) \times C_0 (1.5) \times K_{dep_s} \times (1 - FP)$	式 V-113
解離性モデル	同式を使用。	

- 5
6 ・ 従来の暴露評価モデルと Trapp (2009)¹による葉中の濃度推計式から、大気中のガス
7 態物質の葉・茎への濃縮係数 ($K_{leaf-air}$)及び植物の導管を流れる水分と土壌中水分の
8 間の分配係数 (*TSCF*)の推計式を導出した。
9 ・ Trapp and Matthies (1998)²及び Trapp (2009)¹では、葉は脂質と水分からなると仮
10 定している。しかし、従来の暴露評価モデルでは、EUSES³の様に、Trapp and
11 Matthies (1998)²の式に葉の50%が空気という仮定を追加し、大気中でガス態物質
12 の葉・茎への濃縮係数 ($K_{leaf-air}$)を推計している (式 V-114)。
13 ・ 葉肉細胞間には空気間隙が多く含まれると考えられる (Mc Farlane, 1995⁴)ことか
14 らも、本章でも、式 V-114 と同様に、葉の50%が空気であると仮定する。

従来の暴露評価モデル	$K_{leaf-air} = FPA + \frac{K_{plant-water}}{K_{air-water}}$	式 V-114
	$K_{plant-water} = FPW + FPLPD \times (10^{\log Pow})^b$	式 V-115
解離性モデル		式 X-74

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.
² Trapp, S. and Matthies, M. (1998) 9.3 PLANT Model. In: Trapp, S. and Matthies, M., Chemodynamics and Environmental Modeling, Springer, Berlin, 118-123.
³ EC (2008) EUSES 2.1 background report: chapter III model calculations
⁴ Mc Farlane, J.C. (1995) Anatomy and Physiology of Plant Conductive Systems. In: Trapp, S. and Mc Farlane, C. (ed.), Plant Contamination; Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes, Lewis/CRC Press, Boca Raton, FL, 13-34.

	$K_{leaf-air} = FPA + (1 - FPA) \times \frac{\left(\frac{V_{cytosol} + V_{vacuole} \times K_{vacuole-cytosol}}{V_{cytosol} + V_{vacuole}} \right)}{K_{air-water} \times G_{cytosol\ n}}$	
--	---	--

1

従来の暴露評価モデル	$-0.5 < \log Pow < 4.5$ のとき $TSCF = 0.784 \times e^{-\frac{(\log Pow - 1.78)^2}{2.44}}$	式 V-116
解離性モデル	$TSCF = K_{xylem-sw}$	式 X-75

2

3 ⑤ 植物体内分配係数 (X.3.1.2 (7)④植物体内分配係数)

- 4 ・ Trapp (2009)¹と同様に、液胞及び木部-土壌間隙水分配係数 ($K_{vacuole-sw}$ 及び $K_{xylem-sw}$)
5 は、液胞及び木部-細胞質分配係数 ($K_{vacuole-cytosol}$ 及び $K_{xylem-cytosol}$)と細胞質-土壌分配
6 係数 ($K_{cytosol-sw}$)の積とする。

7

解離性モデル	$K_{vacuole-sw} = K_{vacuole-cytosol} \times K_{cytosol-sw}$	式 X-76
	$K_{xylem-sw} = K_{xylem-cytosol} \times K_{cytosol-sw}$	式 X-77

8

- 9 ・ Trapp (2009)¹では、生体膜の内外の濃度は平衡に達しており、流入と流出のフラッ
10 クスが同じになると仮定されている。図表 X-11 (36 ページ)に示す細胞質-土壌間隙
11 水分配係数、液胞-細胞質分配係数及び木部-細胞質分配係数は、この平衡の仮定を置
12 いて計算している。
- 13 ・ Trapp (2009)¹では、植物体内の媒体ごとに非解離種とイオン種の分率を考慮して、
14 非解離種の拡散フラックスを Fick の第一法則に基づいて推計し、イオン種の拡散フ
15 ラックスを Nernst 式に基づいて推計している。
- 16 ・ Trapp (2009)¹では、植物体内の各媒体の pH の違いによる化学種分率の違いを考慮
17 し、また活量を用いることにより植物体内のイオン強度による影響を考慮している。
- 18 ・ 本章では、細胞質-土壌間隙水分配係数、液胞-細胞質分配係数及び木部-細胞質分配
19 係数の推計に、Trapp (2009)¹による式を用いる。

20

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

解離性モデル	$K_{in-out} = \frac{E_{(in)-out}}{E_{in-(out)}}$	式 X-78
	$E_{(in)-out} = MTC_{membrane.n} \times G_{out.n} + MTC_{membrane.i} \times \frac{N_{in-out}}{(\exp(N_{in-out})-1)} \times G_{out.i}$	式 X-79
	$E_{in-(out)} = MTC_{membrane.n} \times G_{in.n} + MTC_{membrane.i} \times \frac{N_{in-out}}{(\exp(N_{in-out})-1)} \times \exp(N_{in-out}) \times G_{in.i}$	式 X-80

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17

- 細胞質-土壌間隙水分配係数、液胞-細胞質分配係数及び木部-細胞質分配係数の推計に用いるパラメータを算出する式について、順次説明する。
- 細胞外から細胞質に進入する物質は、細胞壁と細胞膜を通過する。このため、植物細胞内外の質量移動係数 (MTC_{cell})は、細胞壁及び細胞膜 (生体膜)の質量移動係数 ($MTC_{cellwall}$ 及び $MTC_{biomembrane}$)を統合した値である。
- ただし、Trapp (2009)¹では、解離性物質のような高極性物質については、ほとんど水分とみなせる細胞壁の質量移動係数 ($MTC_{cellwall}$)は、細胞膜と比較して非常に大きいため考慮する必要がないとしている。なお、 $MTC_{cellwall}$ は Trapp (2000)²で計算した 0.00025 m/sec であるとしている。
- 本章では、従来の暴露評価モデルとの計算結果比較等のため、非解離性物質の計算を行うことも想定し、細胞壁の質量移動係数 ($MTC_{cellwall}$)は 0.00025 m/sec とする。
- また、従来の暴露評価モデルにおける RCF 及び $TSCF$ 推計式における $\log Pow$ の上限と下限の範囲は本式に設定し、地下部農作物の計算時には $\log Pow_n$ の下限値は 0.57、上限値は 8.2 とし、地上部農作物の計算時には下限値は 0.5、上限値は 4.5 とし、範囲外の値は下限値あるいは上限値とする。

解離性モデル	$MTC_{cell.n} = \frac{1}{\frac{1}{MTC_{biomembrane.n}} + \frac{1}{MTC_{cellwall}}}$	式 X-81
	$MTC_{cell.i} = \frac{1}{\frac{1}{MTC_{biomembrane.i}} + \frac{1}{MTC_{cellwall}}}$	式 X-82
	$MTC_{biomembrane.n} = 10^{\log Pow_n - 6.7}$	式 X-83

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

² Trapp, S. (2000) Modelling Uptake into Roots and Subsequent Translocation of Neutral and Ionisable Organic Compounds. Pest. Manag. Sci., 56(9), 767-778.

	$MTC_{biomembrane.i} = 6.89 \times 10^{-4} \times MTC_{biomembrane.n}$	式 X-84
--	--	--------

- 1
- 2
- 3
- 4
- Nernst 式の数 (N_{x-x})は、媒体間の電位差 (El_{x-x})で決まる値で、Trapp (2009)¹に示されている式で計算する。

解離性モデル	$N_{x-x} = \frac{z \times El_{x-x} \times F}{R \times T}$	式 X-85
--------	---	--------

- 5
- 6
- 7
- 8
- 9
- 10
- 11
- 12
- Trapp (2009)¹では、非解離種の活量 (Act_n)を総濃度 (C_{total})で除した値を、活量容量と定義しているが、Franco and Trapp (2010)²では、環境媒体の構成要素ごとに非解離種とイオン種それぞれについて、その活量 (Act)と活量容量 (B)の積を濃度としている。
 - 本章では、非解離種の活量 (Act_n)を総濃度 (C_{total})で除した値を総濃度あたりの活量 (G)と定義する。

解離性モデル	$G_{xmn} = \frac{1}{\frac{W_{xm}}{\gamma_{xmn}} + \frac{Klipid_{xmn}}{\gamma_{xmn}} + (W_{xm} + Klipid_{xmn}) \frac{\phi_{xmi}}{\gamma_{xmi} \times \phi_{xmn}}}$	式 X-86
	$G_{sw n} = \frac{1}{\left(\frac{1}{\gamma_{sn}} + \frac{\phi_{swi}}{\gamma_{si} \times \phi_{sw n}} \right)}$	式 X-87
	$G_{xi} = G_{xn} \times \frac{\phi_{xi}}{\phi_{xn}}$	式 X-88

- 13
- 14
- 15
- 16
- 17
- 18
- 脂質-水分配係数 ($Klipid$)の計算にも、Trapp (2009)¹による数式を用いる。
 - 同式で用いられている植物脂質と 1-オクタノール間の差に対する修正指数 (b)は植物種ごとの 1-オクタノールと植物の脂質との間の補正係数である (Trapp and Matthies (1995)³)。
 - Trapp (2013a)⁴では、修正指数 (b)を、根では 0.77、葉では 0.95 としている。Trapp

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants.

In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

² Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2, 4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim., Environ. Toxicol. Chem., 29(4), 789-799.

³ Trapp, S. and Matthies, M. (1995) Generic One-Compartment Model for Uptake of Organic Chemicals by Foliar Vegetation, Environ. Sci. Technol, 29, 2333-2338.

⁴ Trapp, S. (2013a) Uptake of Organic Chemicals into Plants Models, Models, Equations and Exercises.

(2009)¹では、それらの統合案として、0.85 が提案されている。Trapp and Matthies (1995)²でも、根では 0.77、葉では 0.95 としており、根拠として、従来の暴露評価モデルで *RCF* と *TSCF* の計算に用いている Briggs et al. (1982)³による大麦の根及びシュート (葉や茎) を用いた実測値より求めた回帰式を引用している。

- ・ 本章では、従来の暴露評価モデルとの整合性を保つため、地下部農作物における計算には修正指数 (*b*) として 0.77 を用い、地上部農作物における計算には 0.95 を用いる。
- ・ また、従来の暴露評価モデルにおける *RCF* 及び *TSCF* 推計式における *logPow* の上限と下限の範囲は本式に設定し、地下部農作物の計算時には *logPow_n* 及び *logPow_i* の下限値は 0.57、上限値は 8.2 とし、地上部農作物の計算時には下限値は 0.5、上限値は 4.5 とし、範囲外の値は下限値あるいは上限値とする。

解離性モデル	$Klipid_{xm,n} = L_{xm} \times (10^{\log Pow_n})^b$	式 X-89
	$Klipid_{xm,i} = L_{xm} \times (10^{\log Pow_i})^b$	式 X-90

⑥ 植物体内の器官や組成間の電位差 (*EL_{x-y}*) の設定値

- ・ Trapp による各文献では、図表 X-31 のとおり文献により異なる植物体内の器官や組成間の電位差 (*EL_{x-y}*) を用いている。
- ・ 本章の式 X-85 では、Trapp (2009)¹ のデータを用いる。

図表 X-31 植物体内の器官や組成間の電位差 (*EL_{x-y}*) [単位: V]

	Trapp (2009) ¹	Trapp (2013a) ⁴	Trapp (2013b) ⁵
細胞質-土壌間隙水	-0.12	-0.12	-0.12
液胞-細胞質	-0.02 (液胞-土壌間隙水※: -0.1)	0.02	0.02
木部-細胞質	0.12 (木部-土壌間隙水※: 0)	0.12	0.12

※ 液胞、木部について、Trapp (2009)¹ では対土壌間隙水の電位差が記載されていた

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

² Trapp, S. and Matthies, M. (1995) Generic One-Compartment Model for Uptake of Organic Chemicals by Foliar Vegetation, Environ. Sci. Technol, 29, 2333-2338.

³ Briggs, G. G., Bromilow, R. H. and Evans, A. A. (1982) Relationships Between Lipophilicity and Root Uptake and Translocation of Non-Ionised Chemicals by Barley, Pest Management Science, 13(5), 495-504.

⁴ Trapp, S. (2013a) Uptake of Organic Chemicals into Plants Models, Models, Equations and Exercises.

⁵ Trapp, S. (2013b) 42 Standard Model for Ionics, Summer course 12906 Modeling of Plant Uptake (Microsoft® Excel ファイル).

め、細胞質-土壌間隙水の電位差分を差し引いた値とした。

⑦ 植物体内の生理学的データの設定値

- ・ Trapp (2009)¹では、図表 X-32 に示す植物体内の生理学的データを用いている。
- ・ 本章でも、図表 X-32 の値を用いる。具体的には、体積 (V_{xm})は、根-土壌間隙水分分配係数 ($K_{root-sw}$)の計算 (式 X-73)及び大気中のガス態物質の葉・茎への濃縮係数 ($K_{leaf-air}$)の計算 (式 X-74)に用いる。イオン強度 (I_{xm}) (図表 X-18、41 ページ)は、活量係数 (γ)の計算 (式 X-32、式 X-33)に用いる。水分含有割合 (W_{xm})は、 xm における総濃度あたりの非解離種活量 ($G_{xm,n}$)の計算 (式 X-86)に用いる。脂質含有割合 (L_{xm})は、脂質-水分分配係数 (K_{lipid})の計算 (式 X-89 と式 X-90)に用いる。植物体内の媒体 (xm)ごとの pH_{xm} (図表 X-16、40 ページ)は、化学種分率 (ϕ)の計算 (式 X-34~式 X-43、43~45 ページ)に用いる。

図表 X-32 植物体内の生理学的データ

植物体内の媒体 (xm)	体積 V_{xm} m ³	イオン強度 I_{xm} mol/L	水分含有割合 W_{xm} volume /volume	脂質含有割合 L_{xm} volume /volume	pH pH_{xm}
細胞質	0.1	0.3	0.943	0.02	7
液胞	0.9	0.3	0.943	0.02	5.5
木部	0.023	0.01	1	0	5.5

(3) 畜産物中濃度推計式の設定経緯 (X.3.1.2 (8)畜産物中濃度の推計)

- ・ イオン種は、脂質膜を透過しにくいいため、一般的な親油性の物質よりも生体に移行しにくい傾向にある (Hendriks, 2007²)。U.S. EPA (2005)の HHRAP³では、解離性物質の牛肉及び牛乳への移行係数 (BTF_{meat} 及び BTF_{milk})を推計するために、見かけの1-オクタノールと水との間の分配係数 ($\log D$)を用いている。なお、牛の小腸内はほぼ中性であることから、 $pH=7$ としている。
- ・ 生理学的なモデルによる詳細な家畜の体内動態解析も可能である。しかし、RTI (2005)⁴では、このような生理学的なモデルは、多くのデータを必要とするとしており、HHRAP³では採用されていない。また、RIVM レポート (Rikken and Lijzen,

¹ Trapp S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers, J. (ed.) Ecotoxicology Modeling, Springer, New York, 299-353.

² Hendriks, A. J., Smitkova, H., and Huijbregts, M. A. (2007) A New Twist on an Old Regression Transfer of Chemicals to Beef and Milk in Human and Ecological Risk Assessment, Chemosphere 70, 46-56.

³ HHRAP : U.S.EPA (2005) Humam Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities Final, EPA530-R-05-006.

⁴ RTI (2005) Methodology for Predicting Cattle Biotransfer Factors. Prepared for U.S. Environmental Protection Agency (EPA) Office for Solid Waste. EPA Contract No. 68-W-03-042.

1 2004¹⁾による検討結果でも、同様の理由によりスクリーニングレベルの評価には向か
2 ないとしている。
3 ・ 本章でも、HHRAP²⁾と同様に、pH=7 における見かけの 1-オクタノールと水との間
4 の分配係数 ($\log D$)を用いて、牛肉及び牛乳への移行係数 (BTF_{meat} 及び BTF_{milk})を
5 推計する。

6

7 (4) 環境中 pH の設定

8 ここでは、化学種分率 (ϕ)の計算 (式 X-34~式 X-43)に用いる環境媒体中の構成要素の
9 水 (x_{ew})の $\text{pH}_{x_{ew}}$ (図表 X-15)を設定するため、我が国における環境媒体 (降水、土壌、淡
10 水、海水)中の pH のモニタリングデータなどをまとめる。

11

12 ① 我が国の降水の pH モニタリングデータ

13 環境省 (2016)³⁾は、酸性雨等の越境大気汚染監視の一環として、湿性沈着 (降水)中の pH
14 をモニタリングしている。

15 大気モニタリング地点 (平成 20 年度まで : 32 地点、平成 21 年度以降 : 27 地点)におけ
16 る平成 20 年度~平成 24 年度の降水の pH (降水量による加重平均値)は 4.48~5.37 であっ
17 た。

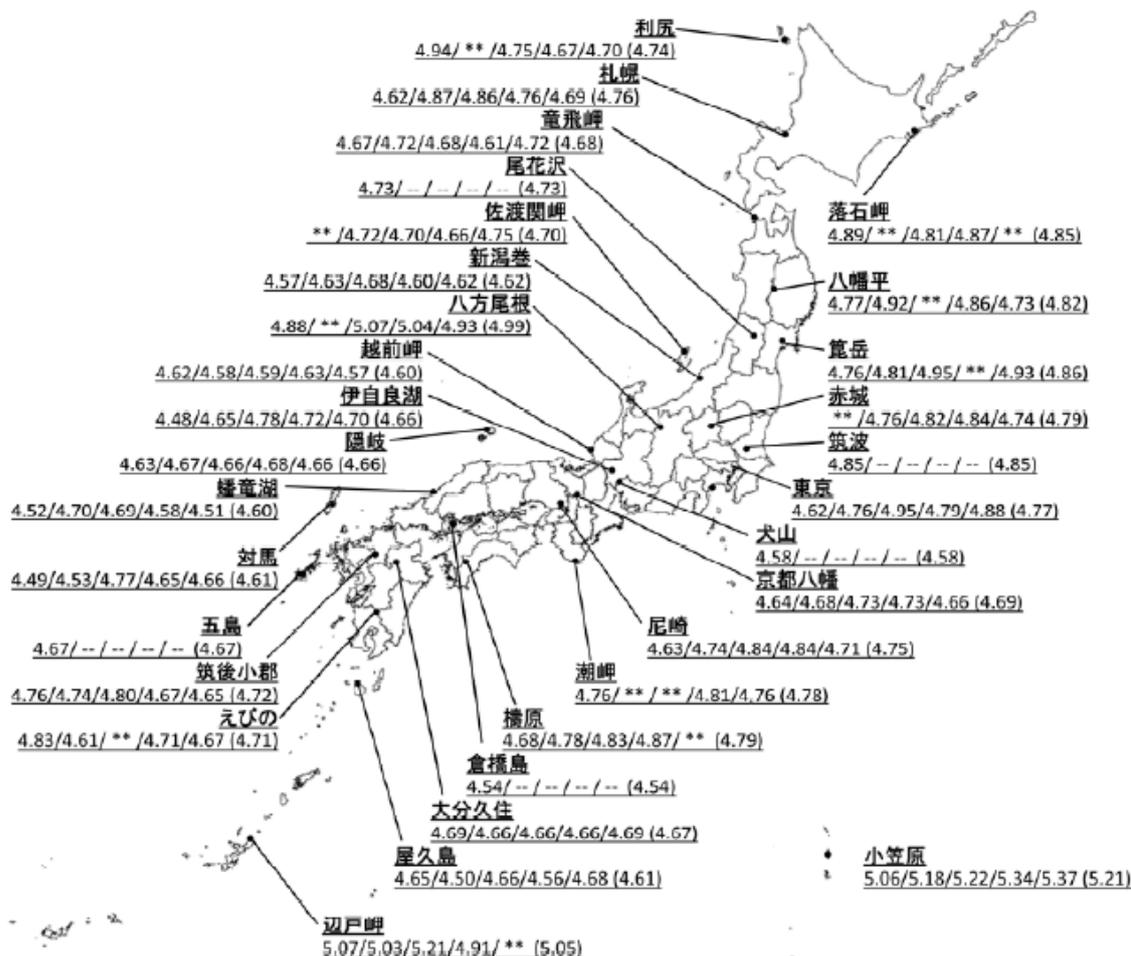
18

¹ Rikken M.G.J. and Lijzen J.P.A. (2004) Update of Risk Assessment Models for the Indirect Human Exposure, RIVM reports 601516011.

² HHRAP : U.S.EPA (2005) Human Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities Final, EPA530-R-05-006.

³ 環境省 (2016) 越境大気汚染・酸性雨長期モニタリング報告書 (平成 20~24 年度)

pH分布図(平成20年度～平成24年度)



平成20年度/平成21年度/平成22年度/平成23年度/平成24年度(5年間平均値)

- 測定せず

** 当該年平均値が有効判定基準に適合せず、棄却された

注1: 平均値は降水量加重平均により求めた

注2: 尾花沢、筑波、犬山、倉橋島及び五島は平成20年度末で測定を休止

1

2

図表 X-33 全国の降水の pH モニタリング結果

3

環境省 (2016)¹14 ページの図 3-1-1 から転載

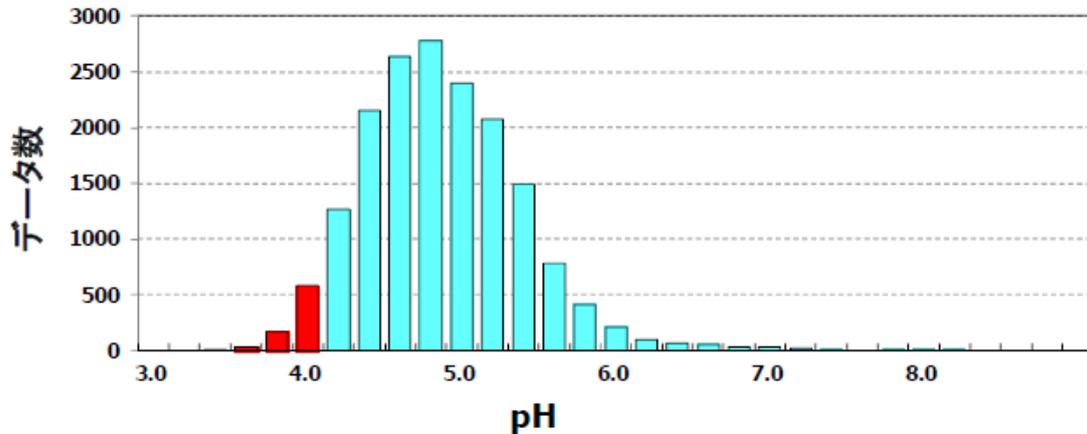
4

5

降水のpHは、降雨イベントごとの変動が大きい。このため、環境省 (2016)¹(図表 X-33)では、日々のバラツキを把握するため、1日ごとに降水を捕集している15地点のデータ(平成15年度～平成24年度の間)の地点ごとの対象期間分、全17,281試料を解析している。pHモニタリング結果の範囲は3.32～10.99であり、平均4.77と報告されている。そのヒストグラムは図表 X-34に示すとおりである。

9

¹ 環境省 (2016) 越境大気汚染・酸性雨長期モニタリング報告書 (平成 20～24 年度)



図表 X-34 H15～24 年度 15 地点における 1 日ごと降水の pH 分布

環境省 (2016)¹53 ページの図 3-1-36 から転載

日々のばらつきの幅は非常に大きいですが、年間平均の pH 測定結果を参考にするると我が国の降水の pH は 4～5.5 程度であると考えられる。本章では、化学種分率の計算に用いる降水の pH を 4.8 (pH モニタリング結果 4.77 を小数点第 2 位で四捨五入)とする。

② 我が国の土壌中 pH モニタリングデータ

農業・食品産業技術総合研究機構 農業環境変動研究センターによる「土壌情報閲覧システム」の「作土層の理化学性データベース」²には、60 の土壌種ごと及び土地利用ごとに (水田、普通畑、樹園地、牧草畑、全体)、土壌の pH がまとめられている。図表 X-35 に 1999 年～2003 年の値を示す。

蒸留水 (H₂O)を用いた測定その他、KCl 水溶液を用いた pH があるが、ここでは、H₂O による測定結果を用いる。作土層における土地利用「全体」の pH (H₂O)平均値の 60 土壌種平均は 5.9 であった。また、土地利用ごとの pH (H₂O)平均値の最小値は 4.2、最大値は 8.1 であった。

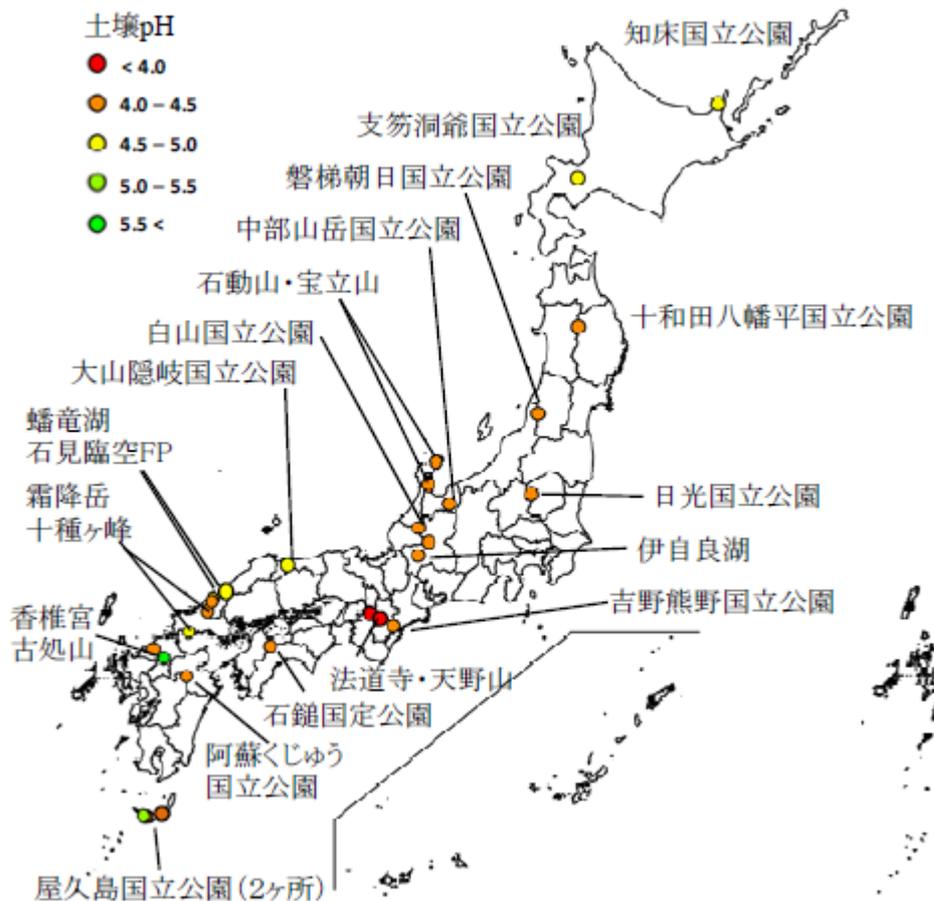
¹ 環境省 (2016) 越境大気汚染・酸性雨長期モニタリング報告書 (平成 20～24 年度)

² 農業・食品産業技術総合研究機構 農業環境変動研究センター 土壌情報閲覧システム 作土層の理化学性データベース.

- 1 図表 X-35 1999年～2003年、作土層の土壌種ごと平均 pH (H₂O)
- 2 農業・食品産業技術総合研究機構 農業環境変動研究センター 土壌情報閲覧システム
- 3 作土層の理化学性データベースから

土壌種	水田	普通畑	樹園地	牧草畑	全体
01A 岩層土		5.7	5.8		5.7
02A 砂丘未熟土		6.2	5.9	5.0	6.2
03A 厚層多腐植質黒ボク土	6.3	6.0	5.1	5.9	5.8
03B 厚層腐植質黒ボク土	5.9	6.0	5.9	6.1	6.0
03C 表層多腐食質黒ボク土	5.5	6.1	5.1	5.8	5.8
03D 表層腐植質黒ボク土	6.1	6.1	5.6	5.9	6.0
03E 淡色黒ボク土	5.7	6.1	5.8	5.1	6.0
04A 厚層多腐植質多湿黒ボク土	5.8	5.9		5.9	5.9
04B 厚層腐植質多湿黒ボク土	5.9	6.0		5.7	5.9
04C 表層多腐植質多湿黒ボク土	6.0	5.2	6.5		5.9
04D 表層腐植質多湿黒ボク土	5.8	6.1	5.6	6.3	5.9
04E 淡色多湿黒ボク土	5.9	6.1	6.4		6.0
05A 多腐植質黒ボクグライ土	5.8				5.8
05B 腐植質黒ボクグライ土	5.8				5.8
05C 淡色黒ボクグライ土					
06A 細粒褐色森林土	6.4	6.0	5.9	6.1	5.9
06B 中粗粒褐色森林土	6.0	6.3	5.8	5.3	6.0
06C 礫質褐色森林土	6.0	6.3	5.9	5.9	6.1
07A 細粒灰色台地土	5.9	5.8	5.7	5.6	5.9
07B 中粗粒灰色台地土	5.7	5.4	6.7		5.8
07C 礫質灰色台地土	5.8	6.3	6.1	5.2	5.8
07D 灰色台地土・石灰質		8.0	8.1		8.1
08A 細粒グライ台地土	5.5			5.5	5.5
08B 中粗粒グライ台地土	5.8				5.8
08C 礫質グライ台地土	5.5				5.5
09A 細粒赤色土		5.7	5.6		5.7
09B 中粗粒赤色土			4.8		4.8
09C 礫質赤色土		5.1	5.6		5.5
10A 細粒黄色土	5.3	6.2	5.6	5.8	5.9
10B 中粗粒黄色土		6.4	5.7	6.2	5.9
10C 礫質黄色土	6.0	5.4	5.1		5.2
10D 細粒黄色土・斑紋あり	5.9	6.4	6.2		6.0
10E 中粗粒黄色土・斑紋あり	6.1	4.2	4.7		5.6
10F 礫質黄色土・斑紋あり	5.9		5.9		5.9
11A 暗赤色土		7.0	6.1	6.1	6.8
11B 礫質暗赤色土		7.6			7.6
12A 細粒褐色低地土・斑紋なし	5.8	6.5	6.0	6.1	6.4
12B 中粗粒褐色低地土・斑紋なし	6.0	6.8	6.2	6.7	6.7
12C 礫質褐色低地土・斑紋なし	6.1	6.2	6.7	6.1	6.5
12D 細粒褐色低地土・斑紋あり	5.9	6.4	6.2	5.1	6.0
12E 中粗粒褐色低地土・斑紋あり	5.8	6.4	6.4		6.2
12F 礫質褐色低地土・斑紋あり	5.8	5.8	6.5		5.8
13A 細粒灰色低地土・灰色系	5.9	5.5	5.4		5.9
13B 中粗粒灰色低地土・灰色系	5.9	5.6	5.9		5.9
13C 礫質灰色低地土・灰色系	5.9	6.2	7.1		5.9
13D 細粒灰色低地土・灰褐色系	5.8	5.8			5.8
13E 中粗粒灰色低地土・灰褐色系	5.8	5.9			5.8
13F 礫質灰色低地土・灰褐色系	5.9	5.7	6.6		6.0
13G 灰色低地土・下層黒ボク	5.8		5.7		5.9
13H 灰色低地土・下層有機質	5.7				5.7
13I 灰色低地土・斑紋なし	5.6	6.4	6.0		6.2
14A 細粒強グライ土	5.6		5.3		5.6
14B 中粗粒強グライ土	5.8				5.8
14C 礫質強グライ土	5.9	6.6			6.0
14D 細粒グライ土	5.8	7.3			6.0
14E 中粗粒グライ土	5.8				5.8
14F グライ土・下層黒ボク	5.3				5.3
14G グライ土・下層有機質	5.7				5.7
15A 黒泥土	5.8	6.6			5.9
16A 泥炭土	5.6	5.5		6.0	5.7
平均	5.8	6.1	5.9	5.8	5.9

1 環境省(2016)¹では、19地域25地点(土壌50プロット)のモニタリング地点における森
2 林の土壌モニタリング結果がまとめられている。日本の森林土壌は、pH4~6の間を示すと
3 されており、モニタリング結果は、図表 X-36 に示すような分布となっている。
4



5

6 図表 X-36 全国の土壌表層の pH モニタリング結果

6

7 環境省(2016)¹64ページの図3-2-1から引用

7

8

9 土壌種ごと、土地利用ごとの pH データを参考にすると、我が国の作土層の pH は 4~8.5
10 程度であると考えられる。本章では、化学種分率の計算に用いる土壌の pH を 5.9 (作土層
11 における土地利用「全体」の pH 平均値 5.9)とする。

12

13 ③ 我が国の表層水中 pH モニタリングデータ

14

国立環境研究所の「環境数値データベース」²の「公共用水域水質検体値データファイル」

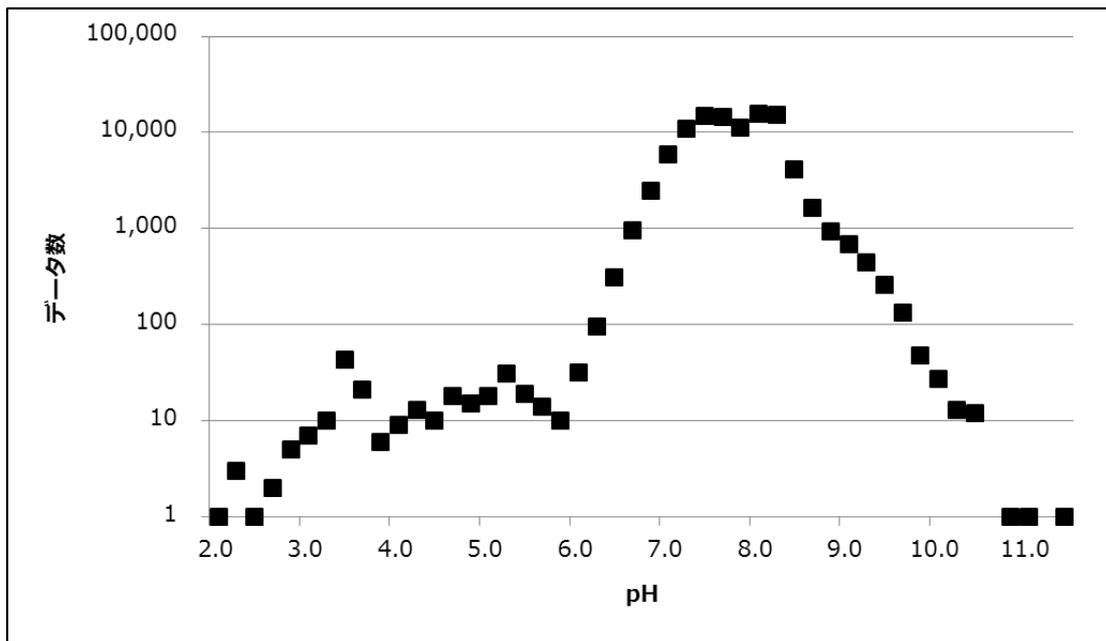
¹ 環境省(2016) 越境大気汚染・酸性雨長期モニタリング報告書(平成20~24年度)

² 国立環境研究所 環境数値データベース.

1 には、1981年度～2009年度における約9,000の全国47都道府県の公共用水域水質測定点
2 における水質監視測定結果がまとめられている。ファイルは、年度別、都道府県別に構成
3 されており、ここでは最新年度の2009年度における47都道府県のデータを対象に、公共
4 用水域におけるpH測定結果の概要をまとめる。

5 103,341データのうち、2,702データは欠測であった。残りの100,639データについて
6 pH測定結果の分布を図表X-37のヒストグラムに示した。平均値は7.8、中央値は7.3、最
7 大値は11.4、最小値は2.0であった。

8



9

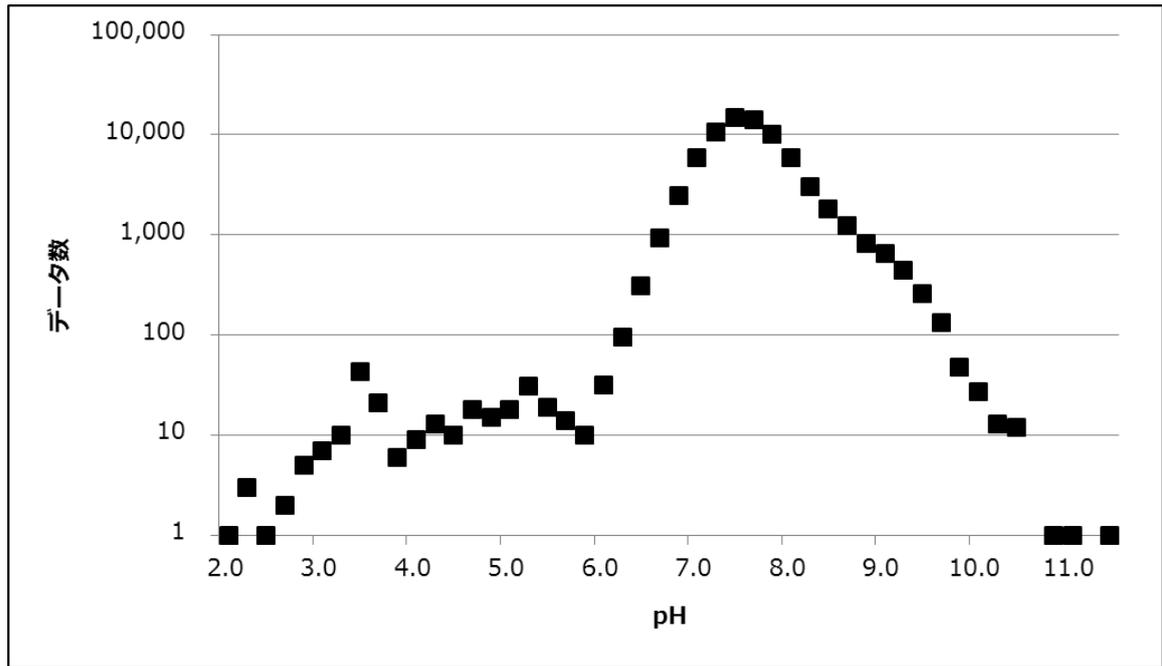
10

図表 X-37 公共用水域における pH 測定結果

11

12 次に、淡水として、河川及び湖沼の pH データの分布を示す。74,868 データのうち、487
13 データは欠測であった。残りの 74,381 データについて pH 測定結果の分布を図表 X-38 の
14 ヒストグラムに示した。平均値は 7.6、中央値は 7.3、最大値は 11.4、最小値は 2.0 であっ
15 た。

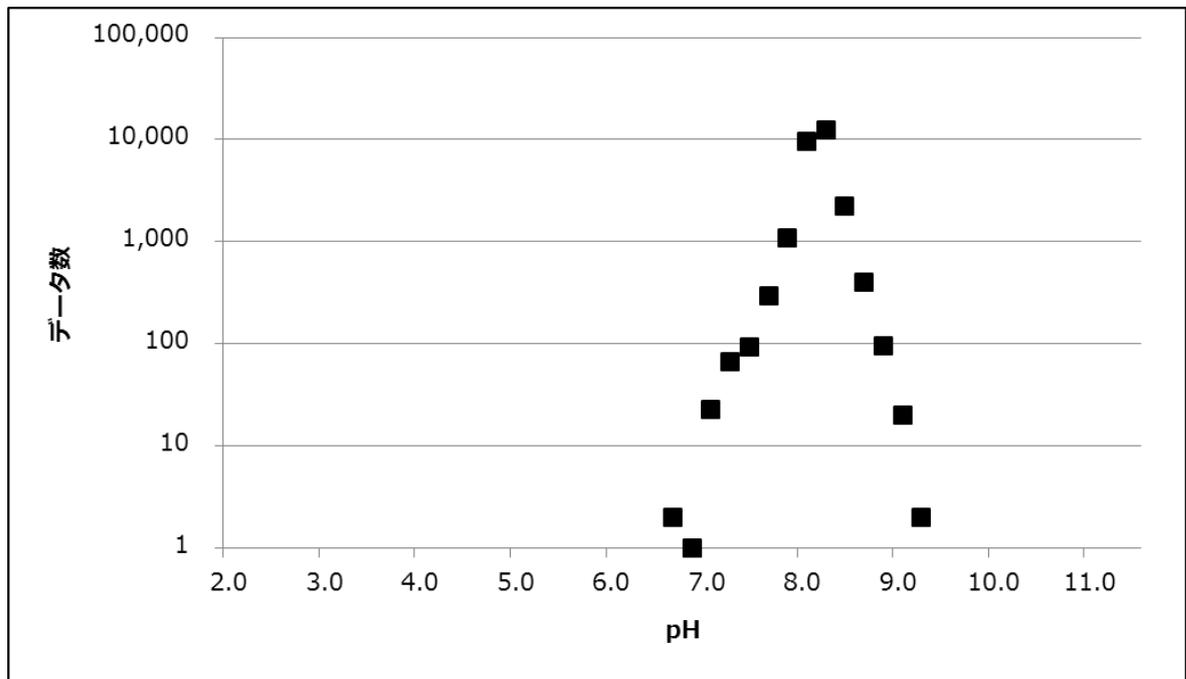
16



1
2
3
4
5
6
7

図表 X-38 公共用水域 (淡水)における pH 測定結果

さらに、海水として海域のみの pH データの分布を示す。28,473 データのうち、2,215 データは欠測であった。残りの 26,258 データについて pH 測定結果の分布を図表 X-39 のヒストグラムに示した。平均値は 8.2、中央値は 8.3、最大値は 9.2、最小値は 6.6 であった。



8
9

図表 X-39 公共用水域 (海水)における pH 測定結果

1
2 環境省 (2016)¹では、酸性化に対する感受性が高いと考えられる河川及び湖沼 11 地点で
3 の pH のモニタリング結果がまとめられている。平成 20～24 年度の 5 年間の平均値は、最
4 低地点で 5.30、最高地点で 7.25 であった。

5 公共用水域の pH データを参考にすると、我が国の表層水 (淡水)の pH は 2～11.5 程度、
6 表層水 (海水)の pH は 6.5～9.5 程度であると考えられる。本章では、化学種分率の計算に
7 用いる表層水 (淡水)の pH は 7.6 (公共用水域 (淡水)の pH 平均値 7.6)とし、表層水 (海水)
8 の pH は 8.2 (公共用水域 (海水)の pH 平均値 8.2)とする。

9 10 ④ 既存の試験法で規定されている pH

11 化審法の「新規化学物質等に係る試験の方法について」に示されている各種試験では、
12 図表 X-40 に示すように、試験水の pH を 6～9 と設定している。

13
14 図表 X-40 「新規化学物質等に係る試験の方法について」の各種試験における pH 設定

試験	pH 調整などに関する記述
微生物等による化学物質の分解度試験	合成下水などを pH7.0±1.0 に調整することとされている
魚介類の体内における化学物質の濃縮度試験	試験用水を pH6.0～8.5 かつ変動幅±0.5 に保つこととされている。
藻類生長阻害試験	推奨された培地の pH は 8.1。なお、試験溶液の暴露開始時及び終了時の pH は測定することとされており、1.5 以上変動してはならないとされている。
ミジンコ急性遊泳阻害試験	試験用水 pH は 6～9。pH 調整を行わずに試験を行うこと、また試験溶液を添加後顕著な pH 変化が見られる場合には、被検物質添加前の pH に調整した後追加試験をすることが望ましいとある。なお、試験溶液の暴露開始時及び終了時の pH は測定することとされており、1.5 以上変動してはならないとされている。
魚類急性毒性試験	試験用水 pH は 6.0～8.5。pH 調整を行わずに試験を行うこと、また試験溶液を添加後顕著な pH 変化が見られる場合には、被検物質添加前の pH に調整した後追加試験をすることが望ましいとある。なお、pH は毎日測定することとされている。

15
16 また、化審法の「既に得られているその組成性状等に関する知見としての取扱いについ
17 て」の「高分子化合物の安全性評価のための試験方法 (高分子フロースキーム)」では、試
18 験液の pH を 4.0、7.0 及び 9.0 としている。

19 本章で、化学種分率の計算に用いる環境媒体中の pH (降水 : 4.8、土壌 : 5.9、淡水 : 7.6、
20 海水 8.2)は、いずれも、以上に示した化審法試験において、環境中 pH を想定し、指定され
21 ている化審法の試験環境の範囲 (pH4～9)の値である。また、土壌中の pH (5.9)は、U.S. EPA
22 の OPPTS 835.1220²で規定されている土壌の pH (土壌と蒸留水の懸濁液) 4～8 及び

¹ 環境省 (2016) 越境大気汚染・酸性雨長期モニタリング報告書 (平成 20～24 年度)

² U.S. EPA (1998a) Fate, Transport and Transformation Test Guidelines: OPPTS 835.1220 Sediment and Soil Adsorption/Desorption Isotherm.

1 OECD (2000)の試験ガイドライン No106¹で規定されている土壌と下水場の処理槽内の pH
2 5.5～7.5 の範囲内である。

3

4 X.4 出典

5 Arnot, J. and Mackay, D. (2007) Risk Prioritization for a Subset of Domestic Substances
6 List Chemicals Using the RAIDAR Model. CEMC Report, No.200703.

7

8 Briggs, G. G., Bromilow, R. H. and Evans, A. A. (1982) Relationships Between
9 Lipophilicity and Root Uptake and Translocation of Non-Ionised Chemicals by Barley.
10 Pest Manag. Sci., 13(5), 495–504.

11

12 Bromilow, R. H. and Chamberlain, K. (2000) Principles Governing Uptake and
13 Transport of Chemicals. In: Trapp, S. and Mc Farlane, C. (ed.), Plant Contamination;
14 Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes, Lewis/CRC Press, Boca Raton,
15 FL, 37–68.

16

17 Calamari, D., Vighi, M. and Bacci, E. (1987) The Use of Terrestrial Plant Biomass as a
18 Parameter in the Fugacity Model. Chemosphere, 16(10–12), 2359–2364.

19

20 EC (2008) EUSES 2.1 Background Report: Chapter III Model Calculations.
21 ([https://echa.europa.eu/documents/10162/16908203/pt4_food_contact_materials_en.pdf#](https://echa.europa.eu/documents/10162/16908203/pt4_food_contact_materials_en.pdf#search=%27EUSES+2.1+background+report+chapterIII%27)
22 [search=%27EUSES+2.1+background+report+chapterIII%27](https://echa.europa.eu/documents/10162/16908203/pt4_food_contact_materials_en.pdf#search=%27EUSES+2.1+background+report+chapterIII%27), 2016/12/13 アクセス)

23

24 ECB (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment, Part II.

25

26 ECHA (2008) Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment
27 Chapter R.7a: Endpoint Specific Guidance.

28

29 ECHA (2015) Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment
30 Chapter R.7a: Endpoint Specific Guidance, Version 4.1.

31

32 ECHA, REACH Resistered Dossier, N-(3-aminopropyl)iminodiethanol (CAS: 4985-85-7),
33 Adsorption/desorption.

¹ OECD (2000) TG 106: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Adsorption - Desorption Using a Batch Equilibrium Method. No.106.

- 1 (<https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/5587/5/5/2>, 2017/1/17 ア
2 クセス)
- 3
- 4 Franco, A. (2010) Multimedia Activity Model for organic neutral and Ionizable
5 chemicals (Microsoft® Excel ファイル),
6 (<https://homepage.env.dtu.dk/stt/Homepage%20anf/Website.htm>, 2017/5/22 アクセス)
7
- 8 Franco, A. and Trapp, S. (2008) Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient
9 Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals. *Environ. Chem.*, 27(10),
10 1995–2004.
- 11
- 12 Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds:
13 Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid, Aniline, and Trimethoprim.
14 *Environ. Toxicol. Chem.*, 29(4), 789–799.
- 15
- 16 Franco, A., Fu, W. and Trapp, S. (2009) Influence of Soil pH on the Sorption of Ionizable
17 Chemicals: Modeling Advances. *Environ. Toxicol. Chem.*, 28(3), 458–464.
- 18
- 19 Hansch, C. and Leo, A. (1995) Exploring QSAR: Volume 1: Fundamentals and
20 Applications in Chemistry and Biology. American Chemical Society, Washington, DC.
- 21
- 22 Harner, T. and Bidleman, T. F. (1998) Octanol-Air Partition Coefficient for Describing
23 Particle/Gas Partitioning of Aromatic Compounds in Urban Air. *Environ. Sci. Technol.*,
24 32(10), 1494–1502.
- 25
- 26 Hendriks, A. J., Smitkova, H. and Huijbregts, M. A. (2007) A New Twist on an Old
27 Regression Transfer of Chemicals to Beef and Milk in Human and Ecological Risk
28 Assessment. *Chemosphere*, 70, 46–56.
- 29
- 30 HHRAP : U.S.EPA (2005) Human Health Risk Assessment Protocol for Hazardous
31 Waste Combustion Facilities Final. EPA530-R-05-006.
32 (<https://www.weblakes.com/products/iraph/protocol.html>, 2016/12/13 アクセス)
33
- 34 Junge, C.E. (1977) Basic Considerations About Trace Constituents in the Atmosphere
35 as Related to the Fate of Global Pollutants. In: Suffet, I. H. (ed.) Fate of Pollutants in
36 the Air and Water Environments Part 1, John Wiley and Sons, New York, 7-25.
- 37
- 38 Kah, M. and Brown, CD. (2008) LogD: Lipophilicity for Ionisable Compounds.

- 1 Chemosphere, 72(10), 1401–8.
2
3 Kim, Y. P., Seinfeld, J. H. and Saxena, P. (1993) Atmospheric Gas-Aerosol Equilibrium I.
4 Thermodynamic model. Aerosol Sci. Tech., 19(2), 157–181.
5
6 Mc Farlane, J.C. (1995) Anatomy and Physiology of Plant Conductive Systems. .In:
7 Trapp, S. and Mc Farlane, C. (ed.), Plant Contamination; Modeling and Simulation of
8 Organic Chemical Processes, Lewis/CRC Press, Boca Raton, FL, 13-34.
9
10 NIST, Reference on Constants, Units and Uncertainty, Fundamental Physical
11 Constants, Faraday Constant.
12 (<http://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?f>, 2016/12/13 アクセス)
13
14 NITE (2012) カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測に関する報告書 (カテゴリー
15 III).
16 (http://www.nite.go.jp/chem/qsar/category_approach.html, 2016/12/13 アクセス)
17
18 OECD (1995) TG 105: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Water Solubility. No.
19 105.
20 ([http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-105-water-solubility_9789264069589-](http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-105-water-solubility_9789264069589-en)
21 [en](http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-105-water-solubility_9789264069589-en), 2016/12/13 アクセス)
22
23 OECD (1995) TG 107: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Partition Coefficient
24 (n-octanol/water): Shake Flask Method. No.107.
25 ([http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-107-partition-coefficient-n-octanol-wa](http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-107-partition-coefficient-n-octanol-water-shake-flask-method_9789264069626-en)
26 [ter-shake-flask-method_9789264069626-en](http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-107-partition-coefficient-n-octanol-water-shake-flask-method_9789264069626-en), 2016/12/13 アクセス)
27
28 OECD (2000) TG 106: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Adsorption -
29 Desorption Using a Batch Equilibrium Method. No.106.
30 ([http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-106-adsorption-desorption-using-a-ba](http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-106-adsorption-desorption-using-a-batch-equilibrium-method_9789264069602-en)
31 [tch-equilibrium-method_9789264069602-en](http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-106-adsorption-desorption-using-a-batch-equilibrium-method_9789264069602-en), 2016/12/13 アクセス)
32
33 OECD (2004) TG 117: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Partition Coefficient
34 (n-octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method. No.117.
35 ([http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-117-partition-coefficient-n-octanol-wa](http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-117-partition-coefficient-n-octanol-water-hplc-method_9789264069824-en;jsessionid=2l2ciroq0888a.x-oecd-live-03)
36 [ter-hplc-method_9789264069824-en;jsessionid=2l2ciroq0888a.x-oecd-live-03](http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-117-partition-coefficient-n-octanol-water-hplc-method_9789264069824-en;jsessionid=2l2ciroq0888a.x-oecd-live-03),
37 2016/12/13 アクセス)
38

- 1 Rikken M.G.J. and Lijzen J.P.A. (2004) Update of Risk Assessment Models for the
2 Indirect Human Exposure, RIVM reports 601516011.
3
- 4 RTI (2005) Methodology for Predicting Cattle Biotransfer Factors. Prepared for U.S.
5 Environmental Protection Agency (EPA) Office for Solid Waste. EPA Contract No.
6 68-W-03-042.
7
- 8 Saarikoski, J., Lindström, R., Tyynelä M, Viluksela M. (1986) Factors Affecting the
9 Absorption of Phenolics and Carboxylic Acids in the Guppy (*Poecilia Reticulata*).
10 *Ecotoxicol. Environ. Saf.*, 11(2), 158–173.
11
- 12 Sabljčić, A., Güsten, H., Verhaar, H. and Hermens, J. (1995) QSAR Modelling of Soil
13 Sorption. Improvements and Systematics of log KOC vs. log KOW Correlations.
14 *Chemosphere*, 31(11–12), 4489–4514.
15
- 16 Schwarzenbach, R. P., Gschwend, P. M. and Imboden, D. M. (2003) *Environmental*
17 *Organic Chemistry*, 2nd ed. John Wiley and Sons. New York..
18
- 19 Staudinger, J. and Roberts, P. V. (2001) A Critical Compilation of Henry's Law Constant
20 Temperature Dependence Relations for Organic Compounds in Dilute Aqueous
21 Solutions. *Chemosphere*, 44(4), 561–576.
22
- 23 Trapp, S. (2000) Modelling Uptake into Roots and Subsequent Translocation of Neutral
24 and Ionisable Organic Compounds. *Pest. Manag. Sci.*, 56(9), 767–778.
25
- 26 Trapp S. (2004) Plant Uptake and Transport Models for Neutral and Ionic Chemicals.
27 *Environ. Sci and Pollut. Res.*, 11(1), 33–39.
28
- 29 Trapp, S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In:
30 Devillers, J. (ed.) *Ecotoxicology Modeling*, Springer, New York, 299–353.
31
- 32 Trapp, S. (2013a) Uptake of Organic Chemicals into Plants Models, Equations and
33 Exercises.
34 ([http://homepage.env.dtu.dk/stt/PhD course 2013website/index.htm](http://homepage.env.dtu.dk/stt/PhD%20course%202013website/index.htm) (Script) [↓](#)
35 2016/12/13 アクセス)
36
- 37 Trapp, S. (2013b) 42 Standard Model for Ionics, Summer Course 12906 Modeling of
38 Plant Uptake (Microsoft® Excel ファイル).

- 1 ([http://homepage.env.dtu.dk/stt/PhD course 2013website/index.htm](http://homepage.env.dtu.dk/stt/PhD_course_2013website/index.htm), 2016/12/13 アクセス)
- 2
- 3
- 4 Trapp, S., Franco, A. and Mackay, D. (2010) Activity-Based Concept for Transport and
- 5 Partitioning of Ionizing Organics. *Environ. Sci. Technol.*, 44, 6123–6129.
- 6
- 7 Trapp, S. and Horobin, W. (2005) A Predictive Model for the Selective Accumulation of
- 8 Chemicals in Tumor Cells. *Eur. Biophys. J.*, 34(7), 959–966.
- 9
- 10 Trapp, S. and Matthies, M. (1995) Generic One-Compartment Model for Uptake of
- 11 Organic Chemicals by Foliar Vegetation, *Environ. Sci. Technol.*, 29, 2333-2338.
- 12
- 13 Trapp, S. and Matthies, M. (1998) 9.3 PLANT Model. In: Trapp, S. and Matthies, M.,
- 14 *Chemodynamics and Environmental Modeling*, Springer, Berlin, 118-123.
- 15
- 16 Trapp, S. and Mc Farlane, C. (ed.) (1995) *Plant Contamination: Modeling and*
- 17 *Simulation of Organic Chemical Processes*, Lewis/CRC Press, Boca Raton, FL.
- 18
- 19 U.S. EPA (1996) Product Properties Test Guidelines: OPPTS 830.7860 Water Solubility
- 20 (Generator Column Method).
- 21 ([https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-830-product](https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-830-product-properties-test-guidelines)
- 22 [-properties-test-guidelines](https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-830-product-properties-test-guidelines), 2016/12/13 アクセス)
- 23
- 24 U.S. EPA (1998a) Fate, Transport and Transformation Test Guidelines: OPPTS
- 25 835.1220 Sediment and Soil Adsorption/Desorption Isotherm.
- 26 ([https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-835-fate-tra](https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-835-fate-transport-and-transformation-test)
- 27 [nsport-and-transformation-test](https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-835-fate-transport-and-transformation-test), 2016/12/13 アクセス)
- 28
- 29 U. S. EPA (1998b) Product Properties Test Guidelines: OPPTS 830.7840 Water
- 30 Solubility: Column Elution Method; Shake Flask Method.
- 31 ([https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-830-product](https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-830-product-properties-test-guidelines)
- 32 [-properties-test-guidelines](https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-830-product-properties-test-guidelines), 2016/12/13 アクセス)
- 33
- 34 U. S. EPA (2012) Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11.
- 35 (<https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>,
- 36 2016/12/13 アクセス)
- 37
- 38 van Beelen, P. (1998) *Environmental Risk Evaluation of Difficult Substances in USES*

- 1 2.0. RIVM report 679102045.
2
3 van Beelen, P. (2000) The Risk Evaluation of Difficult Substances in USES 2.0 and
4 EUSES. A Decision Tree for Data Gap Filling of Kow, Koc and BCF. RIVM report
5 679102050.
6
7 Yoshida, K., Shigeoka, T. and Yamauchi, F. (1987) Evaluation of Aquatic Environmental
8 Fate of 2,4,6-Trichlorophenol with a Mathematical Model. *Chemosphere*, 16(10–12),
9 2531–2544.
10
11 環境省 (2016) 越境大気汚染・酸性雨長期モニタリング報告書 (平成 20～24 年度) .
12 (<http://www.env.go.jp/air/acidrain/monitoring/rep3.html>, 2016/12/13 アクセス)
13
14 厚労省/経産省/環境省 (2014) イオン性を有する新規化学物質の生物蓄積性の判定について
15 (お知らせ) .
16 ([http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/todoke/shinki/14063](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/todoke/shinki/140630_logD.pdf)
17 [0_logD.pdf](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/todoke/shinki/140630_logD.pdf), 2016/12/13 アクセス)
18
19 国立環境研究所 環境数値データベース.
20 (<http://www.nies.go.jp/igreen/>, 2016/12/13 アクセス)
21
22 日本化学会 (2004) 化学便覧 改訂 5 版 基礎編. 丸善
23
24 農業・食品産業技術総合研究機構 農業環境変動研究センター 土壌情報閲覧システム
25 作土層の理化学性データベース.
26 (http://agrimesh.dc.affrc.go.jp/soil_db/index.phtml, 2016/12/13 アクセス)
27
28 松中照夫 (2003) 土壌学の基礎 生成・機能・肥沃度・環境. 農山魚村文化協会.
29
30 姫野貞之, 市村彰男 (2009) 溶液内イオン平衡に基づく分析化学 第 2 版, 化学同人