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

導入編

Ver.1.0

平成 26 年 6 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	平成 26 年　6 月	初版

目　次

導入編 1

1. はじめに 1

2. 化審法におけるリスク評価の枠組み 1

3. 審議会資料と技術ガイダンスとの関係 2

4. 技術ガイダンスの目的 3

5. 技術ガイダンスについて 5

5.1. 技術ガイダンスが扱う対象と構成 5

5.2. 想定される読者等 6

5.3. 各章の内容 7

導入編

1. はじめに

本技術ガイダンスは、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律（以下「化審法」という。）の制度上、優先評価化学物質について行うこととなっているリスク評価の考え方、リスク評価の流れ及びリスク評価手法を解説したものである。

本導入編は、技術ガイダンスの入り口であり、各章のガイドマップでもある。化審法におけるリスク評価の枠組み、過去にリスク評価手法について審議された審議会における資料との関係、技術ガイダンスを作成する目的、技術ガイダンスが扱う対象と構成、想定される読者、各章の概要等を解説している。

2. 化審法におけるリスク評価の枠組み

化審法では、優先評価化学物質のリスク評価は「化学物質による環境の汚染により人の健康に係る被害又は生活環境動植物の生息若しくは生育に係る被害を生ずるおそれがあるかどうかについての評価」と定義されている。

このリスク評価は、厚生労働大臣、経済産業大臣及び環境大臣（以下「三大臣」という。）が、化審法に基づく第二種特定化学物質の指定や優先評価化学物質の指定の取消しを行うかどうかについて判断することを目的として行う。

基本的には、優先評価化学物質ごとに、優先評価化学物質を選定するためのスクリーニング評価により優先度「高」となった対象（人健康又は生態）又は優先度「中」で優先評価化学物質に指定する必要があるとされた対象についてリスク評価を行う。すなわち、優先評価化学物質には以下の 3 種類がある。ただし、優先評価化学物質に指定された後に得られた有害性情報によって対象は変わりうる。

- 人健康のみのリスク評価を行う優先評価化学物質
- 生態のみのリスク評価を行う優先評価化学物質
- 人健康と生態の両方のリスク評価を行う優先評価化学物質

優先評価化学物質が第二種特定化学物質に該当するかどうかの判断基準には、以下に示す「有害性要件」と「暴露要件」の 2 種類がある。これらのいずれにも該当することが、第二種特定化学物質に指定する際の要件となる。

【有害性要件】

人又は生活環境動植物への長期毒性が認められること

【暴露要件】

性状と製造、輸入、使用等の状況からみて相当広範な地域の環境において相当程度残留しているか又は近くこの状況に至ることが確実であると見込まれることにより、人又は生活環境動植物へのリスク[1]が懸念される状況であること

3. 審議会資料と技術ガイダンスとの関係

化審法のリスク評価手法の大枠は、平成 23 年度の審議会[2,3]で審議された。審議結果は、最終的に次の 4 つの審議会資料にまとめられ、パブリックコメントを経て決定された[4]。

- 化審法に基づく優先評価化学物質のリスク評価の基本的な考え方
- 段階的なリスク評価の手順フロー
- 優先評価化学物質のリスク評価手法について
- リスク評価に係る今後の課題

審議会資料と本ガイダンスとの対応を図表 1 に示す。

審議会資料の「優先評価化学物質のリスク評価手法について」の「Ⅲ．リスク評価手法の概要」を具体化したものが本ガイダンスであるという位置付けである。

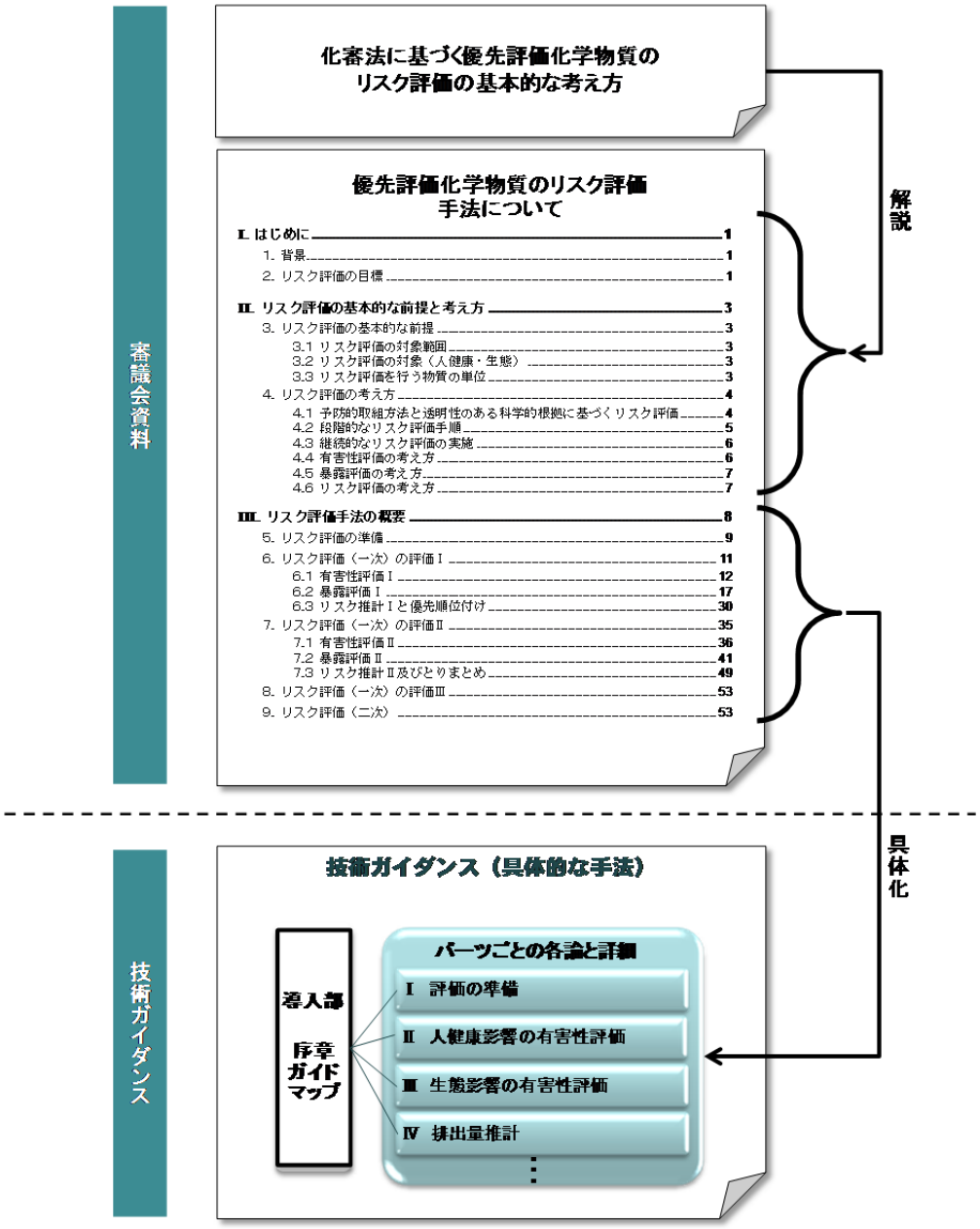
---

[1] 暴露要件と呼称しているが、内容的には暴露だけでなくリスクも含んだ要件であることに注意。

[2] 審議会の正式名称は次のとおりで、平成 23 年 6 月、7 月、9 月の 3 回にわたって審議された。
「薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会化学物質調査会
化学物質審議会安全対策部会評価手法検討小委員会
中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会　合同審議会」

[3] 当時の資料は次のとおり。
- http://www.meti.go.jp/committee/kagakubusshitsu/anzentaisaku/kentou/003_haifu.html
- http://www.meti.go.jp/committee/kagakubusshitsu/anzentaisaku/kentou/004_haifu.html
- http://www.meti.go.jp/committee/kagakubusshitsu/anzentaisaku/kentou/005_haifu.html

[4] 4 つの審議会資料（パブリックコメント後）は次のとおり。（本文と同じ順番）
- http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/riskassess_kangaekata.pdf
- http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/riskassess_flow.pdf
- http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/riskassess.pdf
- http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/riskassess_kadai.pdf



図表 1　技術ガイダンスと審議会資料との関係

4. 技術ガイダンスの目的

本ガイダンスが作成された目的は 2 つある。1 つは化審法の規制に係る判断の根拠となるリスク評価について標準的な手法を示すことにより、物質間で公平性・整合性を確保することである。もう 1 つはリスク評価における考え方や技術的な手法に関して透明性を担保することである[1]。

[1] 透明性の担保は、後述の審議会資料「化審法に基づく優先評価化学物質のリスク評価の基本的な考え方」においても、3.(2)①イ「リスク評価の手法については、科学的根拠や国際

公平性と整合性の確保に関しては以下のような意義がある。

化審法の目的は、「人の健康を損なうおそれ又は動植物の生息もしくは生育に支障を及ぼすおそれがある化学物質による環境の汚染を防止するため、製造等に関し必要な規制を行うこと」である。法律上の規制措置の必要性や措置の内容は一定の判断基準に照らして決定される。一方、化学物質の人の健康や生活環境動植物に対するリスク評価の手法は目的に応じた詳細さの程度や着目する有害性の種類等によって、様々なレベル、多様なアプローチがありうる。法律上の判断に使われるリスク評価の手法には、法の目的と規制方式に沿った法律上の判断基準に照らすことのできる評価結果を提供できるものが要求される。そして、規制措置の判断に関し物質間で公平性を保つことが求められる。そのためには、リスク評価は物質ごとに特有の手法で行われるのではなく、時代に応じた最新の科学的知見も踏まえつつ、一定の範囲内で共通する考え方と手法に基づくことが必要であり、技術ガイダンスにて標準的手法を提示する。

透明性の担保に関しては以下の 2 つの意義がある。

1 つは、優先評価化学物質のリスク評価に係るすべての利害関係者に対して、このリスク評価のプロセスと技術的な詳細を公開することにより、それぞれ必要なレベルでリスク評価の有効性と限界を理解した上でリスク評価の手法・結果を適切に活用してもらうためである。

もう 1 つは、さらなる改良や高度化への門戸を開いておくことである。優先評価化学物質のリスク評価の手法は、欧米で発達してきた化学物質管理制度における各種のリスク評価の技術を概ね土台としている。一方で、化審法は難分解性・高蓄積性の性状を有する化学物質の環境汚染に端を発した法律制定の経緯から、独自の審査項目に基づく事前審査制度が設けられ、運用されてきた。性状（ハザード）[1]の審査を基礎とした化審法の制度には、欧米の制度におけるリスク評価手法をそのまま適用することが困難な面があった。そのため、化審法の事前審査や優先評価化学物質に対する評価といった制度に適合するよう、排出量推計を始めとする各種の手法を調整し、その複合体としてリスク評価スキームを構築した。法律の届出制度等で得られる情報の範囲内でリスク評価を可能とするために、様々な仮定を置き多段階の推計を行う本スキームは、情報収集すべき対象物質及び対象項目を絞り込む手段として一定の利点がある一方で、技術的並びに仕組み上の改良の余地が残っている可能性がある。手法の改良・高度化には、できるだけ多くの者によって検証や改良に向けた検討が行われるようにしておくことが重要であり、こうした観点から、一連の手法の透明性を確保することが、リスク評価スキームを今後さらに改良・高度化するための近道となる。

的動向を踏まえて構築し、透明性を担保するために技術ガイダンスとして公開することとする。」と記載がある。

[1] 生分解性、生物蓄積性、有害性（人への長期毒性、生態毒性）。

なお、本ガイダンスでは標準的な手法と考え方を示しており、対象物質の特徴に応じて様々な例外があると想定される。本ガイダンスは、説明を加えた上で例外的な扱いや個別の解析を追加することを阻むものではない[1]。最終的な目的は、形式に従ったリスク評価書等を作成することではなく、化審法上の判断の根拠としうる結論を合理的に導くことである。そのため、今後リスク評価を実施することで得られる経験や科学的知見等を踏まえて、必要に応じて本ガイダンスの内容は見直されていく[2]。

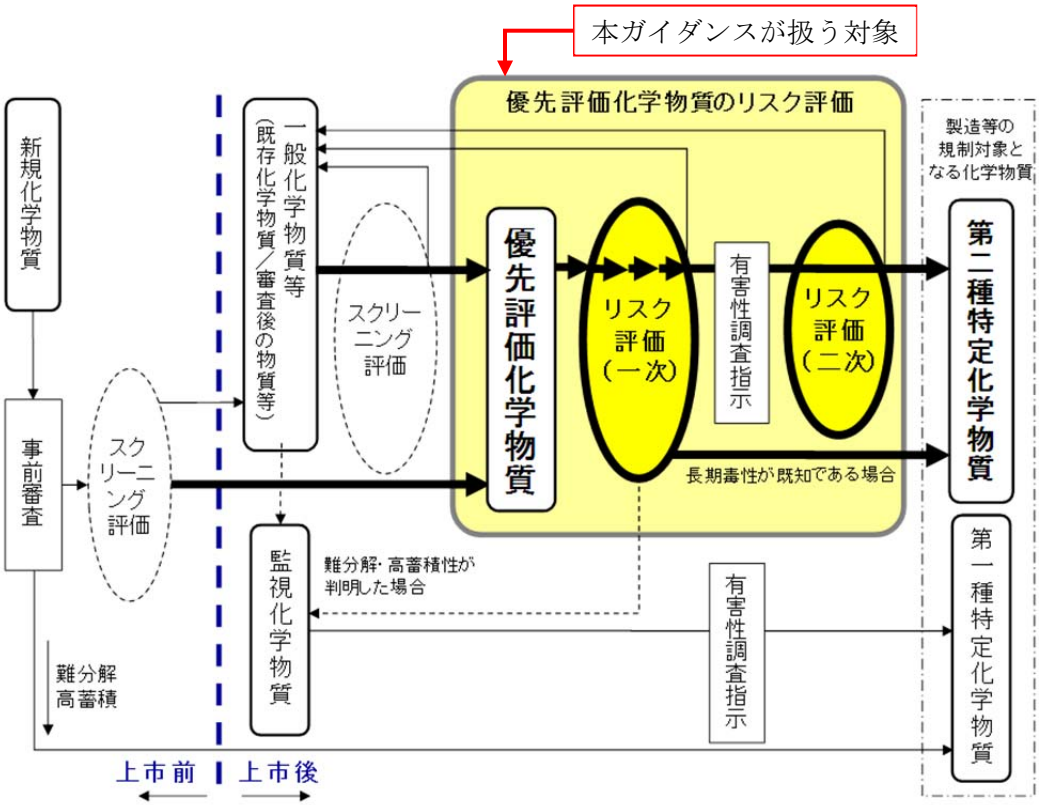
5. 技術ガイダンスについて

5.1. 技術ガイダンスが扱う対象と構成

本ガイダンスが扱う対象を図表 2 に示す。優先評価化学物質に対して行うリスク評価は、「リスク評価（一次）」と、長期毒性との関連性に関する知見等が得られた後に行うリスク評価である「リスク評価（二次）」に分かれており、リスク評価（一次）は更に、評価Ⅰ、評価Ⅱ、評価Ⅲという 3 段階の評価に分かれている。本ガイダンスは、この「リスク評価（一次）」（評価Ⅰ、評価Ⅱ、評価Ⅲ）及び「リスク評価（二次）」に対するものである。

[1] REACH-TGD（EU の REACH におけるリスク評価の技術指針）においても“case-by-case”の対応や“expert judgement”の必要性について折に触れ言及されている。

[2] 審議会資料「化審法に基づく優先評価化学物質のリスク評価の基本的な考え方」においても、5.(3)「『化審法に基づく優先評価化学物質のリスク評価の基本的な考え方』、『優先評価化学物質のリスク評価手法について』及び『技術ガイダンス』については、『今後の課題』についての検討結果、最新の科学的知見や国際的動向、優先評価化学物質のリスク評価の結果を踏まえて、必要に応じて専門家の意見を聴取し、見直しを行う。」と記載がある。



図表 2　本ガイダンスで対象とするリスク評価

本ガイダンスは分量も多いため、リスク評価における技術要素ごと（有害性評価、排出量推計、暴露評価など）に別々の章立てとし、分冊形式とした[1]。

審議会資料（3. を参照）の「優先評価化学物質のリスク評価手法について」の「Ⅲ. リスク評価手法の概要」では、リスク評価（一次）の評価Ⅰ、評価Ⅱ、評価Ⅲ及びリスク評価（二次）等の評価段階に沿って構成され、その下に有害性評価や暴露評価等が記載されている。一方、本技術ガイダンスでは、有害性評価、暴露評価といった技術要素ごとの章の中に、リスク評価（一次）の評価Ⅰ、評価Ⅱ、評価Ⅲ及びリスク評価（二次）の評価段階ごとの扱いを記載する構成となっている。

5.2. 想定される読者等

本ガイダンスのそれぞれの章は、「本編」と「付属資料」の 2 部構成となっている。審議会資料、本ガイダンスの位置付け・概要と想定される読者をまとめると図表 3 のとおりである。

[1] REACH-TGD の詳細版（R シリーズ）も、同様に要素ごとの分冊形式をとっている。

図表 3　審議会資料と技術ガイダンスの位置付けと想定する読者等

構成		位置付け・概要	想定する読者
審議会資料	・化審法に基づく優先評価化学物質のリスク評価の基本的な考え方 ・優先評価化学物質のリスク評価手法について	リスク評価の目標、リスク評価手法の基本的な前提と考え方、手順及び各評価段階（リスク評価（一次）の評価Ⅰ、評価Ⅱ、評価Ⅲ、及びリスク評価（二次））の概要を解説したもの	・リスク評価スキームの目標や考え方を知りたい者（優先評価化学物質の製造・輸入者等） ・化審法のリスク評価に関わる者全般） ・
技術ガイダンス	・本編	リスク評価スキームの評価段階に沿って、各実施項目における詳細な作業の流れや手順、作業の意義やステップ間の相互関係を説明したもの	・審議会資料を読み、手順や手法及びその考え方等の詳細を知りたい者 ・化審法のリスク評価に関わる者全般 ・
	・付属資料※	本編に示した各実施項目における各種のデフォルト設定や手法選定の経緯や根拠、具体的な計算式等を収載したもの	・本編を読み、手法の技術的な詳細や根拠を知りたい者

※導入編と用語集には付属資料はない。

5.3. 各章の内容

本ガイダンスの各章で解説する概要は図表 4 のとおりである。大きくは「準備」、「有害性評価」、「暴露評価」、「リスク推計・とりまとめ等」に分かれている。分量は「暴露評価」が最も多い。

1

2 図表 4　技術ガイダンスの各章の概要

項目	章番号	章の名称	各章の概要
-	-	導入編	技術ガイダンスを作成する目的、審議会資料との関係、リスク評価スキームの特徴、ガイダンスの構成と想定する読者等を解説する。
準備	Ⅰ	評価の準備	リスク評価の準備段階における情報収集と、物理化学的性状等の精査方法等を解説する。
有害性評価	Ⅱ	人健康影響の有害性評価	人健康影響に関する有害性評価について各評価段階における考え方や手法等を解説する。
	Ⅲ	生態影響の有害性評価	生態影響に関する有害性評価について各評価段階における考え方や手法等を解説する。
暴露評価	Ⅳ	排出量推計	化審法の製造数量等の届出情報を用いた排出量推計に関する考え方、手法及び手法の設定方法について解説するとともに、化管法に基づく排出量の情報（PRTR 情報）の暴露評価Ⅱ以降での利用方法についても述べる。これらについて、続くⅤ～Ⅶ章に述べる暴露シナリオごとの扱いも解説する。
	Ⅴ	暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～	暴露評価のうち、すべての優先評価化学物質に適用する排出源ごとの暴露シナリオについて、考え方、手法及び手法の設定経緯等を解説する。数理モデルの全数式も付属資料に収載する。
	Ⅵ	暴露評価～用途等に応じた暴露シナリオ	暴露評価のうち、用途等に応じた暴露シナリオについて、考え方、手法及び手法の設定経緯等を解説する。本シナリオには、水系の非点源シナリオ、大気系の非点源シナリオ、船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ、地下水汚染の可能性シナリオが含まれており、シナリオ別の節立てとなっている。
	Ⅶ	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	評価Ⅱ以降では、様々な影響を含めた暴露シナリオによる暴露評価も実施する。その考え方や手法等を解説する。本章は「広域的・長期的スケールの暴露状況の推計」（製造数量等の届出情報や PRTR 情報を利用）「環境中濃度等の空間的分布の推計」（PRTR 情報等を利用）に分けて解説する。また、残留性の評価のうち、モデル推計に係る内容も述べる。
	Ⅷ	環境モニタリング情報を用いた暴露評価	評価Ⅱ以降では暴露評価に環境モニタリング情報を利用する。環境モニタリング情報の位置付け、収集、選定、利用方法等を解説する。
リスク推計・とりまとめ・等	Ⅸ	リスク推計・優先順位付け・とりまとめ	リスク推計の考え方や手法を解説する。また、リスク総合指標の算出方法、評価Ⅰにおける優先順位付け、評価Ⅱ以降における評価結果に含まれる不確実性を踏まえた解釈やとりまとめ内容等を解説する。

3

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

Ⅰ．評価の準備

Ver. 1.0

平成 26 年 6 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	平成 26 年 6 月	初版

目　次

I. 評価の準備 1
I.1 はじめに 1
I.1.1 本章の位置づけ 1
I.1.2 他の章との関係 2
I.2 評価段階に共通する前提と基本的な考え方 3
I.2.1 情報整備 3
I.2.2 評価対象物質の識別 7
I.2.3 性状データの信頼性評価とキースタディ選定 12
I.2.4 分解性と生物蓄積性の評価 15
I.3 評価Ⅰのための準備 16
I.3.1 評価Ⅰの準備の目的 16
I.3.2 評価Ⅰの準備のフロー 16
I.3.3 優先評価化学物質の抽出 17
I.3.4 評価対象物質の識別に係る情報整備とその候補の識別 18
I.3.5 性状情報の整備とデータの選定 19
I.3.6 評価Ⅰにおける評価対象物質の設定と性状に応じた扱い 22
I.4 評価Ⅱのための準備 24
I.4.1 評価Ⅱの準備の目的 24
I.4.2 評価Ⅰとの違い 24
I.4.3 評価Ⅱにおける評価対象物質の設定 25
I.4.4 物理化学的性状及び生物蓄積性データの精査と選定 25
I.4.5 環境中の分解性データの精査と選定 45
I.4.6 有害性情報の報告の求めに係る項目の特定 60
I.5 評価Ⅲのための準備 71
I.6 リスク評価(二次)のための準備 71
I.7 付属資料 72
I.7.1 物理化学的性状・生物蓄積性及び分解性データの収集内容 72
I.7.2 物理化学的性状・生物蓄積性及び分解性の試験法の適用範囲 73
I.7.3 物理化学的性状・生物蓄積性及び分解性の推計法の概要と適用範囲 88

I. 評価の準備

I.1 はじめに

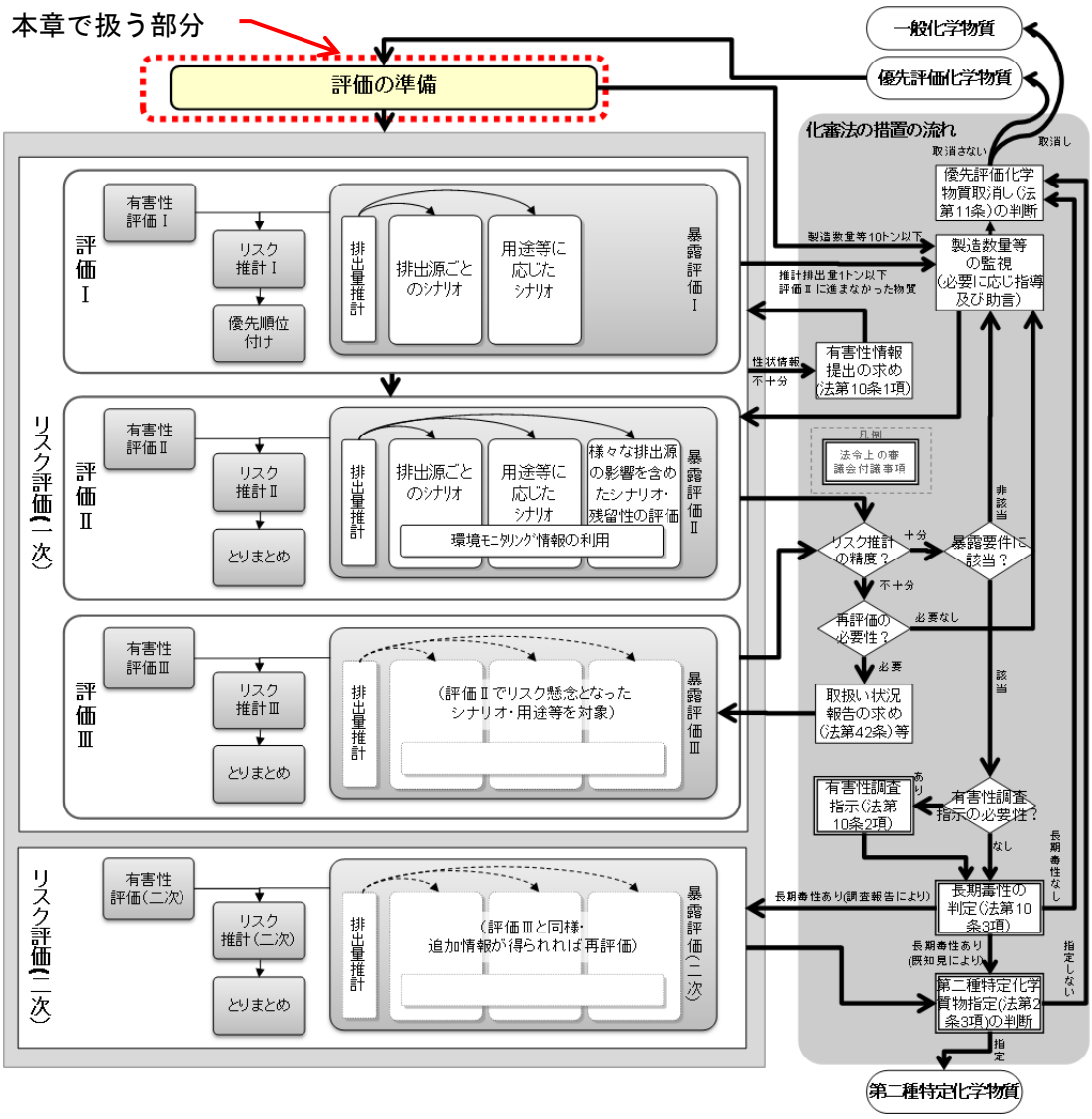
I.1.1 本章の位置づけ

評価の準備は、評価（暴露評価、有害性評価、リスク評価）に先立って行われるものであり、主な内容は、リスク評価の対象物質の特定、評価に用いる情報の整備とデータの選定である。本章ではリスク評価の対象物質の特定、主に暴露評価に用いる物理化学的性状、環境中での分解性[1]及び生物蓄積性[2]に係る情報整備やデータ選定の考え方等について記述する。リスク評価スキーム全体における本章で扱う部分を図表 I-1 に示す。

評価の準備は評価段階ごとに内容が異なる。

[1] 分解性は、化審法では「自然的作用による化学的変化を生じにくいものであるかどうか」という文言で表現されている。その判定をするために微生物等による化学物質の分解度試験が行われ、試験結果に応じて「良分解性」か「難分解性」かに判定される。本ガイダンスでは「分解性」という言葉を、上記の化審法における定性的な判定結果に加えて、環境媒体（大気、水域、土壌、底質）別の分解速度定数（生分解以外の光分解や加水分解等も含む）や半減期といった定量的なデータも包含するものとして使用する。

[2] 生物蓄積性は、化審法では「生物の体内に蓄積されやすいものであるかどうか」という文言で表現されている。その判定をするために魚介類の体内における化学物質の濃縮度試験又は一-オクタノールと水との間の分配係数測定試験が行われ、試験結果に応じて「高濃縮性」か「高濃縮性ではない」かに判定される。本ガイダンスでは「生物蓄積性」という言葉を、上記の化審法における定性的な判定結果に加えて、生物濃縮係数 BCF や生物蓄積係数 BMF といった定量的なデータも包含するものとして使用する。



図表 I-1　リスク評価全体における本章で扱う部分（赤の波線枠内）

I.1.2 他の章との関係

優先評価化学物質のリスク評価で用いられる様々な情報の整備について、図表 I-2 に整理した。表では整備すべき情報の対象項目とその参照先を記載している。

暴露評価に用いる性状情報（物理化学的性状、分解性及び生物蓄積性）[1]の整備については本章に記述している。暴露評価に用いる情報のうち、化審法に基づく製造数量等の届出情報と化管法に基づく PRTR 情報の整備についてはⅣ章に、環境モニタリング情報の整備についてはⅧ章に記述している。また、暴露評価Ⅱにおいて、必要に応じて追加収集する

[1] 性状情報には一般的には有害性情報も含むが、本章においては物理化学的性状、分解性及び生物蓄積性の情報を指して使うものとする。

情報のうち、環境への排出量推計に係る情報についてはⅣ章に、数理モデルの環境条件等についてはⅤ章とⅥ章にそれぞれ記述している。

有害性評価に用いる情報整備については、人健康影響に関してはⅡ章、生態影響に関してはⅢ章に記述している。

また、優先評価化学物質のリスク評価では、評価に用いる以外に、実質的なリスク評価の対象物質である「評価対象物質」の識別（I.2.2 で後述）をするためにも各種の情報を用いる（図表 I-2 に※で表示）。評価対象物質の識別とそのための情報整備については本章（I.2.1 及び I.3.4）に記載している。

図表 I-2　本スキームにおける情報整備の対象項目と記述の参照先

情報整備の対象項目			参照先
暴露評価に用いる情報	性状情報	物理化学的性状	Ⅰ章（本章）
		分解性　※	
		蓄積性　※	
	化審法に基づく製造数量等の届出情報　※		Ⅳ章
	化管法に基づく PRTR 情報		
	環境モニタリング情報		Ⅷ章
	暴露評価Ⅱにおいて必要に応じ追加的に収集する情報	下水処理施設からの環境への排出に係る情報（下水処理場の除去率等）	Ⅳ章
		数理モデルに入力する環境条件等	Ⅴ章、Ⅵ章
有害性評価に用いる情報	人健康影響に係る有害性情報　※		Ⅱ章
	生態影響に係る有害性情報　※		Ⅲ章

※　評価対象物質の識別（I.2.2 で後述）にも使用する情報（I.2.1 及び I.3.4 で後述）

I.2 評価段階に共通する前提と基本的な考え方

I.2.1 情報整備

I.2.1.1　情報整備の進め方

優先評価化学物質のリスク評価を行うための本章で扱う情報整備には 2 つの側面がある。1 つ目は、優先評価化学物質ごとに評価対象物質を識別（I.2.2 参照）するための情報整備である（I.3.4 参照）。それにより、実質的にリスク評価の対象となる評価対象物質の候補を抽出する。2 つ目は評価対象物質ごとの性状情報（物理化学的性状、分解性及び生物蓄積性）の整備のである。

性状情報の整備における主な情報源は以下の（ア）～（ウ）に大別される。

(ア) 化審法上のデータ[1]

[1] 判定に用いられたデータ、国による試験データ、事業者より報告されたデータがある。

(イ) 上記（ア）以外の文献情報等のデータ
(ウ) 推計による定量的データ（(ア)、(イ）を除く）

化審法上、国が保有する（ア）以外に、(イ)（ウ）について国が既知見を収集する情報源の範囲は「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」[1]に記載されている。

これらの情報整備によって優先評価化学物質のリスク評価に必要な情報が得られない場合[2]に、国は法第 10 条第 1 項に基づき優先評価化学物質の製造・輸入事業者に対して有害性等に係る試験成績を記載した資料の提出を求めることができる（I.4.6 参照)。

以上のように、優先評価化学物質のリスク評価に必要な性状情報の整備は、国による既知見調査と事業者への情報の求めという 2 つの手段で進められる。

I.2.1.2 整備する性状情報の項目と使用目的

収集・整備をする性状情報の項目とその使用目的を図表 I-3 に示す。これらは主に暴露評価で用いる。ただし、物質によっては測定不可能な性状がある等により、すべての項目のデータは得られない。物質のタイプ別の扱い等については I.3.6.2 で後述する。

情報整備においては、数値だけではなくデータの信頼性に係る情報を併せて収集する。例えば試験方法、試験条件、GLP 準拠であるかどうか、情報源等である（付属資料 I.7 参照)。信頼性に係る情報は、データの信頼性評価に用いる（I.2.3 参照)。

性状の項目間の相互関係と、暴露評価の各ステップとの関係について、排出源ごとの暴露シナリオを例にして図表 I-4 に示す。図の中の矢印は、矢印の起点の項目が終点の項目を推計する入力値になっていることを表す。この図から、性状が人の摂取量や水生生物の暴露濃度といった暴露評価結果を左右することがわかる。暴露評価の詳細はⅣ～Ⅶ章で、性状データが暴露評価並びにリスク評価結果に及ぼす影響については I.4.6 で後述する。

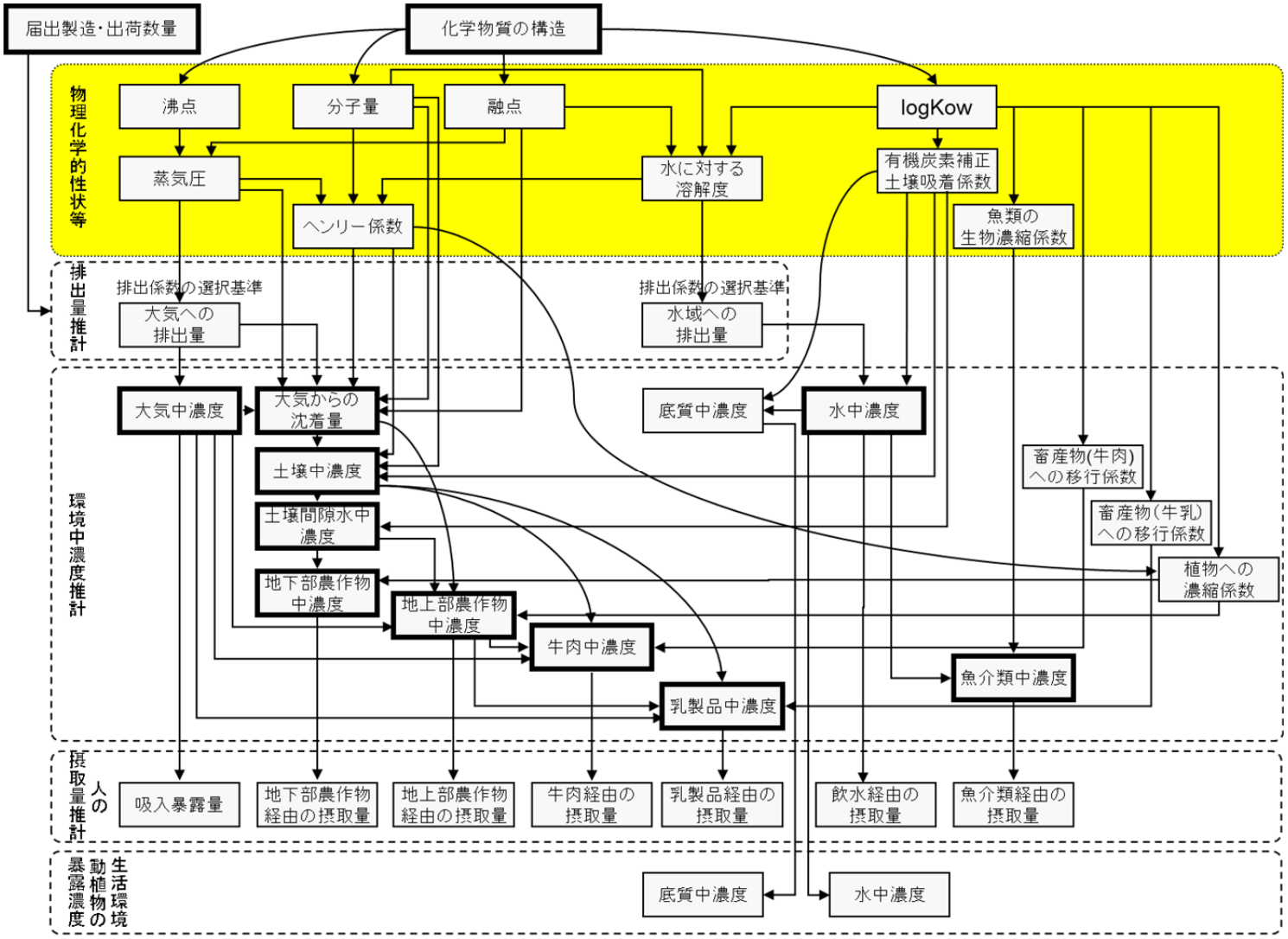
[1] 「化審法のスクリーニング評価及びリスク評価（一次）評価 I に用いる性状データの信頼性評価等の公表について」
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html

[2] 情報が得られても信頼性等が不十分な場合も含む（I.4.6 参照)。

1
2
3 図表 I-3 整備する性状情報の項目と使用目的

項　目	使用目的			
		識別 ※1	暴露Ⅰ ※2	暴露 Ⅱ※3
分子量	・高分子か否かの判断 ・性状データを推計する場合の分子量による適用範囲の確認 ・変化物の生成量の推計（親化合物から変化物）	○	○	○
沸点	・蒸気圧の推計		○	○
融点	・蒸気圧の推計 ・水に対する溶解度の推計		○	○
蒸気圧	・大気に関する排出係数の選択基準 ・ヘンリー係数の推計 ・大気相でのガス態／粒子吸着態の分布比の推計		○	○
水に対する溶解度	・水域に関する排出係数の選択基準 ・ヘンリー係数の推計 ・予測水中濃度が水に対する溶解度を超えていないかの判断及び上限値		○	○
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	・水に対する溶解度の推計 ・BCF の推計 ・Koc の推計 ・植物(農作物)への濃縮係数の推計 ・畜産物(肉、乳製品)の移行係数の推計 ・有害性評価Ⅱにおける底生生物の評価を行うかの判断 ・監視化学物質該当性の判断 ・被験物質により評価対象物質の識別（化審法の審査等におけるデータの場合）	○	○	○
ヘンリー係数	・土壌からの揮発による消失速度の推計 ・ガス態の湿性沈着量の推計 ・土壌の空気相と間隙水の分配の推計 ・植物(農作物)への濃縮係数の推計		○	○
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	・土壌の固相の間隙水の分配の推計 ・底質の固相と間隙水の分配の推計 ・水中の懸濁粒子と水の分配の推計		○	○
生物濃縮係数(BCF)	・魚中濃度推計 ・BMF の選択基準 ・監視化学物質該当性の判断 ・被験物質により評価対象物質の識別（化審法の審査等におけるデータの場合）	○	○	○
分解性	・暴露評価Ⅱに用いる生分解の半減期の推計 ・監視化学物質該当性の判断 ・変化物の有無等による評価対象物質の識別（化審法の審査等におけるデータの場合）	○	○	○
環境中の媒体別分解速度定数／半減期	・媒体別の環境中濃度推計等			○

4 ※1　評価対象物質の識別
5 ※2　暴露評価Ⅰ
6 ※3　暴露評価Ⅱ



図表 I-4　性状項目間及び暴露評価との関係（排出源ごとの暴露シナリオ（Ⅴ章）の例）

I.2.2 評価対象物質の識別

ここでは、優先評価化学物質のリスク評価を行う上で基本となる「評価対象物質」の定義（I.2.2.1 ）と優先評価化学物質との関係（I.2.2.2 ）について説明する。評価段階と評価対象物質の関係にも触れる（I.2.2.3 ）。

I.2.2.1 評価対象物質の定義等

「評価対象物質」とは、リスク評価の実質的な対象物質を指すものとする。

評価対象物質と関係するものとして、優先評価化学物質に指定された化学物質、製造数量等の届出の対象となる化学物質、性状データについて既知見を収集する際の対象物質、有害性試験等の被験物質である試験対象物質等があり、これらはは必ずしも相互に一致しないことがある。

そのため、優先評価化学物質ごとに、以下の 2 つの観点からの確認を行い、評価対象物質の候補を抽出する。この一連の作業を「評価対象物質の識別」と呼ぶ。

（ア）優先評価化学物質に指定されている化学物質のほかに、評価対象物質が存在するかの確認
（イ）優先評価化学物質に指定された化学物質の単位と、有害性情報等の性状情報の化学物質の単位の対応が適切かの確認

評価対象物質の識別によって抽出した評価対象物質ごとに、リスク評価に必要な情報を整備する（I.3.4 で後述）。

I.2.2.2 優先評価化学物質と評価対象物質等との関係

リスク評価を行うにあたっては、優先評価化学物質ごとに評価対象物質を設定し、性状（有害性、分解性・生物蓄積性・物理化学的性状等）情報を整備して評価（有害性評価、暴露評価、リスク評価）を行う[1]。単一構造の優先評価化学物質については、優先評価化学物質として指定された物質と評価対象物質が概ね一致するが、一致しない場合の例について、図表 I-5 に整理した。

[1] 得られる性状データによっては、有害性評価と暴露評価では評価対象物質が異なることがありうる。例えば、優先評価化学物質が混合物の場合、有害性情報は有姿の混合物としてのデータが得られるが、暴露評価に用いる物理化学的性状等の情報は、既知見の収集結果や推計結果を用いるために 1 つの代表成分を評価対象物質とする場合など。

1 図表 I-5 優先評価化学物質と評価対象物質等との関係と事例

	優先評価化学物質	製造数量等の届出の対象となる化学物質	評価対象物質	既知見を収集する際に対象になりうる物質	試験対象物質
定義等	・法第 2 条第 5 項に該当するものとして大臣により指定される化学物質 ・自然的作用により変化物が生じるものは、変化物の性状を加味して親化合物が指定される	指定されている化学物質のほか、運用通知 3-2 に記載される扱い(構造の一部又は構成部分に優先評価化学物質を有するものの扱い)が適用される化学物質	有害性評価、リスク評価の実質的な対象物質 (化審法の審査・判定を経ている場合には、その際に設定される)	国が既知見を収集する際に指標とする物質 (通常、CAS 番号を有する物質。化審法の審査・判定を経ている場合には、その際の評価対象物質)	性状を調べるために個別の試験に供された物質
例①	単一の化学物質	単一の化学物質	単一の化学物質	単一の化学物質	単一の化学物質
例②	○と△の反応生成物	○と△の反応生成物	○と△の反応生成物	○と△の反応生成物(通常、公知の情報源からは情報を収集できない)	○と△の反応生成物
例③	「A」を主成分とする○と△の反応生成物	「A」を主成分とする○と△の反応生成物	・有姿の試験データがある場合：「A」を主成分とする○と△の反応生成物 ・有姿の試験データがない場合：「A」	評価対象物質のうち CAS 番号を有する物質 ・「A」を主成分とする○と△の反応生成物 ・「A」	・有姿の試験が行われている場合：「A」を主成分とする○と△の反応生成物 ・主成分で試験が行われている場合：「A」
例④	「A」と「B」の混合物	「A」と「B」の混合物	・有姿の試験データがある場合：「A」と「B」の混合物 ・有姿の試験データがない場合：「A」又は／及び「B」	評価対象物質のうち CAS 番号を有する物質 ・「A」と「B」の混合物 ・「A」 ・「B」	・有姿の試験が行われている場合：「A」と「B」の混合物 ・代表成分で試験が行われている場合：「A」又は／及び「B」
例⑤	「A」(塩を形成しうる化合物)	・「A」 ・「A を含む塩」や水和物で MITI 番号がないもの	・「A」 ・「A を含む塩」	評価対象物質のうち CAS 番号を有する物質 ・「A」 ・「A を含む塩」	「B」(A を含む塩)
例⑥	「親化合物 A」	「親化合物 A」	・「親化合物 A」 ・「親化合物 A」の変化物である「B」	評価対象物質のうち CAS 番号を有する物質 ・「親化合物 A」 ・「B」	・「親化合物 A」 ・「B」
例⑦	高分子の該当が不明な化学物質「A」	・「A」(高分子でないもの) ・「A」(高分子のもの)	・「A」(高分子でないもの) ・「A」(高分子のもの)	評価対象物質のうち CAS 番号を有する物質 ・「A」(高分子でないもの) ・「A」(高分子のもの)	・「A」(高分子でないもの) ・「A」(高分子のもの)

2 ※ 上記は概念整理のための例示であり、実際に上記のとおりとは限らない。
3 ※ 複数の例に当てはまる場合もありうる。

図表 I-5 に示す例のうち、例①～③は評価対象物質が基本的には 1 つである。

例④の場合は、得られる性状データによっては、成分のうちの複数を評価対象物質にすることがありうる。

例⑤の場合は、必要に応じて複数の化学物質を評価対象物質に設定することがありうる。

例⑥～⑦については、評価対象物質が複数である。

例①は自明とし、以下、例②～⑦について解説する。

例②：優先評価化学物質の指定名称から構造が特定できない場合

代表例としてはに示した「○と△の反応生成物」等といった名称のものである。新規化学物質由来の場合が多く、その場合は化審法の審査を経ているため、審査の際に評価対象物質が設定される。審査の際に用いられる性状データは、通常、有姿の試験データである。

例③：優先評価化学物質が指定名称から主成分の特定できる混合物である場合

代表例としては「A を主成分とする○と△の反応生成物」等といった名称のものであり、新規化学物質由来の場合が多い。化審法の審査等において、有姿の試験データが得られるか否かによって評価対象物質の設定が異なる。有姿の試験データが得られない場合、優先評価化学物質の指定名称のままでは既知見の性状データの検索・収集が行えないことが多いため、基本的には主成分である A を評価対象物質に設定する。

例④：優先評価化学物質が指定名称から主成分は特定できないものの構造の特定できる複数成分の混合物である場合

「A と B の混合物」等といった名称のものや、異性体が含まれる名称のもの、繰り返し構造の数が変化する混合物等が該当しうる。例③とは異なり、主成分は判別できないが構成成分は特定できるものである。化審法の審査等において、有姿の試験データが得られるか否かによって評価対象物質の設定が異なる。有姿の試験データが得られず、優先評価化学物質の指定名称のままでは既知見の性状データの検索・収集が行えない場合には、基本的にはいずれか 1 つの代表成分、又はすべての成分を評価対象物質に設定する。

例⑤：構造の一部又は構成部分に優先評価化学物質を含む化学物質が、製造数量等の届出の対象となる場合

優先評価化学物質の製造数量等の届出において、化審法の運用通知[1]に基づき、1 つの優先化学

[1] 「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について」の「３－２ 構造の一部又は構成成分に第一種特定化学物質、第二種特定化学物質、監視化学物質、優先評価化学物質又は一般化学物質を有するものの取扱い」に基づき、「新規化学物質とは取り扱わないものとしたもの」のうち、構造の一部に優先評価化学物質を有するもの（例：分子間化合物、包摂化合物、水

物質に複数の化学物質が含まれているる場合がある。図表 I-5 の例⑤に挙げた例では、「A」を含む塩や水和物等で、既存化学物質名簿に収載されていないが新規化学物質とは取り扱わない化学物質については、「A」として製造数量等の届出が行われる。その場合、製造数量等の届出の対象となる化学物質にいかなる物質が含まれるかは届出後に判明する[1]。また、届出年度ごとに変わる可能性もある。

評価対象物質は、基本的には優先評価化学物質の指定名称となっている化学物質である。ただし、必要に応じて製造数量等の届出の対象となる化学物質についても評価対象物質に設定する[2]。

例⑥：分解度試験等により変化物が残留することが判明している優先評価化学物質の場合

化審法における分解性の判定結果等に応じ、優先評価化学物質の評価対象物質のパターンは以下の 2 種類に分類できる。

(ア) 親化合物のみが評価対象物質
(イ) 親化合物と変化物(複数の場合を含む)の両方が評価対象物質

親化合物から自然的作用により変化物が生じる場合、その変化物の性状によっては、その変化物も評価対象物質となる[3,4]。本例⑥に該当するのは（イ）の場合である。

上記（ア）と（イ）の 2 つのパターンをさらに詳細にすると、図表 I-6 に示す 7 つのパターンに分類できる。分解度試験の結果、変化物が残留する場合には（イ）のパターンとなり、それ以外は親化合物のみで評価を行うことになる[5]。変化物が生じるかどうか、生じる場合にそれも評価対象

和物、複塩、固溶体、ブロック重合物、グラフト重合物に限る。）については、優先評価化学物質を含む混合物として取り扱い、優先評価化学物質に係る規定が適用される。「新規化学物質とは取り扱わないものとしたもの」とは、同運用通知の「2 新規化学物質の製造又は輸入に係る届出関係」に規定されており、既存化学物質名簿には収載されていないものの、分子間化合物等であって個々の化学物質がすべて既存化学物質等であるものを指す。

[1] 優先評価化学物質製造数量等届出書の様式には物質管理番号(優先評価化学物質の番号)と官報整理番号のほか、「その他の番号」として CAS 番号の記入欄があり、これによって化学物質の構造等が特定される。

[2] 必要に応じてとは、化学物質によって常温における状態（液体／固体など)や性状が異なり、取扱い・排出・環境挙動が異なることが考えられる場合、詳細段階（評価Ⅱ以降）では化学物質ごとに評価を行うこと等を想定している。

[3] 優先評価化学物質は、第二種特定化学物質に該当しているかについての評価を優先的に行う必要がある化学物質である（法第 2 条第 5 項の定義より)。第二種特定化学物質は、同第 3 項の定義により、当該物質（親化合物）自体の性状のみならず、親化合物の変化物の性状によって、親化合物が第二種特定化学物質に指定されることがある。このため、変化物が生じる場合には、変化物も評価対象物質に設定する必要がある。

[4] 人健康と生態の両方の評価を行う優先評価化学物質であって､2 物質以上が評価対象物質になる場合、人健康と生態で有害性評価の対象物質が異なることがありうる。また、人健康の有害性項目によって、対象物質が異なることもありうる。

[5] ただし、スクリーニング評価において、親化合物の有害性では優先評価化学物質相当ではなかった場合に、変化物のみが評価対象物質となる場合もありうる。

物質となるかどうかは、優先評価化学物質の名称からは判別できず、分解度試験の判定結果等から判別を行い、評価対象物質を設定する。

図表 I-6　変化物の有無に係る評価対象物質のパターンの詳細

	（ア） 親化合物のみが評価対象物質										（イ） 親化合物と変化物（複数を含む）の両方が評価対象物質			
パターン	1		2		3		4		5		6		7	
物質	親化合物	変化物	親化合物	変化物	親化合物	変化物	親化合物	変化物	親化合物	変化物	親化合物	変化物	親化合物	変化物
分解度試験※1	残留せず	残留せず※2	残留	残留せず※2	残留せず	良分解性と判定されている物質が残留	残留	良分解性と判定されている物質が残留	未実施	不明	残留	残留	残留せず	残留
分解性判定※1	良		難		良		難		―		難		難	

※ 1：加水分解性によって判定がなされることもある。
※ 2：「既に得られている組成、性状等に関する知見」[1]として第一種特定化学物質もしくは第二種特定化学物質に該当しないとされている化学物質（元素を含む）が残留するものを含む。

例⑦：優先評価化学物質の製造数量等届出から、「高分子化合物」であるかどうか判断できない場合

優先評価化学物質の製造数量等の届出では「高分子化合物の該当の有無」を記載することになっており、1 つの指定名称で、高分子化合物に該当するとして届出られる場合とそうでない場合が混在することがありうる[2]。高分子化合物であるかどうかによって、性状等が異なり、排出量推計のための排出係数の選択基準も異なるため、基本的には、別々の化学物質として評価対象物質に設定する。

図表 I-5 に挙げた例のほかに、スクリーニング評価段階では十分な有害性情報が得られなかった場合や既存のリスク評価書や有害性評価書においてグループで評価されその単位で評価することが妥当と判断される場合等、指定された優先評価化学物質の単位のままではリスク評価が適切

[1] 局長通知「「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て」
[2] 化審法における高分子化合物の定義は「新規化学物質のうち、高分子化合物であって、これによる環境の汚染が生じて人の健康に係る被害又は生活環境動植物の生息若しくは生育に係る被害を生ずるおそれがないものに関する基準」(平成 21 年厚生労働省・経済産業省・環境省告示第 2 号)に規定されており、次の 1 及び 2 に該当するものである。
1. 1 種類以上の単量体単位の連鎖により生成する分子の集合から構成され、3 連鎖以上の分子の合計重量が全体の 50%以上を占め、かつ、同一分子量の分子の合計重量が全体の 50%未満であること。
2. 数平均分子量が 1,000 以上であること。

に行えないことが判明するケースも考えられる。そのため、評価対象物質は情報収集・整備をしながらリスク評価を進める中で個別に見直す場合がありうる。

I.2.2.3 評価段階と評価対象物質の関係

評価対象物質の識別によってその候補を抽出し（本節）、評価段階ごとに評価対象物質を設定する。一つの優先評価化学物質につき複数の評価対象物質の候補がある場合、評価Ⅰでは 1 物質を設定する（I.3.6 参照）。評価Ⅱでは複数物質を設定することがある（I.4.3 参照）。

I.2.3 性状データの信頼性評価とキースタディ選定

評価対象物質の候補ごとに、性状情報を収集し整備する。整備した性状情報は、信頼性評価により信頼性ランクを付与し、信頼性ランク等に基づき性状データ項目ごとにキースタディを選定する。

一般論として、性状データの質の評価（evaluation）には、以下の 3 つの観点がある。既存データの質の評価を効率的に行うために、①の観点から初期フィルターとして 1～4 に格付けした後、②と③の観点からの検討を専門家が行うという手順が推奨されている[1]。①の格付けに Klimisch コード[2]が使用され、「信頼性あり」とされる 1 又は 2 に格付けされたデータが②と③の精査の対象となる。

① Reliability　信頼性：標準化された試験方法への準拠を評価する観点
② Relevance　関連性：データや試験がハザードの特定やリスクキャラクタリゼーションのためにどの程度適切かという観点[3]
③ Adequacy　妥当性：ハザード評価やリスク評価の目的に、どのデータが有用かという、①と②を総合的に判断する観点

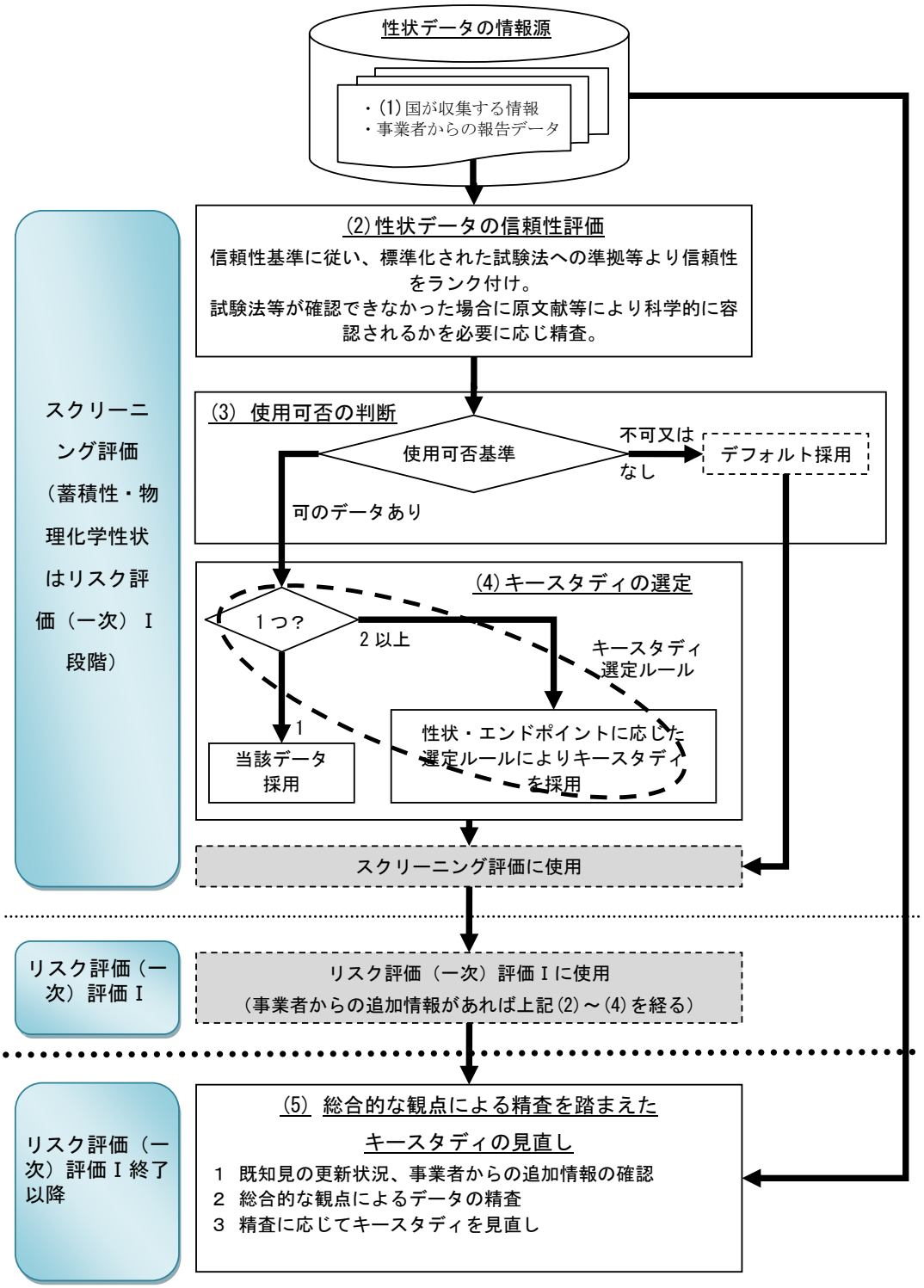
スクリーニング評価とリスク評価に用いる物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データについて、国が既知見を収集する範囲、信頼性評価の考え方とキースタディ選定等の方法については

[1] OECD (2007) Manual for Investigation of HPV Chemicals.
[2] Klimisch, H.-J. et al. (1997) A systematic apporoach for evaluatind the quality of experimental toxicological and ecotoxicological data. Regulatory Toxicology and Phamacology 25, 1-5.
Klimiasch コードには以下の 4 つのランクがあり、原則として 1 と 2 のデータが評価に利用される。
1：信頼性あり（制限なし）、2：信頼性あり（制限付き）、3：信頼性なし、4：評価不能
[3] 例えば、被験物質は評価の対象物質として代表性があるか、対象媒体での物質の安定性等から勘案して試験条件設定等が適切かなどといった観点が考えられる。

「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」[1]に記載されている。優先評価学物質のリスク評価に用いるデータについては、同資料に基づいて信頼性評価、キースタディの選定等を行う。ただし、同資料では、スクリーニング評価とリスク評価（一次）の評価Ⅰまでの方法として記載されており、評価Ⅱ以降については、必要に応じて精査とキースタディの見直しを行う（I.4.4 及び I.4.5 参照）。すなわち、評価Ⅰの段階までは主に上記①の観点から信頼性の格付けとデータ選定を行い、評価Ⅱの段階において②や③も含めた総合的な観点による精査を行い、それを踏まえたキースタディの見直しを行うという、段階的な仕組みとなっている。

スクリーニング評価及びリスク評価を通じた信頼性評価等に係る基本的な流れを図表 I-7 に示す。

[1] 「化審法のスクリーニング評価及びリスク評価（一次）評価Ⅰに用いる性状データの信頼性評価等の公表について」
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html



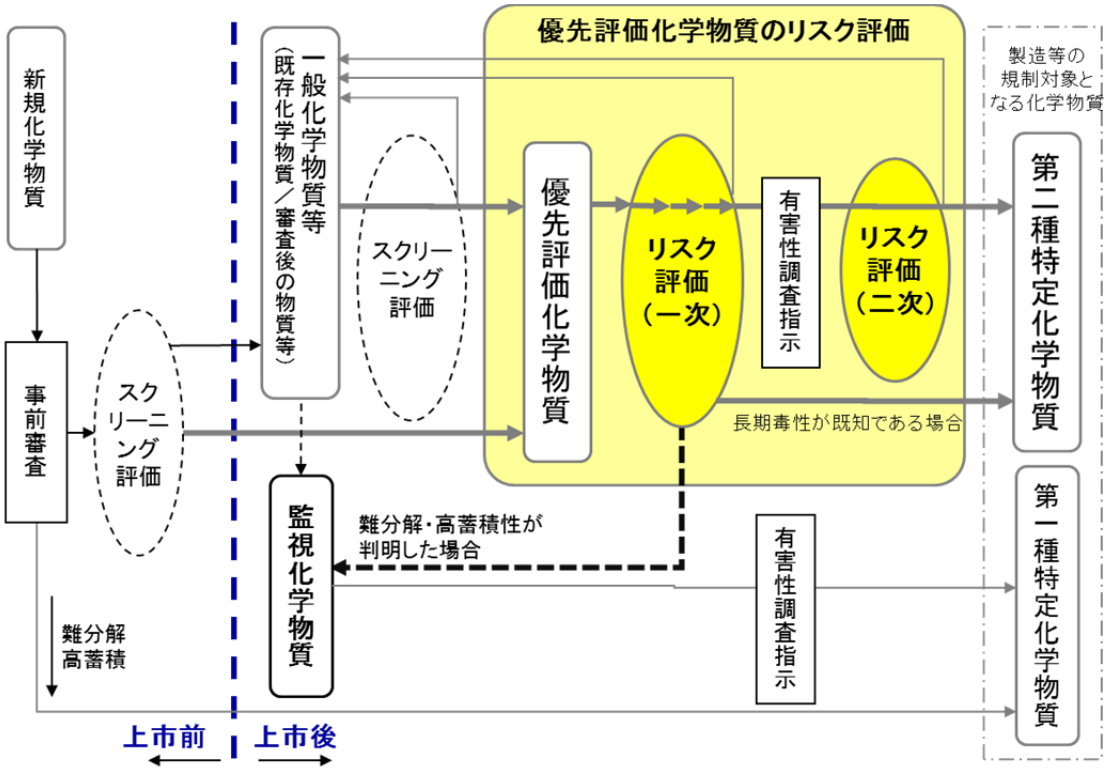
図表 I-7 性状データの信頼性評価等に係る考え方
「化審法のスクリーニング評価及びリスク評価（一次）評価Ⅰに用いる性状データの信頼性評価等の基本的考え方[1]」より

[1] http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html

I.2.4 分解性と生物蓄積性の評価

化審法における審査・判定を経ていない優先評価化学物質の中には、分解性と生物蓄積性が不明のものがある。仮に「難分解性かつ高濃縮性」を有する化学物質である場合、化審法では、監視化学物質[1]（旧第一種監視化学物質）として優先評価化学物質とは異なる枠組みの中で管理されることとなる。そこで、「難分解性かつ高濃縮性」の疑いのある物質の抽出[2]を行い、分解性と生物蓄積性の精査を行う。これにより必要に応じて監視化学物質の該当性の検討に導くこととする。分解性と生物蓄積性の評価は、図表 I-8 においてリスク評価（一次）から監視化学物質を結んでいる破線の部分に該当する。

分解性と生物蓄積性の評価では「優先評価化学物質の抽出（I.3.3 で後述）」において製造・輸入数量が一定値（10 t）以下であった優先評価化学物質についても対象とする。また、このような評価については適宜、一般化学物質も対象として行い、物質の抽出を行うこととする。



図表 I-8　優先評価化学物質のリスク評価の流れ

[1] 難分解・高蓄積性と判明し、人の健康又は高次捕食動物への長期毒性の有無が不明である化学物

[2] この抽出では、化審法の分解性と生物蓄積性に係る「新規化学物質の判定及び監視化学物質への該当性の判定等に係る試験方法及び判定基準」や難分解性・高濃縮性が疑われるものに係る既知見を参考にする。

I.3 評価Ⅰのための準備

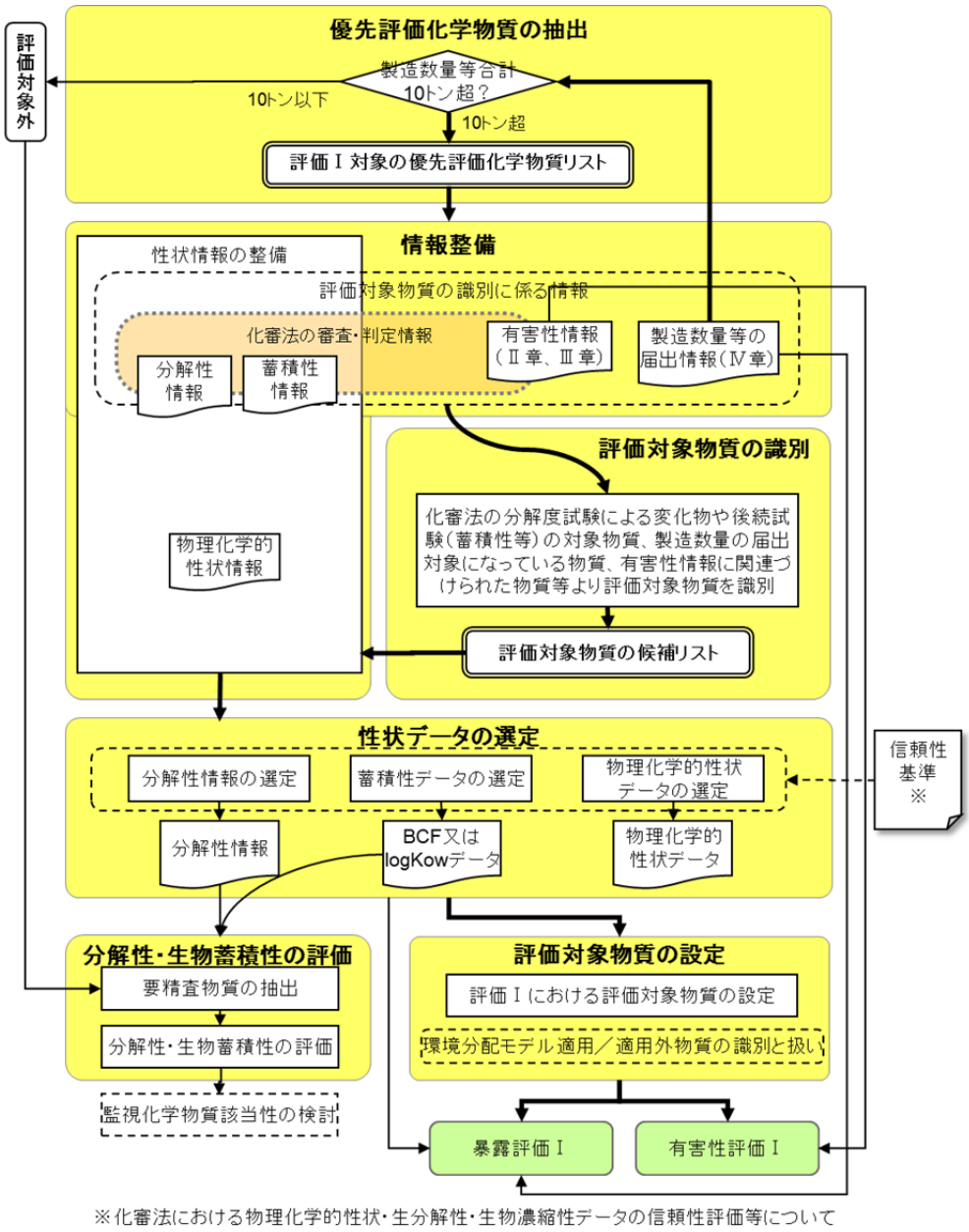
I.3.1 評価Ⅰの準備の目的

評価Ⅰの準備の目的は、評価Ⅰの評価対象物質を設定し、暴露評価Ⅰに用いる物理化学的性状、分解性及び蓄積性に係る情報を整備することである。

I.3.2 評価Ⅰの準備のフロー

評価Ⅰの準備のフローを図表 I-9 に示す。優先評価化学物質の抽出を I.3.3、評価対象物質の識別に係る情報整備とその候補の識別を I.3.4、性状情報の整備とデータの選定を I.3.5、評価Ⅰにおける評価対象物質の設定を I.3.6 で説明する。

なお、図表 I-9 の下段にある「分解性と生物蓄積性の評価」については I.2.4 で前述した。



図表 I-9　評価Ⅰの準備のフロー

I.3.3 優先評価化学物質の抽出

評価Ⅰの対象となるのは、年間の製造・輸入数量の年度合計値が 10 t を超える優先評価化学物質である。

10 t という基準は、法第 5 条（製造予定数量等が一定の数量以下である場合における審査の特

例等）に依拠して設定した。同条は、国内の一年間の製造・輸入予定数量が政令[1]で定める数量（年間 10 t）以下の新規化学物質（低生産量新規化学物質）について、事前審査の過程で「難分解性であるものの高濃縮性ではない」との判定・通知を受けた場合には、事後の監視がなされることを前提に人への長期毒性の疑いの有無及び生態毒性の有無が明らかでない場合であっても製造・輸入ができることとする制度について定めている。この制度は、製造・輸入量が一定数量以下（10 t 以下）の化学物質について、それが第一種特定化学物質に該当する可能性がないものであることが明らかである限り、広範囲な地域の環境中に残留することによる環境経由の暴露の可能性が極めて低いと考えられる[2]ことから設けられたものである。

新規化学物質由来もしくは化審法の判定を受けた既存化学物質由来の優先評価化学物質であれば[3]、第一種特定化学物質に該当する可能性がないものであり、製造・輸入量が 10 t 以下であるものについては第二種特定化学物質に係る暴露要件[4]に該当する可能性が極めて低いと解釈される。このことより、製造・輸入数量が 10 t 以下の物質についてはリスク評価Ⅰの対象としないこととした。

このステップでは、優先評価化学物質の製造数量等の届出情報（次節の参照）のうち、評価年度の製造数量・輸入数量の合計値を用いる。その合計値が 10 t 超か以下に振り分け、前者について当該年度の評価Ⅰの対象とし、次節以降で説明する情報整備を行う。

Ⅰ.3.4 評価対象物質の識別に係る情報整備とその候補の識別

優先評価化学物質のリスク評価を行うための情報整備には、I.2.2 で前述したように 2 つの側面がある。ここでは、1 つ目の側面である優先評価化学物質ごとに評価対象物質を識別するための情報整備とその利用について記載する。

評価対象物質には優先評価化学物質に指定されている物質以外が含まれることがあるため、優先評価化学物質ごとに、以下の 2 つの観点からの確認を行い、評価対象物質の候補を抽出する（「I.2.2 評価対象物質の識別」参照）。

---

[1] 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律施行令　第 2 条の 2

[2] 政令で定める 10t の根拠は「過去の環境モニタリング調査において、製造・輸入数量が 10t 以下である化学物質については、環境中から検出された実績がないことが確認されている」ことであり、化審法の平成 15 年改正において議論され、設定された。
http://www.mhlw.go.jp/shingi/2002/12/s1219-5g.html

[3] 化審法の審査・判定を受けておらず、第一種特定化学物質に該当する可能性がないものであることが明らかではない優先評価化学物質については、製造・輸入量が 10t 以下の場合であっても、分解性・蓄積性の知見に応じて監視化学物質もしくは第一種特定化学物質への該当性について点検を行うことは化審法の制度上、有効であると考えられる。

[4] 第二種特定化学物質の指定要件は、法第 3 条の第二種特定化学物質の定義より、有害性に係る要件（有害性要件）と暴露に係る要件（暴露要件）がある。暴露要件は「性状と製造、輸入、使用等の状況からみて人又は生活環境動植物へのリスクが広範な地域で懸念される状況にあるか、又はこれに至ることが確実と予測される状況であること」をいう。

（ア）優先評価化学物質に指定されている化学物質のほかに、評価対象物質が存在するかの確認
（イ）優先評価化学物質に指定された化学物質の単位と、有害性情報等の性状情報の化学物質の単位の対応が適切かの確認

（ア）と（イ）の観点からの確認を行うため、図表 I-10 に示す情報を用いる。それらの情報を用いて、同表の右欄に示すような種類の評価対象物質の候補が識別される。

図表 I-10　評価対象物質の識別に用いる情報

評価対象物質の識別に用いる情報		識別する評価対象物質の種類と例（例の丸数字は図表Ⅰ-5 参照）
情報源名	用いる項目	
優先評価化学物質の製造数量等の届出情報	・物質名称 ・物質管理番号（優先評価化学物質通し番号） ・官報整理番号（MITI 番号） ・その他の番号（CAS 番号） ・高分子化合物の該当の有無 ・製造・輸入数量（CAS 単位） ・用途別出荷数量	例①②③④⑤⑦ 例えば ・ 通し番号と CAS 番号から例④、例⑤ ・ 高分子化合物の該当の有無から例⑦
化審法の審査・判定に用いられた分解性情報、生物蓄積性情報、人健康影響又は生態影響に係る有害性情報	・物質名称 ・官報整理番号（MITI 番号） ・CAS 番号 ・構造式・分子式 ・分子量 ・構成比率 ・試験方法 ・試験結果 ・判定結果	例①②③④⑤⑥⑦ 例えば ・ 分解度試験の変化物と後続試験の被験物質から例⑥ ・ 被験物質と優先評価化学物質の関係から例③、例④

I.3.5 性状情報の整備とデータの選定

I.3.5.1　情報整備とデータ選定の概要

性状情報には、物理化学的性状、分解性及び生物蓄積性の項目がある（図表 I-3 参照）。これらの情報は、「I.3.3 優先評価化学物質の抽出」及び「I.2.2 評価対象物質の識別」によって抽出された評価対象物質の候補物質ごとに収集する。

収集したデータには、データごとに信頼性ランクを付与し、使用可能なデータを選別し、リスク評価に用いるキースタディを選定する。

評価Ⅰにおける信頼性評価とキースタディ選定の考え方は「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」[1]に記載されていることから、ここではそ

[1] 「化審法のスクリーニング評価及びリスク評価（一次）評価Ⅰに用いる性状データの信頼性評

の概略を記載する。

I.3.5.2 性状データの信頼性評価

性状のデータの信頼性については、そのデータの試験方法や情報源等の情報に基づき、図表 I-11 に示す 1～4 のランク付けを行う。このランク付けは、OECD の HPV マニュアル[1]と、概ねそれに準拠している Japan チャレンジプログラムのマニュアル[2]を参考にして作成されている。

本スキームの独自性として、ランクの中に A,B 等の細分類を設定しており、精査を行う前でも可能な範囲で適切なキースタディが選定しやすいように工夫されている。

価等の公表について」
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html

[1] OECD (2007) Manual for Investigation of HPV Chemicals.
http://www.oecd.org/document/7/0,2340,en_2649_34379_1947463_1_1_1_1,00.html

[2] 厚生労働省、経済産業省、環境省(2005)既存化学物質安全性情報収集・発信プログラムスポンサーマニュアル(詳細版)ver. 1.0. 第 3 章　信頼性評価.
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/challenge/bosyuu_challenge/0722syousaimanual.pdf

図表 I-11 信頼性ランク、信頼性基準及び使用可否基準[1]

<table>
<tr><th rowspan="2">使用可否基準</th><th colspan="3" rowspan="2">信頼性ランク</th><th colspan="2">信頼性基準（信頼性を評価する観点）</th></tr>
<tr><th>国際的にもしくは化審法上認められた試験法等によるデータ</th><th>専門家によりレビューされているとみなすことができるデータ</th></tr>
<tr><td rowspan="6">原則使用可</td><td rowspan="6">信頼性あり</td><td>1A</td><td rowspan="2">制限なし</td><td>化審法通知 1)の試験法又は OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法によるもので GLP2)準拠のもの</td><td>・化審法の判定結果を導くために直接的に使われたデータ
・OECD-HPV プログラム 3)の SIAR4)のキースタディのうち測定値データであり、かつ Reliability 1 の記載があるデータ（ただし、生分解性以外のデータ）</td></tr>
<tr><td>1B</td><td>化審法通知の試験法又は OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法によるもので GLP 準拠でないもの又は、不明なもの</td><td>－</td></tr>
<tr><td>2A</td><td rowspan="3">制限付き</td><td>－</td><td>・OECD テストガイドライン及びそれに準じた試験法と完全に一致していないが、専門家により科学的に受け入れられると判断された試験法によるデータ
・OECD-HPV プログラムの SIAR のキースタディのうち測定値データ
(Reliability2 の記載があるデータ又は Reliability の記載がないデータ)</td></tr>
<tr><td>2B</td><td>－</td><td>「信頼性の定まった情報源」に収録されている測定値データ</td></tr>
<tr><td>2C</td><td>適用範囲の推計方法による推計値</td><td>－</td></tr>
<tr><td>使用不可</td><td>信頼性なし</td><td colspan="2">3</td><td colspan="2">試験等に障害又は不適切な箇所があり、専門家により容認できないと判断されたデータ</td></tr>
<tr><td rowspan="2">※</td><td rowspan="2">評価不能</td><td colspan="2">4A</td><td colspan="2">試験条件及び情報源等が不明な測定値データ</td></tr>
<tr><td colspan="2">4C</td><td colspan="2">推計値を元にした推計値、又は推計条件等が不明な推計値</td></tr>
</table>

※信頼性ランク 1,2 に該当するデータがない場合のみに暫定的に使用
1)「新規化学物質等の試験の方法について」（平成 23 年 3 月 31 日薬食発 0331 第 7 号、平成 23・03・29 製局第 5 号、環保企発第 110331009 号）
2) Good Laboratory Practice ：優良試験所基準
3) 現在の OECD Cooperative Chemicals Assessment Programme
4) SIDS Initial Assessment Report

I.3.5.3 複数データが得られた場合の選定の考え方

同一の性状項目について、複数の試験データが得られた場合は、信頼性ランクが「1」及び「2」については、最もランクが高いデータから選定し[2]、同一ランクのデータが複数得られた場合は適切なデータを選択する。

なお、同一ランクで複数のデータが得られた場合の選択基準は試験条件を加味するなど項目ご

[1] 「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」より。一部略記。
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/reliability_criteria02.pdf
[2] 具体的には、1A のデータが最優先で選択され、次いで 1B、2A、2B、2C の順となる。

とに異なり、詳細は「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」に記載されている。

I.3.6 評価Ⅰにおける評価対象物質の設定と性状に応じた扱い

本節では、前節の性状情報の整備とデータ選定を経て、評価Ⅰにおける評価対象物質の設定（I.3.6.1 ）といずれかの性状項目のデータが得られなかった場合の扱い（I.3.6.2 ）について記載する。

I.3.6.1 評価Ⅰにおける評価対象物質の設定

評価Ⅰの準備において、評価対象物質の候補を識別し（I.3.4 参照）、それらの物質ごとに性状情報を整備してデータを選定した（I.3.5 参照）。

評価対象物質の候補が複数ある場合は、優先評価化学物質との包含関係、CAS 単位ごとの製造・輸入数量や用途別出荷数量、評価対象物質の候補物質ごとに整備・選定された性状データの項目ごとの有無と信頼性ランクを総合的に勘案して 1 つの物質[1]を選定し[2]、それを評価Ⅰの評価対象物質に設定する。

I.3.6.2 環境分配モデル適用物質／適用外物質の識別と評価Ⅰにおける扱い

情報整備した性状データは、暴露評価で使用する数理モデルの入力値となる。暴露評価で使用する数理モデルの中に環境分配モデル[3]がある。環境分配モデルである多媒体モデルはもともと、極性のないもしくは弱い（解離しない）有機化学物質を適用範囲に開発された[4]。

本スキームにおいては、環境媒体間の分配の予測に必要な項目（分子量、融点、蒸気圧、水に対する溶解度、logPow、Koc、ヘンリー係数、生物濃縮係数（BCF））がいずれも測定もしくは推計可能な化学物質を「環境分配モデル適用物質」と定義し、これらの項目のいずれかが測定も推計もできない化学物質を「環境分配モデル適用外物質」と定義する。

ここでは、それらの識別方法と環境分配モデル適用外物質の評価Ⅰにおける扱いについて記載する。

---

[1] ここで 1 つの物質というのは、1 つの化学構造という意味ではない。

[2] 例えば、異性体混合物が優先評価学物質に指定されている場合、混合物としての性状データ、異性体ごとの性状データが整備される。その場合、優先評価化学物質と一致する混合物としての性状データが信頼性ランク 1 又は 2 で揃うのであれば、それを評価対象物質として設定することが考えられる。

[3] 暴露評価で利用する数理モデルで、環境中の大気、土壌、水域、生物相等の環境媒体間の化学物質の移動や分配を評価するもの。排出源ごとの暴露シナリオで利用する農作物中濃度を推計する部分や、評価Ⅱで利用する多媒体モデル等が該当する。

[4] Cowan, C.E. et al. eds. (1994) The Multi-Media Fate Model: A Vital Tool for Predicting the Fate of Chemicals. SETAC Press.

(1) 識別方法

評価対象物質ごとに性状情報の整備をした結果（I.3.5 参照）、分子量、融点、蒸気圧、水に対する溶解度、logPow、Koc、ヘンリー係数、生物濃縮係数（BCF）のいずれかが特定できない（測定不可又は推計不可）物質を環境分配モデル適用外物質とする。

これらは、塩類、無機・金属化合物、高分子化合物、水と反応性が高い物質、構造が特定できない混合物等が考えられる。

(2) 環境分配モデル適用外物質の扱い

環境分配モデル適用外物質の場合、暴露評価Ⅰにおいては単純希釈モデルを使用して環境中濃度等を推計する（詳細はⅤ章参照）。その際、排出量推計は行う必要があり、排出係数の選択のために蒸気圧と水に対する溶解度が必要になる。これらについて、実測値も得られず推計も行えない場合、評価Ⅰにおいては詳細用途別ライフサイクルステージ別の排出係数の中で、大気、水域いずれの排出係数についても最も高い値を付与する（詳細はⅣ章Ⅳ.3.2.4 参照）。

また、単純希釈モデルの使用においても魚介類中濃度を推計するために BCF を用いる。logPow も BCF も得られない場合、評価Ⅰの暴露評価において BCF のデフォルト値として 1,000 を用いる[1]。

(3) 環境分配モデル適用物質（構造不定）の扱い

さらに、有機化合物等ではあるものの構造不定の化学物質又は主成分の特定できない混合物を本スキームでは「環境分配モデル適用物質（構造不定）」と呼んでいる。これらは通常、物理化学的性状の実測値は得られず、構造式が特定できないために推計も不可能である。そこで、一定の条件下で環境分配モデルによる暴露量が最大となる物理化学的性状一式の組合せを見つけ、そのワーストデフォルト暴露量を用いる。詳細については、「Ⅴ章　暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～」を参照されたい。

[1] 化審法の生物蓄積性に関する判定において、「高濃縮性でない」基準の 1 つが「濃縮倍率が 1,000 倍未満であること。」から設定した。

I.4 評価Ⅱのための準備

I.4.1 評価Ⅱの準備の目的

評価Ⅱの準備の目的は、以下の通りである。

(ア) 評価対象物質を必要に応じて複数物質とするなど改めて設定
(イ) 評価Ⅰでは収集しなかった性状の項目、情報を新たに整備
(ウ) 総合的な観点によるデータの精査とキースタディの見直し又は選定
(エ) 物理化学的性状等に係る有害性情報の報告の求めを行う場合にその調査項目を特定

I.4.2 評価Ⅰとの違い

評価ⅠとⅡにおける準備の違いを図表 I-12 に示す。

物理化学的性状、生物蓄積性データについては、評価Ⅰで用いた情報の精査を行い、精査を踏まえたキースタディの見直しを行う。評価Ⅱ以降に新たに追加する情報として、解離定数と環境媒体ごとの分解性に係る情報等がある。

図表 I-12　評価ⅠとⅡにおける準備の違い

評価段階 / 対象項目等	評価Ⅰ	評価Ⅱ
評価対象物質	・評価対象物質の候補が複数ある場合、1 つを設定	・評価対象物質の候補が複数ある場合、必要に応じて複数設定
物理化学的性状・生物蓄積性	・国が情報収集し、各データに信頼性ランクを付与し、一定のルールに従って採用値を決定 ・データが得られない場合、デフォルト値を使用	・評価Ⅰで採用した値も含めて精査を行い、評価Ⅱで用いるキースタディを見直し ・解離性物質について解離定数の情報収集を行い、精査をしてキースタディを選定 ・測定値がなく推計も行えない場合等、必要に応じて類似物質の情報を収集し、類推値の設定を検討 ・評価に十分なデータが得られなかった場合、有害性情報の報告の求めにより国が製造・輸入事業者へ試験成績を記載した資料の提出を要求
分解性	・化審法における生分解性の判定結果（「難分解」又は「良分解性」）のみ使用 ・データが得られない場合、「難分解性」と仮定	・環境媒体別の分解速度定数又は半減期の情報を収集し、暴露評価に用いる値を選定 ・評価に十分なデータが得られなかった場合、有害性情報の報告の求めにより国が製造・輸入事業者へ試験成績を記載した資料の提出を要求

I.4.3 評価Ⅱにおける評価対象物質の設定

評価対象物質の識別により複数の候補が挙げられた場合、評価Ⅰではそのうちの 1 物質を設定した（I.3.6.1 参照）。評価Ⅱにおいては、新たに得られた評価対象物質の識別に係る情報（図表 I-10 参照）があれば追加の候補物質がないかを確認した上で、優先評価化学物質との包含関係、評価Ⅰの準備で得られた情報及び CAS 番号単位ごとの製造・輸入数量や用途別出荷数量等を勘案し、必要に応じて複数の評価対象物質を設定する。

分解度試験による変化物を評価対象物質にする場合等、環境排出後の排出先媒体における存在形態（親化合物のままか変化物か等）を個別に検討を行い、次節以降に記載する評価Ⅱに必要な情報収集を行う。

I.4.4 物理化学的性状及び生物蓄積性データの精査と選定

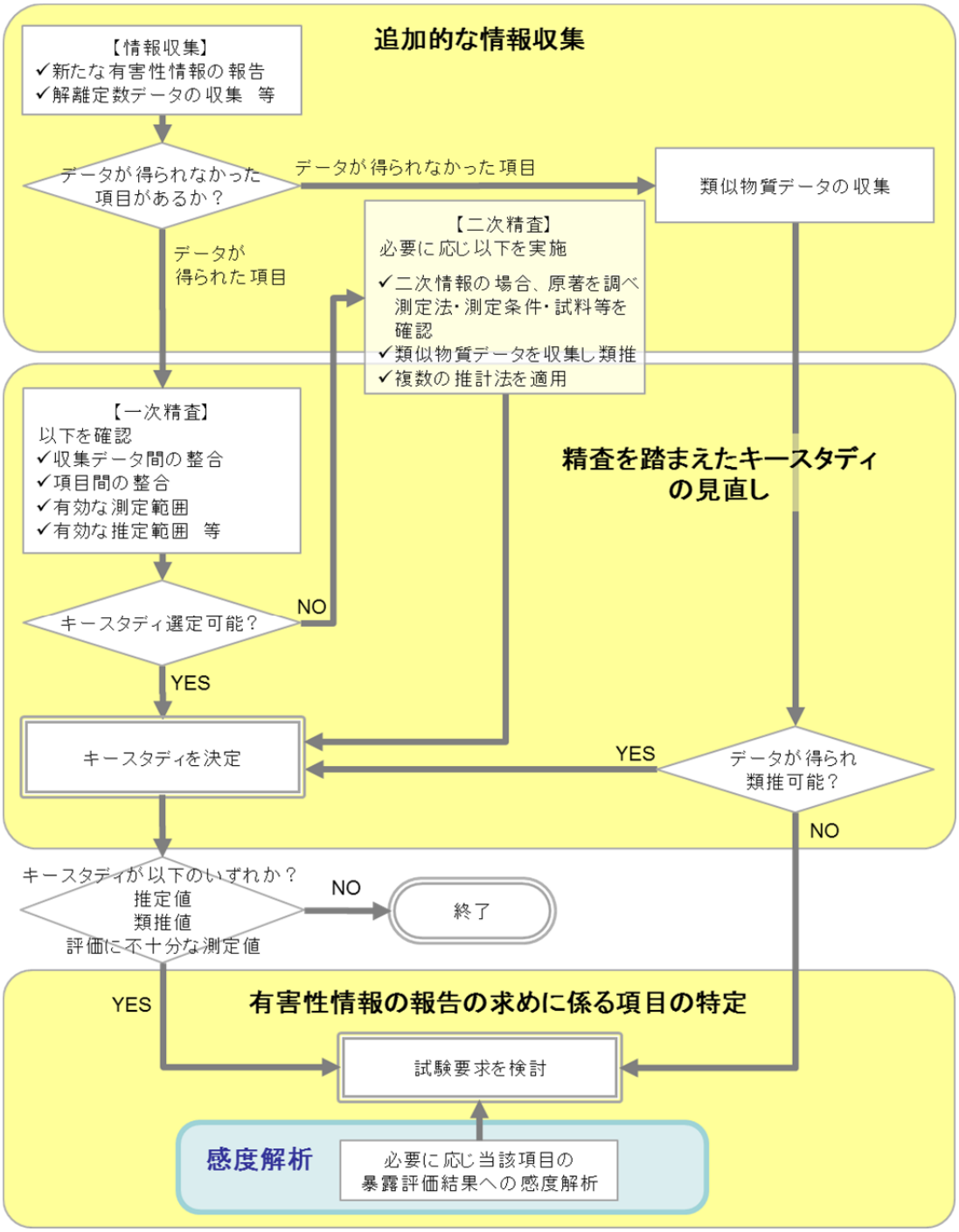
評価Ⅱにおいては、評価Ⅰで用いた物理化学的性状、蓄積性について総合的な観点による精査を行い、それを踏まえてキースタディの見直しを行う。

本節では、物理化学的性状と蓄積性について、評価Ⅱのための追加情報の収集とデータの精査及び暴露評価Ⅱに用いるキースタディの選定の考え方について記載する。

I.4.4.1 物理化学的性状と蓄積性に係る評価Ⅱの準備のフロー

物理化学的性状と蓄積性に係る評価Ⅱの準備には、「追加的な情報収集」、「精査を踏まえたキースタディの見直し」及び「有害性情報の報告の求めに係る項目の特定」のステップがある。これらのステップの関係を図表 I-13 に示す。

以下、追加的な情報収集は I.4.4.2 、精査を踏まえたキースタディの見直しは I.4.4.3 で説明する。有害性情報の報告の求めに係る項目の特定は I.4.6 で後述する。



図表 I-13 物理化学的性状と生物蓄積性に係る評価Ⅱの準備のフロー

I.4.4.2 物理化学的性状と生物蓄積性に係る追加的な情報収集

評価Ⅱでは、以下の様に物理化学的性状と生物蓄積性に関して追加的な情報収集を行う。

(ア) 法第 41 条に基づく新たな有害性情報の報告[1]の有無の確認を行う。
(イ) 評価Ⅰで得られなかった項目がある場合、情報源を広げて情報収集を行う。
(ウ) （ア）と（イ）でも得られなかった場合、類似物質データの収集を行う。
(エ) 評価Ⅰでは情報収集しなかった解離定数について、化学物質の構造上、解離基を有する物質について情報収集を行う。
(オ) 一次精査の結果、キースタディが選定し難い場合等、二次精査において二次情報の原著確認や類似物質データの収集、推計法の追加を行う。

情報収集を行う範囲は、上記（イ）（ウ）については原則として評価Ⅰにおける情報収集範囲と同じである[2]。

I.4.4.3 精査を踏まえたキースタディの見直し

一般的な精査の観点については I.2.3 で前述したことから、ここでは、本スキームの精査の観点と項目別の精査とキースタディの見直しの考え方を記載する。

(1) 本スキームの物理化学的性状と生物蓄積性データに係る精査の観点

化審法においては、スクリーニング評価とリスク評価（一次）の評価Ⅰの段階までは、I.2.3 で述べた主に①reliability の観点からの信頼性評価を行い、評価Ⅰ終了以降は、性状データについて「総合的な観点による精査を踏まえたキースタディの見直し」を行うこととなっている[3]。「総合的な観点」には、①reliability に加えて②relevance や③adequacy の観点を含め（I.2.3 参照）、最終的に評価の目的に適うものかを判断する。

物理化学的性状と生物蓄積性に関して「総合的な観点による精査」は図表 I-13 に示すように、「一次精査」と「二次精査」の二段階で行う[4]。一次精査は原則としてすべての項目について行う

[1] 化審法第 41 条第 3 項では、有害性情報のみならず、分解性、蓄積性、物理化学的性状のデータについても国に任意報告する対象である。
[2] 情報収集の範囲は、「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」に記載のある情報源である。
[3] 化審法のスクリーニング評価及びリスク評価（一次）評価Ⅰに用いる性状データの信頼性評価等の基本的考え方
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html
[4] 精査全般の進め方については、ECHA (2008) Guidance on information requirments and chemical safety assessment. Chapter R.7a: Endpoint specific guidance. Figure R.7.1-2 Global assessment of the available information for the determination of physico-chemical properties. も参考になる。.

もので、主に、得られたデータ間の整合性の確認と試験法・推計法の適用範囲で得られたものかの確認である。それを踏まえてキースタディの見直しを行う。二次精査は、一次精査でキースタディ選定がし難い項目やキースタディに測定値が得られなかった項目を対象に行うもので、原著確認、推計法の追加、類似物質データの収集といったさらなる情報収集とそれに基づく検討である。

① 一次精査

i) 精査を行う項目

原則としてすべての項目について、評価Ⅰで用いたデータがいずれの信頼性ランクであっても、以下に記載する観点で目を通す。評価Ⅰでの採用値が推計値である場合にはその推計に用いた項目（例えば、蒸気圧の推計に用いる沸点等）も精査の対象とする。

また、評価Ⅱ対象物質が解離基を有する物質の場合には、酸解離定数（pKa）についての情報を収集し、精査を行う。

ii) 全般

(ア) 一つの項目について収集した複数の情報源からのデータ間の整合性を確認する。
(イ) 性状項目間のデータに整合性があるかどうかの定性的、可能であれば定量的な確認を行う[1]。
(ウ) 既存の評価書等が得られる場合、そこでの考察や見解を参考にする。
(エ) 信頼性ランクが同等のキースタディ候補が複数得られた場合等、証拠の重み（Weight of Evidence）アプローチで検討を行う（次項（2）① 参照）。
(オ) データが得られなかった項目の二次精査の必要性について「図表 I-29　項目ごとの測定が不可又は不要と考えられる場合」を参考にする。

iii) 測定値の場合

(カ) 試験法ごとの有効な測定範囲で得られたデータかを確認する。
(キ) 試験報告書等の一次情報が得られる場合には、試験法、試験条件、被験物質の純度等を確認する。試験条件や不純物等が測定値の精度に与えた影響を定性的に又は定量的に評価する。
(ク) キースタディの候補となるデータが測定値であっても文献値など二次情報（信頼性ランク 2B 以下）であり、データが単独又は複数データ間のばらつきが説明し難い場合、二次精査の対象とする。
(ケ) 推計値との比較も行い大きく外れる場合は、試験結果又は推計法のいずれに原因があるか

[1] 例えば、蒸気圧が高い化学物質は、通常沸点は低いなど。蒸気圧、沸点ともに高い場合は、いずれかのデータの精度が低いか、不純物の影響などが考えられる。
また、ある項目の推計式に別の項目を含む場合、推計値と測定値を比較することにより整合性の確認に利用できる。ECHA (2008) Guidance on information requirments and chemical safety assessment. Chapter R.7a: Endpoint specific guidance. R.7.1.1.6 Overall consistency of the physico-chemical profile. に例示がある。

検討する。この際、類推の実施が役に立つ場合があり、必要に応じて二次精査の対象とする。

iv) **推計値の場合**

(コ) 推計値を用いる場合、対象物質が推計法の適用範囲かどうかを確認する。適用範囲はトレーニングセットに用いた物質を規定した定量的・定性的な属性範囲である。たとえば、化学結合の種類、原子団の種類などの構造上の特徴、分子の大きさ、生体膜への取り込み機構、特定のタンパク質への結合性、さらに、トレーニングセット物質群の分子量範囲や推定の対象としている物理化学的性状の範囲（融点であればトレーニングセットの推定融点の範囲)である。

(サ) キースタディが推計値の場合、二次精査の対象とする。

② 二次精査

i) **精査を行う項目**

一次精査の結果、信頼性ランクは評価Ⅰの時点とは変わりうる。二次精査を行う項目は、一次精査の結果、キースタディの候補の一次精査後の信頼性ランクが「2B」相当以下の場合で単独のデータ、又は複数データ間でキースタディの選定がし難い場合とする。ただし、信頼性ランクが「1A」、「1B」、「2A」相当の場合でも、キースタディ候補の中で値が大きく異なる等によりキースタディの選定（次項⑵で後述）がし難い項目は二次精査を行う。

ii) **測定値の場合**

二次情報源のデータの場合、必要に応じて原著文献で以下の調査を行う。

(ア) 試験法、試験条件、被験物質の純度等を確認し、容認できるかを検討する。

(イ) 試験対象物質の純度が高くない場合、推計値（不純物の影響を受けない値）も参考にする。

(ウ) 当該優先評価化学物質の評価において、評価対象物質の設定と試験対象物質の関係等から、評価対象物質の評価により適切なデータを選択する。

(エ) 推計値との比較も行い大きく外れる場合は、試験結果又は推計法のいずれに原因があるか検討する。この際、類推の実施が役に立つ場合がある。

iii) **推計値の場合**

(オ) 複数の推計法で推計可能な場合には、推計値間の整合性を確認したり、その平均値を用いることなどを検討する。

iv) **全般**

(カ) 上記 ii)、 iii)の調査によってもキースタディが選定し難い場合、必要に応じて類似物質の情報を収集し、類推できるかを検討する。

(2) 項目別の精査 とキースタディの見直し

① 項目に共通するキースタディ見直しの考え方

評価Ⅱの準備における精査を踏まえたキースタディ見直しの考え方は、評価Ⅰの準備において準拠する信頼性基準[1]のキースタディ選定の考え方[2]に概ね共通するが、異なる点もある。項目に共通して評価Ⅰ時点と異なる点は以下が挙げられる。

(ア) 評価Ⅰ時点では同一の信頼性ランクでキースタディ候補が複数ある場合、それらの中央値を採用[3]するが、評価Ⅱ時点では証拠の重みアプローチ（(オ）で後述）で精査の上、原則としてより評価の目的に適った 1 つのデータを選定する。ただし、いずれのデータもその項目の使用目的に適っている場合には、複数データの統計量を代表値として採用することもある[4]。

(イ) 評価Ⅰ時点では項目ごとに信頼性基準に記載された試験法で行われていれば信頼性ランクは 1 となり、信頼性ランク 2 の測定値や推計値よりも優先的にキースタディになるが、評価Ⅱにおける精査の結果、被験物質に疑義がある場合や評価に適う値が得られていない場合は信頼性ランクが低い他のデータをキースタディに選定することがありうる。

(ウ) 評価Ⅰ時点では信頼性ランク 1 もしくは 2 のデータが得られず 4 のデータがある場合、暫定的に 4 のデータを用いるが、評価Ⅱ時点では 4 のデータの原著の調査（それにより信頼性ランクは変わりうる)、信頼性基準で定める以外の推計法の適用、構造類似物質による類推の検討等を行って、最も評価に適うと考えられるデータを選定する。その結果、推計値または類推値が選定された場合、法第 10 条第 1 項に基づく試験データの求めの必要性について検討する（I.4.6 で後述)。

(エ) 推計値を適用範囲外で使用せざるを得ないときにはその合理性について説明を加える。

(オ) 以下のような場合に証拠の重みアプローチで検討を行う。証拠の重みアプローチとは、複数のデータに基づいて各データの証拠に重み付けをしながらこの妥当性を判定することであり、このプロセスで信頼性ランクが変わることはない。

---

[1] 「化審法のスクリーニング評価及びリスク評価(一次)評価Ⅰに用いる性状データの信頼性評価等の公表について」
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html

[2] 信頼性ランクの高いデータを優先（1A＞1B＞2A＞2B＞2C ：推計値(2C)よりも測定値（1A～2B）優先、測定値の中では化審法もしくは国際的に認められた試験法に基づくデータ(1A、1B)を優先）する等である。

[3] 生物濃縮性 BCF では、中央値ではなく最大値を選択する。

[4] 統計量としては中央値、平均値等が考えられる。LogPow、BCF、Koc については最大値を採用する場合がある。National Instisute of Standards and Technology (NIST)では、以下のサイトで平均値と標準偏差を用いた採用値の計算方法を示している。
http://webbook.nist.gov/chemistry/site-cal.html#AVG

・信頼性ランク 2B 相当以下のデータしか得られないとき
・信頼性ランクが同等の複数のキースタディ候補が得られ、キースタディが選定し難い時

前者のようにいずれのデータも後の評価に単独で使うのには十分ではない場合や後者のように複数のデータ間で不整合が見られる場合に、複数のデータを用いた証拠の重みアプローチにより評価に十分適う代表値を選定できる場合がある[1]。

以下、②～⑩では、項目ごとの精査とキースタディの見直しで留意する点を記載する。これらは主に脚注に示す資料[2]を参考にした。これら以外の引用は個別に脚注で示している。なお、項目ごとの測定法と推計法の概要は付属書に収載している。

② 融点

融点に関する精査とキースタディの見直しにおいて留意する点を図表 I-14 に整理した。

測定値が望ましいが、得られない場合には MPBPVP (EPISuite)や OECD QSAR Toolbox 他による推計を行う。

後の環境中濃度等を推計する数理モデルでの評価のために十分に適切であることが確実でないデータしか得られない場合（例えば融点測定中に分解する）には、分解温度や流動点、推計値、それ以外の値等から、後の評価に適う値を決定する。

図表 I-14　融点の精査とキースタディ見直しに係る留意点

項目	留意点
試験法	✓ 可能な限り不純物の種類、組成調べ、対象物質の特定情報を確認し、その影響を評価する。 ✓ 融点に達する前の分解や昇華が報告されていないか。 ✓ 適切な温度範囲等の条件で試験が実施されているか。
推計法	✓ MPBPVP (EPISuite)3, OECD QSAR Toolbox 他により推計できる。 ✓ 沸点推計値等、推計値に基づいて推計が行われている場合にはその精度評価の際に留意する。 ✓ 融点の推計式の精度は他の物性に比してそれほど高くないと評価されている場合がある。

[1] OECD (2007) Manual for Investigation of HPV Chemicals. Chapter 3. には考え方が記載されている。
ECHA (2010) Practical guide 2: How to report weight of evidence. には考え方のほか、証拠の重みアプローチの良い例、悪い例が示されている。

[2] ECHA (2014) Guidance on information requirments and chemical safety assessment. Chapter R.7a: Endpoint specific guidance. R.7.1 Physicochemical properties.
OECD Guidelines for the Testing of Chemicals. のシリーズ
U.S.EPA の EPI (Estimation Programs Interface) Suite のヘルプドキュメント

[3] EPISuite は米国環境保護庁 有害物質汚染防止局(EPA OPPT)と Syracuse Resarch Corporation が共同開発した、種々物理化学的性状と環境中運命を推計する Windows プラグラムである。http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuite.htm から無償でダウンロードして使用することができる。

項目	留意点
	MPBPVP ✓ MPBPVP による融点推計の精度は低い。 ✓ MPBPVP は融点について 3 つの推計値を出力する。 1) 原子団寄与法(QSAR)に基づく推計値に構造の特徴に基づく補正を行った推計値 2)沸点に定数を乗じる方法から出力される融点推計値がまず出力され 3)さらに、この両者の推計値と若干の基準に基づいてより精度の高い推計値が selected melting point として出力される。 ✓ このように MPBPVP は原子団寄与法に基づいているため推計式の基礎となった原子団及び構造の特徴がカバーしていない物質についての融点の推計は精度がさらに低くなる。 ✓ さらに MPBPVP は、沸点を推計の元とする場合があるため、沸点の精度も融点推計の精度に影響する。 ✓ MPBPVP では、融点推計値が、沸点や蒸気圧推計値とともに出力される。 ✓ MPBPVP では内部物質データベースに沸点、融点、又は、蒸気圧の測定値をいずれか一つでも持つ物質であればその測定値が推計値とともに出力される。融点及び沸点の測定値を持たない場合は、推計に基づく沸点を使って融点の推計が行われる。 **OECD QSAR Toolbox** ✓ OECD QSAR Toolbox には EPISuite が組み込まれているため、物理化学的性状の推算出力結果は組み込まれた時点の EPISuite の結果と同じとなる[1]。
類推	✓ 同族体における内挿は可能。その他は通常不可能。
相互に関係の深い項目	✓ 蒸気圧 ✓ 水に対する溶解度
その他	✓ 入力パラメータについて推計値しかなくその推定精度が低い場合は、他の物性値(例えば蒸気圧)の推計値の基礎データにするには慎重である必要がある。

③ 沸点

沸点に関する精査とキースタディの見直しにおいて留意する点を図表 I-15 に整理した。

沸点は後の評価プロセスで使用する環境分配モデルでは直接の入力値として使用はされない。しかし、環境中濃度等を推計する数理モデルで使用できる蒸気圧測定値が得られない場合には沸点から推定に使われるので後の評価に適う沸点の値が必要である。

測定値が望ましいが、得られない場合には MPBPVP (EPI Suite) 他による推計値やその他の値(例えば分解温度)等から、後の環境中濃度等を推計する数理モデルでの計算に適う値を決定する。

後の環境中濃度等を推計する数理モデルでの評価のために十分に適切であることが確実でないデータしか得られない場合（例えば沸点測定中に分解する）には、分解温度、推計値、それ以外の値等から、後の評価に十分とされる値を決定する。

[1] J.C. Dearden , P. Rotureau & G. Fayet (2013) QSPR prediction of physico- chemical properties for REACH, SAR and QSAR in Environmental Research, 24:4, 279-318, DOI:10.1080/1062936X.2013.773372

図表 I-15　沸点の精査とキースタディ見直しに係る留意点

項目	留意点
試験法	✓ 不純物の存在に大きな影響を受けるため、可能な限り不純物の種類、組成を被験物質とともに調べる。 ✓ 融点が 300℃を超える物質物物質や、常圧で高い沸点の液体、沸点に達する前に分解若しくは自己酸化等が起こる液体の場合、不活性ガス下や減圧下での沸点測定が推奨されている。単に分解温度が記載されている場合がある。この場合「分解」との記載が想定される。
推計法	✓ MPBPVP (EPISuite)、OECD QSAR Toolbox 他により推計できる。 **MPBPVP** ✓ MPBPVP の沸点の推計精度は融点の推計精度に比べると高い。 ✓ MPBPVP の沸点推計では、原子団寄与法(QSAR)のみを基にしていて、このため構造を入力すれば推計値が出力される。したがって、推計式の基礎になった原子団を含まない推計精度は劣るので原子団の確認が必要である。実際に出力される値は原子団寄与法の値にさらに温度補正を加えている。 ✓ MPBPVP では、沸点推計値が、融点や蒸気圧推計値とともに出力される。 ✓ MPBPVP では内部物質データベースに測定値を持つ物質であれば測定値が推計値とともに出力される。 **OECD QSAR Toolbox** ✓ OECD QSAR Toolbox には EPISuite が組み込まれているため、物理化学的性状の推算出力結果は組み込まれた時点の EPISuite の結果と同じとなる[1]。
類推	✓ 同族体における内挿により類推ができる。そのほかの方法は通常不可能。
相互に関係の深い項目	✓ 蒸気圧
その他	✓ 沸点は測定圧力に依存するため、信頼性基準文書[2]に記載の式[3]で圧力補正を行い、標準圧力での値にする。

④ 蒸気圧

蒸気圧に関する精査とキースタディの見直しにおいて留意する点を図表 I-16 に整理した。

被験物質及び不純物の種類と組成を確認し、蒸気圧への影響を評価する。試験方法によって不純物の影響は異なる。OECD のテストガイドライン 104（2006）に記載の 8 つ 8 の公定法のうち動的法、静止法、蒸気圧計法は純物質や業務用グレードの物質に適用可能であるが、不純物は結果に影響を与える。 蒸気圧天秤法や気体飽和法は純物質にしか適用できない[4]。

試験条件下で分解がある物質には適用できない。この場合、推計法により蒸気圧を推計する。

[1] J.C. Dearden , P. Rotureau & G. Fayet (2013) QSPR prediction of physico- chemical properties for REACH, SAR and QSAR in Environmental Research, 24:4, 279-318, DOI:10.1080/1062936X.2013.773372

[2] 「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」 http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/reliability_criteria02.pdf

[3] JIS K0066　化学製品の蒸 V 留試験方法 5.3 留出温度の大気圧補正式をもとにしている。

[4] EPA OPPTS 830.7950 p.1 (F)

1 図表 I-16 蒸気圧の精査とキースタディ見直しに係る留意点

項目	留意点
試験法	✓ OECD テストガイドライン 104 に記載の公定法には 8 つあり、全体として 10^{-10} Pa ～ 10^{5} Pa の範囲の蒸気圧を測定することができるが、1 つ 1 の測定方法ですべてをカバーすることはできない。 ✓ それぞれの試験法がカバーしている蒸気圧範囲の測定であることが必要。 ✓ 不純物の存在が測定に及ぼす影響を評価する必要がある。被験物質中の不純物の種類と量を特定する。 ✓ 試験法で指定された温度範囲での測定であることを確認する。 ✓ 指定された試験範囲内で分解が起こっていないことを確認する。 ✓ 融点が標準状態で 300℃を超えるものは測定されないことがある。また 200℃～300℃のものは、限界値での測定に基づく蒸気圧値で、又は、推計値によるもので十分とされる場合がある。 ✓ 沸点が 30℃未満の物質では、蒸気圧が測定上限である 10^{5} Pa などを超えて測定されないことが多い。この場合、推計データを使用すれば十分である。
推計法	✓ 純物質の蒸気圧推計には MPBPVP (EPISuite)[1]や OECD QSAR Toolbox 他により推計できる。 **MPBPVP** ✓ MPBPVP では三つの推計方法による蒸気圧推計値が出力される。1) Antoine 法、2) 修正 Grain 法、3) Mackayy 法である。Mackay 法は適用範囲が狭いので MPBPVP では 1)、2)の方法に基づいた推計値が出力される。MPBPVP では固体については 1) 、2)では補正が行われる。Selected 蒸気圧として固体では補正を含む 1)の値が、液体については補正を含む 1)と 2)の値が出力することによってその推定精度を高めている。 ✓ MPBPVP による蒸気圧推計は蒸気圧が高いとき、沸点と融点の測定値を用いる限り比較的精度が高い。蒸気圧が低くなるにつれて推計精度が悪くなる。 したがって、MPBPVP の推計適用範囲での推計を実施し、範囲内であっても低い蒸気圧では推計精度の評価が慎重に行われるべきである。 ✓ また融点と沸点について推計値が使われる場合が有り、これらを用いた推計値について、特に推計精度の悪い融点を用いた推計値の評価は慎重の行われるべきである。 ✓ MPBPVP では内部に沸点や融点の物質データベースを持っているので、収載のある物性値についてはそれが推計に使用される。 ✓ MPBPVP ではユーザにより沸点および融点を入力できる。 **OECD QSAR Toolbox** ✓ OECD QSAR Toolbox には EPISuite が組み込まれているため、物理化学的性状の推算出力結果は組み込まれた時点の EPISuite の結果と同じとなる[2]。
類推	✓ 同族体における内挿により類推ができる。そのほかの方法は通常不可能。

[1] EPISuite は米国環境保護庁 有害物質汚染防止局(EPA OPPT)と Syracuse Resarch Corporation が共同開発した、種々物理化学的性状と環境中運命を推計する Windows プラグラムである。http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuite.htm から無償でダウンロードして使用することができる。

[2] J.C. Dearden , P. Rotureau & G. Fayet (2013) QSPR prediction of physico- chemical properties for REACH, SAR and QSAR in Environmental Research, 24:4, 279-318, DOI:10.1080/1062936X.2013.773372

項目	留意点
相互に関係の深い項目	✓ 融点 ✓ 沸点
その他	✓ 蒸気圧は測定温度に依存するため、環境中濃度等を推計する数理モデルの入力値は、信頼性基準文書[1]に記載の式[2]で 20℃における値に補正する。

⑤ 水に対する溶解度

水に対する溶解度に関する精査とキースタディの見直しにおいて留意する点を**図表 I-17** に整理した。

測定値がキースタディ候補である場合、被験物質の純度、揮発性と水中での安定性（加水分解性等）及び測定温度を確認する。これらが不明もしくは疑義がある場合や後の評価に適わない値の場合は、測定値、推計値、類推値の中から評価に適う値の採用を検討する。

図表 I-17　水に対する溶解度の精査とキースタディ見直しに係る留意点

項目	留意点
試験法	✓ OECD テストガイドイン等に記載の公定法はいずれも純物質、不揮発性、水中で安定な物質に適用する方法であることから ・ 不純物の存在に大きな影響を受けるため、可能な限り被験物質の純度を調べること。 ・ 対象物質が揮発性である場合、可能な限り試験においてどのような配慮をしているかについて調べること。 ・ 水中（試験 pH における）安定性（半減期等）に配慮すること。 ✓ 温度依存性があり、公定法は試験温度が定められているが、公定法ではない場合、試験温度を調べて、信頼性基準に示す温度補正を行うこと。
推計法	✓ WSKOWWIN (EPISuite)、WATERNT (EPISuite)や OECD QSAR Toolbox 他により推計できる。 ✓ 推計法は多数あるが、推計精度は 1-オクタノールと水の間の分配係数ほど高くないとされている。 **WSKOWWIN** ✓ WSKOWWIN には Pow 測定値から対水溶解度を推計するモデルが実装されている。また、当該化学物質の Pow 値が WSKOW の持つ物質データベースにない場合や、ユーザによる入力がない場合には KOWWIN による推計値が使用される。 ✓ Pow に測定値が使われず、推計値が使われた場合には精度が悪い場合がある。 **WATERNT** ✓ 化学物質の構造からのみ対水溶解度を推計する。この推計式は WSKOWWIN で使われたデータセットと同じものが使われている。 **OECD QSAR Toolbox**

[1] 「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」 http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/reliability_criteria02.pdf

[2] ECB (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. PartⅡ, Chapter 3, 2.3.2 Data for exposure modelsEquation (2)

項目	留意点
	✓ OECD QSAR Toolbox には EPISuite が組み込まれているため、物理化学的性状の推算出力結果は組み込まれた時点の EPISuite の結果と同じとなる[1]。
類推	✓ 同族体における内挿により類推ができる。そのほかの方法は通常不可能。 ✓ WATERNT では、類似化合物の既知 WS から類推する ExpVapAdj オプションが使える場合がある(推計法と同様に適用範囲に入ることが必要である)。
相互に関係の深い項目	✓ 水中安定性（加水分解性等） ✓ 解離定数
その他	✓ 入力パラメータについて推計値しかなくその推定精度が低い場合は、他の物性値(例えば log Pow)の推計値の基礎データにするには慎重である必要がある。 ✓ 文献値は互いに大きく異なる可能性があり、古いデータは往々にして純度が高くないため大きい傾向がある。 ✓ 塩の共存や設定温度等により可溶性を高めたデータ（生態毒性試験の溶媒を使用した場合等）は、公定法のデータと異なる可能性がある。 ✓ 混合物や無機化合物の場合、有機の単一物質とは異なる配慮が必要である。 ✓ 測定温度に依存するため、環境中濃度等を推計する数理モデルの入力値は、信頼性基準文書[2]に記載の式[3]で 20℃における値に補正する。

⑥ 1-オクタノールと水との間の分配係数（logPow）

1-オクタノールと水との間の分配係数（logPow)に関する精査とキースタディの見直しにおいて留意する点を図表 I-18 に整理した。

測定値がキースタディ候補である場合、被験物質が測定対象外の物質（無機化合物、金属化合物、界面活性物質等）でないこと、測定値が測定法の推奨測定範囲内にあることを確認するとともに、水中での解離性と安定性（加水分解性等）についても確認する。これらが不明もしくは疑義がある場合は、測定値の中のより適切なデータ、もしくは推計値や類推値の設定や採用を検討する。

なお、公定測定法では、測定値のばらつきの許容範囲を規定しており、単一のデータの採用は可能であるが、必要に応じて、証拠の重み（WeightWeight of Evidence）アプローチの活用も検討する。

測定値が得られない場合、KOWWIN 等の手法により推計値を求め、採用の可否を検討する。

[1] J.C. Dearden , P. Rotureau & G. Fayet (2013) QSPR prediction of physico- chemical properties for REACH, SAR and QSAR in Environmental Research, 24:4, 279-318, DOI:10.1080/1062936X.2013.773372

[2] 「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」 http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/reliability_criteria02.pdf

[3] ECB (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. PartⅡ, Chapter 3, 2.3.2 Data for exposure models、Equation (3)

図表 I-18 logPow の精査とキースタディ見直しに係る留意点

項目	留意点
試験法	✓ 公定法はいずれも非解離型の純物質で、水中で安定な物質に適用する方法であることから ・被験物質の定量に分光分析法（photometric methods ）を用いている場合は、不純物の存在に大きな影響を受けるため、可能な限り被験物質の定量法について調べること。 ・被験物質が解離性である場合、非解離型の値を測定するように水の pH に対してどのような配慮をしているか調べること。 ・水中（測定 pH における）安定性（半減期等）に配慮すること。
推計法	✓ 推計法は多数あるが、推計法の 95%信頼区間は推計 logPow の±1 程度である。推計値をキースタディとする場合、対象物質が適用範囲に入る複数の推計法の適用を検討すること。
類推	✓ 同族体における内挿により類推ができる。そのほかの方法は通常不可能。
相互に関係の深い項目	✓ 水に対する溶解度 ✓ 水中安定性（加水分解性等） ✓ 解離定数
その他	✓ 1980 年以前の古い文献データは公定測定法や最新の推計法に基づくデータでないため、採用の可否には配慮が必要である。 ✓ 混合物や無機化合物の場合、有機の単一物質とは異なる配慮が必要である。

⑦ 有機炭素補正土壌吸着係数 Koc[1]

有機炭素補正土壌吸着係数 Koc に関する精査とキースタディの見直しにおいて留意する点を図表 I-19 に整理した。

Koc に関する測定データが編纂されているが、出典の記載のないものや Koc 決定のための記述が十分でないものも多い。このため後の環境分配モデルへの適用に当たっては慎重に値を選択する必要がある。

測定値が得られない場合、KOCWIN (EPI Suite) や OECD TG 106 付属書 4 で紹介されている複数の推計を行い、比較評価して値を得る。

報告されている Koc の測定値にはかなりのばらつきがあることが指摘されている。例えば、Mackay et al.(1992) [2]は、ベンゼンの Koc として 24 の事例を挙げ、その値は 0.11～2.08 L/kg の範囲に及ぶという。このばらつきは土壌含有有機物の吸着能力の差、Koc を決定するのに使用した手法の差、考慮されていない土壌の性質、化学化学物質の吸収のされやすさなどが要因である。Koc の値のばらつきは特に極性化合物大きくなる傾向にある。公定法では一般に数種の土壌を用いることを推奨しているが多くの報告ではこれにしたがっておらず、Koc 値は単一の土壌で測定されており、場合によっては単一の濃度での測定結果が報告されている。

[1] 化学物質の土壌への吸着しやすさを表す。平衡状態の溶液中の化学物質濃度に対する土壌中の単位重量あたりの有機炭素に吸着される化学物質の量の比。

[2] Mackay, D., & Boethling, R. S. (Eds.). (2000) Handbook of property estimation methods for chemicals: environmental health sciences. 8.3.4 Availability of Koc Values

1 図表 I-19 有機炭素補正土壌吸着係数の精査とキースタディ見直しに係る留意点

項目	留意点
試験法	✓ 試験法としては大きく分けて 2 つある。実際の土壌を用いて被験物質の土壌有機物と水相の実際の吸着量に基づいて吸着係数を求める方法(吸着平衡法)と、土壌の有機物の代わりに、シリカーベースの HPLC の非極性のスペーサーと極性末端を有する固定相を用い被験物質の保持時間に基づいて吸着係数を求める方法(HPLC 法)である。 ✓ 吸着平衡法 ・HPLC 法に適さない物質(例えば、界面活性剤)で使える場合がある。 ・試験期間中に試験物質の分解や変化が起こっているか土壌と水の両相について分析がなされている必要がある。 ・水への溶解度の低い物質や吸着性の高い物質では水相の物質の測定誤差が Koc に大きな影響を与えるので、被験物質の純度や安定性、吸着平衡への到達の判断が重要になる。 ・水への溶解度が 0-4 g/L 以下の物質では溶解補助剤による方法や Spiking 法が適切に使用されているか確認する。 ・揮発性物質では試験中のロスに留意が必要である。 ・試験系の容器などに高い吸着性を持つ物質については勧められない。十分な試験が行えない場合、特に、log Pow < 20 や log Pow > 10^4 のような物質の場合には、推計法が勧められる。 ✓ HPLC 法 ・不純物がカラムで被験物質が分離されれば、結果への影響は小さい。 ・揮発性物質や吸着平衡法の試験系に高い吸着性を持つ物質でも測定ができる場合がある。 ・適用範囲：log Koc : 1.5～5.0 ・本法の妥当性が確認されている物質がテストガイドラインに記載されている。 ・イオン性の物質では緩衝液を使い pH5.5～7.5 で可能なら被解離状態と解離状態で測定する。 ・適切な対照物質が必要。 ・不適切：カラムや溶離液、系と反応や吸着のある物質や、無機成分と相互作用する物質(例. 粘土鉱物とクラスター錯体を形成する物質)には使えない。界面活性剤、無機物質、中程度や強い酸や塩基には使えない場合がある。 ✓ 土壌のタイプによる結果の違いが大きいので、公定法通り複数の土壌タイプで実施されていることが確認できることが望ましい。
推計法	✓ KOCWIN(EPISuite)や OECD QSAR Toolbox、OECD TG106 付属書 4 で紹介されている推計法他が使用できる。 **KOCWIN** ✓ KOCWIN は構造から推計する方法と log Pow から推計する方法が実装されている。両方法ともさらに特定の構造を持つものに対する補正が行われている。両方法とも精度は高いが、前者の方が若干高い。 ✓ 構造から推計する方法及び構造にもとづく補正では、推計式の基になった物質群に含まれない構造的な特徴を持つ化合物の推計精度について考慮する必要がある。 ✓ KOCWIN の log Pow 法では log Pow の値として測定値を使った方が精度が高い。また、推計の基になる log Pow はユーザにより入力できる。 **OECD TG 106 付属書 4 記載の方法** ✓ 化合物のクラス分けし、それに応じた推計式が紹介されている。

項目	留意点
	OECD QSAR Toolbox ✓ OECD QSAR Toolbox には EPISuite が組み込まれているため、推算出力結果は組み込まれた時点の EPISuite の結果と同じとなる[1]。
類推	✓ 同族体における内挿により類推ができる。そのほかの方法は通常不可能。
相互に関係の深い項目	✓ log Pow
その他	✓ 公開されている測定データについて土壌のタイプ等による誤差が予想される。推計値を含めて慎重な評価が必要である。 ✓ Koc は無機化学物質や logPow が測定できないとされる物質では環境媒体間の分配予測のために特に重要である[2]。

⑧ ヘンリー係数[3]

ヘンリー係数に関する精査とキースタディの見直しにおいて留意する点を図表 I-20 に整理した。

ヘンリー係数を測定するための国際的なテストガイドラインはない。測定値が収載されたいくつかの情報源があり、これらの情報源はヘンリー係数を知る上で重要なだけでなく、類似化合物についてヘンリー係数を類推により推定するのにも役に立つ[4]。

測定値が望ましいが、測定値が得られ無い場合は HENRYWIN 等の推計法を使用する。

図表 I-20 ヘンリー係数の精査とキースタディ見直しに係る留意点

項目	留意点
試験法	✓ 公定試験法がないため個別の研究論文等を参照することになり、実験手法についての個別の記述を確認することが必要である。 ✓ 知られている試験法には、大きく分けて動的平衡法と静的平衡法の 2 つ 2 がある。動的平衡法は気泡塔やぬれ壁塔を用いて塔の頭部又は底部で達成される平衡状態に基づいてヘンリー係数が計算されるのに対し、静的平衡法は密閉容器中の気相と水相の間での平衡状態に基づいて計算される。
推計法	✓ 水に対する溶解度と蒸気圧の比による推計法、 HENRYWIN(EPISuite)や OECD QSAR Toolbox 他が使用できる。 **水に対する溶解度と蒸気圧の比** ✓ 水に対する溶解度が低く(< 1 mol/L)、水中や大気中で会合しない化合物については、対対水溶解度と蒸気圧の比として比較的正確に計算できる。しかし測定値より一般に低くなる[5]。 **HENRYWIN**

[1] J.C. Dearden , P. Rotureau & G. Fayet (2013) QSPR prediction of physico- chemical properties for REACH, SAR and QSAR in Environmental Research, 24:4, 279-318, DOI:10.1080/1062936X.2013.773372

[2] OECD (2012) Manual for the Assessment of Chemicals, Chapter 2, Distribution.

[3] 化学物質が水に溶解している場合、その化学物質が平衡に達するまで水から大気への揮発しやすさとして、水と大気への分配を表している数値。

[4] Mackay, D., & Boethling, R. S. (Eds.). (2000). Handbook of property estimation methods for chemicals: environmental health sciences.

[5] ECETOC (1998) Technical Report No. 74, QSARs in Assessment of the Environmental Fate and Effects of Chemicals p.67-

項目	留意点
	✓ 構造に関わるパラメータを組み合わせた推定法が実装されている。 ✓ 物質データベースに当該物質が収載されている場合は測定値も出力される。構造の近い化合物についてヘンリー係数が知られている場合、Experimental Value Adjusted (EVA)と呼ぶ方法で、当該物質との結合の差から推計した類推値を得ることもできる。 **OECD QSAR Toolbox** ✓ OECD QSAR Toolbox には EPISuite が組み込まれているため、物理化学的性状の推算出力結果は組み込まれた時点の EPISuite の結果と同じとなる[1]。
類推	✓ 同族体における内挿により類推ができる。そのほかの方法は通常不可能。 ✓ 分子量を記述子[2]として使用しその類似化合物群にある構造と物性の間の単純な関係から類推を行うことができる場合がある[3]。 ✓ HENRYWIN には類似化合物の既知 WS から類推する ExpVapAdj オプションが使える場合がある（推計法と同様に適用範囲に入ることが必要である)。
相互に関係の深い項目	✓ 分子量 ✓ 水に対する溶解度 ✓ 蒸気圧
その他	✓ pH 6～8 で解離する物質、水和しやすい物質、溶解性の高い物質、系への吸着がある物 V 質、系でのイオン強度が高い場合は見かけのヘンリー係数と希薄水溶液でのその物質本来のヘンリー係数はかなり違った値になり数値の評価に留意する。

⑨ 酸解離定数 pKa

酸解離定数 pKa は、評価Ⅱにおいて収集する項目である。pKa は解離性物質の環境分配モデルの入力値（logPow 等の物理化学的性状）を補正する際に使用する。解離定数に関する精査とキースタディの選定において留意する点を図表 I-21 に整理した。

解離性物質は、実際の環境媒体を構成する水（雨水、表層水、土壌間隙水、底質間隙水等)中では、その pH に対応する割合で、一部が解離状態にあるが、イオン化した解離状態と非解離状態では環境分配モデルでの挙動が大きく異なる。イオン化した解離状態では、農作物、畜産物に濃縮されず、大気からの吸入や飲料水経由の摂取を考慮する。しかし、このような物質は解離状態を考慮した物理化学的性状を利用すること[4]により環境分配モデルで計算することが可能となる。

測定値がキースタディ候補である場合、被験物質が測定対象外の物質（加水分解、酸化等によ

[1] J.C. Dearden , P. Rotureau & G. Fayet (2013) QSPR prediction of physico- chemical properties for REACH, SAR and QSAR in Environmental Research, 24:4, 279-318, DOI:10.1080/1062936X.2013.773372

[2] 記述子(descriptor) 構造活性相関で用いる物質の構造上の特徴又は物理化学的性状のこと。例えば、分子量、部分構造、LogPowLogPow などが記述子となる。(NITE 構造活性相関に関する用語集 http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/qsar_glossary.html#kijutusi 2014/04/25 閲覧)

[3] Mackay, D., & Boethling, R. S. (Eds.) (2000). Handbook of property estimation methods for chemicals: environmental health sciences. Chapter 4 Section 4.5.4 Structure-Property Relationships with Similar Compounds.

[4] この pKa による logPowlogKowlogKow の補正は、EU-TGD(Chapter R.7a: Endpoint specific guidance P.189)や、HHRAP(USEPA, APPENDIX A-2 P.A-2-24)でも同様に行われている。

り水中で不安定な物質）でないことを確認する。また、複数の解離性基がある場合、全ての pKa 値が測定されていることを確認する。これらが不明もしくは疑義がある場合は、測定値の中のより適切なデータ、もしくは推計値や類推値の設定や採用を検討する。

なお、公定測定法では、測定値のばらつきの許容範囲を規定しており、単一のデータの採用は可能であるが、必要に応じて、証拠の重みアプローチの活用も検討する。

図表 I-21　pKa の精査とキースタディ選定に係る留意点

項目	留意点
試験法	✓ 公定法では、滴定法、電気伝導測定法又は分光光度法が推奨されている。 ・ 分光光度法の場合には、不純物の存在に大きな影響を受けるため、可能な限り被験物質の純度について調べること。 ・ 難水溶性被験物質で測定に溶解助剤が使用されている場合、コロイド生成がないことの確認にどのような配慮をしているかについて調べること。
推計法	✓ 推計法はあるが、推計手法間の推計値が、ばらつく場合がある。推計値をキースタディとする場合、複数の推計法の適用を検討すること。
類推	✓ 同族体による類推での類推の際には、推計値を参考に採用の可否を検討する。 ✓ 同族体間で値がばらつく場合は、類推値は採用しない。
相互に関係の深い項目	✓ 水に対する溶解度 ✓ 水中安定性（加水分解性等）
その他	✓ 1980 年以前の古い文献データは公定測定法や最新の推計法に基づくデータでないため、採用の可否には配慮が必要である。 ✓ 混合物の場合、代表的な成分の pKa 値の推計を行う等、有機の単一物質とは異なる配慮が必要である。

⑩ 生物濃縮係数 BCF

生物濃縮係数 BCF に関する精査とキースタディの見直しにおいて留意する点を図表 I-22 に整理した。

BCF は、化審法の新規化学物質の審査等において生物蓄積性の判定に用いられる試験項目の 1 つであるが、対象物質について蓄積性の判定がなされていても BCF の測定値が得られない場合がある。濃縮度濃縮度試験の省略が認められたり[1]、類推によって生物濃縮性が低いと判断することが認められたりする場合があるからである。

なお、生物蓄積係数 BMF も暴露評価において魚介類中濃度予測に用いる（Ⅴ章参照）。通常、BMF の測定値が得られないため、BCF や logPow の値を選択基準にしたデフォルト値を用いるが、OECD テストガイドライン 305 の改訂で BMF を測定する餌料投与法が追加されたため、測定値も得られた場合には個別に採用値の検討を行う。そのため、図表 I-22 には BMF に係ることも含めて記載した。

[1] 1-オクタノールと水との間の分配係数の常用対数（logPow）が 3.5 未満である場合には「高濃縮性でない」との判断し、濃縮度試験を省略することが認められている（新規化学物質の判定及び監視化学物質への該当性の判定等に係る試験方法及び判定基準 平成 23 年 4 月 22 日）。

図表 I-22　BCF の精査とキースタディ見直しに係る留意点

項目	留意点
試験法	✓ OECD テストガイドライン 305 は 2012 年に改訂されている。 ✓ BCF の測定法には、水暴露法、簡易水暴露法（BCF を測定）及び餌料投与法(BMF を測定)がある[1]。 ✓ 水暴露試験は log Pow が 1.5～6.0 の安定な有機化合物に適している。 ✓ 水暴露法における被験物質濃度は、水に対する溶解度以下であることが望ましい。 ✓ 射性同位元素で標識した被験物質を使用してもよい。放射性同位元素で標識した被験物質の場合、純度は>98%が望ましい。 ✓ 難水溶性で Pow が大きな物質は水暴露法による測定が困難。明確なカットオフの提示は困難であるが log Pow > 5 かつ 0.01～0.1 mg/L 以下の対水溶解性の物質は水暴露法はかなり難しくなり、餌料投与法が望ましい。 ✓ 餌料投与法は多成分からなる物質や UVCB s でも容易。
推計法	✓ NITE カテゴリーアプローチ、BCFBAF(EPISuite)、BCF Baseline モデル他が使用できる。 **NITE カテゴリーアプローチ** ✓ NITE カテゴリーアプローチでは、化合物を生体膜への取り込み機構等に基づいて分類後、log Pow を使用して BCF を推計する。 ✓ 化合物はあらかじめ生体膜への取り込み機構等に基づいて分類する。 ✓ log Pow の測定値を使用した推計式と log Pow の推計値（EPISuite KOWWIN ver. 1.6.7 による推計値)で異なる推計式を使用する。 **BCFBAF** ✓ BCFBAF では、log Pow を使用し計算され、一部構造上の特徴に基づいて補正し、BCF と BAF を推計する。 ✓ 化合物は非イオン性とイオン性の化合物に分類し、異なる推計方法を使用している。 **BCF Baseline モデル** ✓ BCF Baseline モデルでは、logPow の値と推計式から logBCF の最大値を計算し、その値を生物濃縮性 Pow に関わる緩和因子(mitigation factor)により補正する：代謝性、分子サイズ、解離性[2]. 設定適用範囲内での使用が必要。
類推	✓ 同族体における内挿により類推ができる。そのほかの方法は通常不可能。 ✓ NITE カテゴリーアプローチの報告書で類推例がある。
相互に関係の深い項目	✓ log Pow
その他	―

以下に、評価Ⅱにおける BCF の採用値の決め方を順を追って説明する。

i) 化審法における生物濃縮性の判定がある場合

そのデータを選定する。その際に定常状態の BCF を優先する。利用可能な値が複数得られる場合は最も倍率の高い BCF を用いる。定常状態の値が得られない場合は、各濃度区における後半 3

[1] 餌料投与法の化審法上の取り扱いはまだ定まっていない(2014 年 5 月現在)。
[2] 経済産業省委託 みずほ情報総研(2012) 平成２３年度環境対応技術開発等（化審法スクリーニング評価・リスク評価における QSAR 等活用に係る調査等）報告書

回の算術平均値のうち最も倍率の高い BCF を用いる。

「高濃縮性でない」ことが類推により判定されている場合はその類推物質の BCF を用いる。複数の物質から類推されている場合は最大値を用いる。

化審法の審査・判定において、分子量が 800 以上（ハロゲン元素を 2 個以上含む化合物にあっては分子量 1,000 以上）であることから「高濃縮性でない」ことが判定されていて、BCF の値が得られない場合には、評価 I では一律 logBCF=2.0 としたが、評価 II では推計や類推により環境中濃度等を推計する数理モデルに十分使用できる精度の数値が得られる場合はそれを含めて検討する。

推計には BCFBAF(EPISuite)や BCF base-line モデル(OASIS Catalogic)を使用できる場合がある。いずれも適用範囲(domain)外では推計の精度が落ちることを考慮して評価される必要がある。また、これらのソフトウェアは log Pow 値を記述子として推計を行うため、log Pow に推計値を用いる場合には log Pow の推計精度の影響についても評価に際しては考慮する必要がある。

ii) 化審法における生物濃縮性の判定がない場合

信頼性の定まった情報源等により BCF の情報を収集し、信頼性の高いデータが 1 つであれば、それを選定する。複数ある場合は、その中の最大値を選定する。

iii) BCF の測定値がない場合

BCF 測定値がなく、分子量 800 未満（ハロゲン元素を 2 個以上含む化合物にあっては分子量 1,000 未満）の場合、以下の(a)～(d)により選定する。選定に際しては、先行して logPow の採用値を決め、その値を用いる。

なお、log BCF の推計結果が 0.5 以下の場合は評価 I では一律 logBCF=0.5（BCF=3.16）としたが評価 II では推計や類推による値も含めて後の環境中濃度等を推計する数理モデルでの評価に十分な値を選択する。推計の方法は i)で書いたのと同じ方法が利用できる場合があり、その利用にあたっては先に記載したのと同じ留意が必要である。

(a) log Pow の試験結果により化審法に基づく生物濃縮性の判定が行われている場合であって log Pow が 3.5 未満の場合

対象物質が脂肪族炭化水素、芳香族炭化水素及びそのハロゲン化物等(カテゴリーⅠ「単純受動拡散カテゴリーカテゴリー」及びカテゴリーⅡ－A「水素結合アクセプターによる双極子－双極子相互作用が受動拡散に影響を与える物質群」に分類されるものに限る。）の場合は式 I-1 で推算される BCF を用いる[1]。

$$\log BCF = 1.05 \times \log Pow - 1.71 \qquad \text{式 I-1}$$

[1] 独立行政法人 製品評価技術基盤機構 構造活性相関委員会「カテゴリーアプローチによる生物濃縮生予測に関する報告書(単純受動拡散カテゴリー)」(2009)より引用

式 I-1 は、化審法の既存化学物質（373 物質）のデータのうち、適用範囲外物質[1]を除いた 48 物質の実測データを用いて導出された予測式である[2]。

それ以外の物質の場合は BCFBAF（EPI Suite）及び BCF base-line モデル（OASIS Catalogic）等の複数の QSAR モデルによる信頼できる推計値の算術平均値を用いる。

(b) log Pow の試験結果により化審法に基づく生物濃縮性の判定が行われていない場合であって log Pow が 6.0 未満の場合

対象物質が脂肪族炭化水素、芳香族炭化水素及びそのハロゲン化物等（カテゴリーⅠ「単純受動拡散カテゴリー」及びカテゴリーⅡ－A「水素結合アクセプターによる双極子－双極子相互作用が受動拡散に影響を与える物質群」に分類されるものに限る。）で log Pow が測定値の場合は上記の式 I-1 で推計される BCF を用いる。log Pow が推計値の場合は式 I-2 で推計される BCF を用いる。

log BCF = 1.03× log Pow −1.48　　式 I-2

式 I-2 は、化審法の既存化学物質（373 物質）のデータのうち、適用範囲外物質[2]を除いた 54 物質の BCF の実測データと logPow の推計値（KOWWIN による)を 用いて導出された予測式である[3]。

それ以外の物質の場合は BCFBAF(EPI Suite)及び BCF base-line モデル(OASIS Catalogic)等の複数 QSAR モデルによる推計値を先に記載した留意点を踏まえて、次の環境中濃度等を推計する数理モデルへの適用に十分な数値を選択する。

(c) log Pow が 6.0 以上の場合

BCFBAF (EPI Suite) 及び BCF base-line モデル（OASIS Catalogic）等の複数 QSAR モデルによる信頼できる推計値の算出や NITE カテゴリー[5]による類推などを行う。類推した値や推計値の利用に際しては先に記載した留意点を踏まえて利用する。

後の環境中濃度等を推計する数理モデルへの適用に十分な値が得られなかった場合には、最悪のシナリオに基づいた値を設定し影響が大きいことが予想される場合には適切な試験の実施が可能か検討する。

(d) log Pow の推計が不可能な場合

logPow の測定値が得られず、QSAR モデル等でも推計不可能な場合、類似物質のデータを収集

---

[1] 適用範囲外：①水中で容易に反応する物質(例：ハロゲン化ベンジル等)、②logPow が 6 以上の物質、③分子サイズが大きく生体膜透過における拡散速度が遅くなる物質(Dmax≧11Å)

[2] 予測式における r^2=0.905 (r:相関係数)である。

[3] 予測式における r^2=0.890 (r:相関係数)である。

[5] 独立行政法人 製品評価技術基盤機構の HP（カテゴリーアプローチによる化学物質の生物濃縮性予測）：http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/category_approach.html

し、類推が可能かの検討を行う[1]。

I.4.5 環境中の分解性データの精査と選定

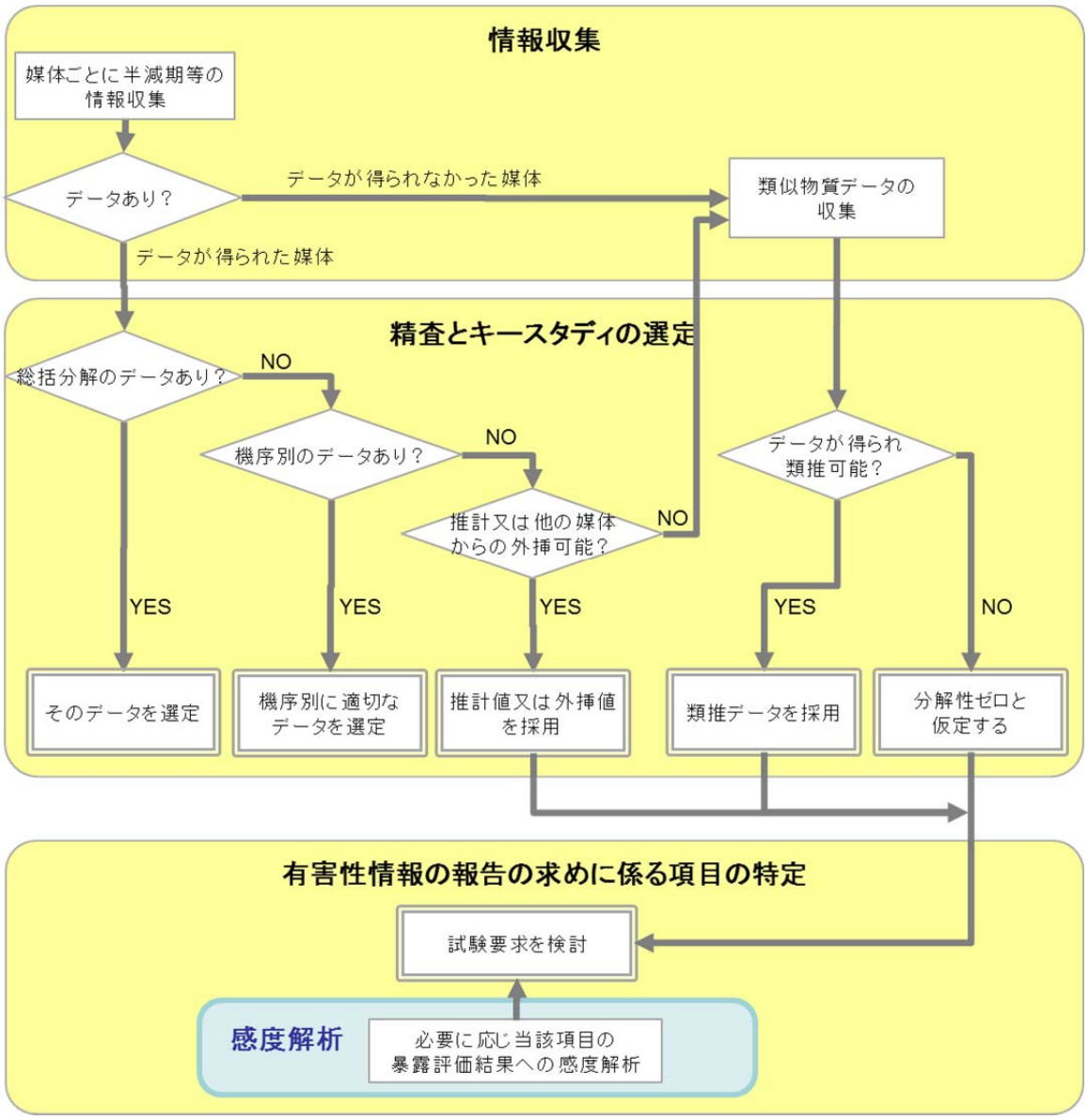
本節では、環境中の分解について、評価Ⅱのための情報整備と収集データの精査及び暴露評価Ⅱに用いるデータの選定方法について記載する。

I.4.5.1 環境中の分解に係る評価Ⅱの準備のフロー

環境中の分解に係る評価Ⅱの準備には、「情報収集」、「精査とキースタディの選定」及び「有害性情報の報告の求めに係る項目の特定」のステップがある。これらのステップの関係を**図表 I-23** に示す。

以下、情報収集は I.4.5.2 、精査とキースタディの選定は I.4.5.3 で説明する。有害性情報の報告の求めに係る項目の特定は I.4.6 で後述する。

[1] o－トリフルオロメチルクロロベンゼンの類推の実施例を NITE (2009) 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[単純受動拡散カテゴリー]で報告している。



図表 I-23　環境中の分解データの選定に係る評価Ⅱの準備のフロー

I.4.5.2　環境中での分解に係る情報収集

化学物質の環境中における分解は、微生物による生物的分解(以下、生分解とする)と非生物的分解に分けられる。さらに生物的分解は、好気的な分解と嫌気的な分解に分けられ、非生物的分解は光分解、加水分解、他の化学物質による酸化などによるものがある。

暴露評価Ⅰでは、微生物による分解度試験結果に基づく化審法の審査・判定等による「難分解性[1]」又は「良分解性」の区分を、水系の非点源シナリオに適用する用途の水域への排出量推計に

[1] 化審法の「難分解性」とは、親化合物が化学的変化をしないことのみを指すのではなく、親化合物から生じる分解生成物等(重合物等も含む)が化学的変化をしにくいことも含む。化審法の難分解性の判定は「微生物による分解度試験」に基づくものであり、これは、自然界における化学物質に対する自然的作用は微生物による寄与が最も大きいためと説明されている。

のみ考慮する（Ⅳ章参照)。その他の環境媒体における分解及び分解機序については考慮せず、分解速度定数を一律ゼロとしている。

暴露評価Ⅱでは、環境媒体（大気、水域、土壌、底質）別の総括的又は機序別の生物的及び非生物的な分解の機序に係る分解速度定数又は半減期のデータを収集し、環境中濃度推計等の数理モデルの入力値に用いる[1]。化審法の分解度試験の結果（水中での生分解性）もこれらの一部として含まれる。

(1) 情報源

環境媒体別の分解速度定数又は半減期データを収集する情報源の例を以下に列挙する。

- 化審法の新規化学物質の審査や既存点検等による生分解試験結果[2]及び事業者より報告された分解性に係る試験結果等
- Hazardous Substances Data Bank (HSDB)[3]
- NIST Chemistry WebBook[4]
- Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals[5]
- Handbook of Environmental Fate and Exposure[6]
- Handbook of Environmental Degradation Rates[7]
- European chemical Substances Information System(ESIS)[8]
- EU ECHA Informantion on Registered Substances[9]

(2) 収集項目

分解に係る情報には、分解の機序ごとの速度定数又は半減期と、分解の機序を区別しないトータルの分解速度定数又は半減期（以下、「総括分解速度定数」又は「総括分解半減期」という。）

---

[1] 例えば、暴露評価Ⅱの排出源ごとのシナリオの暴露評価では土壌中の分解がモデル推計に反映される。（Ⅴ章に記載）また、さまざまな排出源の影響を考慮した暴露シナリオでは、土壌以外にも大気、水域、底質の全 4 媒体中の分解速度定数又は半減期をモデル推計に使用する。（Ⅶ章に記載)。

[2] 新規由来物質については新規由来物質は 3 省データベース(非公開)、既存由来物質は J-CHECK（http://www.safe.nite.go.jp/jcheck/top.action?request_locale=ja）

[3] http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB

[4] http://webbook.nist.gov/chemistry/

[5] Donald Mackay, Wan Ying Shiu, Kuo-Ching Ma and Sum Chi Lee (2006) Vol.I-IV, CRC Pr I Llc; 2 版

[6] Philip H. Howard (1989) Volume I-V, Lewis Pub

[7] Philip H. Howard, Robert S. Boethling, William F. Jarvis and W. Meylan (1991) Lewis Pub

[8] http://esis.jrc.ec.europa.eu/
OECD の SIAR や EU の RiskAssessmentReport などが収載されたデータベース

[9] http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances

がある。総括分解の速度定数とは、分解の機序を総括した媒体中の分解速度定数の和であり、下式で表せる。右辺の f は環境媒体を構成する空気、水、固相への質量分布比[1]であり、k はそれぞれ空気、水、固相における分解の機序別の速度定数の和である。例えば、大気の場合、OH ラジカル、オゾン及び硝酸ラジカルによる分解速度定数の和が空気での機序別の速度定数の和となる。また、i は環境媒体を構成する空気、水、固相を示す。

総括分解の分解速度定数 k_{total} [1/時間] $= f_1\Sigma(k_1 + \cdots) + f_2\Sigma(k_2 + \cdots)\cdots$ 式 I-3

また、分解速度定数と半減期は以下の関係がある。

分解速度定数 [1/時間] ＝ln2／半減期 [時間] ≒0.693／半減期 [時間] 式 I-4

ここでは、前項に例示した情報源等を調査し、環境媒体ごとに環境中での分解に関する情報（半減期、分解速度定数等。以下、「半減期等」という。）として、OECD 等のテストガイドラインの 300 番台のシリーズの分解度試験データ等を含む図表 I-24 に示す情報を収集する。情報収集の際は、データの詳細（測定値の場合、試験法及び試験条件、推計値の場合、推計方法及び推計条件）を確認する。また、分解度のデータしか得られない場合は、そのデータより半減期を推計するため、その値も収集する。

図表 I-24 環境媒体別の分解に関する情報収集項目

環境媒体	収集する情報	備考
大気	・総括分解 ・OH ラジカルとの反応 ・硝酸ラジカルとの反応 ・オゾンとの反応 に関する分解速度定数又は半減期	移流、拡散、散逸、降雨及び降下による消失については調査範囲外。対流圏中における値を用いる。
水域	・総括分解 ・生分解 ・加水分解 ・光分解 に関する分解速度定数又は半減期	拡散及び沈降による消失については調査範囲外。表層水における値を収集する。
土壌	・総括分解 ・生分解（好気的） ・加水分解 に関する分解速度定数又は半減期	土壌間隙空気中のガス態揮発、間隙水中の溶存態の表面流出と溶脱及び土壌粒子吸着態の浸食と巻き上げによる消失ついては調査範囲外。
底質	・総括分解 ・生分解（好気的及び嫌気的） ・加水分解 に関する分解速度定数又は半減期	底質間隙水中の溶存態の拡散及び底質粒子吸着態の巻き上げによる消失については調査範囲外。

[1] 大気、表層水、土壌及び底質の各環境媒体は、空気、水及び粒子の要素で構成されている。質量分布比は、各媒体中の各構成要素での化学物質存在量を媒体中の全化学物質量で除した値として定義される。

I.4.5.3 分解データの精査とキースタディの選定の考え方

ここでは、暴露評価Ⅱに用いる環境中の分解に係るデータの精査の観点と選定の考え方について記載する。

環境媒体 (大気、水域、土壌、底質) 別にモデル入力値 (半減期[1]) を決定する場合に、各媒体に共通した情報収集、データ選定の際の留意点を示す。

(ア) 「総括速度定数」又は「総括分解半減期」のデータがあれば、優先して採用する。情報源に環境媒体のみ記載され、分解反応の種類について明記されていないエキスパートジャッジメント等に基づくデータは、機序別のデータを参考にデータの妥当性を判断し、妥当と判断できる場合には、「総括分解」のデータとして扱う。

(イ) 「総括分解」のデータがなく、分解の機序別のデータがある場合には、それを採用する。なお、分解の機序別のデータから媒体ごとの総括分解半減期等を推計する際には、機序別の分解が、媒体を構成する空気、水、固相のどの要素で生じるのかを確認し、式 I-11のように媒体を構成する空気、水、固相への質量分布比で補正する。

(ウ) 複数のデータが得られる場合は、測定値で測定温度が20℃に近いデータを優先する。

(エ) 分解度の試験データがあり半減期が求められていない場合は、分解は1次反応を仮定し、半減期を算出する。

(オ) 実測値のデータがない場合は、推計データを採用する。その際、推計手法は最新のバージョンが使用されていることが望ましい。推計データがない場合は、類推等により補完する。推計又は類推が不可能な場合は「データなし」とし、分解速度定数はゼロ とする。つまり、当該媒体の当該機序では、「分解はしない」と仮定する。

(カ) 定量的データが得られず、定性的データのみ得られる場合、定性的データを考慮する場合もある。(例：ある環境媒体中では「分解しない」という情報があれば、その媒体中での半減期は無限大に長いと仮定する。)

総括分解の速度定数又は半減期が得られない場合には、得られた分解の機序ごとの速度定数又は半減期を用いて、(式 I-1) 及び (式 I-2) で総括分解の分解速度定数又は総括分解半減期を必要に応じて推計する。機序ごとの分解に関して推計値も含めてデータが得られなかった媒体・機序の分解速度定数に関してはゼロとして扱う。すなわち、当該媒体・機序では分解しないとする安全側の設定とする。

I.4.5.4 媒体別分解データの精査とキースタディの選定

以下に、環境媒体別の半減期等のデータの選定方法を示す。

[1] 分解速度定数の場合は、半減期に換算してモデルに入力する。

(1) 大気

大気（ここでは対流圏の大気を意味する。)中では、直接光分解と間接光分解（OH ラジカル、オゾン、硝酸ラジカルとの反応)が化学物質の消失に寄与しうる。どの分解機序が化学物質の総括分解の速度定数又は半減期に大きく寄与するかは物質に依存する。

以下に大気における分解について、総括および機序別（直接光分解及び間接光分解)に分けて半減期等データの選定方法を示す。

(ア)総括分解

① OECD テストガイドライン等の公的な試験方法は、現時点では存在しない。

② エキスパートジャッジメント等に基づく大気での分解の信頼できる総括半減期のデータが情報源等の調査で得られる場合には、これを採用する。その際に、以下の機序別の分解半減期を基に、総括半減期のデータが妥当であることを確認することが望ましい。

③ 上記①及び②以外の場合は、総括分解の半減期は「データなし」とする。

(イ)直接光分解

① OECD テストガイドライン等の公的な試験方法は、現時点では存在しない。

② エキスパートジャッジメント等に基づく大気での直接光分解の信頼できる半減期のデータが情報源等の調査で得られる場合には、これを採用する。

・化学物質の構造から、大気中で太陽光を直接吸収する可能性がある物質であることを確認する。

・ガス態の試験に基づく場合、蒸気圧等を基に大気中でガス態として主に存在することを確認する。

③ 上記①及び②以外の場合は、直接光分解の半減期は「データなし」とする。

(ウ)OH ラジカルとの反応

① OECD テストガイドライン等の公的な試験方法は、現時点では存在しないが、1970 年代以降、以下に述べる絶対法（absolute rate technique)及び相対法（relative rate technique)が反応速度定数の測定に使用されてきており、測定値は一般に信頼できる。

・絶対法は OH ラジカルと化学物質の反応速度定数を直接的に測定する方法であり、Flash photolysis 等の OH ラジカルの発生法と共鳴蛍光法等の OH ラジカルの測定法を組み合わせて、反応速度定数を求める。異なる温度での測定が容易であることが特徴の一つである。

・相対法は OH ラジカルとの反応速度定数既知の参照物質を被験物質とともに数十リットルのチャンバーに導入し、種々の方法で OH ラジカルを発生させ、参照物質との相対的な消失速度から被験物質の反応速度定数を求める方法である。1×10^{-11} cm^3/molecule/sec 以上の比較的速い反応を有する物質に一般に有用であり、液体や壁面への吸着があり、絶対法での測定が困難な極性有機物質にも有用できる。

② 情報源等の調査で、信頼できる OH ラジカルとの反応の速度定数又は半減期のデータが得られる場合には、これを採用する。なお、半減期データは、情報源に示されている半減期は用いず、図表 I-25 の値[1]を用いて換算する。

③ 情報源等を調査した結果、分解速度定数に係る信頼できる測定データが得られない場合には、AOPWIN (EPI Suite)を用いて、OH ラジカルとの反応による反応速度定数を推計する。

④ 記①～③以外の場合は、OH ラジカルとの反応の半減期は「データなし」とする。

⑤ OH ラジカルとの反応速度定数から半減期を求める際には、以下の関係式を用いて、反応速度定数から分解速度定数を算出し、半減期を求める。その際、OH ラジカル濃度には図表 I-25 の値を用いる。

$$\text{分解速度定数}\left[1/\sec\right] = \text{反応速度定数}\left[cm^3/molecule/\sec\right]\times\text{ラジカル濃度}\left[molecule/cm^3\right] \qquad \text{式 I-5}$$

⑥ 算出した OH ラジカルとの反応における半減期は、化学物質の大気中のガス態にのみ適用する。

図表 I-25 反応速度定数から半減期への換算に用いる濃度

	濃度[molecule/cm^3]
OH ラジカル	5×10^5
硝酸ラジカル	2.4×10^8
オゾン	7×10^{11}

(エ)オゾンとの反応

① OECD テストガイドライン等の公的な試験方法は、現時点では存在しないが、OH ラジカルと同様に、絶対法及び相対法がオゾンとの反応速度定数の測定に使用されてきており、測定値は一般に信頼できる。

② 情報源等の調査で、信頼できるオゾンとの反応の速度定数又は半減期のデータが得られる場合には、これを採用する。なお、半減期データは、情報源に示されている半減期は用いず、図表 I-25 の値を用いて換算する。

③ 情報源等を調査した結果、分解速度定数に係る信頼できる測定データが得られない場合には、AOPWIN (EPI Suite)を用いて、オゾンとの反応による反応速度定数を推計する。

・AOPWIN によるオゾンとの反応速度定数推計値は OH ラジカルとの反応速度定数の推計値ほど推計精度が良くないため、可能であれば、類似構造物質の既知データ等で推計の妥当性を確認することが望ましい。

④ 上記①～③以外の場合は、オゾンとの反応の半減期は「データなし」とする。

⑤ オゾンとの反応速度定数から半減期を求める際には、式Ⅰ-5 の関係式を用いて、反応速度

[1] 化学物質の初期リスク評価書作成マニュアル」(NITE/CERI/NEDO)

定数から分解速度定数を算出し、半減期を求める。その際、オゾン濃度には、図表 I-25 の値を用いる。

⑥ 算出したオゾンとの反応における半減期は、化学物質の大気中のガス態にのみ適用する。

(オ)硝酸ラジカルとの反応

① OECD テストガイドライン等の公的な試験方法は、現時点では存在しないが、OH ラジカル及びオゾンと同様に、絶対法及び相対法が硝酸ラジカルとの反応速度定数の測定に使用されてきており、測定値は一般に信頼できる。

② 情報源等の調査で、信頼できる硝酸ラジカルとの反応の速度定数又は半減期のデータが得られる場合には、これを採用する。なお、半減期データは、情報源に示されている半減期は用いず、図表 I-25 の値を用いて換算する。

③情報源等を調査した結果、分解速度定数に係る信頼できる測定データが得られない場合には、AOPWIN (EPI Suite)を用いて、硝酸ラジカルとの反応による反応速度定数の測定値の有無を確認する。AOPWIN は、硝酸ラジカルとの反応速度定数は推計しない。硝酸ラジカルとの反応が重要な場合に、その旨のコメントを表示し、測定値がある場合にそれを表示する。

④ 記①～③以外の場合は、硝酸ラジカルとの反応の半減期は「データなし」とする。

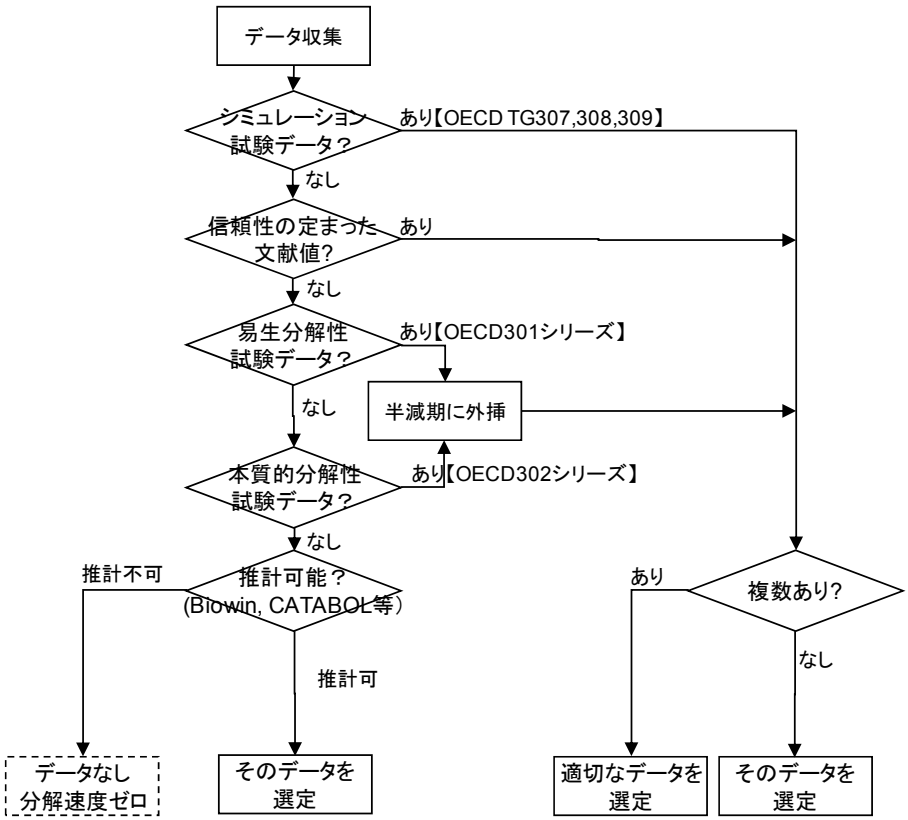
⑤ オゾンとの反応速度定数から半減期を求める際には、式Ⅰ-5 の関係式を用いて、反応速度定数から分解速度定数を算出し、半減期を求める。その際、硝酸ラジカル濃度には、図表 I-25 の値を用いる。

⑥ 算出した硝酸ラジカルとの反応における半減期は、化学物質の大気中のガス態にのみ適用する。

(2) 水域 (表層水)

水域の分解性について、総括および機序別（生分解、加水分解、光分解及びその他の分解）に分けて半減期等データの選定方法を示す。

総括分解図表 I-26に、水域等における総括分解及び生分解による半減期等の選定フローを示す。



図表 I-26　水域における生分解性データの選定フロー

以下の手順で、情報源等を調査して、水域での総括分解の半減期等を決定する。

① OECD テストガイドライン 309「Aerobic Mineralisation in Surface Water - Simulation Biodegradation Test」、EPA テストガイドライン OPPTS 835.3190「Aerobic Mineralization in Surface Water – Simulation Biodegradation Test」又はそれらのガイドラインに準じた試験条件下での試験データがある場合にはその試験データを表層水での総括分解速度定数又は総括分解半減期等のデータとして優先して用いる。これらのテストガイドラインの試験は、表層水における好気的生分解及び非生物的分解（加水分解や酸化）[1]を含む総括分解の速度定数又は半減期等のデータを提供する。

・標識物質や被験物質に高感度な分析法（非標識物質）の使用が推奨されており、純度の影響を受けにくいと考えられるが、純度が規定された値以上であることを確認する。

・水中から高揮発性の物質（≥100 Pa･m³/mol）には適用が困難なため、ヘンリー係数、添加回収率等の試験条件への適合性に注意する。

・表層水を試験に用いるため、試験結果がばらつく可能性がある。全ての試験結果を総合的に判断し、そして統計学的に十分な精度で半減期等を決定できる分解度が得られていることを確認して、半減期等を決定することが望ましい（特に試験期間を超える期間の半減期

[1] 試験は暗所にて行われるため、水中光分解の速度定数又は半減期の情報が情報源等の調査で得られる場合には、この情報も加味して、総括分解の速度定数又は半減期を決定する。

の場合)。

② 上記のテストガイドライン又はそれらに準じた試験での半減期等のデータが得られない場合で、エキスパートジャッジメント等に基づく表層水での分解の信頼できる総括半減期のデータが情報源等の調査で得られる場合には、これを採用する。その際に、以下の機序別の分解半減期を基に、総括半減期のデータが妥当であることを確認することが望ましい。

③ 上記①及び②以外の場合は、総括分解の半減期は「データなし」とする。

(ア) 生分解

図表 I-27 にしたがって、以下の手順で、表層水での生分解の半減期等の決定を行う。なお、生分解は、水中の溶存態と懸濁粒子吸着態の両方に適用する。

① 情報源等を調査して、表層水での生分解の半減期等の信頼できるデータは得られる場合は、これを採用する。

② 情報源等を調査して、表層水での生分解の半減期等のデータは得られないが、情報源等で OECD テストガイドライン 301「Ready Biodegradability」(易分解性試験)、同 302「Inherent Biodegradability」(本質的分解性試験)又はこれらに相当するガイドラインに準拠した試験データがある場合は、その試験結果を用い、図表 I-27 に従って、表層水における好気的生分解による半減期を設定する[1]。

・テストガイドラインの試験データを用いる場合には、試験方法によりパスレベルが異なるため、試験方法を確認する。

図表 I-27 生分解性の試験データからにおける生分解半減期（表層水・土壌・底質）への変換

分解度		半減期［日］※2
易生分解性試験 OECD TG 301 (化審法の分解度試験を含む)	本質的生分解性試験 OECD TG 302	
＜20%	＜20%	10,000
－	20%～70%	100
20%～40%	≧70%	30
40%～60%(70%) ※1	－	10
≧60%(70%) ※1 (良分解性)	－	5

※1 OECD 301 A、301E、又はこれらに相当する試験の場合には、70%を適用する。 これは、化審法での良分解判断基準に相当する"Pass Level"が試験法で異なっているためである. (OECD TG 301 "Ready Biodegradability")

※2 底質の半減期は「4」を上記の表の値に乗じて生分解の半減期とする。

③ 分解性試験データが得られない場合には、BIOWIN (EPI Suite) の推計結果に基づき、図表 I-28 に従って、表層水における好気的生分解による半減期を設定する。

BIOWIN は好気的及び嫌気的条件下のモデル適用物質の生分解の可能性を 7 種の推計モデ

[1] Interim Guidance for Using Ready and Inherent Biodegradability Tests to Derive Input Data for Multimedia Models and Wastewater Treatment Plants (WWT) Models, U.S EPA(2000)より引用

ルを用いて推計するもので、得られる結果は生分解性の目安で定性的なものである。本手法で用いるのは「BIOWIN 3 Ultimate Biodegradation」の結果で、最終的な生分解に要する時間が 8 分類に格付けされる。格付けごとに図表 I-28 に示す値を生分解の半減期として用いる[1]。

図表 I-28　BIOWIN3 結果に基づく水相における生分解半減期（表層水・土壌・底質）への変換

格付け(BIOWIN 3 のアウトプット)	半減期［日］※
hours	0.17
hours – days	1.25
days	2.33
days – weeks	8.67
weeks	15
weeks - months	37.5
months	60
longer	180

※ 土壌の半減期は「2」を、底質の半減期は「9」を上記の表の値に乗じて生分解の半減期とする。

④ ①～③のプロセスで半減期等の結果が得られない場合には、CATABOL[2]で推計される BOD 分解度をの「易分解性試験」の分解度に当てはめ半減期データとする。

⑤ 上記①～④以外の場合は、生分解の半減期は「データなし」とする。

(イ) 加水分解

以下の手順で、表層水での加水分解の半減期等の決定を行う。なお、加水分解は、水中の溶存態のみに適用する。

① OECD テストガイドライン 111「Hydrolysis as a Function of pH」、EPA テストガイドライン OPPTS 835.2120「Hydrolysis」、同 835.2130「Hydrolysis as a Function of pH and Temperature」又はこれらに相当するガイドラインに準拠した試験データがあれば、それを優先し、pH 7 の 20℃又はこれに近い温度のデータを採用する。

② テストガイドラインに準拠する試験データが得られない場合で、分解半減期等の信頼できるデータが情報源等の調査で得られる場合には、これを採用する。
その際、pH6～9 の範囲にある 20℃又はこれに近い温度のデータを採用し、pH 記載のないデータは該当 pH 範囲及び温度のデータであると仮定して扱う。

③ 情報源等を調査した結果、加水分解の半減期等の試験データが得られない場合には、HYDROWIN (EPI Suite) 等を用い、推計した結果を採用する。

④ 上記①～③以外の場合は、加水分解の半減期は「データなし」とする。

[1] BIOWIN の結果を半減期に外挿する方法は、EPA の評価ツールの一つである PBT profiler (http://www.pbtprofiler.net/) より引用。

[2] ブルガリア”Prof. As. Zlatarov”大学で開発された生分解性予測ソフトウェア

(ウ) 光分解

以下の手順で、表層水での光分解の半減期等の決定を行う。なお、光分解は、水中の溶存態のみに適用する。

① OECD テストガイドライン 316「Phototransformation of Chemicals in Water - Direct Photolysis」、EPA テストガイドライン OPPTS 835.2210「Direct Photolysis Rate in Water By Sunlight」又はそれに相当するガイドラインに準拠した試験データを優先して採用する。
② テストガイドラインに準拠する試験データが得られない場合には、分解半減期等の信頼できるデータが情報源等の調査で得られる場合には、これを採用する。
③ 上記①及び②以外の場合は、光分解の半減期は「データなし」とする。

(エ)その他

水相における分解反応としては、生分解、加水分解、光分解を想定しているが、それ以外の分解反応（例えば、酸化等)が水相における消失に寄与すると考えられる場合には、その分解による半減期を考慮する。

(3) 土壌

土壌における分解性について、総括および機序別（生分解、加水分解）に分けて半減期等データの選定方法を示す。

(ア) 総括分解

以下の手順で、情報源等を調査して、土壌中での総括分解の半減期等を決定する。

① OECD テストガイドライン 304A「Inherent Biodegradability in Soil」、同 307「Aerobic and Anaerobic Transformation in Soil」、EPA テストガイドライン OPPTS 835.3300「Soil Biodegradation」、同 OPPTS 835.4100「Aerobic Soil Metabolism」、同 OPPTS 835.4200「Anaerobic Soil Metabolism」又はこれらのガイドラインに準じた試験条件下での試験データがある場合には、その好気的試験データを土壌での総括分解速度定数又は総括分解半減期等のデータとして優先して用いる。これらのテストガイドラインの試験は、土壌における好気的生分解及び非生物的分解（加水分解や酸化）を含む総括分解の速度定数又は半減期等のデータを提供する。
・標識物質や被験物質に高感度な分析法（非標識物質)の使用が推奨されており、純度の影響を受けにくいと考えられるが、純度が規定された値以上であることを確認する。
・土壌から高揮発性の物質には適用できないため、揮発性及び測定温度等、試験条件が妥当であることを確認する。
・土壌の不均一性や土壌微生物への影響等のため、試験結果がばらつく可能性があるため、全ての試験結果を総合的に判断し、そして統計学的に十分な精度で半減期等を決定できる

分解度が得られていることを確認して、半減期等を決定することが望ましい（特に試験期間を超える期間の半減期の場合)。

② 上記のテストガイドライン又はそれらに準じた試験での半減期等のデータが得られない場合で、エキスパートジャッジメント等に基づく土壌分解の総括半減期の信頼できるデータが情報源等の調査で得られる場合には、これを採用する。

・採用に際しては、以下の機序別の分解半減期を基に、総括半減期のデータが妥当であることを確認することが望ましい。

③ 上記①及び②以外の場合は、総括分解の半減期は「データなし」とする。

(イ) 生分解

以下の手順で、土壌の生分解性に係る半減期等の決定を行う。なお、生分解は、土壌間隙水中の溶存態と土壌粒子吸着態の両方に適用する。

① 情報源等を調査して、土壌における好気的生分解の半減期等の信頼できるデータが得られる場合には、これを採用する。

② 情報源等を調査して、土壌における好気的生分解性の半減期等のデータが得られず、水域における生分解半減期のデータが得られている場合には、水域における生分解性の半減期と同等であると仮定し、同じ値を採用する[1]。

③ 情報源等を調査して、土壌生分解の半減期等のデータは得られないが、情報源等で OECD テストガイドライン 301「Ready Biodegradability」(易分解性試験)、同 302「Inherent Biodegradability」(本質的分解性試験)又はこれらに相当するテストガイドラインに準拠した試験データがある場合は、その試験結果を用い、前出の図表 I-27 に従って、土壌における好気的生分解による半減期を設定する。

・テストガイドラインの試験データを用いる場合には、試験方法によりパスレベルが異なるため、試験方法を確認する。

④ 土壌、水域における生分解性の試験データがいずれも得られない場合には、(2) 水域（表層水)に示した図表 I-28 の BIOWIN の推計結果に基づく半減期に『2』を乗じた数値を土壌における生分解の半減期とする。

(ウ) 加水分解

土壌における加水分解に係る分解速度又は半減期は、土壌間隙水の pH に特異的で、20℃又はこれに近い温度のデータが望ましいが、このようなデータがない場合は、水域における分解速度定数又は半減期と同等であると仮定し、水域における半減期データを用いる。なお、加水分解は、土壌間隙水中の溶存態にのみ適用する。

[1] Interim Guidance for Using Ready and Inherent Biodegradability Tests to Derive Input Data for Multimedia Models and Wastewater Treatment Plants (WWT) Models, U.S EPA(2000)より引用

(4) 底質

底質における分解について、総括および機序別（生分解、加水分解)に分けて半減期等の選定方法を示す。

(ア) 総括分解

以下の手順で、情報源等を調査して、底質中での総括分解の半減期等の決定を行う。

① OECD テストガイドライン 308 「Aerobic and Anaerobic Transformation in Aquatic Sediment Systems」又はそのガイドラインに準じた試験条件下での試験データがある場合には、その試験結果を優先して用いる。このテストガイドラインの試験は、底質における好気的又は嫌気的生分解と非生物的分解（加水分解や酸化等)による総括分解の速度定数又は半減期等のデータを提供する。総括分解の速度定数又は半減期等のデータを提供する。

・底質は一般に、比較的薄い有酸素状態の好気的な表層と無酸素状態の嫌気的な深層から構成される。このため、生分解が総括分解に大きな寄与が大きい場合、試験が底質での好気的条件下又は嫌気的条件下で行われているのかを確認し、底質での総括分解の速度定数（kdegsed）を式 I-6 で補正する必要がある。

$$k\deg_{sed} = Faer_{sed} \cdot kbio-aer_{sed} + (1 - Faer_{sed}) \cdot kbio-anaer_{sed} + kabio_{sed} \quad \text{式 I-6}$$

記号	説明	単位	デフォルト値	備考
$kdeg_{sed}$	底質での全分解速度定数	d^{-1}		出典[1]
$Faer_{sed}$	底質相における有酸素状態の割合	—	0.25	
$kbio\text{-}aer_{sed}$	底質での好気的生分解速度定数	d^{-1}		
$kbio\text{-}anaer_{sed}$	底質での嫌気的生分解速度定数	d^{-1}		
$kabio_{sed}$	底質での非生物的な分解速度定数の和	d^{-1}		

・標識物質や被験物質に高感度な分析法（非標識物質)の使用が推奨されており、純度の影響を受けにくいと考えられるが、純度が規定された値以上であることを確認する。

・高揮発性の物質には適用できないため、揮発性及び測定温度等、試験条件が妥当であることを確認する。

・底質の不均一性や底質微生物への影響等のため、試験結果がばらつく可能性があるため、全ての試験結果を総合的に判断し、そして統計学的に十分な精度で半減期等を決定できる分解度が得られていることを確認して、半減期等を決定することが望ましい（特に試験期間を超える期間の半減期の場合)。

② 上記のテストガイドライン又はそれらに準じた試験での半減期等のデータが得られない場

[1] J.P.A. Lijzen and M.G.J. Rikken (eds.) EUSES Background report. RIVM Report no. 601900005/2004, Bilthoven, January 2004 の Page Ⅲ-90、「III.4.2.7 Biodegradation in soil and sediment」の式(113)

合で、エキスパートジャッジメント等に基づく底質分解の総括半減期の信頼できるデータが情報源等の調査で得られる場合には、これを採用する。

・採用に際して、可能であれば、以下の機序別の分解半減期を基に、総括半減期のデータが妥当であることを確認することが望ましい。

③ 上記①及び②以外の場合は、総括分解の半減期は「データなし」とする。

(イ) 生分解

以下の手順で、底質の生分解性に係る半減期等の決定を行う。なお、生分解は、底質間隙水中の溶存態と底質粒子吸着態の両方に適用する。

① 情報源等を調査して、底質における生分解の半減期等の信頼できるデータが得られる場合には、これを採用する。

・生分解試験が底質での好気的条件下又は嫌気的条件下で行われているのかを確認し、底質での生分解の速度定数（kdegsed）を式 I-6 で補正する必要がある。

② 情報源等を調査して、底質における好気的生分解性の半減期等のデータが得られず、水域又は土壌おける生分解半減期のデータが得られている場合には、水域又は土壌における生分解性の半減期『4』を乗じた数値を、底質における生分解による半減期として設定する[1]。

③ 情報源等を調査して、底質における生分解の半減期等のが得られないが、情報源等で OECD テストガイドライン 301「Ready Biodegradability」(易分解性試験)、同 302「Inherent Biodegradability」(本質的分解性試験)又はこれらに相当するテストガイドラインに準拠した試験データがある場合は、その試験結果を用い、前出の図表 I-27 に従って得られる半減期に『4』を乗じた数値を、底質における生分解による半減期として設定する。

・テストガイドラインの試験データを用いる場合には、試験方法によりパスレベルが異なるため、試験方法を確認する。

④ 水域、土壌、底質における生分解性の試験データがいずれも得られない場合には、(2) 水域 (表層水)に示した図表 I-28 の BIOWIN の推計結果に基づいた半減期に『9』を乗じた数値を底質における生分解の半減期とする。

(ウ) 加水分解

底質における加水分解に係る分解速度又は半減期は、底質間隙水の pH に特異的で、20℃又はこれに近い温度のデータが望ましいが、このようなデータがない場合は、水域における分解速度定数又は半減期と同等であると仮定し、水域におけるデータを用いる。なお、加水分解は、底質間隙水中の溶存態にのみ適用する。

[1] Interim Guidance for Using Ready and Inherent Biodegradability Tests to Derive Input Data for Multimedia Models and Wastewater Treatment Plants (WWT) Models, U.S EPA(2000)より引用

I.4.6 有害性情報の報告の求めに係る項目の特定

国は、優先評価化学物質のリスク評価を進める上で必要であれば、法第 10 条第 1 項に基づき、優先評価化学物質の製造・輸入事業者に対して有害性等に係る試験成績を記載した資料の提出を求めることができる（以下、「有害性情報の報告の求め」という。）。

本節では、物理化学的性状、分解性及び蓄積性に関する有害性情報の報告の求めについて、対象項目の特定の考え方と求めを行う際の留意点について記載する。

I.4.6.1 有害性情報の報告の求めに係る項目

有害性情報の報告の求めを行うことができる試験項目は省令[1]に定められており、物理化学的性状、分解性及び蓄積性に係る項目に関しては以下の（ア）～（ウ）である。（イ）と（ウ）は新規化学物質の審査において、環境中での分解性と生物への蓄積性に係る判定を行うために必要な試験項目と同じである[2]。

(ア) 物理化学的性状に関する試験
(イ) 微生物等による化学物質の分解度試験
(ウ) 魚介類の体内における化学物質の濃縮度試験又は一－オクタノールと水との間の分配係数測定試験

（ア）物理化学的性状の具体的な項目と試験法については、法第 41 条第 3 項に基づく有害性情報の報告[3]に関する省令と当該省令に係る局長通知に挙げられている知見[4]が参考になる。

---

[1] 新規化学物質に係る試験並びに優先評価化学物質及び監視化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める省令

[2] これらの性状について、優先評価化学物質、監視化学物質、第二種特定化学物質又は一般化学物質の製造又は輸入事業者は、以下の知見（既知見を除く）を得た場合には、法第 41 条第 1 項により国に報告の義務がある。
・微生物等による分解度試験において易分解性ではないもの
・魚介類の体内における化学物質の濃縮度試験において生物濃縮係数が 1000 以上であるもの
・一－オクタノールと水との間の分配係数測定試験において分配係数の対数が 3.5 以上であるもの

[3] 法第 10 条第 1 項の有害性情報の報告の求めは、国が事業者に対して情報の提出を求めることに関する規定であり、法第 41 条第 3 項の有害性情報の報告は、事業者が自主的に国に情報を報告することに関する規定である。

[4] 有害性情報の報告に関する省令において、優先評価化学物質の製造・輸入事業者が国に報告をするよう努めなくてはならないと定められている物理化学的性状、分解性及び蓄積性に係る知見（既知見を除く）は以下の通り。括弧内は同省令に関する局長通知（有害性情報の報告に関する運用について）に記載されている試験法である。

① 融点（OECD TG102 に準じて実施された試験結果）
② 沸点（OECD TG103 に準じて実施された試験結果）
③ 蒸気圧（OECD TG104 に準じて実施された試験結果）

評価ⅠやⅡの準備における情報整備等の結果、上記（ア）～（ウ）の項目について以下のいずれかの場合に、その優先評価化学物質の有害性情報の報告の求めを行うかについて検討する。

- 情報を有しない物質
- 測定値が得られても十分な信頼性を有しない又はキースタディが選定し難い物質
- 推計値や類推値など測定値が得られない物質

有害性情報の報告の求めを行うかの検討においては、以下の点について考慮する。

- 複数の評価対象物質が設定される優先評価化学物質（I.2.2 参照）については、評価対象物質ごとの上記（ア）～（ウ）の性状情報の有無
- 報告の求めを行おうとしている項目の測定の可否
- 報告の求めを行おうとしている項目の暴露評価結果等に対する影響の程度

これらについて以下、順に説明する。

I.4.6.2 複数の評価対象物質を設定した場合

評価Ⅱにおいては、評価対象物質を複数設定することがありうる（I.4.3 参照）。いずれかの評価対象物質の性状情報が得られない場合、後述する「I.4.6.3 物理化学的性状等の測定の可否」と「I.4.6.4 暴露評価結果等に対する影響の程度」を考慮して、有害性情報の報告の求めを行うかについて個別に検討を行う。

性状情報は、環境中濃度等を推計する数理モデルの入力値となる。評価対象物質の用途や形状（塩であれば固体である等）、それらから考えられる排出先媒体を勘案して、重要な項目を特定する。

I.4.6.3 物理化学的性状等の測定の可否

化学物質によっては特定の物理化学的性状等について測定が行えないことがある。そのため、有害性情報の報告の求めを行うかの検討においては、得られている範囲の情報から判断して、試

④ 一-オクタノールと水との間の分配係数（試験方法等通知に定められる方法もしくは OECD TG 107 又は TG117 に準じて実施された試験結果）
⑤ 水に対する溶解度（OECD TG105 に準じて実施された試験結果）
⑥ 解離定数（OECD TG112 に準じて実施された試験結果）
⑦ 光分解性 （OECD TG316 に準じて実施された試験結果）
⑧ 加水分解性 （OECD TG111 に準じて実施された試験結果）
⑨ 大気、水域、底質又は土壌に係る分配係数 （OECD TG 106 又は TG121 に準じて実施された試験結果もしくは③及び⑤の試験結果を使用して得られた計算結果）
⑩ 生分解性（試験方法等通知に定められる方法もしくは OECD TG301A, 301B, 301D, 301E, 301F 又は 302C に準じて実施された試験結果）
⑪ 生物濃縮性（試験方法等通知に定められる方法で実施された試験結果）

験の実施が可能かについて考慮するものとする。

下表に項目別の測定不要と考えられる場合等を整理した。

図表 I-29　項目ごとの測定が不可又は不要と考えられる場合等

項目	測定が不可又は不要と考えられる場合等
融点	・ 気体 ※1 ・ 融点が 0℃より低い液体 ※1 ・ 融点が－20℃より低い物質[1] ※2 ・ 融点に達する前に分解や昇華が起こる物質 ※3 ・ 融点 ＜ －25℃又は ＞300℃ のものはそれぞれ＜ －25℃、＞300℃と報告 ※4
沸点	・ 気体　※1 ・ 沸点が 300℃以上か、沸点に達する前に分解する固体及び液体(この場合は、減圧下での沸点や蒸気圧に基づいて推計する)。　※1 ・ 明らかに沸点の高い無機物や有機物の塩などは推計値で十分 ※1 ・ 300℃以上で融解するか、沸点に達する前に分解する固体(この場合は、減圧下での沸点を測定するか推計する) ※2 ・ 沸騰前に分解する(自己酸化、転移、分解、部分分解(変化物を生成)する物質) ※2 ・ 高沸点の液体又は 101.3kPa 以上で沸点に達する前に分解、自己酸化等をする液体については、不活性ガス下又は減圧下での沸点の決定し、減圧下での沸点を導くことが推奨 ※3 ・ 爆発物、自然発火物、又は、自己反応性物質は、沸点の決定は一般的に実施できない(自然発火物質については、不活性ガス又は減圧下での試験の実施を検討する) ※3 ・ 物質の融点が 300℃以上のもの、融点測定試験中に化学変化が起こる物※3 又は、大気圧で沸点に達する前に分解する物質(このような場合、減圧(0.2 kPa まで)下で分解なしに沸点を測定できるか確認する)。※3 ・ 爆発性物質(火薬類)、自己反応性物質に分類されるもの、融点測定中に化学変化が起こるもの、0.2kPa 以下の減圧状態でも沸点に達する前に分解する液体 ※3 ・ 沸点 ＜ －50℃又は ＞300℃ のものはそれぞれ＜ －50℃、＞300℃と報告 ※4 ・ 沸騰しないで化学反応(例えば、分解、部分分解(変化物の生成)、転移)が起こる物質の場合には反応を報告する　※4 ・ 非常に分子量の大きいものや非常に融点の高いもの　※6

[1] REACH Annex VII Column 2 では、融点が -20℃の下限値未満の時には試験報告をする必要はないとしているが、下限値で融けるかどうかの判断は試験により実施されるべきともしている。なお、(Q)SAR で-50℃未満の場合はそれだけで実施不要としている。

項目	測定が不可又は不要と考えられる場合等
蒸気圧	・ 融点が 360℃を超えたり、融点測定中に分解するようなもの ※1 ・ 融点が 200～360℃の場合は認められた推計法でよい ※1 ・ 計算により 25℃での蒸気圧が 10^{-5} Pa を下回るとき ※1 ・ 明らかに低い蒸気圧となる無機物や有機物の塩(推計値で十分) ※1 ・ 沸点 ＜30℃ の化合物 ※1 ・ 融点が 300℃を超えるもの※2 ・ 融点が 200℃～300℃の物質（試験法に基づく限界値、または、認められた推計に基づく値があればよい） ※2 ・ 標準沸点が 30℃未満のもの(このようなものは蒸気圧が測定限界（10^{5} Pa）を超える）※3 ・ 測定中に分解するもの、不安定なもの、爆発性のもの、自己反応性のもの、有機過酸化物（測定できない）※3 ・ 自然発火性のもの(不活性状態で測定するが、不活性状態を維持できないようなものは推計値を使用）※3 ・ 測定機器を破壊するような腐食性物質(推計値を使用する）※3 ・ 標準沸点が 0℃以下のもの ※4 ・ 測定条件で分解する化合物 ※5: TG 104
水に対する溶解度	・ 水中で不安定なもの ※1 ・ 1 μg/L の溶解度のもの(数値の報告は必要ない）※1 ・ pH4, 7, 9 で加水分解して安定でない物質（半減期 12 時間未満）※2 ・ 水中で酸化し易い物質 ※2 ・ 明らかに水に不溶なもの(限界テストの報告が必要）※2 ・ 水に触れると引火する物質、水中で酸化しやすい物質※3 ・ 明らかに極水溶性のもの(アミンの無機塩、硫酸塩、四級アンモニウム化合物） ※6 ・ 極端に疎水性のもの(log Pow > 7) ※6 ・ 分散型ポリマー ※6
一-オクタノールと水との間の分配係数	・ 水又はオクタノールに極端に溶解性が高いか低い場合(限界テストを実施又は推計値でよい。ただし、Log Pow 推計値が 6 を超える時信頼性は低い）※1 ・ 試験が実施できないものは推計値でよい ※1 ・ 無機化合物 ※2 ・ 試験が困難なもの（例: 試験中に分解したり、高い界面活性作用を示したり、激しく反応したりする物。あるいは、水やオクタノールに溶けない物。純度の十分でないもの）※2 ・ 対水溶解度が 5 g/L 超の化合物（ただし、ポリマーはこの限りでない）※4
解離定数	・ 解離性官能基を持たない化合物(例えば、炭化水素）※1 ・ 水中で加水分解され不安定なもの（半減期 12 時間未満）※1 ・ 酸化し易い物質 ※1 ・ 溶解助剤を用いてもなお検出できないほど不溶なもの ※2 ・ 反応性が高いもの、不安定なもの。水と接触して引火性のガスを発生するもの※3 ・ 水に対する溶解性が 200 μg/L 未満の化合物(水抽出画分が 2%以上のポリマーを除く）※4

項目	測定が不可又は不要と考えられる場合等
有機炭素補正土壌吸着係数	・ 吸着能が低い（例えば、logPow が低い）物質。Log Pow < 3 の非イオン化物質[1] ※2 ・ 物質又は変化物が急速に分解する場合(加水分解性物質は加水分解物の吸着係数を測定するのがよい場合がある）※2 ・ log Pow=3 が、吸着能のカットオフ値とされているが、水可溶性で低 Pow のものは必ずしも吸着能が低くはない※3 ・ 水に対する溶解性が 200 μg/L 以下の化合物（水抽出画分が 2%以上のポリマーを除く）※4
生物濃縮係数	・ 生物蓄積能が低い物質（(例えば logPow ≦ 3[2]）※2 ・ 生体膜透過能が低い物質 ※2 ・ 水界への直接・間接の暴露が起こりそうにないもの ※2
生分解性	・ 無機物質※2 ・ 水抽出画分が pH7 で 2%以下のポリマー（分枝シリコン又はシロキサンポリマーはこの限りではない） ※4 ・ ヘンリー係数が 100 Pa･m³/mol 以上の揮発性物質 ※5: TG309

※1 OECD HPV Manual Chapter 2.
※2 REACH 条文 Annex VII Column 2
※3 REACH Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment R7a (V2.4)
※4 Canadian EPA(2005) Guidelines for the Notification and Testing of new Substances: Chemicals and Polymers
※5 該当する OECD 試験ガイドライン
※6 EPA (1997) Chemistry Assistance Manual for Premanufacture Notification Submitters.

I.4.6.4 性状データの暴露評価結果等に対する影響の程度

本リスク評価スキームでは暴露評価に数理モデルを利用するため、数理モデルの入力値である物理化学的性状等データの精度は、暴露評価ひいてはリスク推計の結果の精度に影響を及ぼす（X 章参照）。影響を及ぼす程度は、数理モデルごとに、物理化学的性状等データの組合せに応じて様々である。

本スキームの暴露評価で用いる数理モデルは、蒸気圧、水溶解度及び logPow が排出量推計と環境中濃度推計に直接的に関係するため（図表 I-3、図表 I-4 参照）、原則としてこの 3 項目を有害性情報の報告の求めの対象として想定する。なお、これら以外の項目の有害性情報の報告の求めは、評価Ⅱ以降で使用する数理モデルに応じて必要に応じ個別に検討する。

有害性情報の報告の求めを行う候補となった項目について、報告の求めを行うかの判断に資するため、暴露評価に用いる数理モデルを使って暴露評価結果に対する感度解析を行う。感度解析とは、数理モデルの出力結果が、入力値の変動によってどの程度の影響を受けるかを調べる手法である。

感度解析は以下の様な場合に行うことが想定される。

[1] イオン化物質では水に対して可溶性であれば低 Log Pow でも吸着能が高い場合がある(ECHA IR-CSR Capter R.7a R.7.1.15.4)。
[2] 化審法の濃縮度試験が必要となるのは 3.5 以上である。ただし、界面活性のある物質、分子量分布を有する混合物、有機金属化合物、純度の低い物質（HPLC 法を除く）及び無機化合物には適用しない。

キースタディ候補のデータについて、

(ア) 測定値が得られても十分な信頼性を有しない[1]、又は複数の測定値データが大きくばらつく場合[2]

(イ) 推計値しか得られない場合

(ウ) 類推値しか得られない場合

以下、感度解析方法の概要を「(1)感度解析の方法」、上記（ア）と（ウ）の場合の感度解析の方法を「(2)信頼性等が不十分な測定値、又は類推値しか得られない場合の感度解析」に、（イ）の場合の感度解析の方法を「(3)推計値しか得られない場合の感度解析」に示す。

感度解析の結果、有害性情報の報告の求めを行う候補となった項目のデータの変動によってリスク推計結果が変化するような場合は、原則として有害性情報の報告の求めを行うものとする。

(1) 感度解析の方法

感度解析の方法の概要を下表に示す。感度解析は、本スキームで暴露評価に用いる数理モデルを用い、有害性情報の報告の求めを行う候補となった項目の値を変動させて、数理モデルの出力結果の変動を調べる。対象項目の入力値の変動幅として上限値と下限値を設定し、項目が複数の場合はその組合せをつくり、組合せ回数分の数理モデルを用いた計算を行う。組み合わせの回数は「$2^{項目数}$」である。例えば、3 項目について感度解析を実施する場合、その上限値・下限値の組み合わせは2^3＝8 通りのパターンで計算を行う。ありうる組み合わせの中で、リスク懸念箇所数等が変動するような場合、有害性情報の報告の求めの必要性が高いと考えられる。

また、下表に挙げた以外の目的変数や数理モデルを用いた感度解析も必要に応じて検討を行う。

[1] 例えば、二次情報による測定値が得られたが原著の確認をしても詳細が明らかでないようなデータが単独で得られ、証拠の重みアプローチによる裏付けも行えないような場合が考えられる。

[2] 「大きくばらつく」目安として、10 倍以上の差があるような場合を想定している。

図表 I-30　感度解析の方法の概要

用いる 数理モデル	目的変数 （影響の程度の調査対象）	変動させる 入力値	目的変数に対する感度の調べ方
排出源ごとの暴露シナリオに使用する排出源周辺半径 1～10km のローカルスケールモデル ※1	・排出源ごとの暴露シナリオのリスク推計結果 ➢ 人健康影響の場合はリスク懸念箇所数、リスク懸念の影響面積 ➢ 生態影響の場合は水生生物（物質により底生生物も）に係るリスク懸念箇所	有害性情報の報告の求めを行う候補となった蒸気圧、水溶解度、logPow のいずれか（複数の場合もありうる）	・入力値の変動幅（上限値と下限値）を設定する｛（2）と（3）で後述｝。 ・項目ごとの上限値と下限値（場合によりベースラインも設定）を数理モデル（必要に応じ排出量推計を含む）に入力して目的変数の変動を調べる。 ・入力値が複数項目の場合、上限値と下限値の組み合わせごとに目的変数の変動を調べる。 ・排出量は対象物質の評価Ⅱの用いる値（PRTR 情報主軸なら PRTR 情報、そうでなければ製造数量等の届出情報に基づく排出量推計も推計に含める）とする。 ・変動させる入力値（蒸気圧、水溶解度、logPow）からヘンリー係数、Koc、BCF を推計している場合には、その関数を推計に含める。ヘンリー係数等が測定値等で得られている場合は固定値として扱う。
様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオに使用するレベルⅢタイプの多媒体モデル ※2	・人の合計摂取量の媒体別比率 ・環境媒体別存在比率		

※1　PRAS-NITE[1]（Ⅴ章参照）
※2　MNSEM3-NITE（Ⅶ章参照）

(2) 信頼性等が不十分な測定値、又は類推値しか得られない場合の感度解析

キースタディ候補に信頼性が不十分な測定値又は類推値しか得られない場合、当該項目の感度解析における変動幅の設定は、概ね以下の２つのパターンが考えられる。

(ア) 測定値や類推値が単独の値の場合
(イ) 測定値や類推値に複数の候補の値がある場合

上記（ア）の場合の変動幅は、精査後のキースタディ候補の値をベースラインとし、その 10 分の１、10 倍の３パターンの性状データの入力値を設定し、数理モデルに入力して目的変数の変動を調べる。なお、logPow についてはログスケールであるため±1 とする。ただし、項目ごとの測定法による測定誤差を考慮し、それが 10 倍以上であるような場合は、変動幅を個別に検討する。

上記（イ）の場合の変動幅は、複数のキースタディ候補間の上限値と下限値（ばらつきの上限値と下限値）を設定する。

[1] PRAS-NITE：PACSs Risk Assessment System
http://www.safe.nite.go.jp/risk/pras-nite.htmlhttp://www.safe.nite.go.jp/risk/pras-nite.html

(3) 推計値しか得られない場合の感度解析

キースタディ候補に推計値しか得られない場合、当該項目の感度解析における変動幅は、推計値から測定値の取り得る範囲を逆推定することにより設定する。

以下に、logPow を例にして変動幅の求め方を示す。

logPow の推定に用いた手法[1]の元データ（複数の化学物質の測定値と推計値の既知のペアデータ）から散布図を作成し、回帰式を求めておく(図表 I-31 参照)。ここで、測定値を説明変数 x、推計値を目的変数 y としたとき、x_0 のときの目的変数 y の値の信頼区間である予測区間を用いる。信頼率 95%の予測区間は下式のようになる。

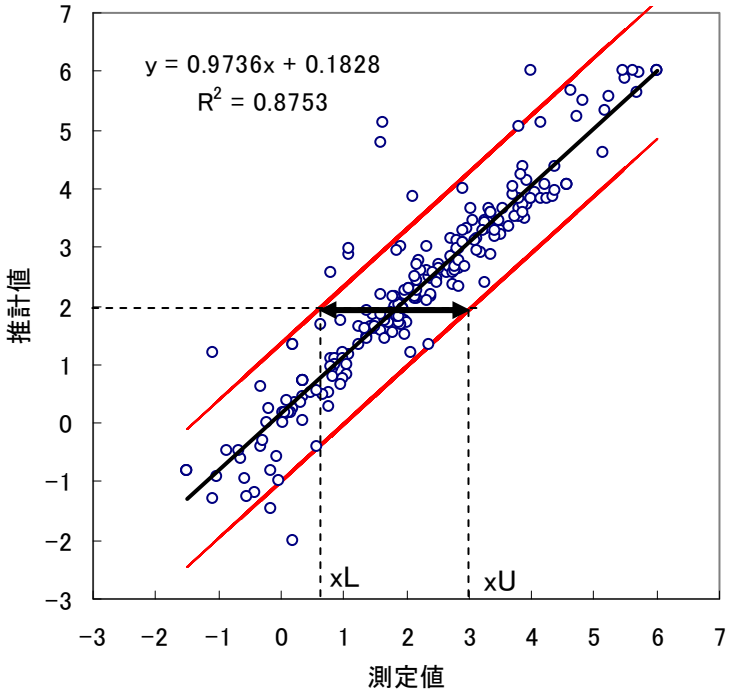
$$(b_0 + b_1 x_0) \pm t(n-2, 0.025)\sqrt{\left\{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{(xx)}}\right\} V_e} \qquad \text{式 I-7}$$

b_0	: 回帰の切片
b_1	: 回帰係数
n	: サンプル数
t（n-2,0.025）	: 自由度 n-2 の t 分布における上側確率 2.5 パーセント点
$\bar{x}$	: 説明変数 x の算術平均
$S(xx)$	: 偏差平方和
Ve	: 残差の標準偏差

この式を用いて、推定値 y が得られたときにとりうる測定値 x の範囲（図表 I-31 の xL と x U)を逆算する。

複数の項目のキースタディ候補が推計値であれば、同様に推計値がある場合の測定値がとりうる上限値及び下限値を求め、前項①に記載したように複数項目の組み合わせについて数理モデルに入力し、目的変数（図表 I-30 参照）の変動を調査する。

[1] 推計に用いた回帰式等

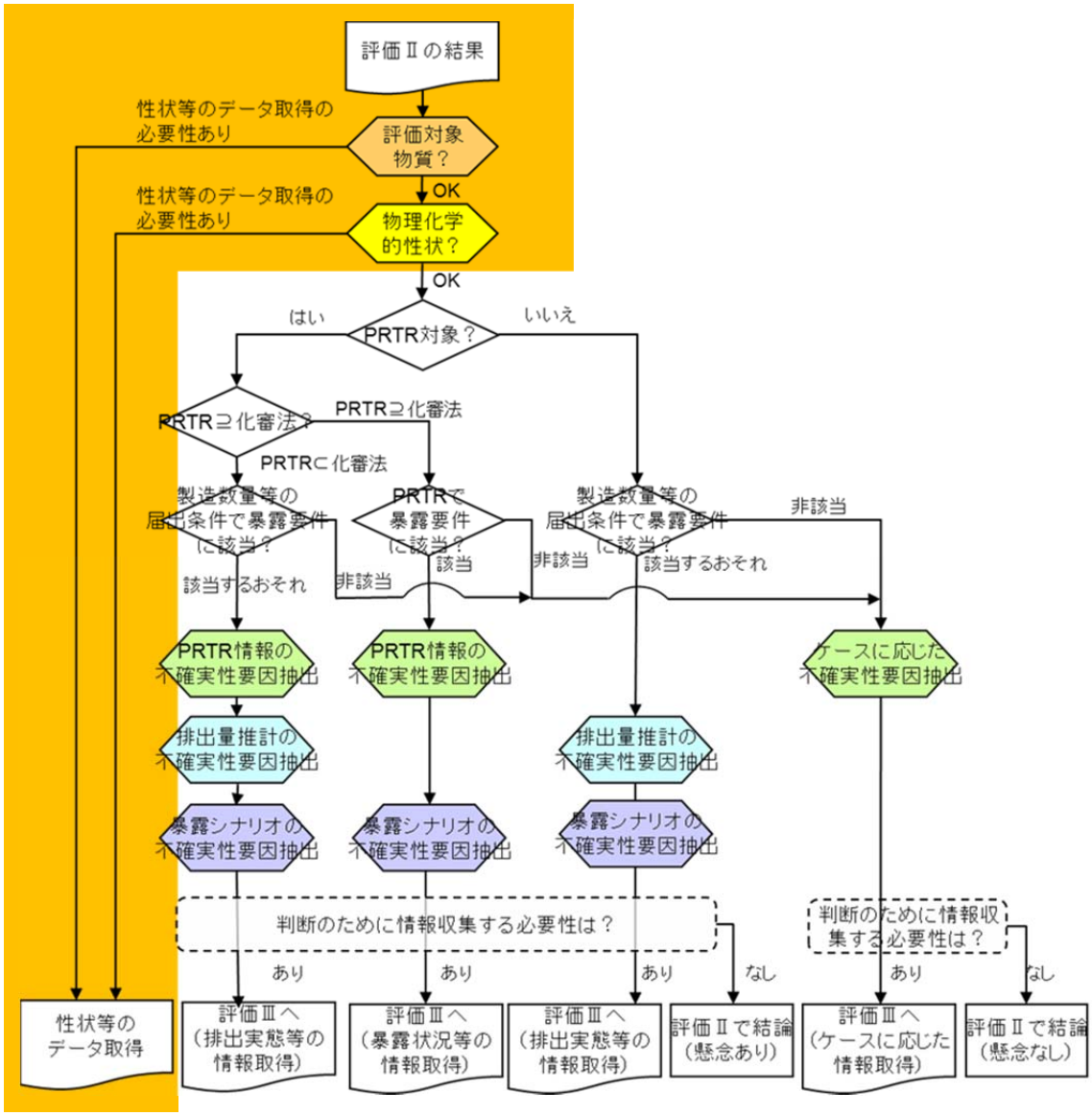


図表 I-31　logPow の測定値と推計値の線形回帰と逆推定の例（プロットと式はイメージ）

I.4.6.5　不確実性解析との関係

評価Ⅱにおいて、評価対象物質の特定や暴露評価に必要な物理化学的性状、分解性及び生物蓄積性の情報が得られない又は信頼性が不十分な場合等に、I.4.6 に前述した通り、法第 10 条第 1 項に基づく有害性情報の報告の求めを行う。このことは、評価Ⅱの不確実性解析において、はじめに評価対象物質の適切さと物理化学的性状に係る不確実性の検討を行う部分に該当している（図表 I-32 の左側の色を付けた部分）。

このような法第 10 条第 1 項に基づく新たな情報が得られた場合、そのデータの精査と採用可否の判断を行い、評価Ⅱを再度行うものとする。



図表 I-32　不確実性解析の段階的進め方

これらの部分の不確実性解析の内容は以下の通りである。

i)　評価対象物質の不確実性

評価対象物質について、有害性を含む性状データが揃っていることが理想的であり、ここではそのデータギャップの有無と、データギャップがある場合にそれが過小評価をもたらすかについて考察する。データギャップとは例えば、混合物であるが、そのうちの一成分のみの性状で代表させている等である。そのことが過小評価をもたらすかについては、個別ケースに応じて判断する。

ii)　物理化学的性状データの不確実性

評価Ⅱにおける精査の結果、信頼できる情報源から得られた各物理化学的性状データまたはそれらの推計データが大幅にばらつく場合等は、数理モデルを用いて暴露評価を実施す

る際に感度解析もあわせて実施する。その結果、結果の変動がわずかである、もしくは暴露要件の判断を左右するほどではない場合には、次の不確実性解析のステップへ進む。

評価対象物質又は物理化学的性状のいずれかによって過小評価のおそれがあるような場合は図表 I-32 に示すように基本的にはその先の不確実性解析は行わない。まずこれらの不確実性を下げないと、その先にある不確実性の内訳も見分けられないためである。

I.5 評価Ⅲのための準備

この段階では、取扱い状況の報告[1]や追加モニタリング調査の結果等の主に暴露評価に係る新たに収集された情報を反映してリスク評価を行う。

取り扱い状況の報告の求め等の判断に至った評価Ⅱの段階で、評価に必要な性状情報については既知見調査もしくは有害性情報の報告の求めに基づく報告により得られていると想定される（図表 I-32 参照）。そのため、原則として性状情報に関するさらなる情報整備や精査は想定されない。ただし、法第 41 条に基づく有害性情報の報告等により新たな知見が得られた場合には、データの精査とその採用可否の判断を行う。

I.6 リスク評価(二次)のための準備

この段階では、法第 10 条第 2 項に基づく有害性調査指示に基づき事業者より報告された長期毒性に関する知見を得た物質を対象に、リスク評価を行う。

有害性調査指示の判断に至った評価Ⅱないし評価Ⅲの段階で、評価に必要な性状情報については既知見調査もしくは有害性情報の報告の求めに基づく報告により得られていると想定される。そのため、原則として性状情報に関するさらなる情報整備や精査は想定されない。ただし、法第 41 条に基づく有害性情報の報告等により新たな知見が得られた場合には、データの精査とその採用可否の判断を行う。

[1] 法第 42 条により、国は優先評価化学物質取扱事業者に対し、その取扱い状況について報告を求めることができることとなっている（詳細はⅣ章参照）。

I.7 付属資料

I.7.1 物理化学的性状・生物蓄積性及び分解性データの収集内容

性状データの収集においては、数値等に加えてデータの信頼性評価に必要な情報を併せて収集する。項目ごとに収集する内容は「化審法第４１条に基づく有害性情報報告の作成・提出等についての要領」[1]（以下「要領」という。）と様式に記載されていることから、ここではその概要を記載する。

「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」[2]に記載されている国が既知見を収集する情報源より、「図表 I-3　整備する性状情報の項目と使用目的」の項目（融点、沸点、蒸気圧等）の情報を収集する。その際に収集する内容は、融点、沸点、蒸気圧、1-オクタノールと水との間の分配係数、水に対する溶解度、ヘンリー係数、有機炭素補正土壌吸着係数については概ね共通しており、下表に融点の例を示す。測定条件については、融点と沸点については測定圧力について、それ以外の項目については測定温度について収集することとしている。

生物濃縮性と生分解性については、下表に示す項目のほか、暴露期間や化審法における判定情報（「低濃縮性」等）も収集する。

これらの収集内容は、評価Ⅰにおける信頼性ランク付けとキースタディ選定に最小限必要な内容として設定されている。

図表 I-33　項目別の収集内容等（融点の場合）

	収集内容※1	記入例	概要
情報源の情報	情報源名	Mackay	信頼性基準文書に記載されている情報源の略名
	情報源の詳細(版、Ver.、等)	Second Edition	
物質同定情報	評価物質_名称	テレフタル酸	
	評価物質_CAS	100-21-0	
	試験物質_名称	テレフタル酸	
	試験物質_CAS	100-21-0	
信頼性関連情報※2	ガイドラインの記載	OECD TG 102	測定法もしくは推計法の略名
	GLP の記載	yes (incl. certificate)	
	信頼性の記載	1: reliable without restriction	情報源に記載があれば転記
	キースタディの該否	key study	情報源に記載があれば転記
測定値の情報	項目の記載(融点、凝固点、昇華点、等)	融点	
	値の種類の記載(実測、推定、等)	experimental result	

[1] 有害性情報の報告義務について
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/todoke/harmful_index.html
「化審法第４１条に基づく有害性情報報告の作成・提出等についての要領」
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/todoke/harmful_manual.pdf

[2] 「化審法のスクリーニング評価及びリスク評価（一次）評価Ⅰに用いる性状データの信頼性評価等の公表について」
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html

	収集内容※1	記入例	概要
	融点等_記号	<	不等号等
	融点等_値または下限値	-76	
	融点等_上限値		
	融点等_値の範囲		
	融点等_単位	° C	
測定条件の情報	圧力_記号		不等号等
	圧力_値または下限値	1013	
	圧力_上限値		
	圧力_値の範囲		
	圧力_単位	hPa	
備考	備考	Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, Boca Raton, FL.	情報源に記載されている原著等

※1 要領では「項目名」と記載されている。ここでは、融点、沸点等の項目と紛らわしいことから収集内容と表記した。なお、ここでは一部を省略している。
※2 信頼性ランク付けでは「信頼性関連情報」以外の情報も用いる。

I.7.2 物理化学的性状・生物蓄積性及び分解性の試験法の適用範囲

本節では物理化学的性状、蓄積性及び分解性の項目ごとに、信頼性基準に記載された試験法ごとの適用範囲を整理する。

I.7.2.1 物理化学的性状・生物蓄積性の試験法の適用範囲

(1) 融点

融点の試験法としては OECD テストガイドライン 102 「Melting Point/ Melting Range」、EU A.1 等がある。融点の測定方法は複数あり、各測定法の測定温度及び測定精度は下記のとおりである。融点は、常圧で固体の物質を測定する。

図表 I-34 融点の測定法

規格名称	試験名称※1	適用範囲等※2
OECD TG 102 EU A01 OPTTS 830.7200	Capillary/liquid bath (液浴付毛細管法)	**適用温度(K)**：273 ～ 573 **測定精度(K)**：± 0.3 **適用物質**：粉砕できるもの(OECD TG 102)。粉砕が容易でないものに適用できる場合も一部有り（EU A01)。
OECD TG 102 EU A01 OPPTS 830.7200	Capillary/metal block (金属ブロック付毛細管法)	**適応温度(K)**：293 ～ 573 以上 **測定精度(K)**：± 0.5 **適用物質**：粉砕できるもの（OECD TG 102)。 粉砕が容易でないものに適用できる場合も一部有り、特に、光電検出装置を使用した場合は装置によっては可能。色の濃い物質に使えない場合がある(EU A01)。
OECD TG 102 EU A01 OPPTS 830.7200	Kofler hot bar (Kofler ホットバー)	**適用温度(K)**：293 ～ 573 以上 **測定精度(K)**：± 1.0 **適用物質**：ホットバーに薄い層状に載せることができるもの（OECD TG 102)。粉砕できるもの。粉砕が容易でないものは不可 （EU A01)。

規格名称	試験名称※1	適用範囲等※2
OECD TG 102 EU A.1	Melt microsope 溶融顕微鏡	**適応温度(K)**：293 ～ 573 以上 **測定精度(K)**：± 0.5 **適用物質**：少量の物質の測定に適している。粉砕できるもの。粉砕が容易でないものも一部可能(EU A01)。
OECD TG 102 EU A.1 OPPTS 830.7200	Differential thermal analysis and differential scanning calorimetry 示差熱分析、示差走査熱量分析	**適用温度(K)**：173～1273 **測定精度(K)**：± 0.5 (～600K)、± 2.0 (～1273K) **適用物質**：粉砕が容易でないものでも測定可能(EU A01)。
OECD TG 102 EU A.1 OPPTS 830.7200	Freezing temperature 凝固点	**適応温度(K)**：223 ～ 573 **測定精度(K)**：± 0.5 **適用物質**：粉砕が容易でないものでも測定可能(EU A01)。
OECD TG 102 EU A.1 OPPTS 830.7200	Pour point 流動点	**適用温度(K)**：223 ～ 323 **測定精度(K)**：± 0.3 **適用物質**：融点の低い油状物質に適している(OECD TG 102)。
OPPTS 830.7200	Drop melting point	**適用温度(K)**：記載なし **測定精度**：記載なし **適用物質**：ワセリン、微結晶性ワックス
OPPTS 830.7200	Thiele tube	記載なし
OPPTS 830.7200	Cooling curve	記載なし
OPPTS 830.7200	Fisher-Johns	記載なし
OPPTS 830.7200	Freezing temperature	記載なし
ISO 1392	Method for the determination of the crystallizing point	**適用温度(℃)**：－50～250 **測定精度**：記載なし **適用物質**：記載なし
ISO 2207	Petroleum waxes - Determination of congealing point	**適用物質**： 冷却時に硬化又は耐流動性を示す物質
ISO 3016	Petroleum oils - Determination of pour point	**適用物質**： 石油製品。燃料油、重質潤滑油、及び、残渣燃料を成分として含む製品(最低流動点の測定)。
JIS K 0064	化学製品の融点及び溶融範囲測定方法	**適用温度(℃)**：常温～300 **測定精度**：記載なし **適用物質**：融点測定方法(I)は、明確な融点を示す物質に、溶融範囲測定方法(II)は、明確な融点を示さない物質(油脂，ワックス，ワセリンなど多成分の混合物，ガラス，アモルファス物質など)。
JIS K 0065	化学製品の凝固点測定方法	**適用温度(℃)**：-15～100 **測定精度**：記載なし **適用物質**：明確に凝固点を示さない化学製品には適用しない。

※1 試験名称としては便宜的に各行の規格名称列の先頭にある規格の名称を採用している。規格によって名称は異なる。

※2 規格名称列に記載している規格名の順にみて記載した。()内はその記述が()内の規格に基づいた記載であることを示す。下位に記載の規格の記載が、上位規格の記載と重複する場合は、簡便のため、記載をしなかった。

(2) 沸点

沸点の試験法としては OECD テストガイドライン 103 「Boiling Point」、EU A.2 等がある。

沸点の測定方法は複数あり、各測定法の測定精度は下記のとおりである。

図表 I-35 沸点の測定法

規格名称	試験名称※1	適用範囲等
OECD TG 103 EU A.2 OPPTS 830.7220	Ebulliometer エブリオメーター	**適用温度(℃)：**-15～100 **測定精度(K)：** ± 1.4 (~373K)、± 2.5 (~600K) 純物質の場合のみの数値。この測定精度は、ASTM D 1120-72 に記載のような装置による場合で、装置性能とともに精度は上がる場合がある(EU A02)。 **適用物質：**沸点より低い温度で自動酸化・転位・分解等が起こる物質には適さない(その場合、減圧下での測定が望ましい)(OECD TG 103)。
OECD TG 103 EU A.2 OPPTS 830.7220	Dynamic method 動的法	**適用温度(℃)：**記載なし **測定精度（K）：**± 0.5 (~600K) 純物質の場合のみの数値。 **適用物質：**沸点より低い温度で自動酸化・転位・分解等が起こる物質には適さない(その場合、減圧下での測定が望ましい)(OECD TG 103)。
OECD TG 103 EU A.2 OPPTS 830.7220	Distillation method 蒸留法	**適用温度(℃)：**記載なし **測定精度（K）：**± 0.5 (~600K) **適用物質：**沸点より低い温度で自動酸化・転位・分解等が起こる物質には適さない(その場合、減圧下での測定が望ましい)(OECD TG 103)。
OECD TG 103 EU A.2 OPPTS 830.7220	Siwoloboff 法	**適用温度(℃)：**記載なし **測定精度（K）：**± 2.0 (~600K) 純物質の場合のみの数値。 **適用物質：**沸点より低い温度で自動酸化・転位・分解等が起こる物質には適さない(その場合、減圧下での測定が望ましい)(OECD TG 103)。
OECD TG 103 EU A.2 OPPTS 830.7220	Photocell detection 光電セル検出法	**適用温度(℃)：**記載なし **測定精度（K）：**± 0.3 (373K) 純物質の場合のみの数値。 **適用物質：**沸点より低い温度で自動酸化・転位・分解等が起こる物質には適さない(その場合、減圧下での測定が望ましい)(OECD TG 103)。
OECD TG 103 EU A.2 OPPTS 830.7220	Differential thermal analysis 示差熱分析法	**適用温度(℃)：**記載なし **測定精度（K）：**± 0.5 (~600K)。± 2.0 (~1273K) **適用物質：**沸点より低い温度で自動酸化・転位・分解等が起こる物質には適さない(その場合、減圧下での測定が望ましい)(OECD TG 103)。
OECD TG 103 EU A.2 OPPTS 830.7220	Differential scanning calorimetry 示差走査熱量分析	**適用温度：**記載なし **測定精度（K）：**± 0.5 (~600K)、± 2.0(~1273K) **適用物質：**沸点より低い温度で自動酸化・転位・分解等が起こる物質には適さない(その場合、減圧下での測定が望ましい)(OECD TG 103)。
JIS K 0066:1992 ISO 918:1983	化学製品の蒸留試験方法	**適用温度(℃)：**30～350 ISO では、30℃～300℃。 **測定精度（K）：**± 0.5 (~600K)、± 2.0(~1273K) **適用物質：**記載なし
ISO 3924:2010	Petroleum products — Determination of boiling range distribution — Gas	**適用温度：**55℃以上 **測定精度：**記載なし **適用物質：** 最終沸点が大気圧で 538℃以下の石油製品や留分に適用できる。沸点範囲が 55℃より高いものに適用できる。ガソリン

規格名称	試験名称※1	適用範囲等
	chromatography method	試料やガソリン成分には適さない。55℃以上の沸点範囲で、室温でのサンプリングに支障をきたさない低い蒸気圧を持つものに限られる。
ISO 3405:2011	Petroleum products — Determination of distillation characteristics at atmospheric pressure	**適用温度：**初留点が 0℃超で終点が約 400℃以下。 **測定精度：**記載なし **適用物質：**原油中間留分と軽油留分の沸点範囲の決定用。の初留点が 0℃超で終点が約 400℃以下のもの。

※1 試験名称としては便宜的に各行の規格名称列の先頭にある規格の名称を採用している。規格によって名称は異なる。

(3) 蒸気圧

蒸気圧の試験法としては OECD テストガイドライン 104「Vapour Pressure」、EU A.4 等がある。蒸気圧の測定方法は複数あり、各測定法の推奨範囲、測定精度は下記のとおりである。

図表 I-36　蒸気圧の測定法

規格名称	試験名称※1	適用範囲等
OECD TG 104 EU A.4 OPPTS 3830.7950※2	Dynamic method 動的方法	**適用蒸気圧(Pa)：**10^3 ～10^5 **繰り返し精度(%)：**～25 (2 x 10^3 Pa 以下)、1～5 (2 x 10^3 Pa 以上) **再現性(%)：**～25 (2 x 10^3 Pa 以下)、1～5 (2 x 10^3 Pa 以上) **適用物質：**低温融解固体、液体。試験条件で分解しない化学物質にのみ適用可能（OECD TG 104)。
OECD TG 104 EU A.4 OPPTS 3830.7950	Static method 静的方法	**適用蒸気圧(Pa)：**10～10^5 10^{-2}～10^5 (キャパシタンスマノメータ使用時) **繰り返し精度(%)：** 5～10 **再現性(%)：**5～10 **適用物質：**固体、液体。試験条件で分解しない化学物質にのみ適用可能（OECD TG 104)。
OECD TG 104 EU A.4 OPPTS 3830.7950	Isoteniscope method 蒸気圧計法	**適用蒸気圧(Pa)：**10^2～10^5 **繰り返し精度(%)：** 5～10 **再現性(%)：**5～10 **適用物質：**固体、液体。試験条件で分解しない化学物質にのみ適用可能（OECD TG 104)。
OECD TG 104 EU A.4 OPPTS 3830.7950	Effusion method: vapour pressure balance 滲出法：蒸気圧天秤	**適用蒸気圧(Pa)：**10^{-3}～1 **繰り返し精度(%)：** 5～20 **再現性(%)：**50～ **適用物質：**固体、液体。試験条件で分解しない化学物質にのみ適用可能（OECD TG 104)。
OECD TG 104 EU A.4 OPPTS 3830.7950	Effusion method: Knudsen cell 滲出法：クヌーセンセル	**適用蒸気圧(Pa)：**10^{-10}～1 **繰り返し精度(%)：** 10～30 **再現性(%)：**記載なし **適用物質：**固体、液体。試験条件で分解しない化学物質にのみ適用可能（OECD TG 104)。
OECD TG 104	Effusion method: isothermal	**適用蒸気圧(Pa)：** 10^{-10}～1 **繰り返し精度(%)：** 5～30

規格名称	試験名称※1	適用範囲等
EU A.4 OPPTS 3830.7950	thermogravimetry 滲出法 等温熱重量分析	**再現性(%)**：50～ **適用物質**：固体、液体。試験条件で分解しない化学物質にのみ適用可能（OECD TG 104)。
OECD TG 104 EU A.4 OPPTS 3830.7950	Gas saturation method 気体飽和法	**適用蒸気圧(Pa)**： 10^{-10}～10^{3} **繰り返し精度(%)**： 10～30 **再現性(%)**：50～ **適用物質**：固体、液体。試験条件で分解しない化学物質にのみ適用可能（OECD TG 104)。
OECD TG 104 EU A.4 OPPTS 3830.7950	Spinning rotor method スピニングローター法	**適用蒸気圧(Pa)**： 10^{-4}～0.5 **繰り返し精度(%)**： 10～20 **再現性(%)**：記載なし **適用物質**：固体、液体。試験条件で分解しない化学物質にのみ適用可能（OECD TG 104)。
JIS K 2258-1 ISO 3007 (MOD) ※3	原油及び石油製品—蒸気圧の求め方—第 1 部：リード法	**適用物質**：揮発性で，かつ，非粘ちょう性の石油製品。細かい適用範囲物質が規定されている(詳細は原文参照)。
JIS K 2258-2	原油及び石油製品–蒸気圧の求め方– 第 2 部：3 回膨張法"	**適用物質**：揮発性で，かつ，非粘ちょう性の石油製品。細かい適用範囲物質が規定されている(詳細は原文参照)。

※1 試験名称としては便宜的に各行の規格名称列の先頭にある規格の名称を採用している。規格によって名称は異なる。
※2 OPPTS 835.7950 では、「標準沸点が 30℃未満の化学物質については蒸気圧試験が必要ない」としている。
※3 ISO/IEC Guide 21 に基づく同等性(対応の度合い)を示すコード。完全に一致[IDT]ではないが対応と違いが明確なもの。厳密な定義は同ガイド参照。

(4) 水に対する溶解度

水に対する溶解度に関連する試験法としては「OECD テストガイドライン 105 「Water Solubility」、EU A.6 等がある。水に対する溶解度の測定方法は複数あり、各測定法の適用範囲、測定精度は下記のとおりである。

図表 I-37 水に対する溶解度の測定法

規格名称	試験名称※1	適用範囲等
OECD TG 105 EU A.6 OPPTS 830.7840	Column elution method カラム溶出法	**適用溶解度(mg/L)**：10^{-2} g/L 以下 **精度要求**：再現精度が 30 %未満 **感度要求**：10^{-6} g/L 未満 **適用物質**：水中で安定、非揮発性、実質的に純物質(OECD TG 105)。
OECD TG 105 EU A.6 OPPTS 830.7840	Flask method フラスコ法	**適用溶解度(mg/L)**：10^{-2} g/L 以上 **精度要求**：再現精度が 15 %未満 **感度要求**：10^{-6} g/L 未満 **適用物質**：水中で安定、非揮発性、実質的に純物質(OECD TG 105)。
OPPTS 830.7860	Water Solubility Generator Column Method 水溶解ジェネレーターカラム法	**適用溶解度(mg/L)**：1 ppb ～ 5000 ppm 1 ppb 未満はそれ以上測定する必要が無く、5000 ppm 以上では OPPTS 830.7840 フラスコ法により測定すべきとしている。

※1 試験名称としては便宜的に各行の規格名称列の先頭にある規格の名称を採用している。規格によって名称は異

なる。

(5) 1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)

logPow の測定法としては、OECD テストガイドライン 107「Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method」、同 117「Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method」、同 123「Partition Coefficient (1-Octanol/Water): Slow-Stirring Method」、EU A.8 等がある。

各測定法の適用範囲等は、以下に示すとおりである。

図表 I-38 logPow の測定法

ガイドライン	測定方法	適用範囲等
OECD TG 107 EU A.8 US EPA OPPTS 830.7550 JIS Z 7260-107:2000	Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method フラスコ振とう法	**適用範囲：**-2 < logPow < 4 **要求される再現性：**3回の測定値が±0.3 logPow未満 **測定温度：**20～25℃、±1℃内で管理 **適用物質：**界面活性剤や、水不溶性物質、水中解離/会合物質、高分子化合物（分子量分布があるもの）、有機金属化合物、低純度物質、無機化合物には適用不可
OECD TG 117 EU A.8 US EPA OPPTS 830.7570 JIS Z 7260-117:2006	Partition Coefficient (n-octanol/water): High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method 高速液体クロマトグラフィー（HPLC）法	**適用範囲：**0 < logPow < 6 **要求される繰り返し精度：**2回の測定値が±0.1 logPow未満であること **測定温度：**±1℃内で管理 **適用物質：**混合物等にも適用可能、強酸、強塩基、金属錯体には適用不可 フラスコ振とう法での測定値の±0.5内の値が得られる
OECD TG 123 EU A.8	Partition Coefficient (1-Octanol/Water): Slow-Stirring Method 低速攪拌法	**適用範囲：**logPow ≦8.2 測定機関間のmedian standard deviationは0.15～0.3 logPowであった[1] **測定温度：**25±1℃1℃ **適用物質：**疎水性の高い物質の測定に適している
US EPA OPPTS 830.7560	Generator Column 法	**適用範囲：**1 < logPow < 6.0以上 被験物質の測定を行う前に、少なくとも2種の参照物質について各々2回測定し、各参照物質の測定値の平均が、推奨logPow値の±0.1以内にあることを確認 **測定温度：**25±0.05℃

(6) 有機炭素補正土壌吸着係数 Koc

Koc に関連する試験法としては、OECD テストガイドライン 121「Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) on Soil and on Sewage Sludge using High Performance Liquid

[1] Tolls, J. et al. (2003) Slow-stirring method for determining the n-octanol/water partition coefficient (Pow) for highly hydrophobic chemicals: Performance evaluation in a ring test. Environ. Toxicol. Chem., 22(5): 1051–1057.

Chromatography (HPLC)」、同 106「Adsorption –Desorption Using a Batch Equilibrium Method」等がある。Koc の測定方法は複数あり、各測定方法の適用範囲等は、以下に示すとおりである。

図表 I-39 Koc の測定法

規格名称	試験名称※1	適用範囲等※2
OECD TG 121 EU C.19 US EPA OPPTS 835.1110※3 ISO18749:2004	Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) on Soil and on Sewage Sludge using High Performance Liquid Chromatography (HPLC) HPLC を使用した土壌と底質に関する吸着係数(Koc)の推計	**適用 log Koc：** 1.5～5.0 **適用が容易な物質：** HPLC システムの検出可能な物質。試験中の安定性が十分な物質(OECD TG 121)。 水に可溶な物質。 揮発性物質―他法での定量分析精度の悪い物質。他の試験系に強く吸着する物質。 **適用が難しい物質：** 中程度あるいは強い酸又は塩基、イオン性物質―緩衝液を使用し、沈殿が生じないようにする(OECD TG 121)。 **適用できない物質：** HPLC 移動相/固定相と反応。無機成分と相互反応。界面活性。無機化合物 (OECD TG 121)。 水に不溶な気体。加水分解しやすい化合物。土壌表面で触媒的に分解され易い化学物質。0.01 mg/L で分析できない物質 (OPPTS 835.1110)。 試験中にストリッピングや発泡のような非生物学的プロセスによる被験物質の除去を起す物質。活性土壌を解膠物質。易分解性物質(ISO 18749)。
OECD TG 106 EU C.18 US EPA OPPTS 835.1230 US EPA OPPTS 835.1220	Adsorption -Desorption Using a Batch Equilibrium Method バッチ平衡を使用した吸着脱着平衡法	**適用が容易な物質：** 水に対する溶解度 ＞10^{-4} g/L。測定中安定。高荷電物質でないもの。対象物質の純度 95%以上が望ましい。 **適用が難しい物質：** 水に対する溶解度 ＜10^{-4} g/L―適切な溶解助剤の使用、又は、Spiking 法の使用。 揮発性物質―試験中のロスを防ぐ。

※1 試験名称としては便宜的に各行の規格名称列の先頭にある規格の名称を採用している。規格によって名称は異なる。
※2 規格名称列に記載している規格名の順にみて記載した。()内はその記述が()内の規格に基づいた記載であることを示す。下位に記載の規格の記載が、上位規格の記載と重複する場合は、簡便のため、記載をしなかった。
※3 このガイドライン OPPTS 835.1110 は 2014 年 5 月現在のところ"public draft"で最終化されていない。

(7) ヘンリー係数

ヘンリー係数については、国際的なテストガイドラインはないが、測定に関する研究報告は多数あり、試験方法について比較を行っている Staudinger, J., & Roberts, P. V. (1996)によれば各測定方法の適用範囲等は、以下に示すとおりである[1]。

[1] Staudinger, J., & Roberts, P. V. (1996). A critical review of Henry's law constants for environmental applications. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, *26*(3), 205-297.

図表 I-40　ヘンリー係数の測定法[1]

測定法		概要	平均相対標準偏差※1
動的方法：「ガスパージ」法とも呼ばれ、気体と水の間での動的平衡に基づいてヘンリー係数を決定する。	batch air stripping バッチ空気ストリッピング（bubble column 気泡塔）	適切な気泡塔中、等温状態で、空気などの気体による水相から被験物質の除去による、消失速度を測定し、それに基づいてヘンリー係数が決定される。	2.8%～21%
	concurrent flow 並流 (wetted wall column ぬれ壁塔)	ぬれ壁塔は垂直の塔中で薄い水の層と並流する気体との間での化合物の平衡状態を生む。化合物を添加した水はぬれ壁塔に入れられ、塔内を下方に流れる化合物を含まない気体と接触する。十分な時間、接触させると、塔の底に気体流が達する時までには、気液平衡に達する。水相と気相を分析する。	19%～52%
静的方法：動的平衡法と違い、密閉容器中で平衡に達する。	Single equilibration 単回平衡法	最も単純かつ直接的な方法。量が既知なと水相と気相からなる密閉容器に化合物を一定量入れ、平衡に達したところで、化合物の濃度をどちらか一相又は両相で測定。	2.8%～30%
	Multiple equilibration 多回平衡法	ガスシリンジなどで平衡に達した後気相を数回、化合物を含まない気体に入れ替え、そのたびに一方の相を測定。	1.5%
	EPICS	液量の異なる、密閉したペアーの瓶を用意し、平衡に達した後に、気相ヘッドスペースを測定。	2.9%～19% 0.1～2 のヘンリー係数(無名数)に適している。この範囲では相対標準誤差は小さくなる。
	Variable headspace 変動ヘッドスペース	異なるヘッドスペースー液容量比を持つ複数の容器から採取した溶液から相対的平衡気相濃度をガスクロマトグラフィ等で定量して行う。気相濃度は算出する必要は無く、気相の GC ピーク面積で表される気相濃度の比で代用できる。	4.4%

※1 複数の文献に基づくものでは最大と最小の平均相対標準偏差を記載。

(8) 酸解離定数 pKa

解離定数に関連する試験法には OECD テストガイドライン 112「Dissociation Constants in Water」、EPA テストガイドライン OPPTS 830.7370「Dissociation Constants in Water」、EU A.7 等がある。これらのガイドラインでは、滴定法、電気伝導測定法及び分光光度法の 3 種の測定法が推奨されている。

各測定法の適用範囲等は、以下に示すとおりである。

[1] Staudinger, J., & Roberts, P. V. (1996)の記述に基づく。

図表 I-41　pKa の測定法

規格名称	試験名称	適用範囲等
OECD TG 112 OECD112 US EPA OPPTS 830.7370 EU A7	Titration Method 滴定法	**適用濃度範囲：**0.01 M 又は飽和水溶解度の 1/2 未満（難水溶性物質には不適切） **要求される繰り返し精度：**3 回以上の測定値が対数単位で±0.1 未満 **測定温度：**20℃±1℃ 溶解助剤を用いた場合、チンダル現象でコロイドの有無を確認する
	Conductometric Method 電気伝導測定法	**適用濃度範囲：**0.01 M 又は飽和水溶解度の 1/2 未満（難水溶性物質には不適切） Onsager 式が有効である場合には、比較的低い濃度での酸－塩基平衡以外の錯体形成等にも使用できる場合がある **要求される繰り返し精度：**3 回以上の測定値が対数単位で±0.1 未満 **測定温度：**20℃±1℃内 **その他：**溶解助剤を用いた場合、チンダル現象でコロイドの有無を確認する
	Spectrophotometric Method 分光光度法	**適用物質：**非解離体と解離体で UV/VIS 吸収スペクトルがかなり異なる物質にのみ適用できる。また、低溶解度物質、酸－塩基平衡以外の錯体形成等にも適用できる **要求される繰り返し精度：**3 回以上の測定値が対数単位で±0.1 未満 **測定温度：**20℃±1℃ **その他：**緩衝液の濃度は 0.05 M 未満

(9) 生物濃縮係数

生物濃縮係数に関連する試験法は、OECD テストガイドライン 305 がある。2012 年の改訂により生物濃縮係数 BCF を測定する方法と生物蓄積係数 BMF を測定する方法が記載されている。ガイドライン OECD テストガイドライン 305A～E は 1996 年に統合された後、2012 年に改訂された。この改訂では餌料投与法が組み込まれた。この方法は、対水溶解性が低く水暴露法の実施が困難な物質や試験水から鰓を通じて直接濃縮されるよりも餌を通じて魚の体内に入り濃縮される物質の評価に有効である。日本の規格として JIS Z 7260-305 があるが、これは OECD 旧ガイドライン 305 を基礎としている。化審法の「魚介類の体内における化学物質の濃縮度試験」も現在のところ OECD 旧ガイドライン 305 に相当するものになっている。

図表 I-42　生物濃縮係数 BCF（又は生物蓄積係数 BMF）の測定法

規格名称	試験名称※1	適用範囲等
OECD TG 305(2012)※2 305-I EU C.13※3 JIS Z 7260-305:2000 US EPA OPPTS 850.1730	Aqueous Exposure Bioconcentration Fish Test 水暴露法	**適用物質：** logPow: 1.5～6.0 で安定な有機化合物が適適当であるが、被験物質の水中での安定性かつ完全溶解濃度が得られることが示されるならば、高疎水性物質(log Pow が 6.0 を超える)にも適用可能である。 **適用の難しい物質：** 強疎水性物質、すなわち、logPow> 5 かつ　水に対する溶解度 ～0.01-0.1 mg/L; 界面活性剤; 組成の複雑な混合物; 対水溶解性のきわめて低い物質—餌料投与法の実施も検討[1]。。

[1] 化審法濃縮試験法では、被験物質の水に対する溶解度の適用範囲について明確な記載は無い。

規格名称	試験名称※1	適用範囲等
OECD TG 305(2012) 305-II EU C.13※3	Minimised Aqueous Exposure Fish Test 簡易水暴露法	同上
OECD TG 305(2012) 305-III EU C.13※3	Dietary Exposure Bioaccumulation Fish Test 餌料投与法※4	**適用物質**： 餌料中で安定な物質 水暴露法で困難な物質、例えば、 Log Pow 5 以上、対水溶解性が低い(～0.01 から 0.1 mg/L)、水暴露法の試験水中で不安定なもの、界面活性剤、混合物

※1 試験名称としては便宜的に各行の規格名称列の先頭にある規格の名称を採用している。規格によって名称は異なる。
※2 OECD TG 305A～E は 1996 年に OECD TG 305(1996)として一本化され、さらに、2012 年にさらに改訂されている。
※3 REACH 試験規則((EC) No 440/2008 の 2012.07.23 改正版において、OECD TG 305(1996)がまだ参照されている。
※4 この試験法は被験魚の餌に被験物質を添加するのに対して、先の二つの試験法(水暴露法)が水槽の水に対象化学物質を添加している。この試験のエンドポイントは dietaryBMF(餌料生物蓄積係数)であって、BCF(生物濃縮係数)ではない。また、BMF から BCF への公に定まった換算式はない。

I.7.2.2 分解性の試験法と適用範囲

(1) 大気中での OH ラジカル、オゾン、硝酸ラジカルとの反応

OH ラジカルとの反応の速度定数の測定には、絶対法（absolute rate technique)と相対法(relative rate technique)に大きく分類される方法が使用される。

・絶対法：OH ラジカルと化学物質の反応速度定数を直接的に測定する方法であり、OH ラジカルの発生に Discharge flow (DF)、Pulsed laser photolysis (PLP)、Flash photolysis (FP)、Pulsed radiolysis (PR)等を用い、OH ラジカルを共鳴吸収法（RA)、共鳴蛍光法（RF)、Electron paramagnetic resonance 法（EPR)、質量分析法（MS)等で測定して、反応速度定数を求める。一般に、既報値は FP-RF のように、OH のラジカル発生法と検出法の組み合わせとともに記載される。異なる温度での測定が容易であることが特徴の一つである。

・相対法：OH ラジカルとの反応速度定数が既知である参照物質と被験物質を大型のチャンバーに導入し、種々の方法で OH ラジカルを発生させ、参照物質と被験物質の濃度を分光光度法やガスクロマトグラフ法で測定し、相対的な消失速度から被験物質の OH ラジカルとの反応速度定数を求める。一般に、相対法は、1×10^{-11} cm^3/molecule/sec 以上の比較的速い反応速度定数の物質に有用であり、液体や壁面への吸着があり、FP 法では困難な極性有機物質にも有用である。

絶対法と相対法は 1970 年代以降、反応速度定数の測定に使用されており、OH ラジカルとの反応速度定数の公定測定法ではないが、測定値は一般に信頼できる。

オゾン及び硝酸ラジカルとの反応の速度定数も、OH ラジカルと同様に絶対法と相対法に大別される方法で測定される。

・オゾンとの反応速度定数：増感光分解や熱分解によりオゾンを発生させ、ケミルミネセンスやガスクロマトグラフでオゾンや被験物質を直接測定する絶対法と放電や熱分解によりオゾンを発生させ、ガスクロマトグラフで被験物質と参照物質を測定する相対法で測定された反応速度定数が報告されている。

・硝酸ラジカルとの反応速度定数：電子線により硝酸ラジカルを発生させ、レーザー誘起蛍光で硝酸ラジカルを直接測定する絶対法と熱分解により硝酸ラジカルを発生させ、ガスクロマトグラフで被験物質と参照物質を測定する相対法で測定された反応速度定数が報告されている。

これらの絶対法と相対法も 1970 年代以降、反応速度定数の測定に使用されており、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応速度定数の公定測定法ではないが、測定値は一般に信頼できる。

(2) 生分解性

生分解性の試験法は、易生分解性試験として OECD テストガイドライン 301、310 及び EPA テストガイドライン OPPTS 835.3110、本質的生分解性試験として、302 等がある。

各試験法の概要は、以下に示すとおりである。

図表 I-43　易分解性の試験法

規格名称	試験名称	適用範囲等
OECD TG 301 A US EPA OPPTS 835.3110	DOC Die-Away法	**原理：**溶存有機炭素（DOC)を測定 **適用物質：**難水溶性物質、揮発性物質には不適切。吸着性物質には注意が必要 **試験推奨温度：**22±2℃以内 **パスレベル：**DOC除去率70%
OECD TG 301 B US EPA OPPTS 835.3110	CO_2 Evolution (Modified Sturm Test)法	**原理：**分解に伴う二酸化炭素の生成量を測定 **適用物質：**揮発性物質には不適切 **試験推奨温度：**22±2℃以内 **パスレベル：**ThCO_2の60%
OECD TG 301 C US EPA OPPTS 835.3110	MITI (I)法	**原理：**酸素消費量（BOD)を測定 **適用物質：**揮発性物質には注意が必要 **測定温度：**25±1℃ **パスレベル：**BOD分解度60%
OECD TG 301 D US EPA OPPTS 835.3110	Closed Bottle法	**原理：**溶存酸素濃度(DOC)を測定 **適用物質：**難水溶性物質には注意が必要 **試験推奨温度：**22±2℃以内 **パスレベル：**ThODの60%
OECD TG 301 E US EPA OPPTS 835.3110	Modified OECD Screening法	**原理：**溶存有機炭素（DOC)測定 **適用物質：**難水溶性物質、揮発性物質には不適切。吸着性物質には注意が必要 **試験推奨温度：**22±2℃以内 **パスレベル：**DOC除去率70%
OECD TG 301 F US EPA OPPTS	Manometric Respirometry法	**原理：**酸素消費量（BOD)で生分解を測定 **適用物質：**揮発性物質には注意が必要 **測定温度：**22±2℃

規格名称	試験名称	適用範囲等
835.3110		**パスレベル：**BOD分解度60%
OECD TG 310	Headspace Test法	**原理：**分解に伴う二酸化炭素を試験液中の無機炭素（IC)として分析 **適用物質：**水溶性及び難水溶性物質に適用でき、ヘンリー係数が50 Pa･m³/molまでの揮発性物質にも適用できる **試験推奨温度：**20±1℃以内 **パスレベル：**ThICの60%

1

2 図表 I-44　本質的分解性の試験法

規格名称	試験名称	適用範囲等
OECD TG 302A EPA OPPTS 835.3210	Modified SCAS法	**原理：**溶存有機炭素（DOC)を測定
		適用物質：難水溶性物質（<20 mg-DOC/L)、揮発性物質には不適切
		測定温度：室温
		パスレベル：DOC除去率が20%以上の場合、本質的生分解性の証明とみなす。DOC除去率が70%以上の場合、完全な生分解性があることの証明とみなされる。
OECD TG 302B EPA OPPTS 835.3200	Zahn-Wellens/EMPA法	**原理：**溶存有機炭素（DOC)または化学的酸素要求量(COD)を測定
		適用物質：難水溶性物質（<50 mg-DOC/L)、揮発性物質には不適切
		測定温度：20～25℃
		パスレベル：DOC除去率またはCOD分解度が20%以上となった場合、本質的生分解性の証明とみなす。DOC除去率またはCOD分解度が70%以上の場合、完全な生分解性があることの証明とみなされる。
OECD TG 302C	Modified MITI (II)法	**原理：**酸素消費量（BOD)を測定
		適用物質：揮発性物質には注意が必要
		測定温度：25±2℃
		パスレベル：BOD分解度が20%以上の場合、本質的生分解性の証明とみなす。BOD分解度が70%以上の場合、完全な生分解の証明とみなされる。：

3

4 水中生分解のシミュレーション試験法としては、OECD テストガイドライン 309「Aerobic
5 Mineralisation in Surface Water - Simulation Biodegradation Test」、EPA テストガイドライ
6 ン OPPTS 835.3190「Aerobic Mineralization in Surface Water – Simulation Biodegradation
7 Test」等がある。
8 試験法の概要は、以下に示すとおりである。
9

10 図表 I-45　水中生分解の試験法

規格名称	試験名称	適用範囲等
OECD TG 309 EPA OPPTS 835. 3190	pelagic test：表層水単独で好気的条件下インキュベートするバッチ試験 suspended sediment test ：0.01～1 g/L (乾重量)の懸濁粒子/底質	**原理：**濃度対数値と時間から、直線回帰分析で速度定数と半減期を算出 **適用物質：** ・開放系の綿栓フラスコでの試験は、ヘンリー係数が1 Pa･m³/mol未満の物質に適用できる ・密閉系のフラスコでの試験は、ヘンリー係数が100Pa･m³/mol未満の物質に適用できる

規格名称	試験名称	適用範囲等
	を含む表層水で好気的条件下インキュベートするバッチ試験	**測定温度：**20～25℃、±2℃で管理 **添加回収試験における回収率：**標識化合物使用の場合、90～110%；非標識化合物使用の場合、70～110%が必要 **その他：**分解動力学（速度定数、半減期)を決定するため、試験濃度は水への溶解度未満でなければならないことから、試験濃度が低い場合には、^{14}C標識化合物が使用されることがある

(4) 加水分解

加水分解の試験法としては、OECD テストガイドライン 111「Hydrolysis as a Function of pH」、EPA テストガイドライン OPPTS 835.2120「Hydrolysis」、同 835.2130「Hydrolysis as a Function of pH and Temperature」等がある。

試験法は、予備試験と高次試験の Tier アプローチで基本的に構成されている。試験法の概要は、以下に示すとおりである。

図表 I-46 加水分解の試験法

規格名称	試験名称	適用範囲等
OECD TG 111 EPA OPPTS 835.2120 EPA OPPTS 835.2130	Hydrolysis as a Function of pH*1	**原理：**濃度と時間の回帰分析により、変換曲線の信頼性と半減期等の信頼区間の計算を可能にする **被験物質純度：**95%以上 **適用物質：**高揮発性物質には不適切 **適用濃度範囲：**0.01 M又は飽和水溶解度の1/2未満（難水溶性物質には不適切) **測定温度：**50℃（Tier 1)、25℃を含む10～70℃（Tier 2)。各温度は±0.5℃で管理 **添加回収試験における回収率：**標識化合物使用の場合、90～110%；非標識化合物使用の場合、70～110%が必要

*1 Tier 1 : 予備試験（pH 4.0、7.0、9.0 ; 5 日間); Tier 2 : 高次試験（予備試験で加水分解性が確認された pH ; 90%が加水分解されるか 30 日のどちらか短い期間)

(5) 水中光分解

水中光分解の試験法としては、OECD テストガイドライン 316「Phototransformation of Chemicals in Water - Direct Photolysis」、EPA テストガイドライン OPPTS 835.2210「Direct Photolysis Rate in Water By Sunlight」等がある。

試験法は、予備試験と高次試験の tier アプローチで基本的に構成されている。試験法の概要は、以下に示すとおりである。

図表 I-47　水中光分解の試験法

規格名称	試験名称	適用範囲等
OECD TG 316	Phototransformation of Chemicals in Water – Direct Photolysis	**Tier 1: Theoretical screen 理論的スクリーニング** ・透明な自然水の表層付近での被験物質の理論的最大光分解速度定数を、被験物質の290～800 nmのモル吸光係数と夏季の太陽放射照度から、量子収量を1と仮定して計算する。 ・半減期が30日超の場合、さらなる試験は不要で、30日以下の場合、Tier 2の試験を行う。 ・この方法で算出される直接光分解による半減期は理論上の最小値であるため、半減期が短い場合には、そのまま使用できないことに注意が必要である
		Tier 2: Experimental study 直接光分解速度定数の測定 ・フィルター付キセノンアークランプ光(推奨)か太陽光を30日以上照射し、透明な自然水の表面付近の夏季太陽光下で生じる化学物質の直接光分解速度定数と半減期を測定する。 ・半減期が190日超の場合、さらなる直接光分解試験は不要で、190日以下の場合、初期被験物質量の10%を超える主要変換生成物を同定する（オプション：量子収量の決定)。
EPA OPPTS 835.2210	Direct Photolysis Rate in Water By Sunlight	**Tier 1: UV/visible absorption spectra-estimation of aqueous photolysis maximum rate constant and minimum half-life in sunlight** **紫外/可視吸収スペクトルに基づく太陽光による水中光分解の最大速度定数と最小半減期の推定** ・透明な自然水の表層付近での被験物質の理論的最大光分解速度定数を、被験物質の290～800 nmのモル吸光係数を基にGCSOLAR program (US EPA, CEAM、URL：http://www2.epa.gov/exposure-assessment -models/gcsolar)で最小半減期を季節、緯度、水深等の関数として計算する ・この方法により算出される直接光分解による半減期は理論上の最小値であるため、半減期が短い場合には、そのまま使用できないことに注意が必要である
		Tier 2: Aqueous Photolysis in Sunlight **太陽光による水中光分解** ・太陽光下で、入射光強度を測定するための光量計(*p*-nitroacetophenone/pyridine系)とともに光分解速度定数を測定する。 ・光分解試験は、霜の降りない時期（天気がよければ北半球では、、5月、6月、7月、8月、9月)に実施する

(6) 土壌分解

土壌分解の試験法としては、OECD テストガイドライン 307「Aerobic and Anaerobic Transformation in Soil」、EPA テストガイドライン OPPTS 835.3300「Soil Biodegradation」、同 OPPTS 835.4100「Aerobic Soil Metabolism」等がある。

各試験法の概要は、以下に示すとおりである。

図表 I-48　土壌分解の試験法

規格名称	試験名称	適用範囲等
OECD TG 307 EPA OPPTS 835.4100	Aerobic and Anaerobic Transformation in Soil*1	**原理：**濃度と時間の回帰分析により、分解曲線の信頼性と半減期等の信頼区間を計算する **被験物質純度：**95%以上 **適用物質：**土壌から高揮発性の物質には適用不可 **回収率：**添加回収試験における回収率は、標識化合物使用の場合、90～110%；非標識化合物使用の場合、70～110%が必要 **推奨測定温度：**20±2℃内で管理 **試験期間：**時間とともに土壌微生物の活性の減少が予想されるため、試験は通常、120日を超過するべきではない
OECD TG 304A EPA OPPTS 835.3300	Inherent Boidegradability in Soil*2	**原理：**CO_2発生量で分解度（%)を算出する。 **推奨測定温度：**22±2℃内で管理 **試験期間：**最大64日まで **その他：**3種類の土壌（alfisol, spodosol, entisol)を使用する。

*1 flow-through apparatus、biometer-type flask 等のインキュベーション・システムを使用。
*2 biometer-type フラスコを用いて、14C-標識化合物をインキュベーションする。

なお、OECD テストガイドライン 304A「Inherent Biodegradability in Soil」及び EPA テストガイドライン OPPTS 835.3300「Soil Biodegradation」は、biometer-type フラスコを用いて、^{14}C-標識化合物をインキュベーションする土壌分解試験であるが、分解の動力学的データ（速度定数、半減期)を得ることを主目的としていない。しかしながら、動力学データが得られている場合には採用を検討する。

(7) 底質分解

底質分解の試験法としては、OECD テストガイドライン 308 「Aerobic and Anaerobic Transformation in Aquatic Sediment Systems」等がある。

各試験法の概要は、以下に示すとおりである。

図表 I-49　底質分解の試験法

規格名称	試験名称	適用範囲等
OECD TG 308	Aerobic and Anaerobic Transformation in Aquatic Sediment Systems*1	**原理：**濃度と時間の回帰分析により、分解曲線の信頼性と半減期等の信頼区間を計算する **被験物質純度：**95%以上 **適用物質：**水中から高揮発性の物質には適用不可 **添加回収試験における回収率**：標識化合物使用の場合、90～110%；非標識化合物使用の場合、70～110%が必要 **推奨測定温度：**20±2℃内で管理

*1 flow-through apparatus や biometer-type flask 等のインキュベーション・システムを使用

I.7.3 物理化学的性状・生物蓄積性及び分解性の推計法の概要と適用範囲

I.7.3.1 物理化学的性状・生物蓄積性の推計法の概要と適用範囲

(1) 融点

融点の推計方法には、Stein and Brown (1994)[1]の方法や Gold and Ogle(1969)[2]の方法があり、それに基づいて MPBPVP (EPI Suite[3])は実装されている。OECD (Q)SAR Toolbox[4]でも融点の推計が行われるが MPBPVP(バージョンは不明)と同じものが実装されている[5]。

図表 I-50　融点の推計法

名称		MPBPVP (EPI Suite)[6]
提供者		US EPA
バージョン		Ver.1.43 (2014 年 4 月現在)
推計法の概要	原理	MPBPVP は、沸点、融点、及び、蒸気圧を推計する EPISuite 上に実装された一モジュールである。推計はこの順で行われるが、この 3 つの物性値取得用に用意されているインターフェースは一つであり、別々には提供していない。 **沸点**の推計には対象物質の構造情報を使う。**融点**の場合は、構造情報を使って直接推計する方法と、先の沸点推計値を使って間接的に推計する方法とを併用する。**蒸気圧**の推計には沸点と融点を使う。 **MPBPVP による融点推計の原理** MPBPVP は構造情報のみを使って融点を推計できる。それには二つの推計方法が併用されている：構造情報を使って推計する方法(下記 i)と、沸点を使って推計する方法(下記 ii)をである。後者の推計方法は沸点推計値から融点推計値を得るために使われる。MPBPVP では、(i), (ii)の推計値とともに、この 2 つの推計値の平均値あるいは重み付け平均値を融点提案値(Selected VP)として出力する[7]。 **(i) 構造情報を使って融点を推計する方法 (Adapted Joback Method)** Joback 法(1982)[8]及び Reid et al. (1987)[9]の方法を適用し、拡張した Stein and Brown (1994)[10]の方法による。構造情報として原子団フラグメント(Group Fragment、 原子団の類型)を使用する。

[1] Stein, S.E. and Brown, R.L. (1994). Estimation of normal boiling points from group contributions. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 34: 581-7.
[2] Gold, P. I., & Ogle, G. J. (1969). ESTIMATING THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF LIQUIDS. 4. BOILING FREEZING AND TRIPLE-POINT TEMPERATURES. *Chemical Engineering*, *76*(1), 119.
[3] http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuite.htm
[4] http://toolbox.oasis-lmc.org/?section=overview
[5] Dearden, J. C. and Rotureau, P. et al (2013). *QSPR prediction of physico-chemical properties for REACH.* SAR and QSAR in Environmental Research 24(4):279-318
[6] MPBPWIN とも記載されている。
[7] この平均値あるいは重み付け平均値を行う基準と方法は入手できなかった。
[8] Joback, K. G. (1984). A unified approach to physical property estimation using multivariate statistical techniques (Doctoral dissertation, Massachusetts Institute of Technology).
[9] Reid, R.C., Prausnitz, J.M. and Poling, B.E. (1987). The Properties of Gases and Liquids. Fourth edition. NY: McGraw-Hill, Inc., Chapter 2.
[10] Stein, S.E. and Brown, R.L. (1994). Estimation of normal boiling points from group contributions. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 34: 581-7.

		原子団寄与法に基づき分子を原子団類型に分割し、その類型に固有の係数(Coefficient)[1] g_iと　その類型の物質分子内での出現回数 n_i　の積を総和し、続いて補正用の構造上の特徴類型(補正用構造類型)に対応する補正項 Corr[2]を加えて、融点T_{m}(K)を推計する： $T_{\mathrm{m}} = 122.5 + \sum(n_i \times g_i) + Corr$　。 **(ii) 沸点を介して融点を推計する方法(Gold and Ogle Method の利用)** Gold and Ogle(1969)[3]の方法では、沸点 T_b（K）を使って、次の計算により融点 T_{m}（K）の推計する： $T_{\mathrm{m}} = 0.5839\, T_b$　。 MPBPVP では、この式により構造より推計された沸点を使って、融点を推計する。沸点の入力値を使っての融点推計は行わない。
	インプット	・CAS 番号 ・物質名 ・構造（SMILES、MDL MOL File、又は、構造式の描画） ・沸点（オプション　融点推計には使用されない） ・融点（オプション　融点推計には使用されない） ・温度（記述子ではなく、温度換算のための入力。融点の計算には使用されない）
	アウトプット	**実験値データベース**(EXP_MBVP.DB)にあれば、 **・融点実験値(あれば)** ・SMILES ・CAS ・化学名 ・化学式 ・構造式 ・分子量 **推計** **・融点推計値（Adapted Joback Method）** **・融点推計値（Gold and Ogle Method）** ・平均融点推計値 ・選択融点とその選択方法(eg. Mean Value, Weighted Value)
適用範囲[4]		有機化合物。一般的には、無機化合物、金属、有機金属は適用範囲外[5] 一般的に受け入れらたモデル適用範囲はないが、トレーニングセットの分子量、融点の範囲を超えた化学物質での推計では精度が落ちる。また、トレーニングセットにはない原子団類型を持つ化学物質での推計についても精度が落ちる。 有機化学物質が対象である。 MPBPVP 推定融点はスクリーニング目的でのみ使用することが推奨されている。
推計精度		MPBPVP のトレーニングデータセット及びバリデーションセットは入手できないが、PHYSPROP データベースから EPISuite に取り込まれているテストデータについては公開されている。 物質数 = 10,051, 分子量 = 16.04～1238.19 (平均 MW 224.63), 融点= -171.21℃～349.84℃, 決定係数 r^2 = 0.63, 標準偏差 = 63.9℃, 平均絶対誤差 = 48.6℃

[1] Group fragment と Coefficient の対応は、MPBPVP on-line Guide の付録 F

[2] MPBPVP の on-line Guide の付録 F の第二表の補正用構造類型(Correction Factor, Melting Point Coefficient 及び表注)の記述は MPBPVP の実際の計算を正確に表していないようだ。

[3] Gold, P. I., and G. J. Ogle. (1969). "ESTIMATING THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF LIQUIDS. 4. BOILING FREEZING AND TRIPLE-POINT TEMPERATURES." *Chemical Engineering* 76.1 1969: 119.

[4] 適用範囲(domain)は MPBPVP on-line Guide に記述されている。

[5] On-line EPI Suite™ User's Guide (v4.00 – v4.11) 。EPISuite を構成する SMILESCAS.DB には無機化合物も収載されているがこれについてプログラムを実行すると融点は出力するが、Results 画面に適用範囲外であることを示す警告が出る場合がある(下記出力例参照)。

その他留意事項等	**実験値データベース** 実験値データベースファイル(EXP_MBVP.DB)には 11,347 の化学物質が含まれ、8,948 物質の融点測定値が収載されている(そのソースは主に SRC の PHYSPROP データベース)。Excel ファイルとしても入手可能である[1]。入力した構造によりこのデータベースの検索を行う。推計そのものにはこのデータベースは必要ない。 **融点推計のための手順** **CAS 番号か構造の入力必須**であり、そうしないと MPBPVP は応答しない。構造の入力には、SMILES, MDL MOL File, 直接の描画の 3 つの方法がある。 1. **CAS 番号**を入力すると、実験値データベースに融点測定値がある場合はその測定値を出力する。CAS 番号の収載が無い場合には、"NO CAS Match Found"と表示される[2]。融点測定値がなくても SMILECAS データベースにある場合は SMILES が表示され手順 2 へ行く。 2. 直接入力された、又は、手順 1 で取得された **SMILES** 記述子を使い SMILECAS データベースを捜して見つかった場合には、データベースにある融点測定値を出力する。さらに、その SMILES を使って原子団類型記述子及び補正項用の構造上の特徴類型を示す記述子が特定され、それに対応する係数を取得し、前述の推計原理(i)に基づいて、融点推計値が出力される。 また、沸点の推計原理(1.7.3.1(2)参照)にもとづく沸点推計値も同様に推計される。その沸点推計値を使って、前述の推計原理(ii)(Gold and Ogle 法)に基づいても融点が推計される。 3. **MDL Mol File** をインポートした場合、あるいは、**構造式を描画**した場合には、その構造式から SMILES が導き出されて、手順 2 へ行き、最終的に融点推計値とあれば測定値が出力される。 4. **物質名(部分)**を入力した場合は、名称が類似する等している物質を NAMESEPI データベースから抽出し、候補リストとして表示し、そのリストからユーザが選択した物質の SMILES を取得する。続いて、手順 2 へ行き、最終的に沸点推計値とあれば測定値を出力する。 5. **沸点を入力**しても融点の推計には使用されない。 6. **融点を入力**しても融点の推計には使用されない。 7. **温度を入力**しても融点の推計には使用されない。

出力例 – 適用範囲外の警告例

無機化合物 NaN_3 を CAS 番号 26628-22-8 を MPBPWIN v1.43 インプットして出力される結果。推計数値がでても、推計適用範囲(estimation domain)外であることに注意をしておく必要がある。:

[1] http://esc.syrres.com/interkow/EpiSuiteData.htm MP-BP-VP-TestSets.zip

[2] 有効でない CAS 番号—1 桁目チェック用デジットが合わない—を入力すると、"Incorrect last Digit is CAS"との表示が出る。

```
Experimental Database Structure Match:  no data

SMILES : N([Na])=N#N
CHEM   : Sodium azide
MOL FOR: N3 Na1
MOL WT : 65.01
------------------------- SUMMARY MPBPWIN v1.43 --------------------
  ******************************************************************
  *  WARNING - The entered structure is an INORGANIC Compound.     *
  *    Inorganic compounds were not included in the training data  *
  *     set for the methodology utilized in this program. Therefore, *
  *    inorganic compounds are outside the estimation domain.      *
  ******************************************************************

Boiling Point:  892.47 deg C (Adapted Stein and Brown Method)

Melting Point:  349.84 deg C (Adapted Joback Method)
Melting Point:  349.84 deg C (Gold and Ogle Method)
Mean Melt Pt :  349.84 deg C (Joback; Gold,Ogle Methods)
  Selected MP:  349.84 deg C (Weighted Value)

Vapor Pressure Estimations (25 deg C):
```

(2) 沸点

沸点の推計にはやはり MPBPVP (EPI Suite)他を使うことができる。

図表 I-51 沸点の推計法

名称		MPBPVP (EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver.1.43 (2014 年 4 月現在)
推計法の概要	原理	MPBPVP は、EPISuite に沸点、融点、及び、蒸気圧の推計のために実装されているモジュールであるが、その沸点推計サブモジュールでは沸点の推計を化学物質の構造情報を使って行う。 MPBPVP 沸点推計が基づいている方法は、Joback 法(1982)[1]及び Reid et al. (1987)[2]の方法を適用し拡張した Stein and Brown (1994)[3]の方法である**(Adapted Stein and Brown Method)**。 この推計ではまず構造情報を使う。具体的には、原子団寄与法に基づき物質分子を原子団類型(Group Fragment)に分割し、その原子団類型に対応する係数(Coefficient)[4] g_i と出現回数 n_i の積を総和し、さらにそれを補正するために構造上の特徴類型(補正用構造類型)に基づく補正項 $Corr$ を加え（下記(i)）、続いて、その推計沸点値に基づく補正を行う(下記(ii))。 MPBPVP による沸点推計では、Stein and Brown の原著ではなかった原子団類型を追加している。

[1] Joback, K.G. 1982. A Unified Approach to Physical Property Estimation Using Multivariate Statistical Techniques. Stevens Institute of Technology, submitted to the Dept. of Chem. Eng. for M.S. Degree at the Massachusetts Institute of Technology in June 1984.
[2] Reid, R.C., Prausnitz, J.M. and Poling, B.E. 1987. The Properties of Gases and Liquids. Fourth edition. NY: McGraw-Hill, Inc., Chapter 2.
[3] Stein, S.E. and Brown, R.L. 1994. Estimation of normal boiling points from group contributions. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 34: 581-7.
[4] 原子団類型-係数対応表は on-line Guide 付録 F の第 1 表である。

		(i) 原子団寄与法による沸点推計[1] $$T_b = 198.2 + \sum(n_i \times g_i) + Corr$$ ここで、T_b：沸点(単位 K)、 g_i：原子団類型 i の係数、n_i：原子団類型 i の分子中の出現回数、Corr：補正用構造類型補正項。 原子団類型とそれに対応する係数の対応表、及び、補正用構造特徴類型とそれに対応する係数の対応表、補正用構造類型補正項のための計算式は MPBPVP on-line Guide 付録 F にある。 **(ii) 推計沸点による補正式** 前段(i)での推計値T_bはさらに次の式により補正される。 $$T_{b(補正)} = T_b - 94.84 + 0.5577\,T_b - 0.0007705\,(T_b)^2 \qquad [T_b \leq 700\ \mathrm{K}]$$ $$T_{b(補正)} = T_b + 282.7 - 0.5209\,T_b \qquad [T_b > 700\ \mathrm{K}]$$
	インプット	・CAS 番号 ・物質名 ・構造（SMILES、MDL MOL File、又は、構造式の描画） ・沸点（オプション　沸点推計には使用されない） ・融点（オプション　沸点推計には使用されない） ・温度（記述子ではなく、温度換算のための入力値。沸点の計算には使用されない）
	アウトプット	**実験値データベース**（EXP_MBVP.DB)にあれば、 **・沸点実験値(あれば)** ・SMILES ・CAS ・化学名 ・化学式 ・構造式 ・分子量 **推計** **・沸点推計値**（Adapted Stein and Brown Method）
適用範囲		有機化合物。一般的には、無機化合物、金属、有機金属は適用範囲外[2] ・ 適用範囲の明確な定義はないが、トレーニングセットに用いられた物質の分子量の範囲（不明）を外れる場合や原子団フラグメントに固有の係数が設定されない官能基を有する場合などは、推計精度が低くなる。 ・ 少なくともテストデータの分子量範囲、沸点範囲になければならない。
推計精度		MPBPVP のトレーニングデータセット及びバリデーションセットは入手できないが、PHYSPROP データベースから EPISuite に取り込まれているテストデータについては公開されている。 物質数= 5,890, 分子量: 16.04～959.17(平均 MW 156.19), 沸点= -83.29℃～612.91℃, 決定係数 r^2 = 0.935, 標準偏差 = 22.0℃, 平均絶対誤差 = 14.5℃
その他留意事項等		**実験値データベース** 実験値データベースファイル(EXP_MBVP.DB)には 11,347 の化学物質が含まれ、6,381 物質の沸点測定値が収載されている(そのソースは主に SRC の PHYSPROP データベース)。Excel ファイルとしても入手可能である[3]。入力した構造によりこのデータベースの検索を行う。推計そのものにはこのデータベースは必要ない。

[1] on-line Guidance に記載の式とは少々異なる理由については、後の”推計式補足”項を参照。
[2] On-line EPI Suite™ User's Guide (v4.00 – v4.11) 。融点の適用範囲の脚注も参照。
[3] http://esc.syrres.com/interkow/EpiSuiteData.htm　MP-BP-VP-TestSets.zip

	沸点推計のための手順 **CAS 番号か構造の入力が必須**であり、そうしないと MPBPVP は応答しない。構造の入力には、SMILES, MDL MOL File, 構造式の描画の 3 つの方法がある。 1. **CAS 番号**を入力すると、実験値データベースに沸点測定値がある場合はその測定値を出力する。CAS 番号の収載が無い場合には、"NO CAS Match Found"と表示される[1]。沸点測定値がなくても SMILECAS データベースにある場合は SMILES が取得され手順 2 へ行く。 2. 直接入力された、又は、手順 1 で取得された **SMILES** 記述子を使い SMILECAS データベースを捜して見つかった場合には、データベースにある沸点測定値を出力する。さらに、その SMILES を使って原子団類型の記述子を特定し、それに対応する係数を得て、前述の推計原理に基づいて、沸点推計値を出力する。 3. **MDL Mol File** をインポートした場合、あるいは、**構造式を描画**した場合には、その構造から SMILES を導き出し、手順 2 へ行き、最終的に沸点推計値とあれば測定値を出力する。 4. **物質名(部分)**を入力した場合は、名称が類似する等している物質を NAMESEPI データベースから抽出し、候補リストとして表示し、そのリストからユーザが選択した物質の SMILES を取得する。続いて、手順 2 へ行き、最終的に沸点推計値とあれば測定値を出力する。 5. **沸点を入力**しても沸点の推計には使用されない。 6. **融点を入力**しても沸点の推計には使用されない。 7. **温度を入力**しても沸点の推計には利用されない。

推計式補足

上表の(i)に記載している計算式では、MPBPVP の on-line Manual に記載していない構造特徴類型 Corr 項(correction factors for specific types of compounds)を加えているので、少々説明が必要だろう。

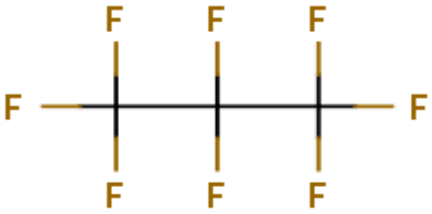
この Corr 項は、on-line Manual の次の記載の下線部を意味する：

"MPBPWIN incorporates additional extensions to Stein and Brown Method such as … and (2) correction factors for specific types of compounds (e.g. amino acids, various aromatic nitrogen rings, and phosphates)."

この項は on-line Manual の付録 F の第二表から構造特徴類型(例えば、=N-NH- (ring)、-F per,aliphat)に基づいて Coef を取得し、それを総和して得ることができる。

事例

MPBPVP V1.43 で Octafluoropropane (CAS RN: 76-19-7)(右図)の事例を計算し、その出力結果の沸点の計算表を見ると Corr 項が分かりやすいかもしれない。



MPBPVP v1.43 での計算結果（下表）

表の Type Corr 行が、構造特徴類型補正項である。付録 F の第二表に Correct Factor 列に記述子として、この行の BOIL DESCRIPTION の列に記載されている-F per. Aliphat がある。さらに、その注 Note 1 に regress 式 Coef = 10.4 (#Fluorides) – 54.5 があり、本事例で計算すると、Coef

[1] 有効でない CAS 番号—1 桁目チェック用デジットが合わない—を入力すると、"Incorrect last Digit is CAS"との表示が出る。

= 10.4 x 8 – 54.5 = 28.7 となり、赤枠で囲った左表データ欄の 3 行目 Value 列の値を得ることができた[1]。

```
Experimental Database Structure Match:
  Name      :  OCTAFLUOROPROPANE
  CAS Num   :  000076-19-7
  Exp MP (deg C):  -147.6
  Exp BP (deg C):  -36.6
  Exp VP (mm Hg):  6.63E+03
         (Pa   ):  8.84E+005
  Exp VP (deg C):  25
  Exp VP ref    :  DAUBERT,TE & DANNER,RP (1989)

SMILES : C(F)(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F
CHEM   :
MOL FOR: C3 F8
MOL WT : 188.02
------------------------- SUMMARY MPBPWIN v1.43 --------------------


Boiling Point:  -36.85 deg C (Adapted Stein and Brown Method)

Melting Point: -137.61 deg C (Adapted Joback Method)
Melting Point: -135.18 deg C (Gold and Ogle Method)
Mean Melt Pt : -136.39 deg C (Joback; Gold,Ogle Methods)
  Selected MP: -136.39 deg C (Mean Value)

Vapor Pressure Estimations (25 deg C):
  (Using BP: -36.60 deg C (exp database))
  (MP not used for liquids)
    VP:  6.01E+003 mm Hg (Antoine Method)
       :  8.02E+005 Pa   (Antoine Method)
    VP:  4.66E+003 mm Hg (Modified Grain Method)
       :  6.22E+005 Pa   (Modified Grain Method)
    VP:  4.79E+003 mm Hg (Mackay Method)
       :  6.39E+005 Pa   (Mackay Method)
  Selected VP:  5.34E+003 mm Hg (Mean of Antoine & Grain methods)
             :  7.12E+005 Pa   (Mean of Antoine & Grain methods)
```

TYPE	NUM	BOIL DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Group	3	>C<	4.50	13.50
Group	8	-F	0.13	1.04
Corr	8	-F per.aliphat	regress	28.70
*		Equation Constant		198.18
RESULT-uncorr		BOILING POINT in deg Kelvin		241.42
RESULT- corr		BOILING POINT in deg Kelvin		236.31
		BOILING POINT in deg C		-36.85

TYPE	NUM	MELT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Group	3	>C<	46.43	139.29
Group	8	-F	-15.78	-126.24
*		Equation Constant		122.50
RESULT		MELTING POINT in deg Kelvin		135.55
		MELTING POINT in deg C		-137.61

(3) 蒸気圧

蒸気圧の推計に MPBPVP (EPI Suite)他を使うことができる。

[1] なお、出力結果にある Result-Corr は温度補正式適用部分である。また、付録 F の記述は一部不十分で実際 MPBPVP で行われている計算を完全に表していないようである。

1 **図表 I-52 蒸気圧の推計法[1]**

名称		MPBWIN (EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver.1.43 (2014 年 4 月現在)
推計法の概要	原理	MPBPVP による蒸気圧の推計は三つの方法に基づいている。 (i) 修正 Grain 法、(ii) Anotoine 法、 (iii) Mackay 法。 MPBPVP はこの 3 つの推計値を計算し出力するが、選択蒸気圧（selected VP）として出力するのは、固体については、修正 Grain 法であり、液体については修正 Grain 法と Antoine 法の平均値である。Mackey 法による出力は選択蒸気圧の選定には考慮されない。 **1. 修正 Grain 法** 標準沸点を使って液体の蒸気圧及び固体の蒸気圧を推計する(下記(i)-1, (i)-2 参照)。MPBPVP に実装されている修正 Grain 法は Lyman et all. (1985)[2]に詳述されている。 **(i)-1 液体の蒸気圧推計** 温度 T(K)における液体の蒸気圧$P_{(l)}$ (atm)は、標準沸点T_b(K)から次の式により推計される。 $$\ln P_{(l)} = \frac{K_F \ln(RT_b)}{\Delta Z_b}\left[1 - \frac{(3-2T_\rho)^m}{T_\rho} - 2m(3-T_\rho)^{m-1}\ln T_\rho\right]$$ ここで、 $T_\rho = T/T_b$ $m = 0.4133 - 0.2575\,T_\rho$ 構造因子 K_F = Lyman et al(1990)[3]の第 14 章記載の値 ガス定数 R = 82.057 cm^3 atm/mol K、 圧縮係数 ΔZ = 0.97 **(i)-2 固体の蒸気圧推計** 温度 T (K)における固体(>25℃において)の蒸気圧$P_{(s)}$ (atm)は、融点T_m (K)と(i)-1 で得られた液体蒸気圧(過冷却液体蒸気圧) $P_{(l)}$ (atm)を使って次のようにして推計する： $$\ln P_{(s)} = \ln P_{(l)} + \ln \Delta P_{(s)}$$ $$\ln \Delta P_{(s)} = 0.6\ln(RT_m)\left[1 - \frac{(3-2T_{\rho m})^m}{T_{\rho m}} - 2m(3-2T_{\rho m})^{m-1}\ln T_{\rho m}\right].$$ $T_{\rho m} = T/T_m$ m = 0.4133 − 0.2575 T_m ガス定数 R = 82.057 cm^3 atm/mol K. ここで、$\Delta P_{(s)}$ は固体蒸気圧と過冷却液体蒸気圧の差(atm)。 **2. Antoine 法** Antoine 法でも、標準沸点を使用して蒸気圧を推計する。修正 Grain 法の液体蒸気圧推計式とは異なる推計式(下記(ii)-1)を用いる。固体の蒸気圧については、MPBPVP では修正 Grain 法と同じ式を用いて過冷却液体蒸気圧から、固体蒸気圧を推計する(下記(ii)-2)。

[1] MPBPVP (Ver.1.43) on-line User Guide の記述に基づく
[2] Lyman, W.J. (1985). In: Environmental Exposure From Chemicals. Volume I., Neely,W.B. and Blau,G.E. (eds), Boca Raton, FL: CRC Press, Inc., Chapter 2.
[3] Warren J. Lyman, William F. Reehl, David H. Rosenblatt (1990). Handbook of chemical property estimation methods：environmental behavior of organic compounds, American Chemical Society

		(ii)-1 液体の蒸気圧推計 Antoine 法では、温度 T (K) における液体の蒸気圧 $P_{(l)}$ (atm)を標準沸点 T_b (K)を使って、次の式により推計する： $\ln P_{(l)} = \frac{\Delta H_b (T_b - C_2)^2}{\Delta Z_b R {T_b}^2}\left[\frac{1}{(T_b - C_2)} - \frac{1}{(T - C_2)}\right]$ $C_2 = -18 + 0.19\,T_b$ (Tomson 則により) $\Delta Z_b = 0.97$ (定数) $\frac{\Delta H_b}{T_b} = \Delta S_b = K_F(8.75 + R \ln T_b)$ ガス定数 $R = 1.987$ (cal/mol K). Fishtine 定数 K_F= Lyman et al(1990)[1]の第 14 章の表 ここで 蒸発熱(蒸発エンタルピー変化) ΔH_b **(ii)-2 固体の蒸気圧推計** 前節(i)-2 と同じ式により、(ii)-1 で推計された液体の蒸気圧を使って、固体の蒸気圧を推計する。 **3. Mackay の方法** Mackay の方法では、温度 T (K) における蒸気圧 P_v (atm)を、標準沸点 T_b (K)と融点 T_m (K)を使って次式により推計する： $\ln P_v = -(4.4 + \ln T_b)\left[1.803\left(\frac{T_b}{T} - 1\right) - 0.803 \ln\left(\frac{T_b}{T}\right)\right] - 6.8\left(\frac{T_m}{T} - 1\right)$ ここで、化学物質が液体の場合には、融点に関する項(第二項)を無視する。
	インプット	・CAS 番号 ・物質名 ・構造 (SMILES、MDL MOL File、構造式の描画) ・沸点 (オプション。 入力すると内部のデータや推計値に優先して沸点推計に使用される) ・融点 (オプション。入力すると内部のデータや推計値に優先して沸点推計に使用される) ・温度 (記述子ではない。入力温度(K)における蒸気圧が出力される。デフォルト : 25℃)
	アウトプット	**実験値データベース** (EXP_MBVP.DB)にあれば、 **・蒸気圧実験値(あれば)** ・SMILES ・CAS ・化学名 ・化学式 ・構造式 ・分子量 **推計** ・インプット温度での三つ推計方法それぞれの**推計蒸気圧**(Antoine 法、Modified Grain Method, Mackay Method) ・インプット温度での推計選択蒸気圧(とその推計方法) ・過冷却液体蒸気圧 (と推計方法)
適用範囲		有機化合物。一般的には、無機化合物、金属、有機金属は適用範囲外[2]。

[1] Lyman, W.J., Reehl, W.F. and Rosenblatt, D.H. 1990. Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Washington, DC: American Chemical Society, Chapter 14

[2] On-line EPI Suite™ User's Guide (v4.00 – v4.11) 。融点の適用範囲の脚注も参照。

	適用範囲の明確な定義はないが、トレーニングセットに用いられた物質の分子量の範囲（不明）を外れる場合や原子団フラグメントに固有の係数が設定されない官能基を有する場合などは、推計精度が低くなる。 少なくともテストデータの分子量範囲、沸点範囲になければならない。 蒸気圧の推計は沸点と融点に基づいて行われ、測定値を用いれば比較的精度よく推計できるが、融点と沸点の推計法の精度はよくないので融点、沸点の推計値を用いて蒸気圧を推定する場合には留意が必要である。融点、沸点について推計値しか得られない場合には蒸気圧の測定の実施が望ましい場合がある。
推計精度	MPBPVP のトレーニングデータセット及びバリデーションセットは入手できないが、PHYSPROP データベースから EPISuite に取り込まれているテストデータについては公開されている。 物質数：3037, 分子量：16.04～943.17（平均 194.22)、蒸気圧：2.1E－4 mm Hg ～ 1.55E+8 mm Hg（平均: 5.1526E+4 mm Hg)[1]、 決定係数 r^2 = 0.914、標準偏差 = 1.057、平均偏差 = 0.644、蒸気圧 1E－6 mm Hg 以下では推計による誤差が大きくなる。 上記の物質 3037 のうち、融点、沸点の測定値のある物質 1642 についての推計精度は：決定係数 r^2 = 0.949、標準偏差 = 0.59、平均偏差 = 0.32 この結果は、融点、沸点測定値を用いたほうが、推計精度が高いことを意味する。
その他留意事項等	**実験値データベース** 実験値データベースファイル(EXP_MBVP.DB)には 11,347 の化学物質が含まれ、そのうち、蒸気圧については 2,857 物質の測定値が収載されている(そのソースは SRC の PHYSPROP データベース)。Excel ファイルとしても入手可能である[2]。入力した構造によりこのデータベースの検索を行う。推計そのものにはこのデータベースは必要ない。 **沸点推計のための手順** **CAS 番号か構造の入力が必須**であり、そうしないと MPBPVP は応答しない。構造の入力には、SMILES, MDL MOL File, 直接の描画の 3 つの方法がある。 1. **CAS 番号**を入力すると、実験値データベースに蒸気圧測定値がある場合はその測定値を出力する。CAS 番号の収載が無い場合には、”NO CAS Match Found”と表示される[3]。蒸気圧測定値がなくても SMILECAS データベースにある場合は SMILES が取得され、引き続き推計を実施する(手順 2 参照)。 2. 直接入力された、又は、手順 1 で取得された **SMILES** 記述子を使い SMILECAS データベースを捜して見つかった場合には、データベースにある蒸気圧測定値を出力する。同時に、融点と沸点の推計サブモジュールにより融点と沸点の推計が実施される(1.7.3.1(1), (2)参照)。入力値がある場合はそれを使って、ない場合は、推計値を使って上記**推計原理**により蒸気圧の推計値が出力される。 3. **MDL Mol File** をインポートした場合、あるいは、**構造を描画**した場合には、その構造から SMILES が導き出されて、手順 2 へ行き、最終的に蒸気圧推計値とあれば測定値が出力される。 4. **物質名(部分)**を入力した場合は、名称が類似する等している物質を NAMESEPI データベースから抽出し、候補リストとして表示し、そのリストからユーザが選択した物質の SMILES を取得する。続いて、手順 2 へ行き、最終的に蒸気圧推計値とあれば測定値を出力する。

[1] http://esc.syrres.com/interkow/EpiSuiteData.htm MP-BP-VP-TestSets.zip
[2] MP-BP-VP-TestSets.zip
[3] 有効でない CAS 番号—1 桁目チェック用デジットが合わない—を入力すると、”Incorrect last Digit is CAS”との表示が出る。

	5. **沸点を入力**すると入力値を使って蒸気圧を推計し、沸点推計値は使われない。 6. **融点を入力**すると、上記蒸気圧の推計原理に基づいて、融点推計値を使わずに融点入力値を使って蒸気圧を推計する。 7. **温度を入力**すると(デフォルト 25℃)、入力温度における蒸気圧を出力する。 **バージョンについて** MPBPVP はバージョンアップとともに推計式が改善されているのでバージョンによって違う推計値を与えることになる。できるだけ新しいバージョンを使用すること、また、使用したバージョンを記載し、適用範囲についても使用したバージョンの on-line user guide で確認する必要がある。

先の融点及び沸点の節で記載したのと同じく、OECD の発表によれば無機・金属・有機金属化合物、分子量が 1000 を超える物質、反応性・加水分解性物質、1・2 族の陽イオン塩化合物以外の物質について本推計が使用できる。

(4) 水に対する溶解度

水に対する溶解度の推計には WSKOWWIN(EPISuite)又は WATERNT (EPI Suite)を使うことができる。

図表 I-53 水に対する溶解度の WSKOWWIN による推計法[1]

名称		WSKOWWIN(EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver. 1.42 (2014 年 4 月現在)
推計法の概要	原理	WSKOWWIN は、水に対する溶解度(水に対する溶解度)を推計するための EPISuite 上に実装された単独のモジュールである。 WSKOWWIN の水に対する溶解度の推計は、 (i) 構造情報のみ使って推計する方法と、 (ii) 構造情報と融点測定値とを使って推計する方法とが 実装されている。 **推計は Pow を介して推計**される。Pow は同じ EPISuite の Pow を推計する KOWWIN モジュールにより構造情報だけから推計可能なので、結局構造情報だけを使って(あるいは構造情報に基づく融点推計値も使って)水に対する溶解度を推計するできるわけである。 ***Pow からの推計式*** 以下では、Pow を取得後の計算部分についてのみ説明する。 (i) 構造情報だけを使う方法 $\log S = 0.796 - 0.854 \log Pow - 0.00728\, MW + \sum Ci$ ··· [1] (ii)融点測定値も使う方法 $\log S = 0.693 - 0.96 \log Pow - 0.0092\,(Tm - 25) - 0.00314\, MW + \sum Ci$ ··· [2] ここで、S: 水に対する溶解度(mol/L)、Pow: オクタノール・水分配係数、Tm: 融点(℃)、MW:分子量、Ci は、構造のタイプに基づく補正係数(on-line WSKOWWIN User's Guide の付録 F)。式[2]の融点補正項は固体のみに適用され、$Tm \leq 25$の時右辺第 3 項は 0。 融点測定値が入力されたときには式[2]を使用し、そうでないときには式[1]を使用する。
	インプット	・CAS ・構造 (SMILES、MDL MOL File、又は、構造式の描画)

[1] WSKOWWIN (Ver.1.42) on-line User Guide の記述に基づく

		・物質名 ・融点（オプション） ・LogPow（オプション）
	アウトプット	**実験値データベース**(EXPWSOL.DB)にあれば、 **・水に対する溶解度実験値** ・SMILES ・CAS ・化学名 ・化学式 ・構造式 ・分子量 **推計** ・推計 Log Pow（KOWWIN による） ・あれば、Log Pow 実験値 ・水に対する溶解度推計に用いた Log Pow **・水に対する溶解度推計値（及び、推計式、補正項の値）**
適用範囲		有機化合物。一般的には、無機化合物、金属、有機金属は適用範囲外[1]。 一般的に受け入れらたモデル適用範囲はないが、トレーニングセットの分子量、水に対する溶解度、LogPow の範囲を超えた化学物質での推計では精度が落ちる。また、トレーニングセットにはない官能基や構造的な特徴を持つ化学物質での推計についても精度が落ちる。 ・分子量: 27.03 ～ 627.62 ・水に対する溶解度: 4 x 10^{-7} mg/L ～ 完全に溶解 ・Log Pow: -3.89 ～ 8.27
推計精度		<トレーニングセット> 物質数 = 1450, 決定係数 r^2 = 0.970, 標準偏差 = 0.409, 平均偏差 = 0.313 (決定係数 r^2 = 0.934, 標準偏差 = 0.585, 平均偏差 = 0.442) ( )内は式 2 による推計の場合、つまり、融点を使わず分子量だけを使って推計した場合。 <バリデーションセット> 物質数 = 817, 決定係数 r^2 = 0.902, 標準偏差 = 0.615, 平均偏差 = 0.480 (物質数= 85, 決定係数 r^2 = 0.865, 標準偏差= 0.961, 平均偏差 = 0.714) ( )内は式 2 による推計の場合、つまり、融点を使わず分子量だけを使って推計した場合。
その他留意事項等		**実験値データベース** 実験値データベースファイル(EXPWSOL.DB)には水に対する溶解度測定値を含む 6,200 の化学物質が含まれている。実験値データベースは推計そのものには不要である。Pow に関する実験値データベース(EXPKOW.DB)による Pow 実験値も取得される。実験値データベースを削除すれば推計に実験値データベースは使用しない。実験値データベースは WATERNT と共通である。 **WSKOWWIN による水に対する溶解度の推計手順** **CAS 番号か構造の入力が必須**であり、そうしないとアプリケーションは応答しない。構造の入力には、SMILES, MDL MOL File, 直接の描画の 3 つの方法がある。 1. **CAS 番号**を入力すると、実験値データベースに水に対する溶解度測定値がある場合はその測定値を出力する。CAS 番号の収載が無い場合には、”NO CAS Match Found”と表示される[2]。水に対する溶解度測定値がなくても SMILECAS データベースにある場合は SMILES が表示され手順 2 へ行く。 2. 直接入力された、又は、手順 1 で取得された **SMILES** 記述子を使い SMILECAS データベースを捜して見つかった場合には、データベースにある水に対する溶解度測定値を出力する。同時に、兄弟サブルーチンである KOWWIN によって SMILES 情報を使って Log Pow の推計を実施する。Log Pow の入力値があればそれを使って、

[1] On-line EPI Suite™ User's Guide (v4.00 – v4.11) 。融点の適用範囲の脚注も参照。
[2] 有効でない CAS 番号—1 桁目チェック用デジットが合わない—を入力すると、”Incorrect last Digit is CAS”との表示が出る。

	なければ Log Pow 推計値を使って**推計原理**に従って推計を実施し、水に対する溶解度の推計値と、あれば測定値を出力する。 3. **MDL Mol File** をインポートした場合、あるいは、**構造を描画**した場合には、その構造から SMILES が導き出されて、手順 2 へ行き、最終的に水に対する溶解度推計値とあれば測定値が出力される。 4. **物質名(部分)**を入力した場合は、名称が類似する等している物質を NAMESEPI データベースから抽出し、候補リストとして表示し、そのリストからユーザが選択した物質の SMILES を取得する。続いて、手順 2 へ行き、最終的に水に対する溶解度の推計値と、あれば測定値を出力する。 5. **融点を入力**すると、前節 ***Pow からの推計式***で記載した推計式[2]を使って、**推計原理**に基づいて、水に対する溶解度推計値とあれば測定値を出力する。 6. **Log Pow を入力**すると、KOWWIN による Log Pow 推計値を使わずに、入力値を使って、**推計原理**に基づいて、水に対する溶解度推計値とあれば測定値を出力する。 **融点について** 精度の高い数値がある場合にのみ融点入力を行う。

1

2 図表 I-54 水に対する溶解度の WATERNT による推計法[1]

名称		WATERNT (EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver. 1.01 (2014 年 4 月現在)
推計法の概要	原理	水に対する溶解度の推計を、構造情報のみを使って行う。構造情報としては、原子団類型とその他の構造上の特徴類型(補正用構造類型)とを記述子として使う。 WATERNT による水に対する溶解度の推計は、Maylen and Howard (1995)[2]記載の原子団フラグメント法に基づいている。この方法では構造を原子又はより大きな原子団の断片に分割して得られる原子団類型に対応する係数 f_i とその原子団類型の出現回数 n_i の積の総和と、補正用に化学物質の種類や構造上の特徴の類型(補正用構造類型)に対応する係数 c_j とその補正用構造類型の出現回数 n_j の積の総和から下記のようにして水に対する溶解度 S (mol/L)を推計する： $$\log S = \sum(f_i \times n_i) + \sum(c_j \times n_j) + 0.24922$$ ここで、 $\sum(f_i \times n_i)$ = 原子団構造類型の係数 f_i とその原子団構造類型の対象分子での出現回数 n_i の積の総和、 $\sum(c_j \times n_j)$ =補正用構造類型に対応する補正係数c_jとその類型の出現回数 n_j の積の総和、 fi や cj = WATERNT on-line User Guide の付録 D の表の値。 ***類推による推計*** EVA 法 WATERNT には Experimental Value Adjusted Method と呼ぶ方法で、水に対する溶解度が既知の化合物から類似の化合物の水に対する溶解度を類推する方法がオプションとして用意されている。
	インプット	入力インターフェースには BaseInput モードと類推による推計に対応する ExpValAdj モードがある。 ***BaseInput モード*** ・CAS 番号

[1] WATERNT (Ver.1.01) on-line User Guide の記述に基づく

[2] Meylan, W. M., & Howard, P. H. (1995). Atom/fragment contribution method for estimating octanol–water partition coefficients. *Journal of pharmaceutical sciences*, *84*(1), 83-92.

		・構造（SMILES、MDL MOL File、又は、構造式の描画） ・物質名 ***ExpValAdj モード*** 類推を行いたい物質の ・CAS 番号 ・構造（SMILES、MDL MOL File、又は、構造式の描画） ・物質名 類推の基になる物質の ・CAS 番号 ・構造（SMILES） ・物質名 ・水に対する溶解度
	アウトプット	***BaseInput モード*** **実験値データベース**(EXPWSOL.DB)にあれば ・水に対する溶解度実験値 ・SMILES ・化学名 ・化学式 ・構造式 ・分子量 **推計** ・水に対する溶解度推計値 ***ExpValAdj モード*** ・水に対する溶解度推計値(類推値)
適用範囲		有機化学物質が対象である。 適用範囲の明確な定義はないが、トレーニングセットに用いられた物質の分子量の範囲（不明）を外れる場合や固有の係数が設定されていない原子/原子団フラグメントを有する物質などは、推計精度が低くなる。 少なくともテストデータの分子量範囲、水に対する溶解度の範囲になければならない。
推計精度		<トレーニングセット> 物質数 = 1128, 決定係数 r^2 = 0.940, 標準偏差 = 0.537, 平均偏差 = 0.355, 分子量： 30.30～627.62(平均 187.73), 水に対する溶解度= 0.0000004～混和性 mg/L <バリデーションセット> 物質数 = 4,636, 決定係数 r^2 = 0.815, 標準偏差 = 1.045, 平均偏差 = 0.796, 分子量 = 16.043～1,356.40((平均 227.52), 水に対する溶解度= 0.000000044～6660000 mg/L
その他留意事項等		**実験値データベース** 実験値データベースファイル(EXPWSOL.DB)には水に対する溶解度測定値を含む6,200 の化学物質が含まれている。実験値データベースは WSKOWWIN と共通である。実験値データベースファイルを削除すると実験値の取得が行われないが、推計そのものには影響がない。 **WATERNT による水に対する溶解度の推計手順** B*aseInput モード* 1. **CAS 番号**を入力すると、実験値データベースに水に対する溶解度測定値がある場合はその測定値を出力する。CAS 番号の収載が無い場合には、”NO CAS Match Found”と表示される[1]。水に対する溶解度測定値がなくても SMILECAS データベースにある場合は SMILES が取得され、手順 2 へ行く。 2. 直接入力された、又は、手順 1 で取得された **SMILES** 記述子を使い SMILECAS データベースを捜して見つかった場合には、データベースにある水に対する溶解度測定値を出力する。一方、**推計原理**に従って SMILES を使って推計を実施し、水に対す

[1] 有効でない CAS 番号—1 桁目チェック用デジットが合わない—を入力すると、”Incorrect last Digit is CAS”との表示が出る。

	る溶解度推計値とあれば測定値を出力する。 3. **MDL Mol File** をインポートした場合、あるいは、**構造を描画**した場合には、その構造から SMILES が導き出されて、手順 2 へ行き、最終的に水に対する溶解度推計値とあれば測定値が出力される。 4. **物質名(部分)**を入力した場合は、名称が類似する等している物質を NAMESEPI データベースから抽出し、候補リストとして表示し、そのリストからユーザが選択した物質の SMILES を取得する。続いて、手順 2 へ行き、最終的に水に対する溶解度推計値とあれば測定値を出力する。 ***ExpValAdj モード*** 類推を行いたい物質に関する欄で物質構造を CAS、SMILES、又は、構造式描画で特定し、類推の基とする物質の欄で同様の方法で物質構造を特定したうえで、類推基物質の既知の水に対する溶解度を入力することによって計算が可能になる。 (ア) **CAS 番号**を入力すると、実験値データベースに水に対する溶解度測定値がある場合はその測定値を出力する。CAS 番号の収載が無い場合には、”NO CAS Match Found”と表示される[1]。水に対する溶解度測定値がなくても SMILECAS データベースにある場合は SMILES を得る。 (イ) 又は、直接 **SMILES** を入力するか、**MDL Mol File をインポート**、若しくは、**構造を描画**して SMILES 情報を得る。 (ウ) 又は、**物質名(部分)**を入力して、NAMESCAS データベース中にある物質の名称が類似している等する物質のリストを表示する。そのリストからユーザが選択した物質に対応する SMILES を取得する。 (エ) 1～3 の手順を類推したい物質、類推の基になる物質について行い、加えて、類推の基になる物質について、精度の高い**水溶解度を入力**する。 計算を実行すると、類推の基になる物質と類推したい物質の両方を原子団類型と補正用構造特徴類型に分解し、両物質の類型差分について、原子団類型に対応する係数と補正用構造特徴類型に対応する係数とを、対応表から取得し、それぞれの係数とその類型の類型差分中での出現回数との積の総和を、類推基物質の水に対する溶解度に加えることによって、類推したい物質の水溶解度を推計する。 **バージョンについて** WATERNT はバージョンアップとともに推計式が改善されているのでバージョンによって違う推計値を与えることになる。できるだけ新しいバージョンを使用すること、また、使用したバージョンを記載し、適用範囲についても使用したバージョンの on-line user guide で確認する必要がある。 **その他** 固有の係数は on-line MPBPVP Help の付録 F に記載されている。 WATERNT と WSKOWWIN の推計式を導き出すのに使われたデータセットは同じものである。

(5) 1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)

logPow の推計には、KOWWIN (EPI Suite)等が用いられる。KOWWIN は、一般に、ほとんどの既存の Kow 推定法よりも推計精度が良いとされている[2]。

[1] 有効でない CAS 番号—1 桁目チェック用デジットが合わない—を入力すると、”Incorrect last Digit is CAS”との表示が出る。

[2] US EPA Science Advisory Board (SAB) Review of the Estimation Programs Interface Suite (EPI SuiteTM). (PDF, 60 pp., 484,315 bytes), EPA-SAB-07-011 (2007).

1 **図表 I-55 logPow の推計法**

名称		KOWWIN (EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver. 1.68（2014 年 4 月現在）
推計法の概要	原理	化学物質の構造をフラグメント（原子やより大きな官能基）に分割し、各フラグメントの係数値を合計して logPow を推定する。フラグメント係数[1]は、2447 の logPow 測定値に対して 2 種類の重回帰分析を行って導出されている。 推計に用いる数式は以下のとおりである。 $\log Pow = \Sigma(f_i \cdot n_i) + \Sigma(c_j \cdot n_j) + 0.229$ ここで、f_i：フラグメント係数、n_i：フラグメントの出現数、c_j：補正係数（推計値と測定値の差を最小にするための係数）、n_j：補正係数が適用される回数である。 フラグメント係数は、1120 物質を用いて導出され、補正係数は 2447 物質を用いて導出されている。
	インプット	以下の 3 項目のいずれかを入力する。 ・CAS 番号 ・構造（SMILES、MDL MOL File、構造式の描画） ・物質名
	アウトプット	・logPow
適用範囲		有機化学物質に適用。 <u>推計対象化学物質の範囲</u> 推定式導出用データセットの分子量:最小 MW = 18.02, 最大 MW = 719.92, 平均 MW = 199.98 検証用データセットの分子量：最小 MW = 27.03, 最大 MW = 991.15, 平均 MW = 258.98
推計精度		<トレーニングセット> <u>フラグメント係数導出用データセット</u> 物質数 = 2,447, 決定係数 r^2 = 0.982, 標準偏差 = 0.217, 絶対偏差 = 0.159 残差推定誤差：0.10 以下= 45.0%, 0.20 以下= 72.5%, 0.40 以下= 92.4%, 0.50 以下= 96.4%, 0.60 以下= 98.2% <u>検証用データセット</u> 物質数 = 10,946, 決定係数 r^2 = 0.943, 標準偏差 = 0.479, 絶対偏差 = 0.356 残差推定誤差：0.20 以下= 39.6%, 0.40 以下= 66.0%, 0.50 以下= 75.6%, 0.60 以下= 82.5%, 0.80 以下= 91.6% 1.00 以下= 95.6%, 1.20 以下= 97.7%, 1.50 以下= 99.1% 検証用データセットには、推定式導出用の物質でのフラグメント数や分子量の最大値を超える 372 物質が含まれる。これらの物質に対する推定精度は以下のとおりである。 <フラグメント出現数が最大値を超える場合> 物質数= 372, 決定係数 r^2 = 0.939, 標準偏差 = 0.731, 絶対偏差 = 0.564 <分子量が最大値を超える場合> 物質数 = 103, 決定係数 r^2 = 0.879, 標準偏差 = 0.815, 絶対偏差 = 0.619 <フラグメント出現数と分子量がともに最大値を超える場合> 物質数 = 75, 決定係数 r^2 = 0.879, 標準偏差 = 0.90, 絶対偏差 = 0.706
その他留意事項等		**実験値データベース** 実験値データベースファイル(EXPKOW.DB)には約 13,700 の測定値が含まれている。 **推計のための手順** 1. **CAS 番号**を入力すると、実験値データベースに測定値がある場合はその測定値を出力する。CAS 番号の収載が無い場合には、”NO CAS Match Found”と表示される[2]。測定値がなくても SMILECAS データベースにある場合は SMILES が取得さ

[1] KOWWIN (Ver.1.68) on-line User Guide の Appendix D にフラグメント係数と補正係数の詳細が記載されている。

[2] 有効でない CAS 番号—1 桁目チェック用デジットが合わない—を入力すると、”Incorrect last

	れ、手順 2 へ行く。 **2.** 直接入力された、又は、手順 1 で取得された **SMILES** 記述子を使い SMILECAS データベースを捜して見つかった場合には、データベースにある測定値を出力する。一方、**推計原理**に従って SMILES を使って推計を実施し、推計値とあれば測定値を出力する。 **3. MDL Mol File** をインポートした場合、あるいは、**構造を描画**した場合には、その構造から SMILES が導き出されて、手順 2 へ行き、最終的に推計値とあれば測定値が出力される。 **4. 物質名(部分)**を入力した場合は、名称が類似する等している物質を NAMESEPI データベースから抽出し、候補リストとして表示し、そのリストからユーザが選択した物質の SMILES を取得する。続いて、手順 2 へ行き、最終的に推計値とあれば測定値を出力する。 **バージョンについて** 推計には、最新バージョンを使用すること、また、使用したバージョンを記載し、適用範囲についても使用したバージョンの on-line user guide で確認する必要がある。

(6) 有機炭素補正土壌吸着係数 Koc

有機炭素補正土壌吸着係数の推計には KOCWIN (EPI Suite)を使うことができる。

図表 I-56 Koc の推計法[1]

名称		KOCWIN (EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver. 2.00 (2014 年 4 月現在)
推計法の概要	原理	KOCWIN は Koc を構造情報のみを使って推計できる。その方法には二つある： (i) 構造情報のみを使って直接 Koc を推計する方法(MCI 法)と、 (ii) Pow を介して推計する方法である。 この二つの方法での計算結果を別々に出力する。 **(i) MCI 法** 構造情報のみを使って推計する。 (i)-1 非極性化合物については、構造情報として一次分子結合指数(Molecular Connectivity Index: MCI)[2]のみを使って次の式により推計する： $$\log Koc = 0.5213\,MCI + 0.60$$ (i)-2 一方、極性化合物では、構造情報として MCI とその他の構造上の特徴に基づく補正係数(補正用構造類型補正係数)を使って次式のように推計する： $$\log Koc = 0.5213MCI + 0.60 + \sum P_f N$$ ここで、$\sum P_f N$ は補正用の構造上の特徴類型(補正用構造類型)に対応する補正係数 P_f と対象化合物でのその構造的特徴類型の出現回数 N の積の総和である。この補正用

Digit is CAS”との表示が出る。

[1] KOCWIN(Ver. 2.00)の on-line User Guide の記述に基づく

[2] MCI による予測方法とその使用方法については Meylan, W., P.H. Howard and R.S. Boethling, "Molecular Topology/Fragment Contribution Method for Predicting Soil Sorption Coefficients", *Environ. Sci. Technol.* 26: 1560-7 (1992). にある。また、Mackay, D., & Boethling, R. S. (Eds.). (2000). Handbook of property estimation methods for chemicals: environmental health sciences. CRC press. には具体的な計算事例が記載されている。

		構造類型とそれに対応する係数は KOCWIN on-line user Guide の付録 D の一つ目の表で見ることができる。 **(ii) Pow を介して推計する方法** この方法では(i)と異なり、**推計は Pow を介して推計**される。Pow は同じ EPISuite の Pow を推計する KOWWIN モジュールにより構造情報だけから推計可能なので、結局構造情報だけを使って Koc を推計できるわけである。Pow のユーザ入力値を使うこともできる。 以下では Pow から Koc を推計する原理について説明する。 ***Pow から Koc を推計する原理*** (ii)-1 **非極性有機化学物質**では、入力された Pow があればそれを使って、なければ、KOWWIN で推計された Pow を使って、次式により Koc が推計される： $$\log Koc = 0.8679 \log Pow - 0.0004$$ (ii)-2 **極性有機化学物質**では、Pow を使い、さらに、(i)のケースと同じようにして補正用構造類型に対応する補正係数とその補正用構造類型の出現回数を使って、次の式により推計する。 $$\log Koc = 0.55313 \log Pow - 0.9251 + \sum P_f N$$ この補正用構造類型とそれに対応する補正係数は KOCWIN on-line user Guide の付録 D の二つ目の表で見ることができる。
	インプット	・ CAS 番号 ・ 構造（SMILES、MDL MOL File、又は、構造式の描画） ・ 物質名 ・ Log Pow (オプション)
	アウトプット	**実験値データベース**(EXPKOC.DB)にあれば、 ・ **Koc 実験値** ・ SMILES ・ 化学名 ・ 化学式 ・ 構造式 ・ 分子量 **推計** ・ **MCI 法による推計 Koc** ・ **LogPow を介した推計 Koc** ・ LogPow を介した推計に使用した Log Pow の値
適用範囲		有機化合物。一般的には、無機化合物、金属、有機金属は適用範囲外[1]。 一般的に受け入れられた適用範囲の定義はないが、次のような場合推計精度が落ちる。 ・トレーニングセットの分子量範囲から外れている。 ・トレーニングセットに含まれ推計式の基になった原子団や構造フラグメント以外の構造を持つ化合物。
推計精度		**MCI 法** <トレーニングセット> <u>非極性有機化合物</u> 物質数 = 69, 決定係数 r^2 = 0.967, 標準偏差 = 0.247, 平均偏差 = 0.199 <u>極性有機化合物</u> 物質数 = 447, 決定係数 r^2 = 0.900, 標準偏差 = 0.340, 平均偏差 = 0.273 <u>総括</u> 決定係数 r^2 = 0.916, 標準偏差 = 0.330, 平均偏差 = 0.263

[1] On-line EPI Suite™ User's Guide (v4.00 – v4.11) 。融点の適用範囲の脚注も参照。

	<バリデーションセット> 物質数 = 158, 決定係数 r^2 = 0.850, 標準偏差 = 0.583, 平均偏差 = 0.459 **Pow を介して(場合により構造情報を使って)推計する方法** <トレーニングセット> 非極性有機化合物 物質数 = 68, 決定係数 r^2 = 0.877, 標準偏差 = 0.478, 平均偏差 = 0.371 極性有機化合物 物質数 = 447, 決定係数(r^2) = 0.855, 標準偏差 = 0.396, 平均偏差 = 0.307 総括 決定係数 r^2 = 0.86, 標準偏差 = 0.429, 平均偏差 = 0.321 <バリデーションセット> 物質数 = 150, 決定係数 r^2 = 0.778, 標準偏差 = 0.679, 平均偏差 = 0.494
その他留意事項等	**実験値データベース** 実験値データベース(EXPKOC.DB)に関する詳細な情報は入手できなかった。 **Koc 推計のための手順** **CAS 番号か構造の入力が必須**であり、そうしないとアプリケーションは応答しない。構造の入力には、SMILES, MDL MOL File, 直接の描画の 3 つの方法がある。 1. **CAS 番号**を入力すると、実験値データベースに Koc 測定値がある場合はその測定値を出力する。CAS 番号の収載が無い場合には、”NO CAS Match Found”と表示される[1]。Koc 測定値がなくても SMILECAS データベースにある場合は SMILES が表示され手順 2 へ行く。 2. 直接入力された、又は、手順 1 で取得された **SMILES** 記述子を使い SMILECAS データベースを捜して見つかった場合には、データベースにある SMILES を出力する。さらに、その SMILES、前述の推計原理に基づいて、Koc 推計値と、あれば測定値とが出力される。あわせて KOWWIN により Pow の測定値があれば測定値をなければ推定値を出力する。この Pow が前述の推計原理で使用される。 3. **MDL Mol File** をインポートした場合、あるいは、**構造を描画**した場合には、その構造から SMILES が導き出されて、手順 2 へ行き、最終的に Koc 推計値と、あれば測定値とが出力される。 4. **物質名(部分)**を入力した場合は、名称が類似する等している物質を NAMESEPI データベースから抽出し、候補リストとして表示し、そのリストからユーザが選択した物質の SMILES を取得する。続いて、手順 2 へ行き、最終的に Koc 推計値とあれば測定値とを出力する。 5. **Log Pow** を入力した場合は、KOWWIN による推計 Log Pow の代わりに入力値が使われる。 **バージョンについて** KOCWIN はバージョンアップとともに推計式が改善されているのでバージョンによって違う推計値を与えることになる。できるだけ新しいバージョンを使用すること、また、使用したバージョンを記載し、適用範囲についても使用したバージョンの on-line user guide で確認する必要がある。 **その他** KOCWIN では KOC 測定データについて多くが事前の選別から漏れて推計式が導かれている。KOC 測定データについてはばらつきが多く、信頼性が十分でないデータがあることが知られているので推計式導出に使われたデータの解析が必要だろう。

1

[1] 有効でない CAS 番号—1 桁目チェック用デジットが合わない—を入力すると、”Incorrect last Digit is CAS”との表示が出る。

(7) ヘンリー係数

ヘンリー係数の推計には、対水溶解度が 1 mol/L 未満のとき、蒸気圧と水に対する溶解度の精度が高ければこの二つの値の比として推計する。それ以外では、HENNRYWIN (EPI Suite)他を使うことができる。

図表 I-57 ヘンリー係数の推計法(蒸気圧と対水溶解度比)

名称		蒸気圧と対水溶解度比
提供者		
バージョン		
推計法の概要	原理	$$\boldsymbol{Henry} = \frac{\boldsymbol{VP}}{\left(\frac{\boldsymbol{WS}}{\boldsymbol{MW}}\right)}$$ 記号 / 説明 / 単位 Henry / ヘンリー係数 / [Pa・m³/mol] VP / 蒸気圧 / [Pa] WS / 対水溶解度 / [mg/L] MW / 分子量 / ―
適用範囲		対水溶解度 ＜1 mol/L
推計精度		HENRYWIN の on-line guidance によれば、ヘンリー係数を直接測定値と測定蒸気圧/測定対水溶解度比とを比較(120 物質)した結果、前者に対する後者の決定係数は 0.997、絶対平均誤差、平均偏差は Log 値でそれぞれ 0.05、0.07 であり、蒸気圧/溶解度比によるヘンリー係数の値は測定値の精度が高ければ非常に正確な値を得ることができるとしている。
その他留意事項等		ヘンリー係数は無次元量としても取り扱われる。後の評価で使う環境中運命のためのモデルで必要ならば次の式により換算する。 $$\boldsymbol{Henry_{dimensionless}} = \frac{Henry}{R \cdot T}$$ ガス定数: $R = 8.314\ \mathrm{Pa \cdot m3/(mole \cdot K)}$ 温度: T [K] コンピュータアプリケーションとしては提供されていない。

図表 I-58 ヘンリー係数の推計法(HENRYWIN[1])

名称		HENRYWIN (EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver. 3.20 (2014 年 4 月現在)
推計法の概	原理	HENRYWIN ではヘンリー係数を**構造情報**のみを使用して推計できる。二つの方法により推計を行い、推計値を別々に出力する。 (i) 構造情報として**原子団類型**を使う原子団寄与法 (Hine and Mookerjee 1975)[2]に基づく方法(Group Est)と、 (ii) 構造情報として**結合類型**を使い、その**補正**に**構造上の特徴の類型(補正用構造類**

[1] HENRYWIN(Ver. 3.20)の on-line User Guide の記述と実際の操作の結果に基づく
[2] Hine, J., & Mookerjee, P. K. (1975). Structural effects on rates and equilibriums. XIX. Intrinsic hydrophilic character of organic compounds. Correlations in terms of structural contributions. *The Journal of Organic Chemistry*, *40*(3), 292-298.

要		型)を使う結合寄与法 (Hine and Mookerjee 1995)の方法を Meylan and Howard (1991)[1]が拡張した方法)に基づく方法(Bond Est)である。 **(i) 原子団寄与法 (Group Est)** ヘンリー係数$Henry$ (無名数)の推計のために次の式が使われる： $$Henry = \frac{1}{10^{\sum((G_i)(N_i))}}$$ ここで、G_i: 原子団類型 i の原子団寄与値、N_i: その原子団類型 i の対象化学物質分子内での出現回数、原子団類型と原子団寄与値の対応記載した原子団類型―原子団寄与値対応表は HENRYWIN on-line user guide の付録 F で見ることができる[2]。 **(ii) 結合寄与法 (Bond Est)** HENRYWIN では、Meylan and Howard (1991)の結合寄与法に基づいて、 ヘンリー係数$Henry$ (無名数)の推計のために次の式が使われる： $$Henry = \frac{1}{10^{\sum\left((B_i)(N_i)+(C_j)(M_j)\right)}}$$ ここで、B_i: **結合類型**に対して付与されている結合寄与値、N_i: その結合の対象化合物分子内での出現回数、C_j: 特定の**補正用構造類型**を持つ化学物質群に対する**補正値**、M_j: その補正用構造類型の出現回数。 結合類型と結合寄与値の対応及び補正用構造類型と補正値の対応を記載した結合類型表又は補正用構造特徴類型―寄与値又は補正値対応表は、HENLYWIN on-line user guide の付録 D～E にある[3]。
	インプット	入力画面には BaseInput モードと類推による推計に対応する ExpValAdj モードがある。 ***BaseInput モード*** ・CAS 番号 ・構造 (SMILES、MDL MOL File、又は、構造の描画) ・物質名 ***ExpValAdj モード*** このモードでは、入力した類推の基になる物質の情報を使って、類推を行いたい物質のヘンリー係数を類推する： 類推を行いたい物質の ・CAS 番号 ・構造 (SMILES、MDL MOL File、又は、構造の描画) ・物質名 類推の基になる物質の ・CAS 番号 ・構造 (SMILES) ・物質名 ・ヘンリー係数

[1] Meylan, W. M., & Howard, P. H. (1991). Bond contribution method for estimating Henry's law constants. *Environmental toxicology and chemistry*, *10*(10), 1283-1293.

[2] HENRYWIN の on-line guidance では、$\sum((G_i)(N_i))$を LWAPC(log Water-Air Partition Constant)と呼んでいる。これはヘンリー係数(無名数)の逆数の対数にあたる。

[3] HENRYWIN の on-line guidance では、$\sum\left((B_i)(N_i) + (C_j)(M_j)\right)$を LWAPC(log Water-Air Partition Constant)と呼んでいる。

	アウトプット	***BaseInput モード*** **実験値データベース(EXHEN.DB)にあれば、** **・ヘンリー係数実験値** ・SMILES ・化学名 ・化学式 ・分子量 ・構造式 **推計** **ヘンリー係数推計値** "Incomplete" 構造類型又は結合類型と寄与値又は補正値の対応表にない構造類型や結合型が対象化合物に含まれる場合は"Incompete"の警告が出る。また、計算表には"Missing Value for …"のメッセージが現れて、どの構造類型、結合類型に対する寄与値又は補正値が与えられていないかを把握できる。 ***ExpValAdj モード*** **・ヘンリー係数推計値(類推値)**
適用範囲		有機化合物。一般的には、無機化合物、金属、有機金属は適用範囲外[1]。 **結合寄与法の適用範囲** トレーニングセットの分子量範囲に収まっていること。 精査時には、トレーニングセットにより示される結合類型や補正用構造類型以外の構造類型もつ化学物質では、参照すべき結合寄与値や補正値がないため推計値の精度に問題が起こることを考慮する必要がある。 そのような結合類型や補正用構造類型を持つ化学物質については、"Incomplete"、及び、"Missing Value for …"の出力がでる。 **原子団寄与法の適用範囲** トレーニングセットの分子量範囲に収まっていること。 精査時には、トレーニングセットにより示される原子団構造類型及び補正用構造類型以外の構造類型を持つ化学物質では、参照すべき原子団寄与値や補正値がないため推計値の精度に問題が起こることを考慮する必要がある。 そのような原子団構造類型や補正用構造類型を持つ化学物質については、"Incomplete"、及び、"Missing Value for …"の出力がでる。
推計精度		**結合寄与法と原子団寄与法の精度の違い** 特定の構造上の特徴による補正が行われる化学物質群については結合寄与法による推計の精度が比較的高い。しかしながらそうではない化学物質群については原子団寄与法のほうが精度的に優れている。とはいうものの、原子団寄与法では特定の構造を持つ化合物、例えば、hexachlorocyclohexanes では精度が悪いことが知られている。 HENRYWIN のマニュアルでは、違いが大きい場合、二つの推計値の平均をとった方がよい場合があるとしている。 ヘンリー係数が 3.0×10^{-7} atm・m^3/mole より小さい場合は、水からの揮発はないものとしている。 **結合寄与法の推計精度** <トレーニングセット> 物質数: 442, 決定係数 $r^2 = 0.977$, 標準偏差 = 0.400, 平均偏差= 0.249 ; ヘンリー係数の対数値の逆数で回帰している。 トレーニングセットの物質にはヘンリー係数を測定した 120 物質と、それ以外に測定蒸気圧/水に対する測定溶解度比として算出した物質が含まれる。 前者に対する後者の決定係数は 0.997、絶対平均誤差、平均偏差は Log 値でそれぞれ 0.05、0.07 であり、蒸気圧/溶解度比によるヘンリー係数の値は測定値の精度が高ければ非常に正確な値を得ることができる。

[1] On-line EPI Suite™ User's Guide (v4.00 – v4.11) 。融点の適用範囲の脚注も参照。

	<バリデーションセット> 物質数= 1376, 決定係数 r^2 = 0.79, 標準偏差= 1.54, 平均偏差= 1.00；ヘンリー係数の逆数の対数値で回帰している。 統計的な誤差はヘンリー係数の逆数の対数値が 5.0 以上(ヘンリー係数無名数で $1x10^{-5}$ 以下、$2.45x10^{-7}$ at･m^3/mole)で見られる。 10^{-8} at･mm^3/mole をカットオフ値とすると、1077 化合物が残り、その標準偏差は 1.31、平均偏差は 0.42 となる。 **原子団寄与法の推計精度** <トレーニングセット> 物質数= 318, 決定係数 r^2 = 0.956, 標準偏差 = 0.397, 平均偏差= 0.223；ヘンリー係数の対数値の逆数で回帰している。 <バリデーションセット> 物質数= 1031, 決定係数 r^2 = 0.85, 標準偏差 = 1.05, 平均偏差= 0.85；ヘンリー係数の逆数の対数値で回帰している。 なお、バリデーションテストでは原子団類型表にない原子団(“Missing fragments”)を持つ 798 化合物についてはバリデーションからあらかじめ除外している。
その他留意事項等	**実験値データベース** 実験値データベース(EXHEN.DB)は 1650 のヘンリー係数データを持っている。そのデータには蒸気圧と溶解度から算出されたデータと試験により決定されたヘンリー係数がある。実験値データベースを削除すれば、実験値の取得のみが停止し、推計そのものには影響を与えない。 ヘンリー係数の実験値はインターネット上でデータベースとして公開されており、Excel ファイルとしても取得できる[1]。 **HENRYWIN によるヘンリー係数の推計手順** ***BaseInput モード*** 1. **CAS 番号**を入力すると、実験値データベースにヘンリー係数測定値がある場合はその測定値を出力する。CAS 番号の収載が無い場合には、”NO CAS Match Found”と表示される[2]。ヘンリー係数測定値がなくても SMILECAS データベースにある場合は SMILES が表示され手順 2 へ行く。 2. 直接入力された、又は、手順 1 で取得された **SMILES** 記述子を使い SMILECAS データベースを捜して見つかった場合には、データベースにある SMILES を出力する。得られた **SMILES** を使って**推計原理**で説明した方法で推計する。**原子団寄与法では**、その SMILES を使って原子団類型に分解し、その出現回数を数える。原子団類型に対応する原子団寄与値を対応表[3]で捜し出し、(i)に記載した方法でヘンリー係数を推計する。 **結合寄与法では**、やはり SMILES を使って結合類型を取り出し、その出現回数を数える。結合類型に対応する結合寄与値を対応表で捜し出し[4]、さらに、構造情報から補正用構造類型(結合寄与値による推計を補正する構造上の特徴を記述したもの)を取り出し、その補正用構造類型に対応する補正値を対応表で捜し出す[5]。捜し出した結合寄与値と補正値、及び、それぞれの出現回数を使って、(ii)の推計式に基づいてヘンリー係数を推計する。 3. **MDL Mol File** をインポートした場合、あるいは、**構造を描画**した場合には、その構造情報から SMILES が導き出されて、手順 2 へ行き、最終的にヘンリー係数推計値とあれば測定値を出力する。 4. **物質名(部分)**を入力した場合は、名称が類似等している物質を NAMESEPI データベースから抽出し、候補リストとして表示し、そのリストからユーザが選択した物質の SMILES を取得する。続いて、手順 2 へ行き、最終的にヘンリー係数推計値

[1] http://esc.syrres.com/interkow/EpiSuiteData.htm HENRYWIN_Data_EPI.zip
[2] 有効でない CAS 番号—1 桁目チェック用デジットが合わない—を入力すると、”Incorrect last Digit is CAS”との表示が出る。
[3] 原子団類型—係数対応表は HENRYWIN の on-line User Guide 付録 F 表 F-1～3。
[4] 結合類型—係数対応表は HENRYWIN の on-line User Guide 付録 D 表 D-1～3。
[5] 結合補正用構造特徴類型—係数対応表は HENRYWIN の on line User Guide 付録 E 表 E-1～3。

	とあれば測定値を出力する。 *ExpValAdj モード* ヘンリー係数を類推により得たい物質(類推目的物質)に関する欄で物質構造を CAS、SMILES、又は、構造式描画で特定し、類推の基にする物質の欄でも同様の方法で物質構造を特定し、既知のヘンリー係数を入力することによって計算が可能になる。 1. 類推目的物質の **CAS 番号**を入力すると、実験値データベースに融点測定値がある場合はその測定値を出力する。CAS 番号の収載が無い場合には、”NO CAS Match Found”と表示される[1]。融点測定値がなくても SMILECAS データベースにある場合は SMILES が表示され手順 2 へ行く。 2. 又は、直接ユーザが **SMILES** を入力するか、**MDL Mol File をインポート**、若しくは、**構造を描画**して SMILES を得る。又は、**物質名(部分)**を入力すると、EPISuite の持つ NAMESEPI データベース中にある物質の名称の類似した物質のリストがあらわれ、そのリストからユーザが選択した物質の SMILES を得る。 3. 上記手順 1,2 を類推の基になる物質についても実施し(構造の指定は SMILES による方法だけ)、さらに、類推の基になる物質の精度の高い**ヘンリー係数を入力**する。 4. 計算を実行すると、類推の基になる物質(類推基物質)と類推目的物質の両方を結合構造類型と補正用構造特徴類型に基づいて分解し、両物質の組み合わせ差分となる類型群を取得する。差分の類型群についてそれぞれの類型に対応する結合寄与値と補正値(対応表[2,3]から取得)とそれぞれの出現回数の総和を、類推基物質のヘンリー係数に加算することによって類推目的物質のヘンリー係数を得ることができる。 “Incomplete”、“Missing Value for …”の出力が出た場合には、それを補う情報を作成するなどが考えられる。 HENRYWIN に実装されている両推計方法での推計値が 1.0 x 10^{-12} atm・m^3/mole 以下の非現実的に低い値となることがある。3.0 x 10^{-7} atm・m^3/mole 以下では水から実質的に非揮発性と見なされる。 HENRYWIN はバージョンアップとともに推計式が改善されているのでバージョンによって違う推計値を与えることになる。できるだけ新しいバージョンを使用すること、また、使用したバージョンを記載し、適用範囲についても使用したバージョンの on-line user guide で確認する必要がある。

(8) 酸解離定数 pKa

酸解離定数（pKa)の推計には、ACD/pKa (ACD Labs)、SPARC (ARChem)等を用いる。一般に、ACD/pKa は、SPARC に比べて推計精度は良いとされている。

図表 I-59　pKa の推計法（ACD/pKa）

名称		ACD/pKa
提供者		ACD Labs
バージョン		Version 2014（2014 年 6 月現在）
推計	原理	ACD/pKa は化学物質の構造からイオン強度ゼロ、25℃の水中での有機化学物質の pKa を物質中の全解離性基に対して推計するツールで、Classic 法と GALAS（Global,

[1] 有効でない CAS 番号—1 桁目チェック用デジットが合わない—を入力すると、”Incorrect last Digit is CAS”との表示が出る。
[2] 結合類型—係数対応表は HENRYWIN の on-line User Guide 付録 D 表 D-1～3。
[3] 結合補正用構造特徴類型—係数対応表は HENRYWIN の on line User Guide 付録 E 表 E-1～3。

法の概要		Adjusted Locally According to Similarity)法の 2 つの推計アルゴリズムが採用されている[1]。 Classic 法は、広く用いられている pKa 推計アルゴリズムを採用し、複数の Hammet 型の式と置換基定数（σ）を pKa の推計に用いる。また、互変異性平衡、共有結合性の水和、α、β－不飽和系での共鳴を pKa 推計時に考慮する。 GALAS 法は、GALAS アルゴリズムを用い、非荷電分子のイオン化中心に対する微視的な pKa 値の推定、微視的 pKa 値の補正、イオン化の隣接イオン化中心への影響等の多段階の計算を行う。推計には、4,600 のイオン化中心のデータベース、約 500 の各種相互作用定数及び 4 種の相互作用計算式を使用し、異なる pH 条件下の分子のプロトン化をシミュレーションシミュレーションする。
	インプット	・構造（SMILES、構造式の描画）
	アウトプット	・酸解離定数 pKa
適用範囲		解離性の基を有する有機化学物質に適用。
推計精度		<トレーニングセット> Classic 法の初期トレーニングセットには、15,932 物質、30,000 件以上の pKa 値と実測された 3,000 以上の置換基定数が含まれる。 GALAS 法の初期トレーニングセットには、17,593 物質、20,000 件以上のイオン化中心が含まれる。
その他留意事項等		一般に、酸と両性イオン（zwitterion)に比べて、塩基の pKa 値の推計は、精度の面で劣る傾向があり、さらに、芳香族のオルト位に分子内水素結合を形成するイオン性の基がある場合、誤差を生じる傾向のあることが示されている[2]。推計の信頼性を向上させるため、ACD と SPARC の両方の推計値を組み合わせて、推計の不確実性を低減させることが推奨されている[1]。

1

2 **図表 I-60　pKa の推計法（SPARC）**

名称		SPARC
提供者		ARChem
バージョン		Web-based calculator（2014 年 6 月現在）
推計法の概要	原理	SPARC の pKa モデルでは、推計対象物質の分子構造を反応中心と摂動子と呼ばれる機能単位に分割し、水中での pKa を推計する。 反応中心は、イオン化し、溶媒にプロトンを供与する可能性を有する最小サブユニットである。 摂動子は、反応中心に付加される分子構造であり、共鳴、静電及び溶媒和の影響を考慮する摂動モデルにより反応中心の pKa を補正し、対象物質の pKa を推計する。
	インプット	・構造（SMILES）
	アウトプット	・酸解離定数 pKa
適用範囲		解離性の基を有する有機化学物質に適用。
推計精度		トレーニングセットには、2,500 の有機分子が含まれ、4,338 の pKa について検証されている。 個々の分子に対して SPARC で推計された値の正確な標準偏差を得ることは難しいが、SPARC は一般に、±0.25 pKa 単位（ヒドロキシ酸及び脂肪族の酸と塩基）、±0.36（他の酸やアミン等のほとんど有機物）、±0.41（=N 及び環状の N、複雑な構造）で pKa を計算することができる。イオン性の基が 6 を超える分子の場合、SPARC の誤差は±0.65 pKa 単位と推定されている[3]。

[1] ACD Labs ホームページ（URL: http://www.acdlabs.com/products/percepta/predictors/pka/）
[2] ECETOC, Environmental Exposure Assessment of Ionisable Organic Compounds, Technical Report No. 123, December 2013..
[3] US EPA, Verification and Validation of the SPARC Model, Office of Research and

その他留意事項等	一般に、酸と両性イオン (zwitterion)に比べて、塩基の pKa 値の推計は、精度の面で劣る傾向があり、さらに、芳香族のオルト位に分子内水素結合を形成するイオン性の基がある場合、誤差を生じる傾向のあることが示されている [1]。推計の信頼性を向上させるため、ACD と SPARC の両方の推計値を組み合わせて、推計の不確実性を低減させることが推奨されている [1]。

(9) 生物濃縮係数

NITE カテゴリーアプローチ及び EPA の BCFBAF (EPISuite)他が使用できる。

図表 I-61 生物濃縮係数の推計法 (NITE カテゴリーアプローチ)

名称		NITE カテゴリーアプローチ[1]
提供者		NITE
バージョン		
推計法の概要	原理	NITE カテゴリーアプローチでは、主に①LogPow と logBCF との相関関係、②Read-across（類推）、③経験側の 3 つの手法を用いて、LogPowBCF を推計する。 まず化学物質の次のような特性によって分類する： (i) カテゴリーI から V： 生体膜への取り込みが受動拡散によるもの (ii) カテゴリーVI：生体膜への取り込みが受動拡散でないもの (iii) カテゴリーVII：水中で容易に分解するもの。 (i) に分類された化学物質は、生体内で反応性の高いもの(カテゴリーIV、 V)を除いて、次の 4 つに細分類される： I 生体膜の透過において、ファンデルワールス力が主要な分子間相互作用のとして働くもの II-A 生体膜の透過において、双極子―双極子相互作用が主要な分子間相互作用のとして働くもの（水素結合アクセプターを持つもの） II-B 生体膜の透過において、水素結合相互作用が主要な分子間相互作用のとして働くもの（水素結合ドナーも持つもの） III 生体膜の透過において、イオン性相互作用が主要な分子間相互作用のとして働くもの **カテゴリーI に属する物質** ①LogPow と logBCF との相関関係を用いた BCF の推計 log Pow を使って次式(i), (ii)を使って BCF を推計する。 (i) カテゴリーI の物質では、信頼性の高い LogPow 測定値が得られる場合には、次の式により logBCF を推計する： $\log BCF = 1.05\ \log Pow(\text{測定値}) - 1.71$ $\log BCF = 1.05\ \log Pow(\text{実測値}) - 1.71$ (ii) BCF の推計に使える LogPow 測定値が得られない場合には、LogPow 推計値に基づいて、次式により logBCF を推計する： $\log BCF = 1.03\ \log Pow(\text{推計値}) - 1.48$ ここで、NITE (2009)[2] は、$\log Pow(\text{推計値})$ は、KOWWIN ver.1.67 により得たとしている。 ②Read-across（類推）を用いた BCF の推計

Development, EPA/600/R-03/033 March 2003

[1] NITE 平成 21 年 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 http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/category_approach.html

[2] NITE(2009) 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[単純受動拡散カテゴリー] http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/category_approach.html

		カテゴリーI に属する BCF が既知の類似物質(分子構造、物理化学的性状が類似な物質)の logBCF(測定値)の平均値を算出し、BCF を推計する。 **カテゴリーII―A に属する物質** ①LogPow と logBCF との相関関係を用いた BCF の推計 上記(i)式は有効である。一方、(ii)式は誤差が大きい可能性があるので、類推(read-across)を併用する。 ②Read-across（類推）を用いた BCF の推計 カテゴリーII-A に属する BCF が既知の類似物質(分子構造、物理化学的性状が類似な物質)の logBCF(測定値)の平均値を算出し、BCF を推計する。 **カテゴリーII-B に属する物質** ①LogPow と logBCF との相関関係を用いた BCF の定性的評価 logPow（測定値または推計値）から想定される logBCF の最大値 logBCFmax を算出(NITE(2011) P.15 scheme 2 のフロー)。 ②Read-across（類推）を用いた BCF の推計 (a) 類推による logBCF 推計（NITE(2011) 5.3 に記載の類推法（read-across)による)。類推を行うための類縁物質の選択は、分子構造の類似性(NITE(2011) 5.3.1(A))と、官能基並びに Dmax、logPow、水中におけるイオン存在割合の 5 つとに基づいて実施する(NITE(2011) 5.3.1)。 例えば、カテゴリーII-B に属し、logPow < 6 の物質では、logBCF 推計式(上記(i), (ii))の 95%信頼限界の上限値(logBCFmax)より低い値であると定性的に推計する。logBCF 値を定量的に推計するためには、類推手法を適用する。カテゴリーII-B 物質の類推手法については、NITE(2011）[1]の 5.3 にその事例が記載されている。 **カテゴリーIII に属する物質** ①Read-across（類推）を用いた BCF の推計 (b) 類推による logBCF 推計(NITE(2012a) [2]5.3 に記載の類推法（read-across)による)。 ②経験側を用いた BCF の定性的評価 過去に化審法で届出された新規化学物質及び既存化学物質のデータから、アニオン性物質及びカチオン性物質に該当する物質は logBCF < 3 と定性的に予測する。 **カテゴリーV に属する物質** ①LogPow と logBCF との相関関係を用いた BCF の定性的評価 logPow（測定値または推計値）から想定される logBCF の最大値（logBCFmax）を算出。 (a) ②Read-across（類推）を用いた BCF の推計 (b) 類推による logBCF 推計 (NITE(2012b) [3] 5.3 に記載の類推法(read-across)による)。 以上の記載は、NITE より 5 巻に分けて公開されたカテゴリーアプローチ報告書(2009～2011）の記載に基づく。

[1] NITE (2011). 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 [水素結合ドナーによる水素結合性相互作用が受動拡散に影響を与える物質群].
http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/category_approach.html

[2] NITE(2012a) 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[イオン性官能基によるイオン性相互作用が受動拡散に影響を与える化学物質群]
http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/category_approach.html

[3] NITE(2012b) 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[生体内での代謝によって排出され易く生体内に濃縮されにくいことが知られている化学物質群]
http://www.safe.nite.go.jp/kasinn/qsar/category_approach.html

	インプット	・ LogPow 測定値又は推定値 ・ カテゴリーの選択(生体膜取り込みモード、水中での分解性、膜透過に働く力、Dmax, 官能基、水中でのイオン存在割合)
	アウトプット	logBCF (推計式又は類推の併用による)
適用範囲		**式(i), (ii)による予測適用範囲外** カテゴリーI に属する物質で、実測値を使う場合は logPow 実測値≧6、若しくは、推計値を使う場合は logPow 推計値≧6、又は、 Dmax ≧ 11Å (logPow 計算値は KOWWIN v1.67 の値。Dmax は Database Manage 4.3 ver.1.3 の値)。
推計精度		<トレーニングセット> 化審法既存点検による濃縮度試験結果が公表されている全 783 物質(平成 20 年 8 月 12 日まで)の中で、以下の条件を満たす 371 物質。 1) 有機低分子量かつ濃縮度試験が化合物単体で行われているもの 2) 対水溶解度が明確に測定されており、対水溶解度より低い濃度で濃縮度試験が行われたもの 3) 測定濃度が検出限界以下でなく、BCF 値が明確に測定されており、対象物質のみの濃縮性が測定されているもの <u>logPow 実測値に基づく BCF の推計(i)</u> 物質数=48, 決定係数 $r^2 = 0.905$ <u>logPow 推計値に基づく BCF の推計(ii)</u> 物質数=54, 決定係数 $r^2 = 0.890$
その他留意事項等		コンピュータアプリケーションとしては提供されていない。 類縁物質が少ない場合、「予想できない」と判断すべき場合がある(NITE(2012b) 7)。

1

2 **図表 I-62 生物濃縮係数の推計法[1] (BCFBAF)**

名称		BCFBAF (EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver. 3.01 (2014 年 4 月現在)
推計法の概要	原理	BCFBAF は、logPow と構造情報を用いて BCF を推計する。非イオン性とイオン性の化合物では BCF の推計原理が異なり、非イオン性の化合物は logPow と化合物の部分構造を記述子とした logBCF の推計式を用いて推計を行う (Meylan et al. (1997)[2])。また、イオン性の化合物は、logPow の値によって 5 つのカテゴリーに分類され、分類されたカテゴリー毎の固有の値が BCF 推計値がとして用いられる。これらの推計には、KOWWIN から計算される logPow 推計値が用いられるが、logPow 測定値を用いて BCF の推計を行うことも可能である。 logPow は、同じ EPISuite に格納されている KOWWIN モジュールにより構造情報だけから推計可能なので、結局 BCFBAF は構造情報だけを使って log BCF を推計できるわけである(log Pow ≧ 1.0 の非イオン性化合物では化合物の部分構造による補正も行われる)。 **非イオン性の化合物** log Pow ≧ 1 では、logPow 及び化合物の部分構造に基づく補正項を用いて、log BCF の推計を行う。具体的には、次のような推計式に基づいて推計する： log $Pow < 1.0$： $\log BCF = 0.5$ log Pow 1.0～7.0： $\log BCF = 0.6598\, log\ Pow - 0.333 + \sum Ci$ log $Pow > 7.0$： $\log BCF = -0.49\, log\ Pow - 0.70 + \sum Ci$

[1] HENRYWIN(Ver. 3.20)の on-line User Guide の記述と実際の操作の結果に基づく
[2] Meylan, W. M., Howard, P. H., Boethling, R. S., Aronson, D., Printup, H., & Gouchie, S. (1999). Improved method for estimating bioconcentration/bioaccumulation factor from octanol/water partition coefficient. Environmental toxicology and chemistry, 18(4), 664-672.

		ここで、Ciは化合物の部分構造に基づく補正項で、BCFBAF の HELP ファイルの付録 E で確認することができる。 **イオン性の化合物** log Pow の値によって、次のような推計式に基づいて推計する： log Pow < 5.0：　log BCF = 0.50 log Pow = 5.0～6.0：　log BCF = 1.00 log Pow = 6.0～8.0：　log BCF = 1.75 log Pow < 8.0～9.0：　log BCF = 1.00 log Pow > 9.0：　log BCF = 0.50
	インプット	・ CAS 番号 ・ 構造（SMILES、MDL MOL File、又は、構造式の描画） ・ 物質名 ・ Log Pow (オプション)
	アウトプット	実験値データベース(EXBCFKM.DB)にあれば、 ・ **LogBCF 実験値** ・ CAS ・ SMILES ・ 化学名 ・ 化学式 ・ 分子量 ・ 構造式 **推計** ・ 推計 Log Pow (KOWWIN による) ・ **BCF 推計値**（BCF 推計に用いた LogPow, 推計に使用した推計式）
適用範囲		有機化合物。一般的には、無機化合物、金属、有機金属は適用範囲外[1]。 広く受け入れられている適用範囲はないが次の点のような場合には精度が落ちることに考慮が払われるべき： ・ トレーニングセットの分子量及び log Pow の範囲外 ・ トレーニングセットで使われた構造上特徴以外の構造に基づく補正因子が与えられていない。 トレーニングセットの範囲は次の通り： 最小分子量: 68.08 最大分子量: 991.80 (イオン性化合物)、959.17 (非イオン性化合物) 平均分子量: 244.00 最小 logPow: -6.50 (イオン性化合物)、-1.37 (非イオン性化合物) 最大 logPow: 11.26
推計精度		<トレーニングセット> 物質数 = 527, 決定係数 r^2 = 0.833, 標準偏差 = 0.502, 平均偏差 = 0.382 (非イオン性化合物) <バリデーションセット> 物質数 = 158, 決定係数 r^2 = 0.82, 標準偏差 = 0.59, 平均偏差 = 0.46 (非イオン性化合物)
その他留意事項等		**BCFBAF による Pow 推計のための手順** 構造の入力には、CAS 番号、SMILES、MDL MOL File、構造式の描画、物質名の５つの方法がある。 1. **CAS 番号**を入力すると、SMILESCAS Database に該当する CAS 番号の構造情報がある場合には、その SMILES と物質名を出力する。CAS 番号の収載が無い場合には、”NO CAS Match Found”と表示される[2]。SMILES と物質名が表示された場合には、手順 2 へ行く。

[1] On-line EPI Suite™ User's Guide (v4.00 – v4.11) 。融点の適用範囲の脚注も参照。
[2] 有効でない CAS 番号—1 桁目チェック用デジットが合わない—を入力すると、”Incorrect last Digit is CAS”との表示が出る。

	2. 直接入力された、又は、手順 1 で取得された **SMILES** を使って、前述の推計原理に基づいて化合物の部分構造に基づく補正項と logPow 推計値を算出され、log BCF 推計値とあれば測定値が出力される。併せて、KOWWIN により Log Pow の推計値と、測定値があれば測定値も出力される。Log Pow 測定値がある場合には、その測定値このを使って、log BCF 推計値が出力される。 3. **MDL Mol File** をインポートした場合、あるいは、**構造を描画**した場合には、その構造から SMILES が導き出されて、手順 2 へ行き、最終的に log BCF 推計値とあれば測定値が出力される。 4. **物質名(部分)**を入力した場合は、名称が類似等している物質を NAMESEPI データベースから抽出し、候補リストとして表示し、そのリストからユーザが選択した物質の SMILES を取得する。続いて、手順 2 へ行き、最終的に log BCF 推計値と、あれば測定値を出力する。 5. **Log Pow** を入力した場合は、KOWWIN による推計 Log Pow の代わりに入力値が使われる。 **バージョンについて** BCFBAF はバージョンアップとともに推計式が改善されているのでバージョンによって違う推計値を与えることになる。できるだけ新しいバージョンを使用すること、また、使用したバージョンを記載し、適用範囲についても使用したバージョンの on-line user guide などで確認する必要がある。 **その他** BCFBAF では、BCF の他に、BAF、kM も併せて出力される[1]。

1

2 **図表 I-63 生物濃縮係数の推計法(BCF base-line モデル)**

名称		BCF base-line モデル（OASIS Catalogic）
提供者		Bourgas Prof Assen Zlatarov 大学
バージョン		Ver.2.07 (2014 年 6 月現在)
推計法の概要	原理	BCF base-line モデルは、Bourgas Prof Assen Zlatarov 大学の Laboratory of Mathematical Chemistry と P&G が共同開発を行い、Bourgas Prof Assen Zlatarov 大学で市販されている。 本モデルは、化学物質の疎水性(logPow)と logBCF の相関関係（基準曲線）に基づいて、logPow から想定される生物濃縮係数の最大値（$logBCF_{max}$）を推計する。この logBCFmax の値に、化学物質の分子サイズ、イオン化、生体内代謝などの生物濃縮を弱める緩和因子（Mitigation factor）を補正して、logBCF を推計する。 生体内代謝は、ラットの肝臓における代謝の実測データを基に作成された代謝シミュレータを用いて予測される。この代謝シミュレータは、505 の素反応と反応確率で構成されており、入力した化学物質に対する生体内代謝経路とその代謝物、残留量などを予測することが可能である。また、分子サイズとイオン化はバイオアベイラビリティを決定する最重要因子として利用される。分子サイズは、分子のフレキシビリティーと立体配座を考慮した量子化学計算（半経験的分子軌道法）の計算結果から推計され、化学物質の分子サイズの増大に伴う細胞壁通過能の記述には平滑関数が用いられる。 $$logBCF_{MAX} = log\left(\frac{{K_{OW}}^n}{(aK_{OW}+1)^{2n}} + F_W\right)$$

[1] BAF, kM を後の環境中運命モデルの評価にどのように使うかは検討課題である。

		$$logBCF = log\left(BCF_{max}\prod_i F_i\right)$$ ここで、F_i は緩和因子で、以下のとおりである。 分子サイズ： $$F_{MS} = 1 - \frac{1}{1+e^{-C(D_{Max\,ave}-D_{Max\,thr})}}$$ イオン化： $$F_{Acids} = 1 - b_{Acids}\cdot Ac$$ $$F_{Phenols} = 1 - b_{Phenols}\cdot Ph$$ $$F_{Ionization} = \left(\frac{D}{P}\right)^b$$ 代謝： $$F_M = 1 - P$$ ここで、$D_{Max\,aver}$ はエネルギー的に安定な配座異性体の D_{Max}（分子の最大半径）の平均、$D_{Max\,thr}$ は細胞壁通過の際の分子サイズの閾値、Ac はスルホン酸/カルボン酸/リン酸及びそのアルカリ塩の場合は 1 でその他は 0 の変数、Ph はハロゲン原子が 4 つのフェノールの場合は 1 でその他は 0 の変数、P（イオン化）は分配係数、D は電離を考慮した分配係数、P（代謝）は親物質が魚類の肝臓で代謝される確率を表す。
	インプット	・構造（SMILES、構造式の描画、MOL file 等）
	アウトプット	**・logBCF 推計値** ・logBCFmax 推計値 ・代謝経路 ・Log Pow 推計値（KOWWIN による） ・代謝の速度定数の推計値（Km） ・生体内での半減期（Km を用いて推計）
適用範囲		トレーニングセット：705 物質（化審法既存化学物質安全性点検のデータを含む） 有機化合物全般（無機化合物や高分子化合物を除く）。但し、以下の 3 種類のドメインの領域内の物質が精度良く予測できる物質とされている。 ①パラメータドメイン：logPow、分子量、対水溶解度がトレーニングセットの範囲内。 ②構造ドメイン：トレーニングセットに含まれている部分構造のみから成る化学構造を持つ物質。 ③メカニズムドメイン：受動拡散が仮定できる物質 適用範囲(domain)外では推計の精度が落ちるため、適用範囲内での使用が必要。
推計精度		log Pow 値を記述子として推計を行うため、log Pow に推計値を用いる場合には log Pow の推計精度の影響について考慮する必要がある。
その他留意事項等		

I.7.3.2 分解性の推計法の概要と適用範囲

(1) 大気中での OH ラジカル、オゾン、硝酸ラジカルとの反応

大気中での OH ラジカル、オゾンとの反応速度定数の推計には、AOPWIN（EPI Suite）を用い

る。大気中での硝酸ラジカルとの反応速度定数については、AOPWIN を用いて測定値の有無を確認する。AOPWIN は硝酸ラジカルとの反応速度定数は推計しないが、硝酸ラジカルとの反応が重要な場合に、その旨のコメントを表示し、測定値がある場合にそれを表示する。

図表 I-64　OH ラジカルとの反応速度定数の推計法

名称		AOPWIN (EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver.1.92（2014 年 4 月現在）
推計法の概要	原理	AOPWIN は光化学的に生成した OH ラジカルと有機化合物の大気中のガス態の反応速度定数を推計する。そして、推計した反応速度定数を使用して、OH ラジカルの平均大気濃度に基づく有機化合物の大気中の半減期を算出する。 AOPWIN で使用する推計手法は、Atkinson らが開発した構造活性相関手法[1]に基づいている。また、Kwok and Atkinson (1995)[2] に掲載されている、フラグメントと速度定数のデータ等を取り込んでいる。加えて、Syracuse Research Corporation が実試験に基づくデータを取り込んでいる。 OH ラジカルとの反応速度定数は以下の工程における反応速度定数を合計して推計される。 (1) 水素引き抜き反応 (2) 特定の窒素・硫黄フラグメントとの反応及びアルコールやフェノールのような OH フラグメントとの反応 (3) 三重結合への付加 (4) オレフィン結合への付加 (5) 芳香環への付加 (6) 縮合環への付加 また、大気中の半減期は次の式により算出される。 $t_{1/2} = 0.693/k_{OH}\,[OH]$ ここで、k_{OH} は OH ラジカルとの反応速度定数 [cm^3 / molecule-sec]、[OH]は OH ラジカル濃度 [molecule / cm^3]。
	インプット	・CAS 番号 ・構造（SMILES、MDL MOL File、構造式の描画） ・物質名
	アウトプット	・OH ラジカルとの反応速度定数 ・大気中の半減期 ・工程毎の反応速度定数
適用範囲		適用範囲についての定義は存在しない。
推計精度		<トレーニングセット> 物質数 = 667, 決定係数 $r^2 = 0.963$, 標準偏差 = 0.218, 平均絶対誤差 = 0.127
その他留意事項等		AOPWIN（Ver.1.92）はデフォルトの OH ラジカル濃度が 1.5×10^6 molecule / cm^3 となっているので、半減期を推計する際は 5×10^5 molecule / cm^3 を選択する必要がある。

[1] Atkinson, 1985, 1986, 1987, 1991; Atkinson and Carter, 1984; Eiermann et al, 1985; Kwok et al, 1992; Kwok and Atkinson, 1995; Kwok et al, 1996（引用文献の詳細は AOPWIN (Ver.1.92) on-line User Guide を参照）

[2] Kwok, E.S.C. and Atkinson, R. 1995. Estimation of Hydroxyl Radical Reaction Rate Constants for Gas-Phase Organic Compounds Using a Structure-Reactivity Relationship: An Update. Atmospheric Environment 29: 1685-95.

図表 I-65　オゾンとの反応速度定数の推計法

名称		AOPWIN (EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver.1.92（2014 年 4 月現在）
推計法の概要	原理	OH ラジカルとの反応速度定数と同様に、AOPWIN はオゾンとオレフィン系・アセチレン系化合物の大気中のガス態の反応速度定数を推計する。そして、推計した反応速度定数を使用して、オゾンの平均大気濃度に基づく有機化合物の大気中の半減期を算出する。 AOPWIN で使用する推計手法については図表 I-XX を参照。 また、大気中の半減期は OH ラジカルとの反応の際と同じ関係式により算出される。
	インプット	・CAS 番号 ・構造（SMILES、MDL MOL File、構造式の描画） ・物質名
	アウトプット	・オゾンとの反応速度定数 ・大気中の半減期
適用範囲		一般的には、オレフィン系・アセチレン系化合物に対して有効である。また、ヒドラジン、フェノール、アルキル鉛化合物、フランなどの限られたクラスについても有効である。
推計精度		<トレーニングセット> 物質数 = 112, 決定係数 $r^2 = 0.88$, 標準偏差 = 0.52, 平均絶対誤差 = 0.35
その他留意事項等		AOPWIN によるオゾンとの反応速度定数推計値は OH ラジカルとの反応速度定数の推計値ほど推計精度が良くないため、可能であれば、類似構造物質の既知データ等で推計の妥当性を確認することが望ましい。 なお、AOPWIN (Ver.1.92) はデフォルトのオゾン濃度が 7×10^{11} molecule / cm^3 となっており、本リスク評価手法で用いることとしているオゾン濃度と同じである。

(2) 生分解性

生分解性の推計法には、BIOWIN (米国 EPA)、CATABOL (ブルガリア Prof Assen Zlatarov 大学)等複数の手法がある。BIOWIN には 7 種の推計モデルがあるが、生分解性半減期の算出に用いるのは「BIOWIN 3 Ultimate Biodegradation」である。CATABOL にも複数の推計モデルがあるが、生分解性半減期の算出には基本的に「CATABOL 301C」を用いる。

図表 I-66　生分解性の推計法（BIOWIN）

名称		BIOWIN3 Ultimate Biodegradation (EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver.4.11 (2012 年 11 月現在)
推計法の概要	原理	BIOWIN3 は最終的な生分解（親化合物の CO2 と水、無機酸化物、新たな細胞物質への変化）に要する時間を予測する。 本モデルは、200 化合物に対する CO_2 生成量、酸素消費量、あるいは溶存有機炭素消滅量といった実験的な調査[1]、及び 50 化合物に対する類似調査[2] に基づく。調査における 5 段階（時間、日、週、月、それ以上）の半定量的な分解時間評価結果を平均化した単

[1] Boethling, R.S., Howard, P.H., Meylan, W., Stiteler, W., Beaumann, J., Tirado, N. 1994. Group contribution method for predicting probability and rate of aerobic biodegradation. Environ. Sci. Technol. 28:459-65.
[2] Boethling, R.S., Sabljic, A. 1989. Screening-level model for aerobic biodegradability based on a survey of expert knowledge. Environ. Sci. Technol. 23:672-9.

		一値と、36 の記述子、分子量を用いて、最終生分解をマトリクス化し、これを線形回帰分析したモデル。
	インプット	・CAS 番号 ・構造（SMILES、MDL MOL File、構造式の描画） ・物質名
	アウトプット	・生分解に要する時間（hours, hours-days, days, days-weeks, weeks, weeks-months, months, longer の定性的な 8 分類で格付け）
適用範囲		適用範囲についての定義は存在しない。
推計精度		回帰分析精度 物質数 = 200, 決定係数 r^2 = 0.72, 平均残差（絶対値）= 0.206 平均二乗誤差：0.10 以下 = 29.5%, 0.30 以下 = 77.5%, 0.50 以下 = 93.5% 分類精度 的中物質数 = 167/200, 的中率 = 83.5%（実測より早い= 93.5%, 実測より遅い= 71.7%）
その他留意事項等		ほとんどのカルボン酸、フェノール及びアルコールの金属塩は遊離酸（もしくは非塩）としての推計のほうが精度がよいことから、Na, K, Li を含む構造の場合、デフォルトではこれらの元素は除かれて計算される。

1

2 **図表 I-67 生分解性の推計法（CATABOL）**

名称		CATABOL 301C モデル（OASIS Catalogic）
提供者		Prof Assen Zlatarov 大学
バージョン		Ver.2.06 (2014 年 6 月現在)
推計法の概要	原理	CATABOL 301C モデルは、Bourgas Assen Zlatarov 大学の Laboratory of Mathematical Chemistry と P&G が共同開発を行い、Bourgas Assen Zlatarov 大学で市販されている。 本モデルは、代謝シミュレータとエンドポイントモデルからなり、Rule-based approach により OECD TG 301C 法条件下での好気的生分解を予測する。代謝シミュレータは、微生物代謝の測定データを基に作成された 620 の素反応とその代謝確率から構成されており、入力した化学物質に対して、これらの素反応を再帰的に再帰適用し、BOD 及び生分解経路の予測を可能にする。BOD の計算は、最も可能性の高い生分解経路と物質収支を利用した代謝ツリーに基づく。 非線形最小二乗フィッティングによりパラメーター化されたモデルは以下の通り。 $$\min_{\mathbf{P}} RSS = \sum_{n=1}^{N} (BOD_n^{Obs} - BOD_n^{Calc}(\boldsymbol{P}))^2$$ ここで、RSS は残差平方和、BOD^{Obs} と BOD^{Calc} はそれぞれトレーニングセットの測定値と推定値、P は代謝の推定確率ベクトルでである。トレーニングセットは化審法既存化学物質安全性点検の 745 物質。
	インプット	・構造（SMILES、構造式の描画、MOL file 等）
	アウトプット	・BOD, % ・代謝経路 ・親物質及び変化物の残留率 ・半減期 ・logPow
適用範囲		以下の条件を満たすとき、その化学物質は適用領域内にあるとみなされる。 ・logPow と MW が特定範囲にある ・ACFs(atom-centered fragments)がトレーニングセット内にある ・シミュレータが完全な無機化の代謝を含む

推計精度	<トレーニングセット> 物質数 = 745, 決定係数 $r^2 = 0.7$ 的中率(易分解性) = 85%, 的中率(易分解性でない) = 91%
その他留意事項等	

(3) 加水分解分解

加水分解の半減期等の推計には、HYDROWIN (EPI Suite) を用いる。

図表 I-68 加水分解の半減期等の推計法

名称		HYDROWIN (EPI Suite)
提供者		US EPA
バージョン		Ver.2.00（2014 年 4 月現在）
推計法の概要	原理	HYDROWIN はエステル、カルバメート、エポキシド、ハロメタン、特定のハロゲン化アルキル、有機リン化合物の加水分解の反応速度定数 Kb を推計する。そして、推計した反応速度定数を使用して、加水分解の半減期$t_{1/2}$を算出する。 **エステル：R1-C(=O)-O-R2** 次の式により算出される。 $\log Kb = 0.92\ Es\{R1\} + 0.31\ Es\{R2\} + 2.16\ sigma^*\{R1\} + 2.30\ sigma^*\{R2\} + 2.10\ sigmaX\{R1\} + 1.25\ sigmaX\{R2\} + 2.67$ ここで、Es は立体因子、sigma*は Taft の置換基定数、sigmaX は Hammett の置換基定数（以下同様）。 **カルバメート：R1-N(-R2)-C(=O)-O-R3** N,N-二置換カルバメートについては、次の式により算出される。 $\log Kb = 7.99\ sigma^*\{R3\} + 0.316\ Sum[sigmaX\{R1 + R2\}] + 3.14\ Sum[Es\{R1 + R2\}] + 0.442$ その他のカルバメートについては、次の式により算出される。 $\log Kb = 2.3\ Sum[sigma^*\{R1 + R2\}] + 0.96\ Sum[sigmaX\{R1 + R2\}] + 7.97\ sigma^*\{R3\} + 2.81\ sigmaX\{R3\} - 0.275$ **エポキシド：(R1)(R2)-COC-(R3)(R4)** 脂肪族エポキシドについては、次の式により算出される。 $\log Ka = 0.359\ Summation[Es\{R\}] - 2.15\ Summation[sigma^*\{R\}] + 1.015\ Co - 1.765$ ビニルエポキシド、芳香族エポキシドについては、次の式により算出される。 $\log Ka = -0.88\ Summation[Es\{R\}] - 4.18\ Summation[sigma^*\{R\}] + 0.63\ CT + 0.47\ Do - 1.36\ Co - 0.98$ ここで、Summation [Es{R}] は R1～4 の立体因子の合計、Summation [sigma*{R}] は R1～4 の Taft の置換基定数の合計、Co は環状のときに 1、脂環式のときに 0、CT はシス体のときに 0、トランス体のときに-1、Do はエポキシ環以外の縮合環の数。 **ハロメタン：X-C(Y1)(Y2)Y3（X はハロゲン、Y3 は水素、Y2 と Y3 はそのいずれか。テトラハロメタンは適用範囲外。）** 次の式により算出される。 $\log Kb = 2.99\ sigma^*\{Y2\} + 2.83\ Summation[Es\{Y1 + Y2 + Y3\}] + 0.995\ fx - 0.633$ ここで、fx はハロゲンごとの係数で F = 0.00、Cl = 1.33、Br = 2.60、I = 2.02（以下同様）。 **ハロゲン化アルキル：R1-C(R2)(R3)H（ハロゲン、水素、単結合の脂肪族炭素から成るものに限る。）** 次の式により算出される。 $\log Kb = 2.09\ Summation[sigma^*\{R1 + R2 + R3\}] + 0.491\ Summation[Es\{R1 + R2 + R3\}] + 3.20\ fx - 15.49$ **有機リン化合物：R1-P(=O)(R2)R3、R1-P(=S)(R2)R3（R1～3 は炭素、酸素、硫黄、窒**

		素、ハロゲンで始まる置換基に限る。） クラスと反応触媒ごとに 13 種の回帰式が用意されている[1]。全ての回帰式は ProStat™ (PSI, 2005) を用いた多重線形回帰である。回帰式の従属変数は速度定数の対数であり、独立変数は立体因子や Hammett の置換基定数などである。 **加水分解の半減期の算出** 次の式により加水分解定数Kbから半減期$t_{1/2}$が算出される。 $$t_{1/2} = 0.6931/(\mathrm{Kb})(1.0\mathrm{E}-7)$$ ここで、1.0E-7 は pH 7 の水中の水酸化物イオン濃度。pH 8 の半減期も算出される。
	インプット	・CAS 番号 ・構造（SMILES、MDL MOL File、構造式の描画） ・物質名
	アウトプット	・加水分解の反応速度定数 ・加水分解の半減期
適用範囲		エステル、カルバメート、エポキシド、ハロメタン、特定のハロゲン化アルキル、有機リン化合物
推計精度		<トレーニングセット> エステル 物質数 = 124, 決定係数 $r^2 = 0.965$ 脂肪族エポキシド 物質数 = 14, 決定係数 $r^2 = 0.80$ ビニルエポキシド、芳香族エポキシド 物質数 = 20, 決定係数 $r^2 = 0.94$ ハロメタン 物質数 = 12, 決定係数 $r^2 = 0.996$ ハロゲン化アルキル 物質数 = 7, 決定係数 $r^2 = 0.98$ リン酸エステル 物質数 = 37, 決定係数 $r^2 = 0.925$, 標準偏差 = 0.372（塩基） 物質数 = 13, 決定係数 $r^2 = 0.977$, 標準偏差 = 0.352（中性） ホスホン酸エステル 物質数 = 23, 決定係数 $r^2 = 0.975$, 標準偏差 = 0.347（塩基） 物質数 = 20, 決定係数 $r^2 = 0.986$, 標準偏差 = 0.408（中性）
その他留意事項等		

1

[1] HYDROWIN (Ver.2.00) on-line User Guide: Phosphorus Compound Hydrolysis Update for the HYDROWIN Program

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

Ⅱ．人健康影響に関する有害性評価

Ver. 1.2

令和４年７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	平成 26 年 6 月	初版
Ver. 1.1	平成 30 年 1 月	「優先評価化学物質のリスク評価手法について」及び「化審法に基づく優先評価化学物質のリスク評価の基本的な考え方」の改訂に伴う改訂
Ver. 1.2	令和 4 年 7 月	「優先評価化学物質のリスク評価手法について」及び「化審法に基づく優先評価化学物質のリスク評価の基本的な考え方」の改訂に伴う改訂

目　次

II. 人健康影響に関する有害性評価 1

II.1 はじめに 1
II.1.1 本章の位置づけ 1
II.1.2 有害性評価の基本的な流れ 3

II.2 前提と基本的考え方 4
II.2.1 用いる有害性情報 4
II.2.2 評価の対象とする有害性項目 4
II.2.3 優先評価化学物質と評価対象物質等との関係 5
II.2.4 経口経路と吸入経路の扱い 5
II.2.5 信頼性評価とキースタディの選定 6
II.2.6 評価の進展に応じた有害性情報の置き換え 8
II.2.7 有害性評価と審議会の意見聴取との関係 8

II.3 有害性評価Ⅰ 9
II.3.1 有害性評価Ⅰの前提・目的等 9
II.3.2 一般毒性・生殖発生毒性 11
II.3.3 変異原性 15
II.3.4 発がん性 15
II.3.5 有害性等の調査の求めの項目の特定 18

II.4 有害性評価Ⅱ 19
II.4.1 有害性評価Ⅱの前提・目的等 19
II.4.2 既知見の更新状況の確認・収集及び精査の観点 21
II.4.3 一般毒性 23
II.4.4 生殖発生毒性 24
II.4.5 変異原性 25
II.4.6 発がん性 25
II.4.7 有害性調査指示の項目の特定 26

II.5 有害性評価Ⅲ 28

II.6 リスク評価（二次）における有害性評価 28

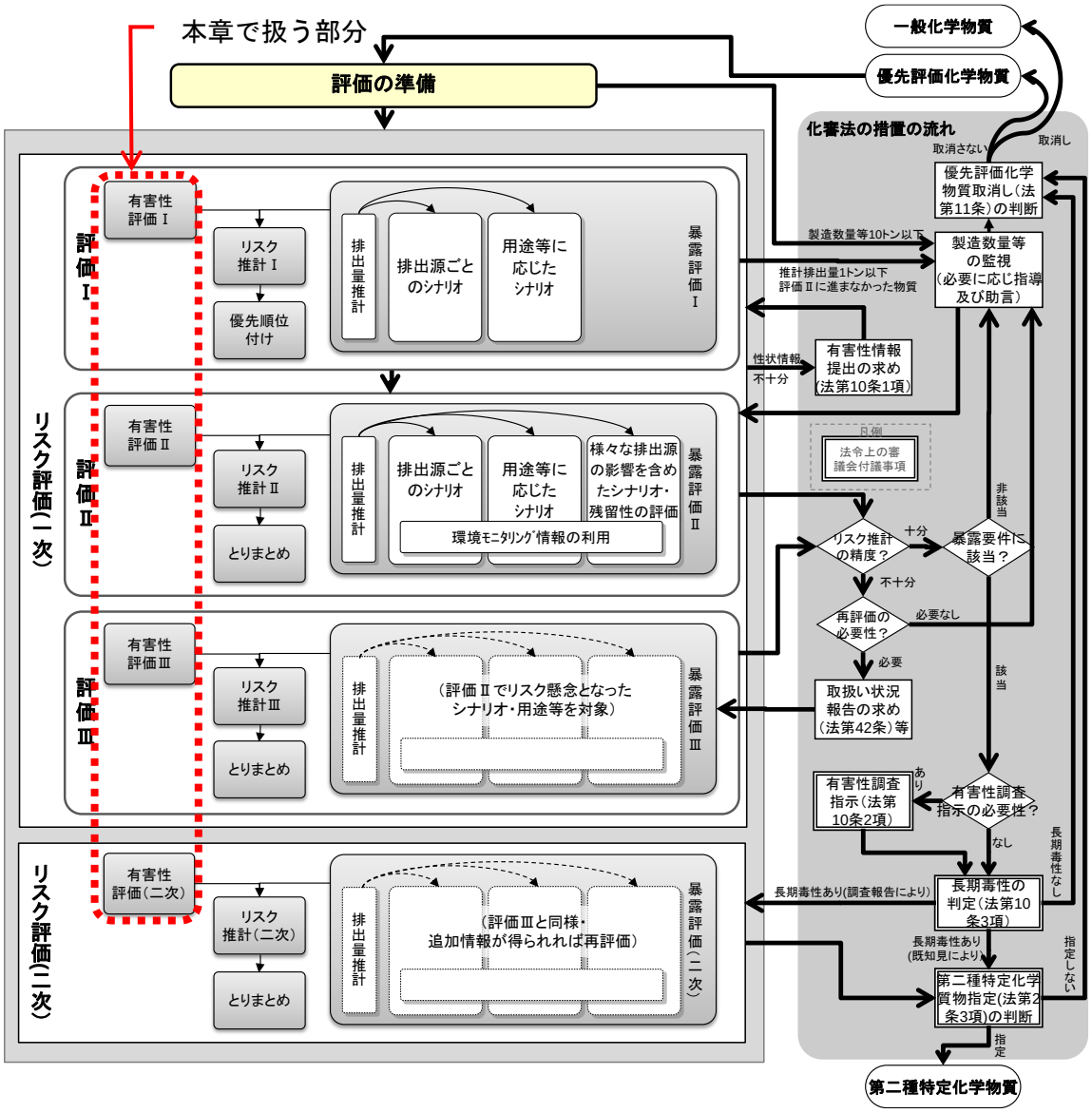
II.7 付属資料 29
II.7.1 経路間外挿の妥当性 29
II.7.2 化管法指定化学物質の選定根拠からの有害性評価値の導出 30
II.7.3 各種の制度等における不確実係数 32
II.7.4 各種の制度等における発がん性の許容リスクレベル 35

II. 人健康影響に関する有害性評価

II.1 はじめに

II.1.1 本章の位置づけ

本章では、優先評価化学物質のリスク評価における人健康影響に関する有害性評価について記載する。リスク評価スキーム全体における本章で扱う部分を図表 II-1 に示す。有害性評価は、評価段階に応じて 4 つの段階（有害性評価Ⅰ～Ⅲ及び有害性評価(二次)）に分かれている。



図表 II-1　リスク評価スキームにおける本章で扱う部分

有害性評価Ⅰは、評価の準備に後続するステップとなる。有害性評価Ⅰで導出した有害性評価値[1]と、暴露評価Ⅰで推計された人の摂取量を比較することにより、リスク推計Ⅰが行われる。

同様に、評価段階に応じた有害性評価で導出した有害性評価値によって、各段階のリスク推計が行われ、評価結果のとりまとめが行われる。

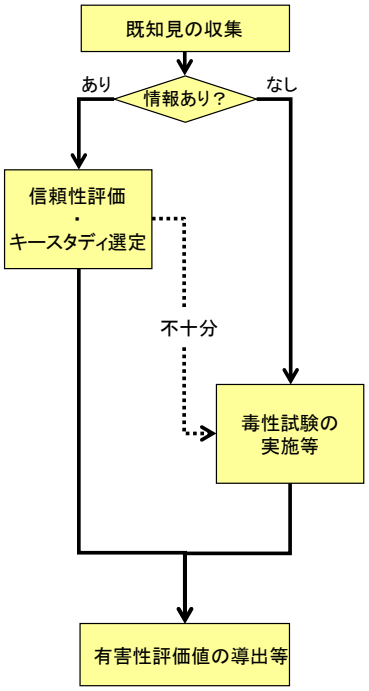
[1] 有害性評価値：TDI（Tolerable Daily Intake）や ADI（Acceptable Daily Intake）、あるいは REACH における DNEL（Derived No Effect Level）等に相当する。一般毒性、生殖発生毒性、閾値がある発がん性の場合は、毒性試験から得られた無毒性量等（NOAEL 等）を不確実係数積[2]で除した数値となる。閾値がない発がん性の場合については、Ⅱ.3.4.3 参照。

[2] 不確実係数積：有害性のデータに含まれる不確実性の中身に応じて設定した不確実係数（Uncertainty Factor: UF ともいう。）を乗じた数値。不確実性は情報の欠如により発生し、より多くの良質のデータを収集することにより減少する。一般的には、動物試験データから人へ外挿する場合の不確実性（種間差）や人の母集団の構成員間でみられる感受性の差（個体差）、一生涯より短い暴露期間で行った試験から得られたデータを一生涯にわたって暴露されたとして外挿する場合の不確実性（試験期間）などを言う。

II.1.2 有害性評価の基本的な流れ

有害性評価の基本的な流れと、スクリーニング評価・リスク評価の各段階における扱いの概要を図表 II-2 に示す。

図表 II-2　有害性評価の基本的な流れと評価段階ごとの扱い【本章における記載箇所】

有害性評価の基本的な流れ	スクリーニング評価	リスク評価（一次）		リスク評価(二次)における有害性評価
		有害性評価Ⅰ	有害性評価Ⅱ・Ⅲ	
	「国が既知見を収集する情報源の範囲」※1 について収集	左記の未収集分、収集時から追加・更新された情報を収集【Ⅱ.3.1.3】	同左【Ⅱ.4.2.1、Ⅱ.5】	同左【Ⅱ.6】
	「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」に基づき実施	上記の追加情報について同左【Ⅱ.3.2～Ⅱ.3.4】	総合的な観点によるデータの精査を行い、精査に応じてキースタディの見直し【Ⅱ.4.2～Ⅱ.4.6】	追加情報について同左【Ⅱ.6】
	―（想定していない）	評価Ⅰ後に必要に応じ、スクリーニング毒性試験又はそれと同等以上のデータ※2 を有さない場合、法第 10 条第 1 項に基づく有害性情報提出の求め【Ⅱ3.5】	リスク評価（一次）後に必要に応じ、法第 10 条第 2 項に基づく長期毒性に係る有害性調査指示【Ⅱ.4.7】	―
	原則的な不確実係数を設定して導出	一般毒性・生殖発生毒性に係る追加分については、同左（スクリーニング評価段階と同じ）【Ⅱ.3.2.2】 発がん性については、可能であれば、信頼性担保された発がん性試験結果あるいは既存の定量情報から導出。【Ⅱ.3.4】	精査を踏まえ、不確実係数の見直し等、専門家による個別判断【Ⅱ.4.3, Ⅱ.4.4, Ⅱ.4.6】	有害性調査指示に基づく有害性情報について、既知見も加味して専門家による個別判断 【Ⅱ.6】

※ 1： II.2.1 参照
※ 2：図表 II-3 参照

有害性評価の一般的な進め方は、はじめに既知見を収集し、信頼性のある情報が得られればそれを採用し、リスク評価で用いる有害性評価値の導出等を行う。既知見で評価に十分な情報が得られなければ、新たな毒性試験の実施を含む、事業者に対する情報提出の求めを行うことになる（図表 II-2 の左列）。

この基本的な流れと対応する化審法における扱いは、評価段階に応じて図表 II-2 に示す様に内容が異なっている。有害性評価Ⅰまでは原則、定型的な手順にしたがい、有害性評価Ⅱ以降は、データの精査を踏まえた総合的な判断を行うこととしている。新たな毒性試験の実施が想定されるのは、有害性評価Ⅰの後に不足するスクリーニング毒性に関する試験、あるいはリスク評価(一次)の後の長期毒性に係る毒性試験である（図表 II-3）。優先評価化学物質のリスク評価を進めるために、国は必要に応じて法第 10 条に基づき製造・輸入事業者に対し有害性情報提出の求め又は

有害性調査指示を行うことができる（II.2.2 及び II.3.5 参照）。

II.2 前提と基本的考え方

ここでは、人健康影響に関する有害性評価について、基本的な事項を記載する。

II.2.1 用いる有害性情報

優先評価化学物質の有害性評価に用いる情報は、次のいずれかである。

（ア）スクリーニング評価に用いた情報
（イ）優先評価化学物質の指定後に事業者より報告等された情報
（ウ）優先評価化学物質の指定後に国が収集した情報

化審法においてスクリーニング評価を行うために、国が有害性に係る既知見を収集する範囲は「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について[1]」に記載されている。リスク評価（一次）評価 I において収集する情報源の範囲も、スクリーニング評価と同じとする。既知見を収集する範囲は、「優先順位１」と「優先順位２」の情報源に分けられ、これらは「政府向け GHS 分類ガイダンス[2]」において、健康有害性に対する有害性の分類判定に利用可能な情報源としてリストアップされている情報源[3]の List 1 と List 2 に概ね対応している。

II.2.2 評価の対象とする有害性項目

評価の対象とする人健康影響に関する有害性項目は、図表 II-3 の左の列に示す「一般毒性」、「生殖発生毒性」、「変異原性」及び「発がん性」の 4 項目とする[4]。この 4 項目は、長期毒性に係る有害性調査指示（法第 10 条第 2 項）の試験項目（同表の左から 2 列目）に準拠している。

---

[1] 化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について【改訂第２版】
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/reliability_criteria03.pdf

[2] 政府向け GHS 分類ガイダンス（GHS 関係省庁連絡会議編、令和２年３月）
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/int/files/ghs/GHS_gudance_rev_2020/GHS_classification_gudance_for_government_2020.pdf

[3] 情報源：健康有害性に関しては List 1～3 まであり、それぞれ以下のとおりである。
List 1：GHS 分類調査に際して、まずこの情報源から調査する。
国際機関、主要各国等で作成され、信頼性が認知されている情報源であり、原則として、一次資料に遡ることができ、必要な場合に情報の確からしさを確認できる評価文書や成書。
List 2：List 1 で必要な情報が確保できない場合に調査するもので、List 1 に記載された評価書以外の有用な情報源。
List 3：原典を探したり、毒性の見当をつけたりするための統合データベース等で必要に応じ利用する。

[4] スクリーニング評価における人健康影響の有害性項目と同じである。

図表 II-3　人健康影響に関する有害性項目と各段階の試験項目等との対応

有害性項目	化審法上の試験項目		GHS 分類の対応する有害性項目（スクリーニング評価で考慮）
	長期毒性に係る有害性調査指示の試験項目　※	スクリーニング毒性に関する試験の項目	
一般毒性	・慢性毒性試験	・28 日間の反復投与毒性試験 ・90 日間の反復投与毒性試験 ・反復投与毒性・生殖発生毒性併合試験	特定標的臓器毒性（反復暴露）
生殖発生毒性	・生殖能及び後世代に及ぼす影響に関する試験 ・催奇形性試験	・反復投与毒性・生殖発生毒性併合試験	生殖毒性
変異原性	・細菌を用いる復帰突然変異試験 ・ほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験又はマウスリンフォーマ TK 試験 ・（上記いずれかで陽性の場合）げっ歯類を用いる小核試験	・細菌を用いる復帰突然変異試験 ・ほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験又はマウスリンフォーマ TK 試験	生殖細胞変異原性
発がん性	・がん原性試験		発がん性

※法第 10 条第 2 項に基づく有害性調査指示の試験項目には、このほかに「生体内運命に関する試験」と「薬理学的試験」がある。前者は、生体内における被験物質の動態の把握をするために、動物に化学物質を投与し吸収、分布、蓄積、代謝、排泄等を調べるもので、後者は、化学物質の薬理学的特性を明らかにするために行われるものである。これらは、特定のエンドポイントに関する試験というよりは、慢性毒性試験や生殖発生毒性試験で毒性が認められた場合に、その説明・解釈のために併用して行われる性質の試験である。

II.2.3 優先評価化学物質と評価対象物質等との関係

優先評価化学物質と評価対象物質等の関係については「Ⅰ章 評価の準備」を参照のこと。

II.2.4 経口経路と吸入経路の扱い

有害性情報は、原則として経口経路のものと吸入経路のものを想定する。化審法は、環境経由の暴露による人健康への影響を評価対象にしているため、主要な暴露経路として経皮経路は想定していない。

有害性評価値を導出する際、経路間の外挿については以下のとおりとする。

有害性評価Ⅰでは、経口経路と吸入経路は区別せず、NOAEL 等の有害性データは 1 日当たり単位体重当たりの摂取量換算を行う。吸入経路の毒性試験データを利用する場合は、試験動物種の呼吸量・体重等により摂取量換算を行う。換算方法は「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」の別紙 3 にしたがう。このような方法で有害性データから求めた最小の有害性評価値を、暴露評価で求める吸入経路と経口経路の両経路を合計した推計摂取量と比較することにより、リスク推計を行う。

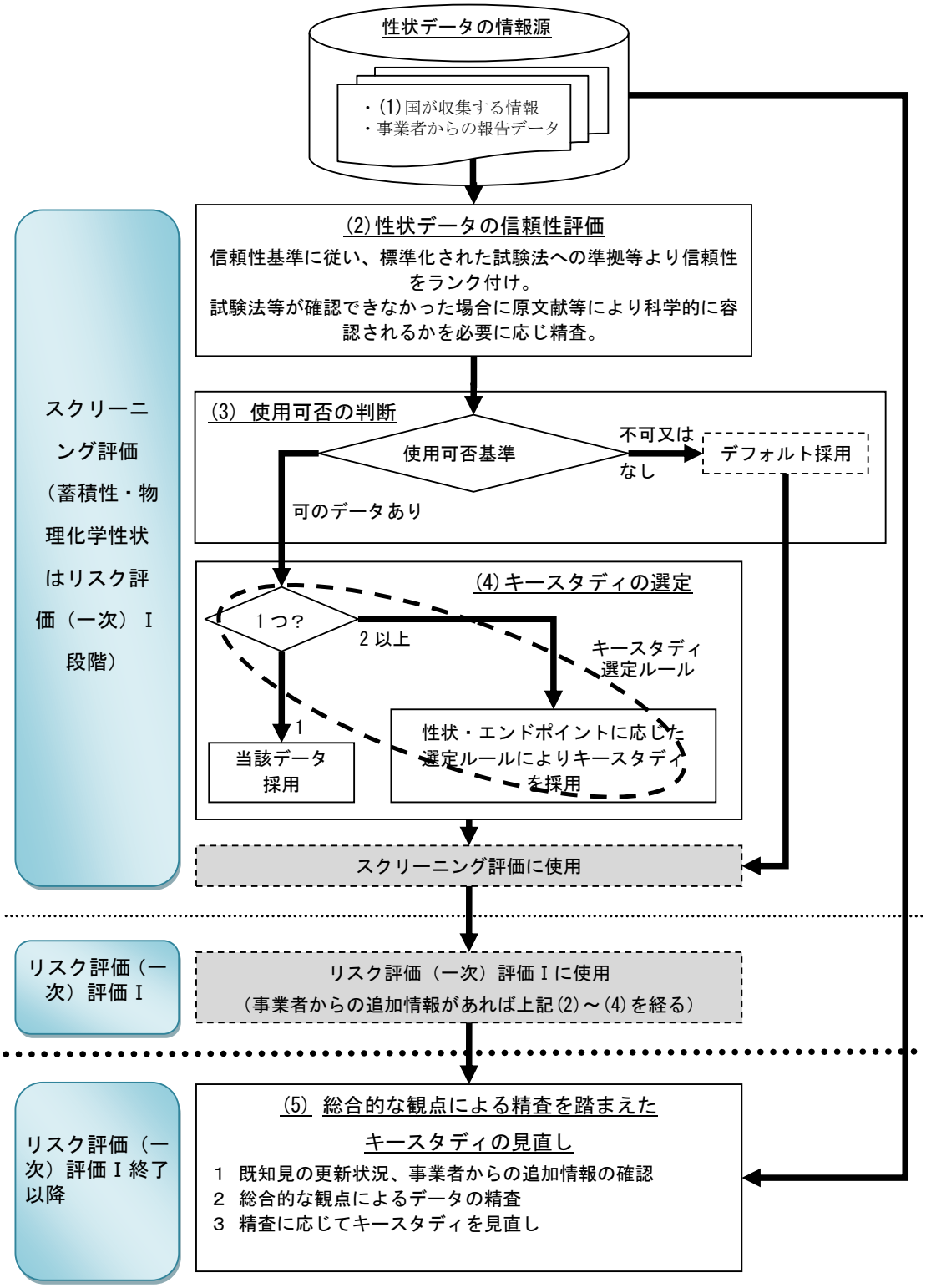
評価Ⅱ以降は、影響の内容に応じて経路別に有害性評価値の設定やリスク推計を行う場合がある（II.4.2.2 参照）。

経路間外挿の妥当性についての検討結果は II.7.1 に示す。

II.2.5 信頼性評価とキースタディの選定

スクリーニング評価に用いる人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等の考え方と方法については、前述の「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」に記載されている。スクリーニング評価により優先評価化学物質に指定された物質のうちリスク評価（一次）評価 I における人健康影響に係る有害性評価に用いるデータについては、基本的には「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」に準じて信頼性評価、キースタディの選定等を行う。リスク評価（一次）評価Ⅱ以降については、必要に応じて専門家による精査とキースタディの見直しが行われる（II.4.2.2 参照）。

スクリーニング評価及びリスク評価（一次）評価 I に用いるデータの信頼性評価等に係る基本的な流れを図表 II-6 に示す。



図表 II-4 有害性データの信頼性評価等に係る考え方
「化審法のスクリーニング評価及びリスク評価（一次）評価Ⅰに用いる性状データの

信頼性評価等の基本的考え方[1]」より

II.2.6 評価の進展に応じた有害性情報の置き換え

事業者からの有害性情報の報告等により、当初用いていた有害性情報よりも適切なデータ（試験期間が長期である等）が得られることがありうる。このような場合、それ以降の有害性評価では、適切なデータに置き換えて評価を行う。これは、優先評価化学物質の取消しにより一般化学物質となり、再びスクリーニング評価を行う場合も同様である。

II.2.7 有害性評価と審議会の意見聴取との関係

本ガイダンスの有害性評価の考え方・手法では、優先評価化学物質のリスク評価に用いる有害性評価値導出等の基本的な手続きを示している。ただし、ここに示した手続きに基づくことはリスク評価に用いる有害性データの決定を意味するのではなく、専門家による個別判断の余地を残すものである。その判断は、化審法に定められる手続きによる。

化審法では、「化学物質の有害性やリスクの評価が必要となる措置に関しては、専門家による科学的知見を踏まえた上で判断を行うことが適当である」との考え方のもと、いくつかの措置については審議会等[2]の意見を聴くものとされている（法第 56 条）。それらの措置のうち、優先評価化学物質のリスク評価に関連するのは次の事項である。

（ア）第二種特定化学物質の政令指定（法第 2 条第 3 項）
（イ）優先評価化学物質の有害性調査の指示（法第 10 条第 2 項）
（ウ）（イ）の報告結果に基づく第二種特定化学物質該当性の判定（法第 10 条第 3 項）

本ガイダンスの手法は、前述の審議会に付議されるリスク評価書の案を作成するためのものである。リスク評価の中でも、特に有害性評価の部分については、データの解釈等において高度な専門的知見を要し、定型化には限界がある。このため、審議会に付議するリスク評価書では、リスク評価に用いる有害性データの選定の理由と選択肢も明らかにし、有害性データの選択の適切性等について専門家による個別判断の余地を残すものとなる。

[1] http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html
[2] 厚生労働省は薬事・食品衛生審議会、経済産業省は化学物質審議会、環境省は中央環境審議会

II.3 有害性評価Ⅰ

II.3.1 有害性評価Ⅰの前提・目的等

II.3.1.1 有害性評価Ⅰの対象とする有害性項目

評価の対象とする有害性項目は、一般毒性、生殖発生毒性、変異原性及び発がん性の４項目である。原則として、スクリーニング評価の有害性クラス付けに用いた一般毒性及び生殖発生毒性の有害性評価値、並びに有害性評価Ⅰにおいて導出する発がん性の有害性評価値の中から、リスク推計Ⅰに用いる最小の有害性評価値を選定する。

II.3.1.2 有害性評価Ⅰにおける評価対象物質の扱い

優先評価化学物質のリスク評価においては、有害性評価やリスク評価の実質的な対象物質である「評価対象物質」は、複数の物質である場合がある（Ⅰ章参照)。そのような場合、有害性評価Ⅰでは簡略化し、原則として優先評価化学物質ごとに評価対象物質を 1 つに決めて評価を行うこととする[1,2]。

評価対象物質が複数になりうる場合として、Ⅰ章の「優先評価化学物質と評価対象物質等との関係」より、次のような例が挙げられる。それぞれについて、有害性評価Ⅰにおける評価対象物質の設定の考え方を示す。

(ア) <u>構造の一部又は構成部分に優先評価化学物質を含む化学物質が、製造数量等の届出の対象となる場合</u>

必要に応じて評価対象物質を複数設定する例である。有害性評価Ⅰでは、優先評価化学物質の指定名称の化学物質を評価対象物質とする。

(イ) <u>分解度試験より変化物が生じることが判明している優先評価化学物質の場合</u>

有害性評価Ⅰでは、原則、親化合物を評価対象物質とする。ただし、親化合物の有害性データが得られず、変化物の有害性データが得られる場合は、変化物を評価対象物質とする。

(ウ) <u>優先評価化学物質に高分子化合物ではない場合と高分子化合物である場合が混在する場合</u>

有害性評価Ⅰでは、原則、高分子化合物ではない化学物質を評価対象物質とする。

---

[1] その場合、有害性評価と暴露評価では、評価対象物質が異なる場合がありうる。

[2] この簡略化は、以下の理由による。
・有害性評価Ⅰの目的は優先順位付けであり、絶対値としての正確さは求められていないこと。
・有害性評価Ⅰの結果のみから最終判断（有害性調査指示、二特指定等）が行われることはなく、最終判断の前には評価対象物質の設定も含めた精査を行うことになること。

II.3.1.3 有害性評価 I の目的とフロー

有害性評価 I の目的は、次のとおりである。

(ア) 一般毒性及び生殖発生毒性、並びに発がん性に係るリスク推計 I に用いる有害性評価値の導出（II.3.2 参照）
(イ) 変異原性及び発がん性を有する物質の抽出（II.3.3、II.3.4 参照）
(ウ) 有害性調査の求めを行う場合の調査項目の特定（II.3.5 参照）

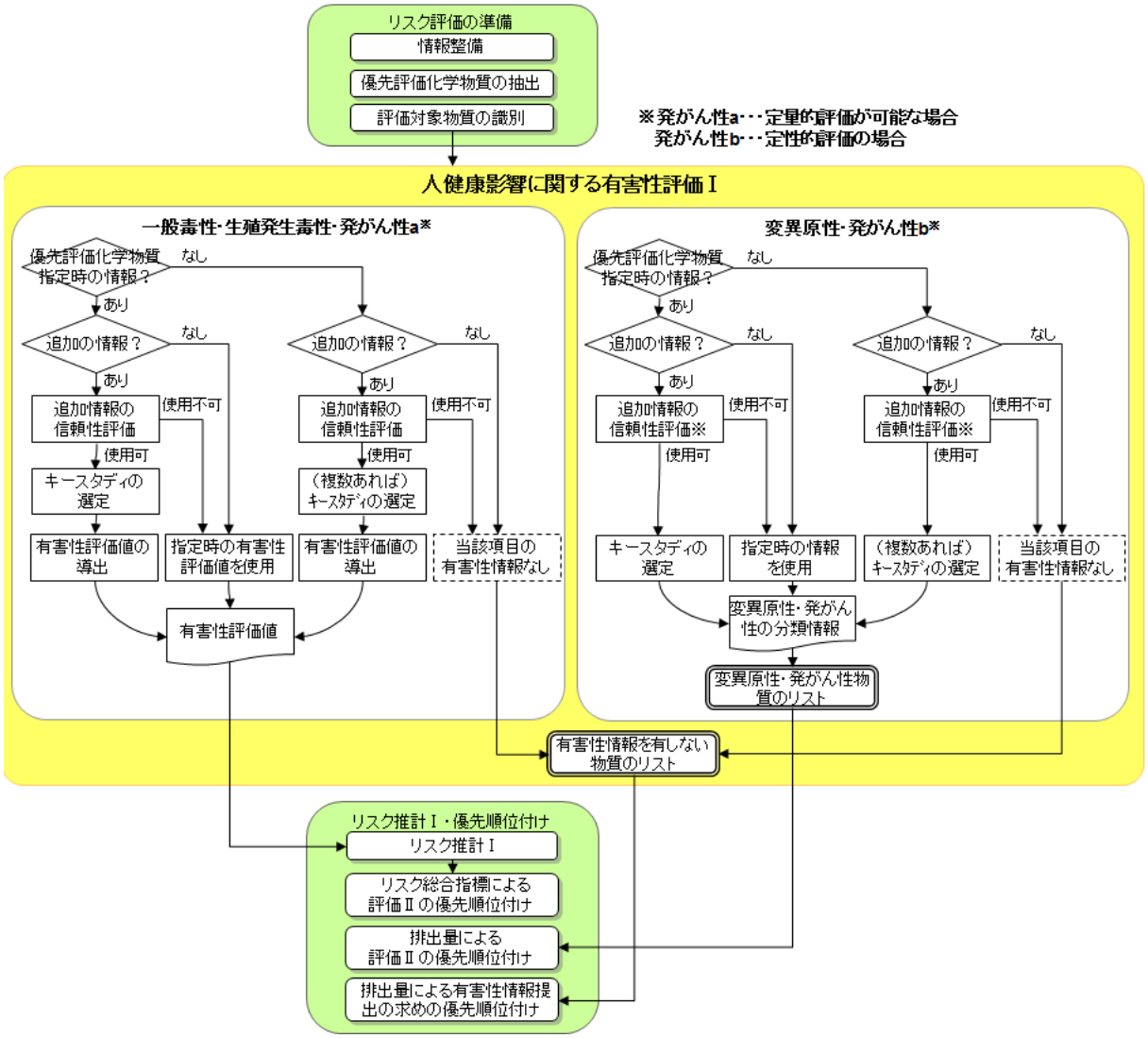
目的（ア）に対応する一般毒性及び生殖発生毒性、並びに発がん性については、有害性評価値の導出を行い、リスク推計 I に用いる。

目的（イ）に対応する変異原性及び発がん性については、分類結果等の定性的な情報を整理して変異原性を有する物質を抽出し、有害性評価Ⅱを行うための優先順位付けの対象とする。また、変異原性については、有害性評価 I における発がん性の有害性評価値導出のための参考情報として扱う。

目的（ウ）に対応して、リスク評価（一次）を進める上で有害性情報が不足する優先評価化学物質とその有害性評価項目を特定し、有害性情報の提出を求める優先順位付けの対象とする。

人健康影響に関する有害性評価 I の流れを図表 II-5 に示す。図表 II-5 に示すように、評価の対象とする有害性項目に関しては、基本的にはスクリーニング評価の有害性クラス付けに用いた有害性情報を用いるが、新たに有害性情報が得られれば、信頼性評価を行った上で使用可能な情報であれば使用する。

なお、発がん性に係る定量的評価に関しては、可能であれば、発がん性試験結果に関する情報、あるいは他機関が導出している発がん性に関する有害性評価値等の定量情報の信頼性評価を行った上で、使用可能な情報に基づき有害性評価値を導出する。必要に応じて、スクリーニング評価における変異原性の評価結果を確認する（II.3.4 参照）。



図表 II-5　人健康影響に関する有害性評価Ⅰの流れ

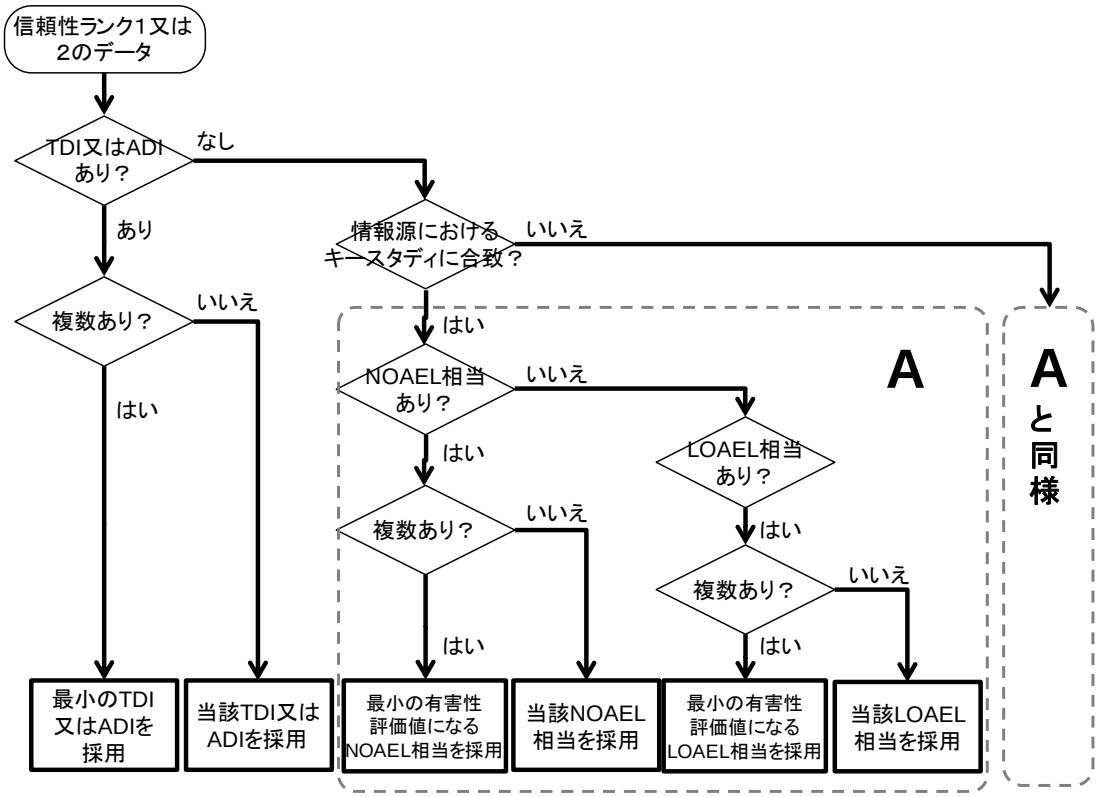
II.3.2 一般毒性・生殖発生毒性

一般毒性及び生殖発生毒性それぞれについて、図表 II-5 に示す手順で有害性評価値を導出する。追加で得られた有害性情報があれば信頼性評価を行い、使用可能なデータを選別してキースタディを選定し、有害性評価値を導出する。

II.3.2.1 キースタディの選定

追加の有害性情報が得られるなどして信頼性評価を経て使用可能なデータが複数得られた場合、有害性項目ごとに「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」に記載されているルール[1]にしたがってキースタディを選定する。キースタディ選定ルールは次のとおりである。信頼性ランク 1 又は 2 のデータの中から、TDI 等が得られれば最優先し、次に調査対象情報源において有害性項目ごとのキースタディに合致するデータが優先される。また、NOAEL 相当[2]は LOAEL 相当[3]よりも優先される。同レベルの NOAEL 等が複数得られた場合は、最小の有害性評価値を与える NOAEL 等を選定する。これらのルールは、スクリーニング評価における扱いと同様である。

有害性評価 I の一般毒性、生殖発生毒性のキースタディ選定の流れを図表 II-6 に示す。



図表 II-6　有害性評価 I における一般毒性、生殖発生毒性のキースタディ選定の流れ

[1]「1.3.　有害性データの仮選定」の項で「有害性データが複数得られる場合」の順位付けが記載されている。
[2]「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」の図表 12 では「NOAEL 相当」の例として NOEL、NOEC、NOAEC、BMDL10、最大投与量が挙げられている。
[3]「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」の図表 12 では「LOAEL 相当」の例として LOEL、LOEC、LOAEC、TDL_0、TCL_0、最小投与量が挙げられている。

II.3.2.2 動物試験結果からの有害性評価値の導出

有害性評価値とは、その値以下では人への有害影響が懸念されないと考えられる量であり、暴露評価による人の推定摂取量と組み合わせて比較するリスク推計で用いる値である。一般毒性と生殖発生毒性の有害性評価値の導出には、動物試験結果等から得られる NOAEL 等を用い、NOAEL 等[1]を不確実係数積で除して有害性評価値を導出する。

スクリーニング評価で用いた情報に追加して有害性情報が得られた場合、一般毒性、生殖発生毒性の別に、以下のように不確実係数積を設定し、有害性評価値を求める。

一般毒性に関する有害性評価値を導出する際の不確実係数は、原則として次のとおりとする。

種間差：..... 10
個体差：.....10
試験期間　90 日未満：.....6
90 日以上 12 ヶ月未満：……2
12 ヶ月以上の試験期間：……1
LO(A)EL 採用：.....10
影響の重大性：.....1～10

不確実係数を適用する重大な影響については、その影響と試験期間の長さを勘案して追加するものとするが、不確実係数を適用する重大な影響については、その影響と試験期間の長さを勘案して追加する。具体的には、以下に該当する影響の場合に追加するものとする。

- NOAEL 等の推定根拠またはその他発現した毒性において、神経行動毒性や重篤な病理組織学的な変化等、毒性学的に重要な変化が発現したもの。
- 回復期の影響については、神経行動毒性や重篤な病理組織学的な変化等、毒性学的に重要な変化であって、以下のいずれかの場合
  ア．回復試験期間内に回復しない病理組織学的な変化を生じさせるもの
  イ．遅発毒性を生じさせるもの
  ウ．回復試験期間内に回復しない生化学的な変化を生じさせるもの

なお、回復期の影響については、可逆性の程度、回復期における毒性の残存状況、遅発毒性の有無、組織学的変化に起因する生化学的な変化かどうか等を考慮する。

生殖発生毒性に関する有害性評価値を導出する際の不確実係数は、原則として次のとおりとする。

種間差：..... 10
個体差：.....10
LO(A)EL 採用：.....10
試験の質／影響の重大性：.....10

[1] NOEL 評価されている場合にも有害性評価 I では NOAEL と特に区別せず取り扱う。

「試験の質／影響の重大性」では、哺乳類を用いる反復投与毒性・生殖発生毒性併合試験を含む簡易生殖毒性試験・一世代生殖試験等の場合に「試験の質」として 10 を、エンドポイントが母体毒性よりも低用量で発現する催奇形／児死亡である場合には「影響の重大性」として 10 を追加する。ただし、「試験の質」及び「影響の重大性」がそれぞれ前述の場合に合致する際には併せて 10 を追加することとする。

以上に示す各不確実係数は、スクリーニング評価の有害性評価値導出に用いるものと同じである。これらの不確実係数積の設定にあたっては、国内外の各種制度等における設定状況を整理した（付属資料 II.7.3 参照）。

II.3.2.3 基準値等からの有害性評価値の導出

国が既知見として収集する有害性情報のなかには、他法令による基準値等（大気汚染防止法に係る大気環境基準、水道水質基準等）も含まれる[1]。基準値等から有害性評価値を導出する場合には、有害性評価 I の段階では原則として図表 II-7 に示す方法にしたがう。これは、スクリーニング評価における扱いと同様である。

図表 II-7　基準値等からの有害性評価値の導出方法

情報源（例）	有害性評価値の導出方法
日本産業衛生学会：許容濃度提案理由書及び許容濃度等の勧告	作業環境許容濃度 TWA（時間加重平均値）は健康な成人に対する断続的な暴露での許容濃度であることから、一般環境での一般人への外挿のため、暴露時間の補正、断続的な暴露から継続的な暴露への補正、敏感な人も考慮した個体差を考慮し、これらを併せた不確実係数積を 100 とする。そのため、有害性評価値（摂取量換算）に相当する NOAEL 等/UFs は、TWA を 100 で除した濃度に、体重を 50kg、1 日呼吸量 20m^3/day として算出。
米国産業衛生専門家会議(ACGIH)：ACGIH 化学物質許容濃度文書	
FAO/WHO 合同食品添加物専門家会議（JECFA）：FAO/WHO Joint Expert Committee on Food Additives – Monographs	ADI (mg/kg/day)等は有害性評価値（NOAEL 等/UFs）に相当するとしてそのまま使用。
FAO/WHO 合同残留農薬専門家会議（JMPR）：FAO/WHO Joint Meeting on Pesticide Residues – Monographs of Toxicological evaluations	
非食用農薬暫定 ADI	
内閣府食品安全委員会：食品健康影響評価	
厚生労働省：既存添加物の安全性の見直しに関する調査研究	
WHO 飲料水質ガイドライン	水質基準値＝（NOAEL 等/UFs）×体重×飲料水の寄与率／1 日飲料水量 の式より、有害性評価値に相当する（NOAEL 等/UFs）の数値を、引用されている水質基準(日本、WHO 等)から体
日本の水道水質基準	

[1] 「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」の「2.1.2. 収集対象情報源」の項にリストアップされている。

情報源（例）	有害性評価値の導出方法
	重を 50kg、飲料水の寄与率 10%、1 日飲料水量 2L/day として算出。
WHO 欧州地域事務局大気質ガイドライン	大気基準値＝｛(NOAEL 等/UFs) ×体重×経口吸収率×大気の寄与率｝／｛吸入吸収率×1 日呼吸量｝の式より、有害性評価値に相当する（NOAEL 等/UFs）の数値を、引用されている大気基準(日本、WHO 等)から体重を 50kg、経口吸収率＝吸入吸収率（分母分子で相殺）、大気の寄与率 100%、1 日呼吸量 20m³/day として算出。
大気汚染防止に係る大気環境基準、指針値	

注）UFs は不確実係数積の意味。UF の設定に関しては II.3.2.2 参照。

II.3.3 変異原性

有害性評価 I における変異原性については、図表 II-5 に示す手順で定性的な分類情報の整理を行う。変異原性に関する定性的な分類情報とは、試験種類別の陽性・陰性の結果並びに総合的な陽性・陰性の判定結果である。これらは、スクリーニング評価の有害性クラス付けで用いた情報であり、さらに追加で得られた有害性情報があれば信頼性評価を行い、使用可能な情報[1]である場合は、分類情報に追加する。

変異原性に関する分類情報とスクリーニング評価における有害性クラスとの対応を図表 II-8 に示す。有害性クラス 1～4 が付与された優先評価化学物質[2]を「変異原性を有する物質」として抽出する。

図表 II-8　スクリーニング評価における変異原性の有害性クラス

有害性項目	有害性クラス				
	1	2	3	4	クラス外
変異原性	GHS 区分 1A	以下のいずれか ・GHS 区分 1B, 2 ・化管法の変異原性クラス 1 ・in vitro 試験で強い陽性※1 ・in vivo 試験で陽性※2	化審法の変異原性試験のいずれも陽性※3 (in vivo 試験が利用できない場合)	化審法の変異原性試験のいずれかで陽性※3 (in vivo 試験が利用できない場合)	以下のいずれか ・化審法変異原性試験のいずれも陰性 (in vivo 試験が利用できない場合) ・in vivo 試験ですべて陰性※4

※1　試験もしくは評価の結果、又は、結論が「強い陽性」とされた場合
※2　in vivo 変異原性試験で陽性の結果がある場合、原則として「クラス２」とし、加えて、in vitro 化審法変異原性試験のすべてで陰性の場合は個別に専門家判断
※3　軽微な陽性、強い陽性を除く
※4　in vitro の変異原性試験で陽性の結果がある場合、「クラス外」とするかどうかは専門家判断

II.3.4 発がん性

有害性評価 I における発がん性については、定性的な分類情報を整理するとともに、可能であれば新たに収集した既存の定量情報に基づく有害性評価値の導出を行う。

[1] 「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」参照。
[2] 変異原性に関する分類情報がなく、デフォルトの有害性クラスが付与されている優先評価化学物質は除く。

発がん性に関する定性的な分類情報とは、IARC 等による発がん性の分類結果であって、スクリーニング評価の有害性クラス付けで用いた情報であり、さらに追加で得られた有害性情報があれば信頼性評価を行い、使用可能な情報であれば、分類情報として追加する。

発がん性の定量的評価における収集対象情報源及び信頼性評価については、基本的に「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」における一般毒性及び生殖発生毒性と同様とする。収集範囲とする有害性データ（試験結果）は、基本的に図表Ⅱ-9 に示す試験法及びこれに準拠した試験法に基づくものとするが、国際標準化される以前の毒性試験データや、ヒト疫学調査等についても、目的に沿って得られたデータであれば収集範囲とする。なお、図表Ⅱ-9 の収集範囲については、OECD 等におけるテストガイドラインの改廃に応じて、適宜見直すこととする。

図表 II-9　発がん性の定量評価に適用できるテストガイドライン

OECD テストガイドライン	試験名
TG451	発がん性試験
TG453	慢性毒性／発がん性併合試験

有害性評価値の導出に際しては、はじめに、他機関が設定している発がん性に関する定量情報（ユニットリスク(UR)及びスロープファクター(SF)、TD_{50}[1]）並びに発がん性試験に関する情報を収集する。

II.3.4.1 閾値の有無の判断

使用可能なデータの選別後は、Ⅱ.3.3 に示した変異原性の評価結果に基づき閾値の有無を判断する。変異原性に関する評価結果が「Ames 試験 及び/または 何らかの in vivo 試験が陽性」であった場合に暫定的に「閾値なし」と判断し、必要に応じて変異原性試験の条件や結果の妥当性を精査した上で最終判断する。この段階での閾値の有無の判断は、閾値の有無を明確にするというよりは、明らかに閾値がない、あるいは閾値がないと確認できない物質を選別することを目的とし、閾値の有無の判断が困難な場合は、専門家判断によることとする。発がん性の有害性評価値は、閾値の有無の別に応じて以下の通り導出方法を分ける。

II.3.4.2 「閾値あり」と扱う場合の有害性評価値の導出

前述の暫定的な判断基準により「閾値あり」と判断された場合は、入手できた発がん性試験情

[1] TD_{50}（50% toxic dose）：半数の動物に毒性が発現すると推定される投与量。米国 National Cancer Institute（NCI）及び National Texicology Program（NTP）並びに公表論文により報告された慢性・発がん性試験のデータベースである Carcinogenic Potency Database（CPDB）において公表されている（参照：https://files.toxplanet.com/cpdb/index.html）。

報から得た発がん性に関する NOAEL または LOAEL（種差 10、個体差 10、重篤度（発がん性）10。LOAEL 採用の場合は、追加で 10 とし不確実係数積 10000）で除して算出する。発がん性試験情報がない、あるいは発がん性情報はあるが、最高用量でも発がん性が認められない等、発がん性を評価するには情報が不足している場合は、発がん性の定量的評価が困難であるため、「情報なし」とする。

II.3.4.3 「閾値なし」と扱う場合の有害性評価値の導出

前述の暫定的な判断基準により「閾値なし」あるいは「閾値がないと確認できない」と判断された場合は、原則として、内外の評価機関が導出している発がん性に関する定量情報あるいは発がん性試験結果（UR、SF、TD_{50}、BMDL[1]、NOAEL）を用いる。SF（単位は$(mg/kg/day)^{-1}$）や UR（単位は$(\mu g/m^3)^{-1}$ 又は $(\mu g/L)^{-1}$）は、「単位量（又は濃度）を一生涯摂取（又は吸入）した場合に増加する発がん確率（リスク）」と定義される。これは、ある化学物質への暴露のみが原因で発がんする確率（リスク）である。

UR、SF 等が得られた場合は、これらの値を用いて 10^{-5} 相当の発がんリスクレベルを有害性評価値として導出する。10^{-5} 相当の発がんリスクレベルとは、閾値がないと考えられる毒性に関し、生涯の発症リスクが 10^{-5}（10 万人に 1 人）といった十分に小さなリスクの増分に対応する用量である。十分に小さなリスクの増分は許容リスクレベルとも呼ばれ、本スキームでは 10^{-5}（10 万人に 1 人）とする

許容リスクレベルの設定にあたっては、国内外の各種制度等における設定状況を整理した（付属資料 II.7.4 参照）。

10^{-5} 相当の発がんリスクレベルは、以下の式によって求める。

10^{-5} 相当の発がんリスクレベル＝10^{-5}／UR または SF　　式 II-1

一方、UR や SF が得られず、TD_{50} が得られた場合は、以下の式により 10^{-5} 相当の発がんリスクレベルを求める。

10^{-5} 相当の発がんリスクレベル＝TD_{50}／50000　　式 II-2

なお、UR または SF 及び TD_{50} の両方を得られた場合は、UR または SF から導出した 10^{-5} 相当の発がんリスクレベルを優先的に採用する。

UR、SF、TD_{50} のいずれも得ることができず、発がん性試験の結果から NOAEL 又は $BMDL_{10}$ が得られた場合は、発がん性の NOAEL は $BMDL_{10}$ に近い値になることが想定されるので、それらの値を不確実係数積 10000 で除して 10^{-5} の発がんリスクレベル相当の有害性評価値を求める。

---

[1] BMDL：用量反応データを統計学的に尤もフィッティングさせた数理モデルにおいて、有害影響を有意に検出できる反応レベル（benchmark response, BMR）の用量に対する 95%信頼限界の用量下限値。BMR を 10%としたときの BMDL を BMDL10 という。
https://dra4.nihs.go.jp/bmd/about_BMD.pdf

「閾値なし」あるいは「閾値がないと確認できない」と判断されたが、発がん性試験結果の情報が無い等の理由により発がん性の定量的評価が困難な場合は、暫定的に発がん影響に対する TTC[1] 1.5 μg/person/day (=0.03 μg/kg/day)を発がん性評価値として扱う。

II.3.5 有害性等の調査の求めの項目の特定

国は、優先評価化学物質のリスク評価を進める上で必要であれば、法第 10 条第 1 項に基づき、製造・輸入事業者に対して有害性等に係る試験成績を記載した資料の提出を求めることができる（以下、「有害性等の調査の求め」という。）。調査を求めることができる試験項目は省令[2]に定められており、人健康影響に係る有害性に関しては次のとおりである。告示[3]には、同等以上の試験として別に定められている。

	【省令】	【告示】
（ア）	ほ乳類を用いる 28 日間の反復投与毒性試験	ほ乳類を用いる 90 日間の反復投与毒性試験又はほ乳類を用いる反復投与毒性･生殖発生毒性併合試験
（イ）	細菌を用いる復帰突然変異試験及びほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験による変異原性試験	細菌を用いる復帰突然変異試験及びマウスリンフォーマ TK 試験による変異原性試験

これらは新規化学物質の審査において、人健康影響に係る判定を行うために必要な試験項目と同じである。（ア）は一般毒性に係る試験であり、（イ）は変異原性に係る試験である。したがって、一般毒性及び変異原性について有害性情報を有しない優先評価化学物質については、必要に応じて（ア）や（イ）の試験成績の提出を求めることになる[4]。

有害性等の調査の求めを行うため、有害性評価 I を行う中で、一般毒性又は変異原性について有害性情報を有しない優先評価化学物質をリストアップする。また、その際には、複数の評価対象物質が設定される優先評価化学物質（II.2.3 参照）については、評価対象物質ごとに有害性情報を有しているかについても考慮する。なお、有害性情報提出の求めを行う前には、国は既知見の有無の確認を行う[5]。

---

[1] TTC（Threshold of toxicological concern）：毒性学的懸念の閾値。ある暴露量以下ではヒトの健康へのリスクを引き起こす確率が極めて低く、包括的な閾値を設定できるという考え方。既知の遺伝毒性発がん物質データベース（CPDB）から得られた TD_{50} データの分布解析から求められた遺伝毒性発がん物質の 10^{-5} の生涯過剰発がんリスクを基とした TTC レベルは、1.5 μg/person/day（＝0.03 μg/kg/day）である。

[2] 【省令】新規化学物質に係る試験並びに優先評価化学物質及び監視化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める省令

[3] 【告示】新規化学物質に係る試験並びに優先評価化学物質及び監視化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める省令第二条及び第四条第四号の規定により厚生労働大臣、経済産業大臣及び環境大臣が別に定める試験

[4] 生殖発生毒性と発がん性については、リスク評価（一次）の段階では、既知見で得られた場合に評価を行う。

[5] 人健康影響に係る有害性情報について、国が既知見を収集する情報源等の範囲は「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」に記載されている。

II.4 有害性評価Ⅱ

II.4.1 有害性評価Ⅱの前提・目的等

有害性評価Ⅱでは原則として、一般毒性と変異原性については、新規化学物質の審査において人健康影響の判定をするために省令[1]に定められている毒性試験（前節 II.3.5 に挙げた(ア)及び(イ)）もしくはそれと同等以上の結果を有する試験が行われていることを前提としている[2]。

II.4.1.1 有害性評価Ⅱの対象とする有害性項目

評価の対象とする有害性項目は、原則として一般毒性、生殖発生毒性、変異原性及び発がん性とする。ただし、既知見の収集等により新たな有害性情報が得られれば、個別に判断して対象項目として考慮する。

II.4.1.2 有害性評価Ⅱにおける評価対象物質の扱い

優先評価化学物質のリスク評価においては、有害性評価やリスク評価の実質的な対象物質である「評価対象物質」は、複数の物質である場合がある（II.2.3 参照）。そのような場合、有害性評価Ⅰでは、原則として優先評価化学物質ごとに評価対象物質を 1 つに決めて評価を行うこととした（II.3.1.2 参照）。有害性評価Ⅱにおいては、当該優先評価化学物質のリスク評価に必要な評価対象物質を設定する。その結果として、II.3.1.2 に示した例（ア）～（ウ）については、1 つの優先評価化学物質につき、複数の評価対象物質が設定されうる。

II.4.1.3 有害性評価Ⅱの目的

有害性評価Ⅱの目的は、前述（II.4.1.1）の有害性評価Ⅱで対象とする項目に関して次のとおりである。

(ア) 一般毒性及び生殖発生毒性については、精査に基づき有害性評価Ⅰのキースタディと不確実係数の見直しを行う。
(イ) 変異原性については、発がん性があると判断できる情報がある場合には発がん性の閾値の有無の扱いの判断に用いる。
(ウ) 発がん性があると判断された場合は、精査に基づき有害性評価Ⅰのキースタディを見直し、閾値の有無に応じて有害性評価Ⅱ独自の有害性評価値を導出する。

---

[1] 新規化学物質に係る試験並びに優先評価化学物質及び監視化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める省令
[2] このことは、有害性評価Ⅰの後に、法第 10 条第 1 項に基づく有害性等の調査の求め（II.3.5 参照）を行うことと同義である。

(エ) 有害性評価Ⅱにおいて有害性調査指示を行う根拠が得られた場合に、その調査項目を特定する。

既知見の更新状況の確認を行い、（ア）～（エ）を実施し、総合的な観点からキースタディを設定してリスク推計に用いる単一の有害性評価値を導出する[1]（図表 II-4 参照）。

II.4.1.4 有害性評価Ⅰとの違い

有害性評価ⅠとⅡ（Ⅲ）の違いを図表 II-10 に示す。

有害性評価Ⅰは、原則として精査を行わない段階であり、追加情報がなければスクリーニング評価の有害性クラス付けに用いられた有害性情報をそのまま用いる。有害性評価Ⅱは、既知見を含めて総合的な観点から精査を行う段階である。ただし、スクリーニング評価や有害性評価Ⅰの段階で既知見を含めた精査が済み、追加の有害性情報がなければ、有害性評価Ⅱにおいて精査を行う必要がない場合もありうる。なお、有害性評価Ⅲは、Ⅱと同様であり、既知見更新の確認を行い、追加情報があれば対応する。

[1] なお、有害性評価値は経口及び吸入の経路ごとに算出する。

図表 II-10　有害性評価ⅠとⅡ（Ⅲ）の違い

評価段階		有害性評価Ⅰ	有害性評価Ⅱ(Ⅲ)
評価対象とする項目		・原則として一般毒性、生殖発生毒性、変異原性及び発がん性	・原則として一般毒性、生殖発生毒性、変異原性及び発がん性 ・既知見の収集等により新たな有害性情報が得られれば、個別に判断して対象項目として考慮
評価対象物質の扱い		・複数の物質が評価対象物質となる場合、評価対象物質を１つに設定	・複数の物質が評価対象物質となる場合には、複数の評価対象物質を設定。
項目別の扱い	一般毒性・生殖発生毒性	・スクリーニング評価に用いた情報を使用（追加の有害性情報があれば信頼性評価を行い、使用可能であれば有害性評価値を導出しキースタディ選定ルール※に基づき選定） ・原則的な不確実係数を用い有害性評価値を導出（スクリーニング評価に用いた有害性評価値はそのまま使用） ・経口・吸入の区別をしない	・既知見の更新状況を確認し個別に精査してキースタディを選定 ・個別に精査し必要に応じて有害性評価値を導出（不確実係数の再設定やベンチマークドース法の適用等、個別判断） ・経口・吸入の区別をする
	発がん性	・可能であれば、変異原性の有無（発がん性の閾値の有無）に応じて、他機関等における評価により導出された NOAEL、BMDL 等や UR、SF、TD_{50} 等を用いて、有害性評価値を導出する。 ・経口・吸入の区別をしない	・発がん性に関する情報を精査後、キースタディ一を選定し、必要に応じ独自に NOAEL、BMDL や UR、SF を求める。変異原性の有無（発がん性の閾値の有無）に関する独自の判断結果に応じた有害性評価値を導出する。 ・経口・吸入の区別をする。
	変異原性	・分類結果等の定性的な情報を整理して、変異原性を有する物質を抽出（追加の有害性情報があれば信頼性評価を行い、使用可能※であれば分類情報に追加） ・発がん性の定量的評価の参考情報として使用	・発がん性があると判断できる情報があればその閾値有無の扱いの判断のため、既知見の更新状況を確認し個別に精査 ・発がん性が不明であれば必要に応じ有害性調査指示の必要性と調査項目の判断
法第 10 条の有害性等の調査の求め・有害性調査指示との関係		・スクリーニング毒性試験又はそれと同等以上のデータを有さない場合、必要に応じ法第 10 条第 1 項に基づく有害性等調査の求めを行うために不足する試験項目を特定	・必要に応じ、法第 10 条第 2 項に基づく長期毒性に係る有害性調査指示のために試験項目を特定

※　「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」に基づく。

II.4.2 既知見の更新状況の確認・収集及び精査の観点

II.4.2.1 既知見の更新状況の確認・収集

国が人健康影響の有害性に係る既知見を収集する範囲は「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について」を元に、必要に応じて収集範囲を広げる（II.2.1 参照）。リスク評価（一次）評価Ⅱ対象物質の人健康影響に関する有害性情報について、既知見の収集状況と、収集時点以降の各情報源の更新状況を確認し、未収集分があれば情報収集を行う（II.2.5 参照）。

既知見の中には、各種の基準値等（水道水の水質基準や大気環境基準等）が含まれている。有害性評価Ⅱの段階では、基準値等の元となっている有害性情報や基準値等の導出方法についても

調査する。さらに必要に応じ、生体内運命等についても情報収集を行う。これらについては、次節に記載する精査に用いる。

II.4.2.2 精査の観点

有害性等の性状データの質の評価（evaluation）には、以下の 3 つの観点がある。既存データの質の評価を効率的に行うために、①の観点から初期フィルターとして格付けした後、②と③の観点からの検討を専門家が行うという手順が推奨されている[1]。①の格付けに Klimisch コード[2]が使用され、「信頼性あり」とされる 1 又は 2 に格付けされたデータが②と③の精査の対象となる。

① reliability：標準化された試験方法への準拠を評価する観点。
② relevance：データがカバーする範囲等がハザードの特定やリスクキャラクタリゼーションのために適切かという観点[3]。
③ adequacy：有害性評価・リスク評価の目的に、データが有用かという観点[4]。

化審法において、スクリーニング評価とリスク評価（一次）評価 I の段階までは、主に①の観点からの信頼性評価を行うことになっている（II.2.5 参照）。リスク評価（一次）評価 I 終了以降は、性状データについて「総合的な観点による精査を踏まえたキースタディの見直し」を行うこととなっている[5]（図表 II-4 参照）。「総合的な観点」には、上記の①に加えて②や③の観点も含まれる。

「総合的な観点による精査」には次のような側面が含まれる。

(ア) 評価対象物質の設定と試験対象物質の関係等（II.2.3 参照）から、データが当該優先評価化学物質を評価するのに適切かどうかを検討する。
(イ) キースタディとしなかったデータについても、クロスチェックや証拠の重みとして考慮する。
(ウ) 着目するエンドポイント以外も含め、有害性のプロファイル全体を考慮する。
(エ) 物理化学的性状について、常温での外観、暴露経路や生体内運命に関連するため目配りする。

---

[1] OECD (2007) Manual for Investigation of HPV Chemicals.
[2] Klimisch, H.-J. et al. (1997) A systematic apporoach for evaluatind the quality of experimental toxicological and ecotoxicological data. Regulatory Toxicology and Phamacology 25, 1-5.
Klimiasch コードには以下の 4 つのランクがあり、原則として 1 と 2 のデータが評価に利用される。
1：信頼性あり（制限なし）、2：信頼性あり（制限付き）、3：信頼性なし、4：評価不能
[3] 例えば、主要な暴露経路で毒性試験の投与経路が設定されているか、対象媒体での物質の安定性等から勘案して試験設定等が適切かなどといった観点が考えられる。
[4] 例えば、被験物質の純度等が異なる複数のデータがある場合、有害性評価・リスク評価の目的が物質の有り姿での評価か、純品での評価かによって、評価に適切なデータは異なるといったことが考えられる。
[5] スクリーニング評価及びリスク評価に用いる性状データの信頼性について
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/ra_reliability.html

(オ) 暴露評価の結果について、主要な摂取経路を特定する観点から目配りする。
(カ) 既存の評価書等が得られる場合、そこでの考察や見解に目配りする。

II.4.3 一般毒性

一般毒性について、収集されたデータの精査を前節（II.4.2.2 ）に記載した観点から行い、必要に応じてキースタディを見直す。精査の主な内容は、次のような事項が考えられる。

(ア) 経口経路と吸入経路の両方の毒性試験データが得られる場合、エンドポイントとする標的臓器と暴露評価による人の主要暴露経路からみて、経路別に有害性評価値を設定するかどうか。
(イ) 生殖発生毒性試験又はがん原性試験の結果も得られる場合、それらの所見から一般毒性としての有害性評価を行うかどうか。必要がある場合は一般毒性の NOAEL 等を設定し、有害性評価値の導出を行う。
(ウ) NOEL から有害性評価値が導出されている場合も、NOAEL が設定されて有害性評価値が算出されている場合も[1]、長期的な影響への関与、ヒトへの外挿性、懸念すべき毒性の種類等を精査して、有害性評価値算定の出発点として適切な NOAEL（又はベンチマークドース）を設定できるかどうかについて検証する。
(エ) 基準値等について、その元となっている情報を精査し、そのエンドポイントや基準値等の導出方法を確認し、必要に応じて一般毒性としての有害性評価の見直しを行う。
(オ) 暴露評価による人の主要暴露経路からみて、得られている毒性試験の投与経路は妥当かどうか。
(カ) 経口経路の試験データだけがあり、主要暴露経路が吸入経路の場合、その物理化学的性状等からみて、経路間外挿が適切かどうか。
(キ) 不確実係数に関しては、以下に示すように、種差、個体差、試験期間、重大性に係る係数等について、詳細な毒性情報に基づき妥当性を検討する。

有害性評価値を導出する際の不確実係数は、次の項目について、専門家判断により改めて設定される。

1. 種差
2. 個体差

[1] 化審法の新規化学物質の審査においては、反復投与毒性の審議において NOEL で評価を行ってきたが、平成 21 年の化審法改正によりハザードベースの制度からリスクベースの制度へと移行したこと、リスク評価の段階では NOAEL から有害性評価値の導出を行うことを基本としていること等から、平成 23 年 11 月以降に届出又は申出のあった新規化学物質について、NOAEL に基づき評価を行うことになった。
「新規化学物質の審査における NOEL 及び NOAEL の取扱いについて（お知らせ）」
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/todoke/shinki/shinki_noael_111122.pdf

3. 適切な NOAEL が求められない場合
4. 試験期間の不足
5. データの不足（適切な投与期間やエンドポイントの測定が設定されていない等）
6. 影響の重大性

各々の項目について、適切な係数を設定できる科学的知見が得られない場合は、基本的に 10 を用いる。なお、以下の項目は、係数の設定に際して考慮できる。

「1. 種差」と「2. 個体差」に関しては、その違いに関して体内動態（トキシコキネティクス）や組織感受性（トキシコダイナミクス）に対応する科学的知見がある場合はそれらの定量的なデータで補正する。補正の方法は、IPCS において作成されたガイダンス[1]に従って適切な係数を設定する。

「3. 適切な NOAEL が求められない場合」は、用量依存性を考慮して、LOAEL に対して適当な不確実係数を設定するが、計算が可能な場合には（NOAEL が設定されている場合でも）ベンチマークドースを算出し、NOAEL の代替として使用する（この場合は、この項目に対する不確実係数は用いない）。ベンチマークドースの算出方法は、ベンチマークドース法の適用に関するガイダンス[2]に示された方法に従って計算する。

「4. 試験期間の不足」において、有害性評価 I で使用したデフォルトの係数に対して、化学物質の蓄積性や、投与期間と有害反応の発現時期や強さとの関連性等を考慮して見直しを行う。

また、「5. データの不足」に関連し、有害性の懸念があるものの適切な試験が行われていない場合には、追加の係数を加えることがある[3]。

「6. 影響の重大性」については、評価値の算出の基となる影響が、閾値のある発がん性、母毒性の無い発生毒性、神経毒性である場合には、影響の用量相関性、重篤度の大きさを考慮して、最大で 10 の係数を加える。

上記のような精査によって、NOAEL 設定の確認、経路別の有害性評価値の導出、すべての不確実係数の見直し、修正や追加等を行うとともに、有害性調査指示を行う場合（II.4.7 参照）の調査項目や試験方法に関する指導等につなげる。

II.4.4 生殖発生毒性

生殖発生毒性について、収集されたデータの精査を前節（II.4.2.2 ）に記載した観点から行い、必要に応じてキースタディを見直す。精査の主な内容は、前項 II.4.3 の一般毒性で示した事項と

[1] http://www.inchem.org/documents/harmproj/harmproj/harmproj2.pdf
[2] ベンチマークドース法の適用に関するガイダンス
http://dra4.nihs.go.jp/bmd/
[3] たとえば、他の情報から生殖発生毒性が懸念されるにもかかわらず、必要な生殖発生毒性に関する試験結果が得られないとき。

概ね共通する。

有害性評価値を導出する際の不確実係数は、原則は一般毒性の項（II.4.3）で示したとおりとする。

II.4.5 変異原性

変異原性について、収集されたデータの精査を前節（II.4.2.2 ）に記載した観点から行い、*in vitro* 及び *in vivo* 試験の結果に基づき、総合的に変異原性の有無を評価する。

局長通知「新規化学物質等に係る試験の方法について」において、変異原性試験の目的を「比較的簡便な短期間の試験により被験物質の遺伝毒性を検出し、それに基づくがん原性及び次世代への遺伝的影響について予測すること」としている。また、目的と試験結果に応じた試験の順序より、*in vitro* 試験で陽性の結果が得られている場合には「げっ歯類を用いる小核試験」を行う必要性について、*in vivo* 試験で陽性の結果が得られている場合には「がん原性試験」を行う必要性について、個別ケースに応じて検討を行う[1]。

II.4.6 発がん性

有害性評価Ⅱにおいて、発がん性の評価は、原則として経口と吸入の経路別に評価を行う。いずれの経路で評価を行うかは、得られる有害性情報と暴露経路等を勘案して、個別に設定する。

発がん性については、閾値の有無により有害性評価値の導出方法が分かれる。閾値の有無の扱いは、変異原性試験の結果と既存の評価を参考にしつつ専門家判断により行う。

なお、II.4.2 に述べた既知見の収集によって、各種の基準値等が発がん性に基づいて設定されていることが判明することがある。この場合、閾値有無等の扱いも含め基準値等の導出法等も確認し、必要に応じて有害性評価値の見直しを行う。

II.4.6.1 「閾値あり」と扱う場合の有害性評価値の導出

発がん性について、「閾値あり」として有害性評価値を導出する場合は、一般毒性、生殖発生毒性と同様に発がん性の NOAEL、BMDL 等を不確実係数積で除して算出する。発がん性の場合、不確実係数積は上記一般毒性の項目で示したとおり、種差、個体差、試験期間の他に、必要な場合は影響の重大性として 10 を追加して、それぞれの係数を乗じて設定する。ただし、専門家判断により、得られる情報に応じて扱いを変えることはありうる。

---

[1] 遺伝子突然変異誘発性を指標とする試験として「① 細菌を用いる復帰突然変異試験」、及び染色体異常誘発性を指標とする試験として「② 哺乳類培養細胞を用いる染色体異常試験又はマウスリンフォーマ TK 試験」を行い、両者いずれかで陽性の結果が得られた場合には「③ げっ歯類を用いる小核試験」を行うこととされている。①と②は *in vitro* 試験、③は *in vivo* 試験である。①と②は法第 10 条第 1 項に基づく有害性等の調査の求めを行うことができる試験項目であり、③は法第 10 条第 2 項に基づく長期毒性に係る有害性調査指示の試験項目である。

II.4.6.2 「閾値なし」と扱う場合の有害性評価値の導出

発がん性について、「閾値なし」として有害性評価値を導出する場合は、原則として、発がん性試験データから得られる $BMDL_{10}$ 等を用いて、UR 又は SF を求め、さらに 10^{-5} 相当の発がんリスクレベルを有害性評価値として導出する。

本スキームにおける UR 等の算定方法は原則として、ベンチマークドース法の適用に関するガイダンス[1]に従って $BMDL_{10}$[2]を計算し、原点へ直線外挿したときの傾きに基づき算出する[3]。ただし、専門家判断により、得られる情報に応じて扱いを変えることはありうる[4]。

II.4.7 有害性調査指示の項目の特定

優先評価化学物質のリスクが相当広範な地域で懸念され、長期毒性の該当性について判定する必要があると認めるに至ったときは、国は法第 10 条第 2 項に基づき、製造・輸入事業者に対して長期毒性に係る有害性の調査指示を行うことができる。有害性調査指示の試験項目は省令[5]に定められており、人健康影響に係る有害性に関しては次のとおりである。

(ア) 慢性毒性試験
(イ) 生殖能及び後世代に及ぼす影響に関する試験
(ウ) 催奇形性試験
(エ) 変異原性試験
（細菌を用いる復帰突然変異試験、ほ乳類培養細胞を用いる染色体異常試験又はマウスリンフォーマ TK 試験、げっ歯類を用いる小核試験）
(オ) がん原性試験
(カ) 生体内運命に関する試験
(キ) 薬理学的試験

（ア）～（キ）いずれの項目の有害性調査指示を行うかは、有害性評価Ⅱにおける精査と、リスク評価（一次）評価Ⅱ（暴露評価、リスク推計の結果）の結果も踏まえて検討を行う。基本的には、相当広範な地域でリスクが懸念される有害性項目と、その判断に必要な範囲が対象となる。また、有害性調査の試験対象物質については、評価対象物質（II.2.3 参照）を踏まえて指示内容に

---

[1] ベンチマークドース法の適用に関するガイダンス
http://dra4.nihs.go.jp/bmd/
[2] ベンチマーク用量の 95%信頼下限値（化学物質の評価で使用する BMD アプローチにおいて、動物実験投与量域内での用量-反応相関曲線に最も適合する数理モデルを選定し、反応指標が有意に検出できる一定の毒性誘発率（ベンチマーク用量：通常 10%）を示す投与量の信頼限界（通常 95%）下限値をいう）。
[3] 既存の SF 等が本スキームで原則としている算出法と異なる方法で導出されている場合等は、算出し直すことも考えられる。
[4] Time-to-tumor モデルや、PBPK モデルによるヒト曝露用量の補正、メカニズムが明らかな場合の生理学的モデルの利用などがある。
[5] 新規化学物質に係る試験並びに優先評価化学物質及び監視化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める省令

含める。

なお、リスク評価（一次）評価Ⅱの時点で有害性調査指示を行うかは、暴露評価についても十分な情報に基づく結果が得られていることが前提となる。

II.5 有害性評価Ⅲ

有害性評価Ⅲは、基本的には有害性評価Ⅱと同様である。

暴露情報の精査等が必要であるとしてリスク評価（一次）評価Ⅲを行うこととなった場合、暴露情報の収集等のために相応の時間を費やすことがありうる。有害性評価Ⅲを行う際に、過去の既知見収集時点以降の各情報源の更新状況を調査し、未収集分の情報収集を行う。追加収集分を加味して、必要に応じて精査やキースタディの見直しを行う。

II.6 リスク評価（二次）における有害性評価

リスク評価（二次）は、法第 10 条第 2 項による有害性調査指示により新たに得られた長期毒性に係る有害性情報を用いてリスク評価を行う段階である[1]。

新たに得られた有害性情報についてリスク評価（一次）の段階で収集された既知見を踏まえて精査し、不確実係数の設定、ベンチマークドース法の適用等、専門家による個別判断に基づき有害性評価値の導出等を行う。

[1] 既知見により長期有害性情報が得られ、長期毒性に係る判定が行える場合には、リスク評価（二次）は行わず、リスク評価（一次）において第二種特定化学物質の指定や優先評価化学物質の取消し等の判断がなされる。

II.7 付属資料

II.7.1 経路間外挿の妥当性

経路間外挿が必要な背景

優先評価化学物質のリスク評価では、人が環境経由で化学物質に暴露される経路を経口経路と吸入経路と想定している（II.2.4 参照）。

化学物質の環境への排出を概観すると、化学物質管理促進法（以下、化管法）により把握されている情報によれば、PRTR 対象物質の届出による総排出量の約 9 割は大気への排出である[1]。そのため、環境経由の暴露では、化学物質の性状によっては吸入経路が主となるものも少なくないと考えられる。

一方、有害性評価に用いる有害性情報は、化審法で得られる反復投与毒性試験が基本的に経口経路であるため、優先評価化学物質のリスク評価においては経口経路で行われた試験データの割合が多い。

一般的に、吸入経路の暴露が主となるような物質のリスク推計において、経口による反復投与毒性試験の結果を用いる場合には、毒性影響のエンドポイントや体内動態など様々な問題を考慮する必要がある。吸入経路で吸収された化学物質は、動脈血の流れとともに全身の各組織に輸送されるが、経口経路で吸収された化学物質は、いったん肝臓に送られて代謝を受けるため、各組織における化学物質量は、吸入経路の場合に比べ、経口経路の方が一般的に少なくなると考えられるからである。

しかし、実際に、経口と吸入による体内吸収率の違いが判明している物質は少なく、両経路における毒性影響として、全身影響が見られる場合には、単位換算を行って相互に（経口経路のデータを吸入経路の評価に、あるいは吸入経路のデータを経口経路の評価に用いるなど）利用せざるを得ないのが現状となっている。シックハウス（室内空気汚染）問題に関する検討会[2]においても、策定した 13 物質に対する指針値は、経口暴露における動物実験データから、ヒトのシナリオ（日本人の平均体重 50[kg]、呼吸量[3]15[m^3/day]）により吸入濃度への換算を行っている。

以上のような背景から、優先評価化学物質のリスク評価においても、吸入経路の暴露が主である物質について、経口経路による反復毒性試験データを用いることがある。そこでは、「経路間外挿は可能である」という前提を置いていることになる。その前提の妥当性確認のため、以下のよ

---

[1] 「経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課（令和４年３月）令和２年度ＰＲＴＲデータの概要― 化学物質の排出量・移動量の集計結果 ―」によると、全国の事業者から届出のあった総排出量は 124 千トン、その内訳は、大気への排出が 112 千トン（総排出量比率 90%）、公共用水域への排出が 6.5 千トン（同 5.2%）、事業所内の土壌への排出が 0.24 トン（同 0.19%）、事業所内の埋立処分が 5.1 千トン（同 4.1%）である。

[2] シックハウス(室内空気汚染)問題に関する検討会
http://www.nihs.go.jp/mhlw/chemical/situnai/kentoukai.html

[3] 本スキームでは、ヒトの呼吸量のデフォルト値として 20[m^3/day]を設定しているが、シックハウス問題に関する検討会では 15[m^3/day]としている。

うな解析を行った。

有害性データの経路間外挿の妥当性検証

■方法

NITE 化学物質管理センターで公開している『化学物質管理のためのリスク評価書活用の手引き』の添付資料 2-1[1]から、NEDO 事業による初期リスク評価において、経口経路と吸入経路の両方で有害性データが得られた物質のうち、以下のいずれかに該当する物質を除いた 34 物質を対象にした。すなわち、34 物質のデータセットは、経口経路と吸入経路の両方で反復投与の動物試験データがあり、かつ両経路とも一般毒性の全身影響がエンドポイントとなっているものである。

- 経口経路データ、吸入経路データのいずれか、もしくは両方に局所影響がみられる場合
- 経口経路データ、吸入経路データのいずれかが一般毒性で片方が生殖発生毒性である場合
- 経口経路データ、吸入経路データの片方が動物試験データで、片方が人のデータである場合（UFs が著しく違うため）
- 経口経路データ、吸入経路データのいずれかで影響がみられず、最大用量を採用している場合（影響の内容が不明であるため）

経口経路と吸入経路それぞれの有害性評価値（N(L)OAEL/UFs[2]）を抽出し、その比「経口の有害性評価値／吸入の有害性評価値」（以下、「経口／吸入比」と略。）を算出した。その際、不確実係数積の設置と、吸入経路データの摂取量換算については、「化学物質の初期リスク評価指針」[3]に記載の方法により行った。

■結果

対象とした 34 物質の経口／吸入比は、約 85%(29 物質)が±10 倍の範囲であった。これら初期リスク評価は文献等から有害性情報を収集しており、異なる機関が行った試験の結果を用いているが、この範囲に収まることが示された。

経口／吸入比が±10 倍に収まらなかった 5 物質の内訳は、10 倍を越える物質が 2 物質、0.1 倍未満の物質が 3 物質であった。

II.7.2 化管法指定化学物質の選定根拠からの有害性評価値の導出

化管法指定化学物質の選定根拠の有害性項目のうち、一般毒性と生殖発生毒性に係る項目は、経口慢性毒性、吸入慢性毒性、作業環境許容濃度及び生殖発生毒性の 4 つである（前 3 項目が一般毒性に対応）。これらの項目に対応する毒性試験結果や各種の基準値等に基づき、化管法におけ

[1] http://www.safe.nite.go.jp/risk/pdf/ippankekka.pdf
[2] UFs: 不確実係数（Uncertainty Factor）積のこと。
[3] 独立行政法人 製品評価技術基盤機構、財団法人 化学物質評価研究機構、委託元 独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 （20007）化学物質の初期リスク評価指針 Ver.2.0.
http://www.safe.nite.go.jp/risk/files/guidance_ver2_20070115.pdf

る有害性のクラスが付与されている。

このような化管法指定化学物質の指定根拠は、旧第二種監視化学物質の指定根拠ともなっていることから、これらの情報を用いたスクリーニング評価における有害性評価値の導出方法が設定されており、図表 II-119 に引用する[1]。リスク評価（一次）評価 I においても基本的にこれを踏襲する。

図表 II-119　化管法の選定根拠からの有害性評価値の導出方法

項目	情報源	有害性評価値導出のルール
経口慢性毒性	水質基準	水質基準値＝（NOAEL 等/UFs）×体重×飲料水の寄与率／1 日飲料水量 の式より、有害性評価値に相当する（NOAEL 等/UFs）の数値を、引用されている水質基準(日本、WHO 等)から体重を 50kg、飲料水の寄与率 10%、1 日飲料水量 2L/day として算出。
	経口反復投与毒性(投与期間 1 年以上)	PRTR・MSDS 対象物質ハザードデータに記載されている情報から NOAEL であれば UFs=100、LOAEL であれば UFs=1000 として NOAEL 等/UFs で算出。
	経口反復投与毒性(投与期間 1 年未満又は不明のもの)	上欄の UFs に試験期間の UF(3 ヶ月未満:6、3 ヶ月以上 1 年未満:2)を追加し、NOAEL 等/UFs で算出。試験期間が不明の場合は 3 ヶ月未満の UF(6) を適用。
	農薬経口毒性	ADI (mg/kg/day) は有害性評価値（NOAEL 等/UFs）に相当するとしてそのまま使用。
吸入慢性毒性	大気環境基準	大気基準値＝｛(NOAEL 等/UFs) ×体重×経口吸収率×大気の寄与率｝／｛吸入吸収率×1 日呼吸量｝ の式より、有害性評価値に相当する（NOAEL 等/UFs）の数値を、引用されている大気基準(日本、WHO 等)から体重を 50kg、経口吸収率＝吸入吸収率（分母分子で相殺)、大気の寄与率 100%、1 日呼吸量 20m³/day として算出。
	吸入反復投与毒性(投与期間 1 年以上)	PRTR・MSDS 対象物質ハザードデータに記載されている情報から NOAEL 等の数値を摂取量換算した値を用い、NOAEL であれば UFs=100、LOAEL であれば UFs=1000 として NOAEL 等/UFs で算出。
	吸入反復投与毒性(投与期間 1 年未満又は不明のもの)	上欄の UFs に試験期間の UF (3 ヶ月未満:6、3 ヶ月以上 1 年未満:2)を追加し、不確実係数積を替えて NOAEL 等/UFs で算出。試験期間が不明の場合は 3 ヶ月未満の UF(6) を適用。
作業環境許容濃度	ACGIH 許容濃度	作業環境許容濃度 TWA（時間加重平均値）は健康な成人に対する断続的な暴露での許容濃度であることから、一般環境での一般人への外挿のため、暴露時間の補正、断続的な暴露から継続的な暴露への補正、敏感な人も考慮した個体差を考慮し、これらを併せた不確実係数積を 100 とする。そのため、有害性評価値（摂取量換算）に相当する NOAEL 等/UFs は、TWA を 100 で除した濃度に、体重を 50kg、1 日呼吸量 20m³/day として算出。
	日本産業衛生学会許容濃度	同上
生殖発生毒性		PRTR・MSDS 対象物質ハザードデータに記載されている情報から、経世代試験の NOAEL であれば UFs=100、LOAEL であれば UFs=1000 として NOAEL 等/UFs で算出。経世代ではない簡易の試験あるいは試験が不明の場合、UF10 を追加し、NOAEL 等/UFs で算出。

注）UFs は不確実係数積の意味。UF の設定に関しては「有害性クラス分類の指標としての有害性評価値」（12 ページ）を参照。

[1] 審議会付属資料、スクリーニング評価手法の詳細（案）
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/screening_detail.pdf

II.7.3 各種の制度等における不確実係数

動物試験結果から人健康影響に関する有害性評価値を導出する際に国内外で用いられている不確実係数の設定状況について調査を行った。これらを参考に、本スキームで用いる不確実係数を設定した。国内で用いられている不確実係数等を図表 II-10 に、国外の不確実係数等を図表 II-11 に示した。本スキームで採用した不確実係数は図表 II-10 に示した。

種差については、国外において、トキシコキネティクスやトキシコダイナミクスを考慮した数値が提案されているが、これらは個々の物質・影響の内容に応じて設定されるものであり、データが得られている物質は限られる。優先評価化学物質のリスク評価（一次）評価 I では、多数の物質について一斉に評価することを想定しており、個別の設定が必要なトキシコキネティクス、トキシコダイナミクスに基づいた数値は得られないため、通常用いられている 10 を採用することとした。これは、実験動物の成獣における NOAEL とヒトの平均的成人での NOAEL の違いを意味する。

個体差については、性別、年齢（小児から老人まで）を考慮しているとされる 10 を採用した[1]。これは、ヒトの平均的成人での NOAEL と高感受性集団（乳幼児等）の NOAEL の違いを意味する。

試験期間に関しては、EU の REACH（ECHA）を参考に、試験期間別に慢性毒性値への外挿を想定した値を採用することとした。すなわち、90 日未満の試験については 6 を（使用するのは 28 日以上の試験）、90 日以上 1 年未満については 2 を、1 年以上の試験は 1 とした。

LOAEL を採用する場合には、NOAEL への外挿の不確実性として 10 を採用した。

影響の重大性については、回復が見込めないような重篤な毒性エンドポイントである場合に十分な安全性を見込むために追加で設定されるもので、国内外の事例では、非遺伝毒性発がん性、神経毒性、母毒性の現れない用量での催奇形性について、この不確実係数が用いられている[2]。

生殖発生毒性に関しては、二世代以上の経世代試験[3]以外の簡易な生殖試験等、あるいは発生毒性試験（催奇形性試験）等に対し、「試験の質」として不確実係数 10 をおいた。これは、生殖毒

---

[1] 「長谷川隆一ほか（2010）毒性データの不確実性とヒトへの外挿法に関する研究（平成 19 年度食品影響評価技術研究報告書）の［解説－6］ヒトのばらつき」では、ヒト及び動物の複数のデータ解析の結果、以下のように結論している。「平均的ヒト集団と高感受性集団との違いは、ヒトのデータでは毒性関連での十分な情報なく、また、げっ歯類のデータも殆どが LD50 の比較解析であった。唯一、新生児ラットと若齢ラットの反復投与の NOAEL を比較した報告があり、5.0 倍以内に 94%が含まれていた。従って、不確実係数 10 でヒトでのばらつきは十分にカバーできるものと考えられる。」
http://www.fsc.go.jp/fsciis/attachedFile/download?retrievalId=cho99920090704&fileId=001

[2] 前ページの脚注に記載した資料の「［解説－8］追加の不確実係数(UF)の使用例～毒性の重篤性等に対する追加 UF 及び発がんポテンシャルに対する UF～」より。

[3] 生殖発生毒性試験において「一世代」とは親（F0）世代のことをいい、一世代生殖毒性試験では、F0 への直接投与による影響と次（F1）世代への母体を介した間接影響を観察する。試験は通常 F1 世代の離乳時に終了する。「二世代」とは、F0 及び F1 世代のことをいい、二世代生殖毒性試験では、F0 世代への直接投与による影響、F1 世代への間接影響及び直接投与による影響、F2 世代への間接影響を観察する。試験は通常 F2 世代の離乳時に終了する。

性に対しては、特に、経世代における生殖毒性がみられるかどうかが重要と考えてのことである。また、母毒性の現れない用量での発生毒性（催奇形性）に関しては、発がん性と同様、次世代への「影響の重大性」ということに対する不確実性となっている。

図表 II-10　国内で用いられている不確実係数等

実施機関 出典 項目	リスク評価（一次） 評価Ⅰまでの設定	内閣府 食品安全委員会 『食品の安全性に関する用語集（第4版）』, 2008.[1]	厚生労働省 厚生科学審議会 生活環境水道部会 『水質基準の見直し等について』, 2003.[2]	環境省 化学物質の環境リスク初期評価ガイドライン（平成26年12月版）, 2014.[3]	GHS関連省庁 連絡会議 GHS表示のために行う消費者製品の暴露に由来するリスク評価の考え方, 2007.[4]	(独)製品評価技術基盤機構 (財)化学物質評価研究機構 <NEDO化学物質総合評価管理プログラム第1プロジェクト> 『初期リスク評価指針 Ver.2.0』, 2007.[5]
種差	10	10	10	10	10	10
個体差	10	10	10		10	10
試験期間	28日以上90日未満; 6 90日以上1年未満; 2 1年以上; 1		最大10	原則10	1～10	1か月; 10 3か月; 5 6か月; 2 12か月; 1
LOAEL採用	10		最大10	10	1～10	10
毒性の性質（閾値あり発がん性等）	影響の重大性; 最大10 生殖発生毒性*; 10		①最大10 ②10	①最大10 ②原則10 (1～10)		閾値ありの発がん性; 10
ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ（不完全性）	生殖発生毒性*; 10		試験の質; 最大10			*)
備考	*) 生殖発生毒性では、影響の重大性（母体毒性より低用量で発現する胎児影響がある場合）と試験の質（経世代試験ではない場合）を考慮するが、両者に合致する場合は併せて10とする。	ADIの設定には通常、種差と個体差を掛け合わせた100を用い、データの質によってより大きい係数（例えば500、1000、1500など）を用いる。	①は毒性の性質が重篤な場合、②は非遺伝子障害性の発がん性ありの場合。	MOEを求めるための係数として設定 ①はNOAEL等を非発がん影響から設定し、人に発がん作用があると考えられる場合、②はNOAEL等を発がん影響から設定した場合。		*) 試験の種類、質等により評価者判断で追加する場合あり。 UFsが10,000を超える時はそのデータは用いない。 試験期間の意味: 1か月＝1-3か月未満、3か月＝3-6か月未満、6か月＝6-12か月未満、12か月＝12か月超

1) http://www.fsc.go.jp/yougoshu_fsc.pdf
2) http://www.mhlw.go.jp/shingi/2003/04/s0428-4b.html
3) http://www.env.go.jp/chemi/report/h28-01/pdf/chpt1/1-2-1.pdf
4) http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/int/ghs_consumer_product_labelling.html
5) http://www.safe.nite.go.jp/risk/files/guidance_ver2_20070115.pdf

図表 II-11　国外で用いられている不確実係数等

実施機関 / 出典 / 項目	米国EPA A REVIEW OF THE REFERENCE DOSE AND REFERENCE CONCENTRATION PROCESSES. EPA/630/P-02/002F, 2002. [1]	WHO/IPCS Environmental Health Criteria 210: Principles for the assessment of risks to human health from exposure chemicals, 1999. [2]	ICH (International Conference on Harmonization of Technical Requirements for Registration of Pharmaceuticals for Human Use) ICH Harmonised Tripartite Guieline Impurities: Guideline for Residual Solvents Q3C(R5), 2011. [3]	ECHA (European Chemicals Agency) Guidance on iformation requirements and chemical safety assessment Chapter R.8: Characterisation of dose [concentration]-response for human health, 2012. [4]		ECETOC (European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals) Technical Report No 110, Guidance on Assessment Factors to Derive a DNEL, 2010.	Australia Department of Health and Ageing Environmental Health Risk Assessment, Guidelines for assessing human health risks from environmental hazards, 2004.
種差	情報がある場合*) TK マウス；7 ラット；4 モルモット；3 ウサギ；2 TD ×3	10 → TD $10^{0.4}$ (2.5) 10 → TK $10^{0.6}$ (4.0)	ラット；5 マウス；12 イヌ；2 ウサギ；2.5 サル；3 その他の動物；10	（全身影響の場合） ラット；4 マウス；7 ハムスター；5 モルモット；3 ウサギ；2.4 サル；2 イヌ；1.4 × 2.5	（局所影響の場合）*1 ×1 又は × 2.5	ラット；4 マウス；7 ハムスター；5 モルモット；3 ウサギ；2.4 サル；2 イヌ；1.4	10
個体差	10	10 → TD $10^{0.5}$ (3.2) 10 → TK $10^{0.5}$ (3.2)	10	（全身・局所） 労働者；5 一般人；10		労働者；3 一般人；5	10
試験期間	亜慢性から慢性へ；10 亜慢性より短期間は用いない	（亜慢性から慢性等）*)	半生*)以上；1 中長期**)；2 中期***)；5 短期；10	亜急性から亜慢性へ；3 亜慢性から慢性へ；2 亜急性から慢性へ；6	（局所影響の場合も同様）*2	亜急性から亜慢性へ；3 亜慢性から慢性へ；2 亜急性から慢性へ；6	
LOAEL採用	10	3 または 10	～ 10	3（最小/大多数の場合）又は 10（最大/例外的な場合）		3	10
毒性の性質（閾値あり発がん性等）		10までの数値	母体毒有の胎児毒性；1 母体毒無の胎児毒性；5 母体毒有の催奇形性；5 母体毒無の催奇形性；10	ケースバイケース*3			1～10
ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ（不完全性）	条件により3 または 10	考慮する （1より大きい値）		ケースバイケース*4			1～10*)
備考【不確実係数積(UFs)等】	TD；トキシコダイナミクス TK；トキシコキネティクス UFsは最大3,000。UFsが10,000のデータは参照値導出には不適切。 *)TKまたはTDに関するデータがない場合、デフォルト係数として3(ヒト等価濃度導出と併せた場合）または10。	TD;toxicodynamics, TK;toxicokinetics *)試験期間に関する具体的な記述はないが、追加的に考慮する項目としてあげている。	*)げっ歯類、ウサギで1年。ネコ、イヌ、サルで7年。生殖試験では器官形成がカバーされる期間を含むこと。 **)げっ歯類で6ヶ月、非げっ歯類で3.5年。 ***)げっ歯類で3ヶ月、非げっ歯類で2年。	*1; 単純な膜損傷由来の場合1、局所代謝経由及び呼吸器への影響の場合2.5 *2; 呼吸器への影響/通常、ラットで亜急性は28日間、亜慢性は90日間、慢性は1.5～2年 *3; 用量-反応関係の信頼性や影響の重大性によりNOAEL採用でも追加されることがある。 *4; 入手可能なデータの完全性や一貫性、代替手法(in vitroデータ、(Q)SAR等)によるデータの信頼性による。			*)「科学的データの量と質」という表現。

1) http://www.epa.gov/raf/publications/review-reference-dose.htm
2) http://www.inchem.org/documents/ehc/ehc/ehc210.htm
3) http://www.ich.org/fileadmin/Public_Web_Site/ICH_Products/Guidelines/Quality/Q3C/Step4/Q3C_R5_Step4.pdf
4) http://echa.europa.eu/web/guest/guidance-documents/guidance-on-information-requirements-and-chemical-safety-assessment

II.7.4 各種の制度等における発がん性の許容リスクレベル

閾値がないと考えられる発がん性物質のリスク評価を行うには、社会的に受容可能なリスクレベルを設定する必要がある。

我が国において初めてリスク評価を行って設定された水道水質基準（平成 4 年）は、世界保健機関(WHO)の飲料水ガイドラインの改定に沿い、生涯過剰発がんリスクを 10^{-5}（10 万人に 1 人がその物質が原因で発がんすると考えられる確率）として求められた。

その後、「今後の有害大気汚染物質対策のあり方について（中間答申）」が専門家を含む関係者から意見を聴取し、目標とするリスクレベルとして、10^{-4} から 10^{-6} まで幅広い意見が提示された。化学物質リスク総合管理技術研究イニシャティブ(2006)の報告書には、「これら関係者の意見や大気環境分野で用いられているリスクレベルの国際的動向、水質保全の分野で既に採用されているリスクレベル、自然災害等のリスク等も勘案し、総合的に検討した結果、生涯リスクレベル 10^{-5} を当面の目標に有害大気汚染物質対策に着手していくことが適当とされ、平成 8 年 10 月、第二次答申としてとりまとめられた。」と記載されている[1]。そして、上記の中央環境審議会「今後の有害大気汚染物質対策のあり方について（第 2 次答申）」（平成 8 年 10 月）[2]を受けて、ベンゼンの環境基準値（平成 9 年）は、目標とするリスクレベルを 10^{-5} として決められた。その後、有害大気汚染物質の優先取組物質のうち、塩化ビニルモノマー、ニッケル化合物、1,3-ブタジエン、1,2-ジクロロエタンが、閾値のない発がん性物質として、リスクレベルを 10^{-5} として指針値が設定されている。

以上のことから、本スキームとして、許容できるリスクレベルは 10^{-5} が適切と考え、これに基づき求めた 10^{-5} 相当の発がんリスクレベルを有害性評価値とすることとした。

[1] http://www8.cao.go.jp/cstp/project/envpt/pub/H17chem_report/h17chem-index.html
[2] https://www.env.go.jp/content/900399699.pdf

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

Ⅲ．生態影響に関する有害性評価

Ver.1.0

平成 26 年 6 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	平成 26 年 6 月	初版

目　次

III. 生態影響に関する有害性評価 1

III.1 はじめに 1
III.1.1 本章の位置づけ 1
III.1.2 生態影響に関する有害性評価の基本的な流れ 2

III.2 前提と基本的な考え方 3
III.2.1 用いる有害性情報 3
III.2.2 評価の対象とする生物 3
III.2.3 評価の対象とする毒性影響 3
III.2.4 優先評価化学物質と評価対象物質等との関係 4
III.2.5 信頼性評価とキースタディの選定 4
III.2.6 評価の進展に応じた有害性情報の置き換え 6
III.2.7 有害性評価と審議会の意見聴取との関係 6

III.3 有害性評価Ⅰ 7
III.3.1 有害性評価Ⅰの目的・前提等 7
III.3.2 水生生物に対する PNEC の導出 7
III.3.3 有害性情報提出の求めの項目の特定 9

III.4 有害性評価Ⅱ 10
III.4.1 有害性評価Ⅱの目的・前提等 10
III.4.2 既知見の更新状況の確認・収集及び精査の観点 11
III.4.3 PNEC の導出 15
III.4.4 有害性調査指示の項目の特定 20

III.5 有害性評価Ⅲ 20

III.6 リスク評価（二次）における有害性評価 21

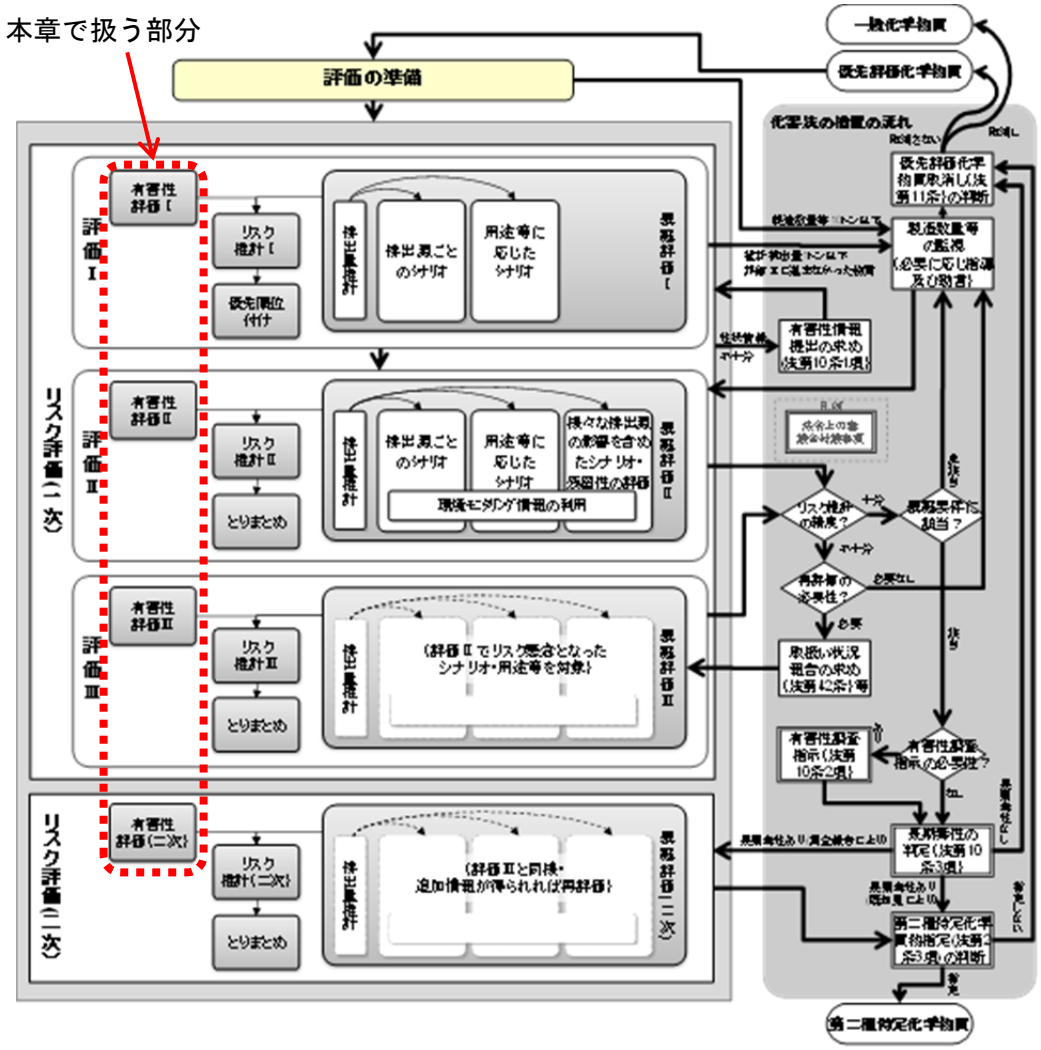
III.7 付属資料 22
III.7.1 PNEC 導出に用いる不確実係数（水生生物） 22
III.7.2 底生生物の有害性評価 23
III.7.3 底生生物に係る生息・食餌条件の例 25

III. 生態影響に関する有害性評価

III.1 はじめに

III.1.1 本章の位置づけ

本章では、優先評価化学物質のリスク評価における生態影響に関する有害性評価について記載する。リスク評価スキーム全体における本章で扱う部分を図表 III-1 に示す。評価の段階に応じて、4 つのステップ（有害性評価Ⅰ～Ⅲ及び有害性評価(二次)）が設けられている。



図表 III-1　リスク評価の手順フローにおける本章で扱う部分

有害性評価Ⅰは、「リスク評価の準備」に後続するステップとなる。有害性評価Ⅰで導出した PNEC[1]と、暴露評価Ⅰで推計した環境中の化学物質濃度を比較することにより、リス

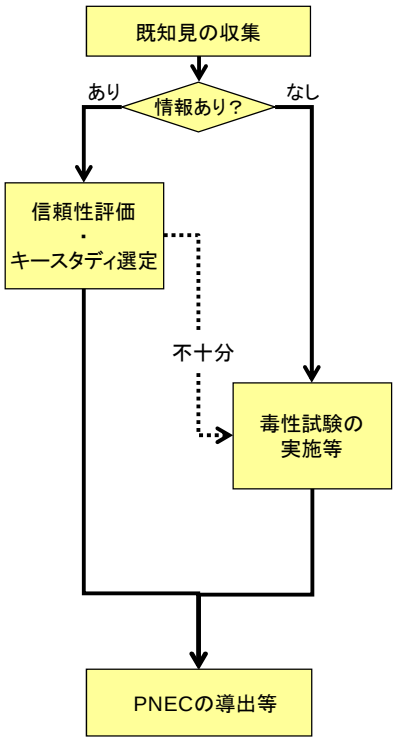
[1] PNEC: Predicted No Effect Concentration 予測無影響濃度

ク推計Ⅰが行われる。評価Ⅱ以降もリスク推計の方法は同様であるが、有害性評価又は暴露評価の情報が追加・更新され、より詳細な評価となっていく。

III.1.2　生態影響に関する有害性評価の基本的な流れ

有害性評価の基本的な流れと、スクリーニング評価及びリスク評価の各段階における扱いの概要を図表 III-2 に示す。

図表 III-2　有害性評価の基本的な流れと評価段階ごとの扱い【本章における記載箇所】

有害性評価の基本的な流れ	スクリーニング評価	リスク評価(一次)		リスク評価(二次)における有害性評価
		有害性評価Ⅰ	有害性評価Ⅱ・Ⅲ	
	「国が既知見を収集する情報源の範囲」について収集	左記の未収集分、収集時から追加・更新された情報を収集【Ⅲ.3】	更に広範な情報を収集【Ⅲ.4, Ⅲ.5】	同左【Ⅲ.6】
	「化審法における生態影響に関する有害性データの信頼性評価等について」に基づき実施	上記の追加情報について同左	総合的な観点による精査を踏まえたキースタディの見直し【Ⅲ.4.2】	追加情報について同左【Ⅲ.6】
	―（想定していない）	評価Ⅰ後に必要に応じ、生態毒性試験データを有さない場合、法第 10 条第 1 項に基づく有害性情報提出の求め【Ⅲ.3.3】	必要に応じ、法第10条第2項に基づく長期毒性に係る有害性調査指示【Ⅲ.4.4】	―
	原則的な不確実係数を設定して導出	追加分について同左（スクリーニング評価段階と同じ）【Ⅲ.3.2】	同左	有害性調査指示に基づく有害性情報から導出【Ⅲ.6】

有害性評価の一般的な進め方は、始めに既知見を収集し、信頼性のある情報が得られればそれを採用し、リスク評価で用いる PNEC の導出等を行う。既知見で評価に十分な情報が得られなければ、新たな毒性試験の実施を含む、事業者に対する情報提出の求めを行うことになる(図表 III-2 の「有害性評価の基本的な流れ」)。

この基本的な流れに対応する化審法における扱いは、評価段階に応じて図表 III-2 に示すように内容が異なっている。有害性評価Ⅰまでは原則、定型的な手順にしたがう。有害性評価Ⅱ以降は、データの精査を踏まえた総合的な判断を行うこととしている。新たな毒性試験の実施が想定されるのは有害性情報を有しないもしくは不十分な場合であり、有害性評価Ⅰの後に実施されるのは、藻類生長阻害試験、ミジンコ急性遊泳阻害試験及び魚類急性毒性試験であり、リスク評価（一次）の後には長期毒性に係る毒性試験である。優先評価

化学物質のリスク評価を進めるために、国は必要に応じて法第 10 条に基づき、製造・輸入事業者に対し「有害性情報提出の求め」又は「有害性調査指示」を行うことができる。

III.2 前提と基本的な考え方

ここでは、生態影響に関する有害性評価について、基本的な事項を説明する。

III.2.1 用いる有害性情報

人健康のリスク評価の場合と同様、有害性評価に用いる情報は以下のいずれかである。

・スクリーニング評価に用いた情報
・優先評価化学物質の指定後に事業者より報告等された情報
・優先評価化学物質の指定後に国が収集した情報

化審法においてスクリーニング評価とリスク評価（一次）評価Ⅰを行うために、国が有害性に係る既知見を収集する範囲は「化審法における生態影響に関する有害性データの信頼性評価等について」[1]に記載されている。

リスク評価（一次）評価Ⅱ以降では、この範囲に加えてより広範な情報収集を行う必要がある。

III.2.2 評価の対象とする生物

生態に関して、化審法では「動植物」と「生活環境動植物」という用語が使い分けられている。前者のほうが概念として広く、後者は、動植物のうち「人の生活と密接な関係のある動植物（例えば、有用な動植物）」等が該当するとされている。優先評価化学物質のリスク評価では、生活環境動植物を対象とし、それは水生生物及び底生生物とする。

ただし、評価Ⅰでは水生生物のみを対象とし、評価Ⅱ以降は、水生生物について、より幅広い生物種を対象とするとともに、化学物質の性状に応じて底生生物も評価対象に追加する。

III.2.3 評価の対象とする毒性影響

評価の対象とする生態に関する有害性影響は、生活環境動植物への長期毒性とする。し

[1] 化審法のスクリーニング評価及びリスク評価(一次)評価Ⅰに用いる性状データの信頼性評価等の公表について
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html

たがって、急性毒性値を用いて評価を行う場合には、慢性毒性値に外挿するため、急性慢性毒性比 ACR (Acute Chronic Ratio)を適用する[1,2]。(Ⅲ.3.2 の図表 III-4 等参照)

なお、評価Ⅱ以降での評価の対象とする水生生物及び底生生物には淡水域と海水域の生物が含まれるが、両者の有害性に対する感受性差に関する知見が少ないため、当面は感受性を同等と仮定し、区別せずに扱うこととする。

III.2.4 優先評価化学物質と評価対象物質等との関係

優先評価化学物質と評価対象物質等の関係については「Ⅰ章 評価の準備」に記載があるため、それを参照のこと。

III.2.5 信頼性評価とキースタディの選定

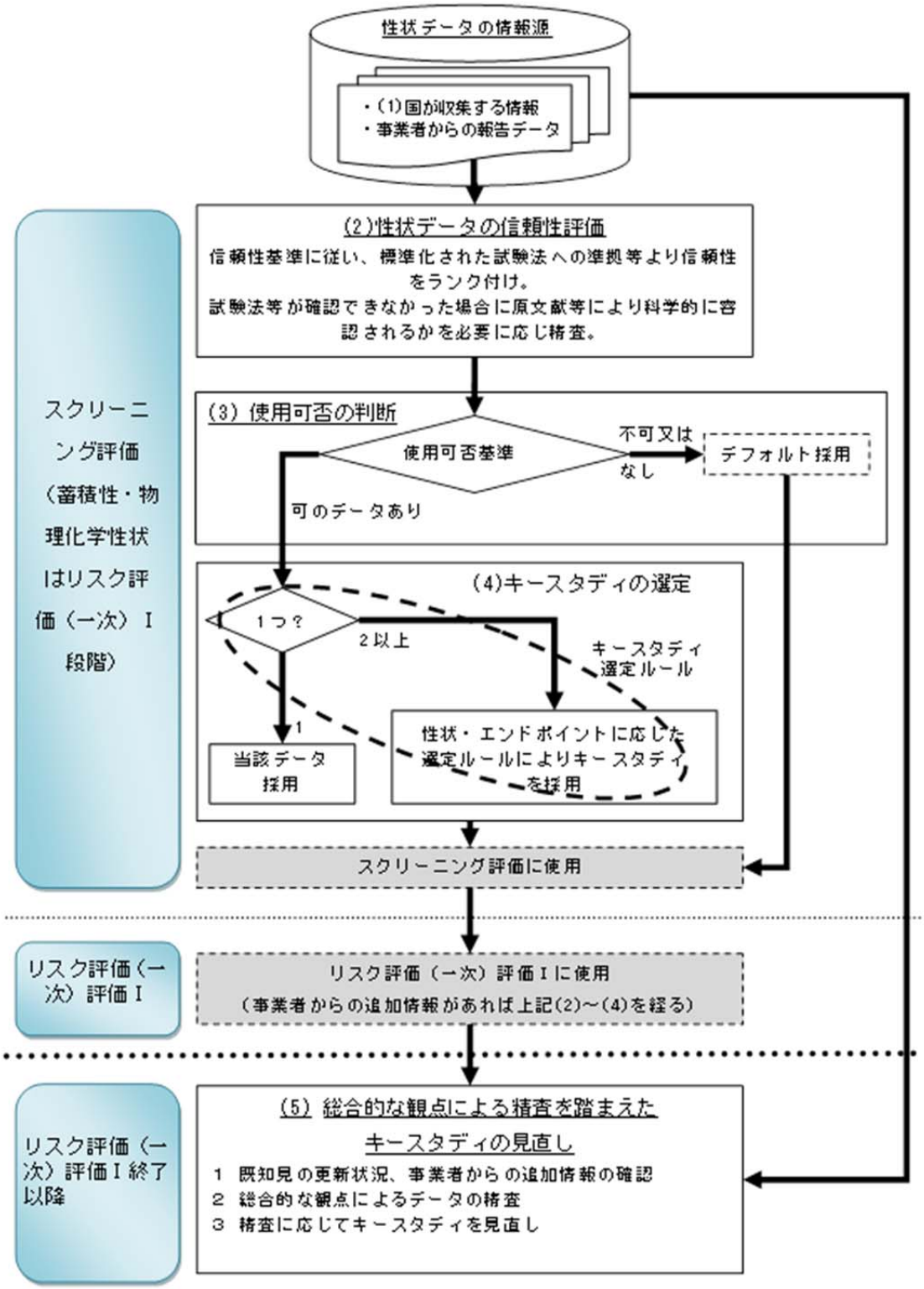
スクリーニング評価及びリスク評価に用いる生態影響に関する有害性データの信頼性評価等の考え方と方法については、「化審法における生態影響に関する有害性データの信頼性評価等について」として公表されている。

優先評価学物質の生態影響に係る有害性評価に用いるデータについては、基本的に同資料に基づいて信頼性評価、キースタディの選定等を行う。ただし、同資料では、スクリーニング評価とリスク評価（一次）の評価Ⅰまでの方法が記載されており、評価Ⅱ以降については、必要に応じて専門家による精査とキースタディの見直しが行われる（III.4.2.2 参照)。

スクリーニング評価及びリスク評価を通じた信頼性評価等に係る基本的な流れを図表 III-3 に示す。

[1] 平成 18 年度第 4 回薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会、化学物質調査会化学物質審議会第 56 回審査部会、第 59 回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会 資料 2-3　藻類生長阻害試験法改定に伴う第三種監視化学物質の判定基準の見直しについて
http://www.env.go.jp/council/05hoken/y051-59b.html

[2] 第 2 回厚生科学審議会化学物質制度改正検討部会化学物質審査規制制度の見直しに関する専門委員会、第 9 回産業構造審議会化学・バイオ部会化学物質管理企画小委員会及び第 2 回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査規制制度小委員会合同会合 参考資料 2　生態毒性の急性毒性値と慢性毒性値の比較



図表 III-3　性状データの質の評価等に係る考え方
「化審法のスクリーニング評価及びリスク評価(一次)評価Ⅰに用いる性状データの信頼性評価等の基本的考え方[1]」より

[1] http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html

III.2.6 評価の進展に応じた有害性情報の置き換え

優先評価化学物質の指定後に国が収集した情報や事業者からの有害性情報の報告等により、当初用いていた有害性情報より適切なデータ（試験期間が長期である等）が得られることがありうる。このような場合、それ以降の有害性評価では、適切なデータに置き換えて評価を行う。

これは優先評価化学物質が法第 11 条によりその指定が取り消され、一般化学物質となり、スクリーニング評価を行う場合も同様である。

III.2.7 有害性評価と審議会の意見聴取との関係

本ガイダンスの有害性評価の考え方・手法では、優先評価化学物質のリスク評価に用いる PNEC 導出等の基本的なルールを示している。ただし、本ルールに基づくことはリスク評価に用いる有害性データの決定を意味するのではなく、専門家による個別判断の余地を残すものである。それは、化審法の以下のような仕組みによる。

化審法では、「化学物質の有害性やリスクの評価が必要となる措置に関しては、専門家による科学的知見を踏まえた上で判断を行うことが適当である」との考え方のもと、いくつかの措置については審議会の意見を聴くものとされている（法第 56 条）。それらの措置のうち、優先評価化学物質のリスク評価に関連するのは以下の事項である。

（ア）第二種特定化学物質の政令指定（法第 2 条第 3 項）
（イ）優先評価化学物質の有害性調査の指示（法第 10 条第 2 項）
（ウ）優先評価化学物質の有害性調査の報告より第二種特定化学物質該当性の判定（法第 10 条第 3 項）

これらについて、所管する各省の審議会[1]の意見を聴取することとなっている。

本ガイダンスの手法は、上記の審議会に付議されるリスク評価書の案を作成するためのものである。リスク評価の中でも、特に有害性評価については、データの解釈等において高度な専門的知識を要し、定型化には限界がある。このため、審議会に付議するリスク評価書の案においては、リスク評価に利用可能な有害性データを明示し、有害性データの選択の適切性等について専門家による個別判断の余地を残すものとする。

[1] 厚生労働省については薬事・食品衛生審議会、経済産業省については化学物質審議会、環境省については中央環境審議会である。

III.3 有害性評価Ⅰ

III.3.1 有害性評価Ⅰの目的・前提等

III.3.1.1　有害性評価Ⅰの目的

有害性評価Ⅰの目的は、以下のとおりである。

（ア）リスク推計Ⅰに用いる PNEC の導出
（イ）「有害性情報提出の求め」を行う場合にその調査項目の特定

（ア）についてはⅢ.3.2 に、（イ）についてはⅢ.3.3 に記載する。

III.3.1.2　有害性評価Ⅰにおける評価対象物質の扱い

有害性評価Ⅰにおける評価対象物質の扱いについては「Ⅰ章 評価の準備」に記述があるため、詳細についてはそちらを参照のこと。

優先評価化学物質のリスク評価において、有害性評価やリスク評価の実質的な対象物質である「評価対象物質」は、複数の物質である場合がある。そのような場合、評価Ⅰでは、原則として優先評価化学物質ごとに評価対象物質を 1 つに決めて評価を行うこととする。

III.3.2　水生生物に対する PNEC の導出

評価Ⅰでは、評価対象生物は水生生物（藻類、ミジンコ、魚類)とし、スクリーニング評価の有害性クラス付けに用いた PNEC を用いる。

優先評価化学物質の指定後に新たに得られた有害性情報があれば、別途定める信頼性基準[1]にしたがって、データごとに信頼性ランクを付与し、使用可能なデータを選別する。使用可能な（信頼性のある）複数のデータが得られた場合、項目に応じた選定ルールにしたがい、キースタディを選定する。

優先評価化学物質の指定後に新たに得られた有害性情報をキースタディとする場合、不確実係数積（UFs: Uncertainty Factors）(図表 III-4)と導出フロー（図表 III-5)より PNEC を導出する。

PNEC 導出において、同一の栄養段階に関して慢性毒性値と急性毒性値のいずれも得られた場合、原則として慢性毒性値を優先的に使用する。

[1] 化審法における生態影響に関する有害性データの信頼性評価等について
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html

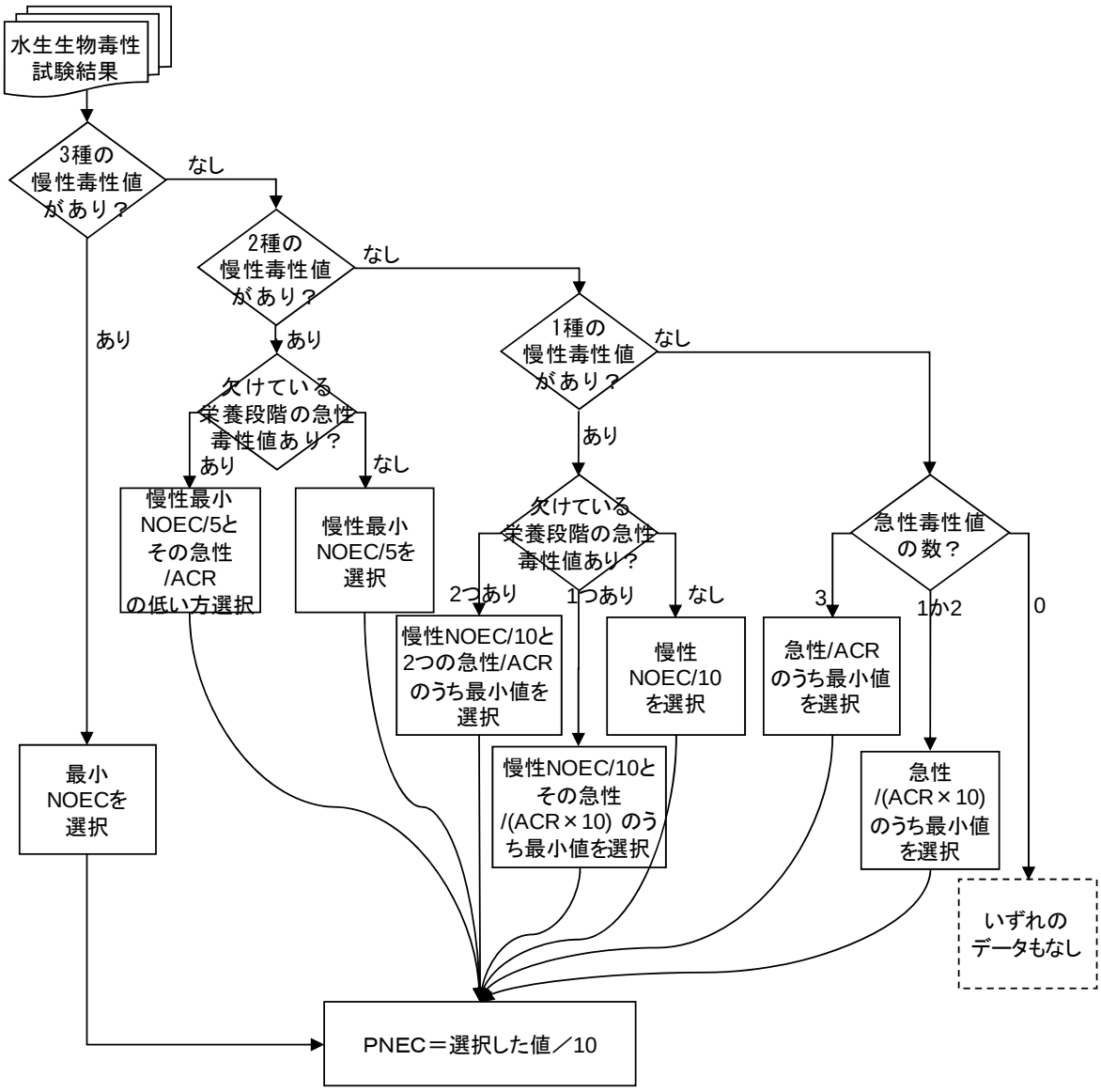
1

2 図表 III-4　スクリーニング評価及び有害性評価 I における

3 水生生物に対する PNEC の導出に用いる不確実係数

採用する毒性値	種間外挿の UF	急性から慢性への UF(ACR)	室内試験から野外への UF	不確実係数積 UFs
3 つの栄養段階の慢性毒性試験結果がある場合の最小の NOEC	－	－	10	10
2 つの栄養段階の慢性毒性試験結果がある場合の小さいほうの NOEC	5	－	10	50
1 つの栄養段階の慢性毒性試験結果がある場合の NOEC	10	－	10	100
3 つの栄養段階の急性毒性 L(E)C50 がある場合の最小の L(E)C50	－	ACR	10	10×ACR
慢性毒性試験結果が欠けている栄養段階の急性毒性値が揃わない場合の小さいほうの L(E)C50	10	ACR	10	100×ACR

ACR	藻類			20		
	ミジンコ	アミン類		100		
		アミン類以外		10		
	魚類			100		



図表 III-5　水生生物に対する PNEC の導出フロー

III.3.3 有害性情報提出の求めの項目の特定

国は、優先評価化学物質のリスク評価を進める上で必要であれば、法第 10 条第 1 項に基づき、製造・輸入事業者に対して有害性情報提出の求めを行うことができる。

有害性等の情報の提出を求めることができる試験項目は省令[1]に定められており、生態影響に関する有害性データに関しては以下の(ア)～(ウ)である。これらは新規化学物質の審査において、生態影響に係る判定を行うために必要な試験項目と同じである。

(ア) 藻類生長阻害試験
(イ) ミジンコ急性遊泳阻害試験

[1] 新規化学物質に係る試験並びに優先評価化学物質及び監視化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める省令

（ウ）魚類急性毒性試験

有害性情報提出の求めを行うため、有害性評価Ⅰの段階で水生生物について有害性情報を有しない優先評価化学物質をリスト化する。また、その際には、複数の評価対象物質が設定される優先評価化学物質については、評価対象物質ごとに有害性情報を有しているかについて確認する。なお、有害性情報提出の求めを行う前には、国は既知見の有無の確認を行う[1]。

III.4 有害性評価Ⅱ

III.4.1 有害性評価Ⅱの目的・前提等

III.4.1.1　有害性評価Ⅱの目的

生態影響に関する有害性評価Ⅱの目的は、以下の 2 点である。

（ア）リスク推計Ⅱに用いる PNEC の導出
（イ）有害性調査指示を行う十分な根拠が得られた場合には、その調査項目の特定

（ア）について、Ⅲ.4.3 に記載する。（イ）については、有害性調査指示に係る省令に規定する項目のうち、いずれの指示を行うのかは個別に特定する。

III.4.1.2　有害性評価Ⅱの対象とする生物

有害性評価Ⅱでは、水生生物に加えて「当該優先評価化学物質について既に得られているその組成、性状等に関する知見に基づいて、その優先評価化学物質が環境中において底質に分布し残留しやすいものである場合」（III.4.3.3 参照）に、底生生物も対象とする。

また、優先評価化学物質のリスク評価ではⅢ.2.2 のとおり生活環境動植物が対象とされているが、人の生活環境には多種多様な動植物が存在し、これらへの影響を評価するためには、可能な範囲で多くの動植物に関する有害性情報を収集し、評価することが望ましい。そこで、有害性評価Ⅱ以降で有害性データを収集する生物種は、化審法試験法[2]の対象種に加え他の法令等において定められた試験法、OECD テストガイドラインや ISO の試験法等の国際的に認められた試験法及び米国等、諸外国の標準試験法等（以下「特定試験法」という。）の対象である水生生物又は底生生物とする。

[1] 生態影響に関する有害性情報について、国が既知見を収集する情報源等の範囲は「化審法における生態影響に関する有害性データの信頼性評価等について」に記載されている。
[2] 「新規化学物質等に係る試験の方法について」（平成 23 年 3 月 31 日　薬食発第 0331 号第 7 号、平成 23・03・29 製局第 5 号、環保企発第 110331009 号）に記載された試験方法

III.4.1.3 有害性評価Ⅱにおける評価対象物質の扱い

優先評価化学物質のリスク評価においては、有害性評価やリスク評価の実質的な対象物質である「評価対象物質」は、複数の物質である場合がある。そのような場合、評価Ⅰでは原則として優先評価化学物質ごとに評価対象物質を 1 つに決めて評価を行うこととしたが、評価Ⅱにおいては、当該優先評価化学物質のリスク評価に必要な評価対象物質を設定する。その結果として、1 つの優先評価学物質につき、複数の評価対象物質が設定される可能性がある。

III.4.1.4 有害性評価Ⅰとの違い

原則として、有害性評価Ⅰは生態影響に関する追加的な精査を行わない段階であり、有害性評価Ⅰはスクリーニング評価の有害性クラス付けに用いられた PNEC をそのまま用いる。一方、有害性評価Ⅱでは、より広範な情報を収集した上で、既知見を含めて精査を行う。ただし、スクリーニング評価の段階で既知見を含めた精査が済み、追加の有害性情報がなければ、評価Ⅱにおいて精査を行う必要がない場合もある。

また、有害性評価Ⅱでは、水生生物に加えて、底生生物も対象とする場合がある（Ⅲ.4.3 参照）。

III.4.2 既知見の更新状況の確認・収集及び精査の観点

III.4.2.1　既知見の更新状況の確認・収集

有害性評価Ⅱの評価対象物質について、優先評価化学物質の指定後に新たに得られた有害性情報の報告に加え、スクリーニング評価の際の既知見の収集状況とその後の更新状況を調査し、未収集分があれば情報収集を行う。国が生態影響の有害性に係る既知見を収集する範囲は「化審法における生態影響に関する有害性データの信頼性評価等について」[1]に記載のある情報源に加えて、より広範囲の情報を収集するために一般的な文献データベース等も情報源とする（図表Ⅲ－6)。

[1] 化審法のスクリーニング評価及びリスク評価(一次)評価Ⅰに用いる性状データの信頼性評価等の公表について
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html

1

2 **図表 III-6　有害性評価Ⅱの信頼性評価に供する情報源**

情報の種類	情報源
評価書等	①環境省　化学物質の環境リスク評価（生態リスク初期評価） ②(独)製品評価技術基盤機構・(財) 化学物質評価研究機構　化学物質の初期リスク評価　（(独) 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）委託事業） ③(独)産業技術総合研究所　詳細リスク評価書 ④OECD（経済協力開発機構）HPVC プロジェクト/ CoCAM （Cooperative Chemicals Assessment Meeting ）「SIDS」（Screening Information Data Set） ⑤欧州連合リスク評価書「EU-RAR」（European Union Risk Assessment Report） ⑥世界保健機関（WHO）「EHC」（Environmental Health Criteria） ⑦世界保健機関（WHO ）/国際化学物質安全性計画（IPCS）国際簡潔評価文書「CICAD」（Concise International Chemical Assessment Document） ⑧カナダ環境保護法優先物質評価書（Canadian Environmental Protection Act Priority Substances List Assessment Report） ⑨Australia NICNAS Priority Existing Chemical Assessment Reports ⑩BUA Report ⑪Japan チャレンジプログラム ⑫農薬取締法　水産動植物登録保留基準設定に用いられた有害性データ ⑬水生生物保全に係る水質環境基準策定に用いられた有害性データ
生態毒性データベース等	①化審法審査済みの有害性データ（新規及び既存化学物質） ②事業者から報告された有害性データ（実測又は学術論文等の有害性データ） ③国内外の政府機関等で実施された生態影響試験 ・環境省生態影響試験事業等での有害性データ ・濃縮度試験予備試験での有害性データ ・既存点検での有害性データ ④国内外の政府機関等から公表されている有害性データ ・米国環境保護庁（US EPA）Pesticide Ecotoxicity Database に登録された有害性データ ・欧州連合（EU）ESIS（European chemical Substances Information System）に収録されている「IUCLID」（International Union Chemical Information Database）に登録された有害性データ ・欧州連合（EU）ECHA（European Chemicals Agency）のデータベースに登録された有害性データ ・欧州産業界 ECETOC の水生生物毒性データベース（ECETOC Aquatic Toxicity：EAT）に登録された有害性データ ・WHO/FAO Pesticide Data Sheets（PDSs） ⑤以下の生態毒性データベース等から得られる学術論文等での有害性データ ・US EPA 生態毒性データベース「AQUIRE」（AQUatic toxicity Information REtrieval） ・Aquatic OASIS（OECD QSAR Toolbox に含まれる生態毒性データベース）
その他の生態毒性情報源	①科学技術振興機構(JST)文献検索システム(JDreamⅢ,検索データベース：JSTPlus, JST7580, JMEDPlus, MEDLINE) ②国立情報学研究所 NII 論文情報ナビゲーター(CiNii) ③その他、インターネット検索

3

4

III.4.2.2　有害性データの精査の観点

(1) 有害性データ精査に際しての基本原則

有害性等の性状データの質の評価（evaluation）を行う際には、以下の 3 つの観点（①「reliability」(信頼性）、 ②「relevance」(適切さ)、③「adequacy」(有用性)）を考慮することが適当である。

欧州連合の REACH では、得られた情報が REACH の目的に十分な質を有しているかが評価されている。データの質の評価では、２つの基本的な事項（「basic elements」）として「relevance」(適切さ)と「reliability」(信頼性)の観点で検討が行われ、その結果から、そのデータがリスク評価等に有用であるか（「adequacy」）が評価される。これらの用語は、Klimisch et al (1997)[1]により定義されたものである[2]。

① reliability（信頼性）: 試験報告書又は公表資料の評価であり、標準化された試験方法に準拠しているか。
② relevance（適切さ）: データと試験は、特有の有害性やリスク特性を適切に捉えているか。[3]
③ adequacy (有用性) : 有害性評価・リスク評価の目的に、データが有用であるか。最も適切で信頼性のあるデータの評価に用いられる。

化審法の生態影響に関する有害性評価は、「Ⅲ.1.2 生態影響に関する有害性評価の基本的な流れ」に従い実施される。スクリーニング評価及び評価Ⅰの段階では、原則、定型的な手順に従い実施することになるが、この手順にはスクリーニング評価及び評価Ⅰの目的に応じた①から③の観点が含まれる(III.2.5 参照)。有害性評価Ⅱ以降は、データの精査を踏まえた総合的な判断を行うこととしており、性状データについて「総合的な観点による精査を踏まえたキースタディの見直し」を実施する[4] (図表 III-3 参照)。「総合的な判断」をするための「総合的な観点による精査」には以下の観点が含まれる。

---

[1] Klimisch, H.J. et al. (1997) A systematic approach for evaluation the quality of experimental toxicological and ecotoxicological data. Regulatory Toxicology and Phamacology 25, 1-5.
Klimisch コードには以下の 4 つのランクがあり、原則として 1 と 2 のデータが評価に利用される。1：信頼性あり(制限なし)、2：信頼性あり(制限付き)、3：信頼性なし、4：評価不能

[2] OECD Manual for the Assessment of Chemicals.
http://www.oecd.org/document/7/0,3746,en_2649_34379_1947463_1_1_1_1,00.html

[3] 例えば、主要な暴露経路で毒性試験の投与経路が設定されているか、対象媒体での物質の安定性等から勘案して試験設定等が適切かなどといった観点が考えられる。

[4] 化審法のスクリーニング評価及びリスク評価(一次)評価Ⅰに用いる性状データの信頼性評価等の基本的考え方
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/shinraisei_kijun.html

(ア) 当該優先評価化学物質の評価において、評価対象物質の設定と試験対象物質の関係等から、性状データのカバーする範囲が適切かどうかを評価する。
(イ) 水-オクタノール分配係数が大きいなど底質に分布し残留しやすいと考えられる物質については、水生生物に加えて底生生物についても評価する。
(ウ) 生活環境の多種多様な動植物への影響を評価するため、情報を収集する生物種を化審法試験法の対象種だけでなく特定試験法の対象種も加えて評価する。特定試験法は、国内外の権威ある機関に認められたもののみを用いることでデータの有用性を確保する。
(エ) 信頼性評価では、可能な限り個別の原著にさかのぼって試験法への適合等を確認し、⑵に定める４つの信頼性ランクに区分する。なお、PNEC 導出に使用可能な有害性データは、信頼性ランク「１」、「２」に該当するものとし、これらは同等に扱うものとする。
(オ) 信頼性ランク「４」とされた有害性データは、キーススタディを選定する際の参考としてクロスチェックや証拠の重み付け等に利用する。
(カ) 国内外の規制値等が定められている場合は、当該規制値の導出に用いられた毒性値等との比較・検証を行う。

⑵ 信頼性ランクの区分

評価Ⅱに用いる有害性データについて、reliability 及び relevance の観点から信頼性ランクを付与する。信頼性ランクは、基本的にスクリーニング評価での考え方を踏襲する。具体的には、以下の４ランクに区分する。

【ランク１信頼性あり（制限なし）】

・ 化審法試験法又は特定試験法を用いて、GLP（Good Laboratory Practice、優良試験所基準）に従って試験が実施されている。

かつ

・ 試験対象物質に関する情報（純度、成分等）が明記されており、含まれている不純物等の成分は毒性に影響しないと考えられる。

【ランク２信頼性あり（制限付き）】

・ 化審法試験法又は特定試験法からの逸脱や不明な点が若干あるが、総合的に判断して信頼性がある。

かつ

・ 試験対象物質に関する情報（純度、成分等）が明記されており、含まれている不純物等の成分は毒性に影響しないと考えられる。

【ランク３信頼性なし】

・ 試験方法は、化審法試験法又は特定試験法からの逸脱が著しく、これら試験法へ

の適合性が判断できないか、科学的に妥当ではない。

又は

・　試験対象物質に関する情報（純度、成分等）が明記されているが、不純物が毒性値に影響している可能性が否定できない。

【ランク４評価不能】

・　試験方法に不明な点が多く、化審法試験法又は特定試験法への適合性が判断できないか科学的な妥当性を判断する情報がない。

又は

・　試験対象物質に関する情報（純度、成分等）が明記されておらず、その妥当性が判断できない。

III.4.3 PNEC の導出

III.4.3.1　キースタディの選定

収集された有害性データについて信頼性ランクを付与し、使用可能なデータを選別する。エンドポイントについては、慢性毒性では無影響濃度（NOEC）、急性毒性については半数致死濃度（LC50）と半数影響濃度（EC50）とする。なお、慢性毒性での無影響濃度が得られない場合は、x%影響濃度（ECx）または最大許容濃度（MATC）等を活用することができる。

各栄養段階又は各生息・食餌条件の急性・慢性の試験項目ごとに信頼性ランク１及び２の毒性値のうち、原則、より小さな毒性値を採用することとして、専門家判断によりキースタディを選定する。なお、信頼性ランク４が付与された毒性値は、キースタディ選定の際の参考としてクロスチェックや証拠の重み付け等に利用するが、キースタディとはしない。

III.4.3.2　水生生物に対する PNECwater の導出

既知見の収集等による新たな有害性情報の追加や精査に伴い、必要に応じて PNECwater の見直しを行う。PNECwater 導出に用いる不確実係数は、図表Ⅲ－7 のとおりである。

PNECwater の導出の際には、同時に、有害性調査指示等による毒性データの追加の必要性について検討するため、不足している毒性データの種類を整理する。

図表 III-7　有害性評価Ⅱ以降における水生生物に対する PNEC の導出に用いる不確実係数

採用する毒性値	種間外挿の UF	急性から慢性への UF(ACR)	室内試験から野外への UF	不確実係数積 UFs
3 つの栄養段階の慢性毒性試験結果がある場合の最小の NOEC	－	－	10	10
2 つの栄養段階の慢性毒性試験結果がある場合の小さいほうの NOEC	5	－	10	50
1 つの栄養段階の慢性毒性試験結果がある場合の NOEC	10	－	10	100
3 つの栄養段階の急性毒性 L(E)C50 がある場合の最小の L(E)C50	－	ACR	10	10×ACR
慢性毒性試験結果が欠けている栄養段階の急性毒性値が揃わない場合の小さいほうの L(E)C50	10	ACR	10	100×ACR

ACR	生産者			20		
	一次消費者	アミン類		100		
		アミン類以外		10		
	二次消費者（捕食者）			100		

III.4.3.3　底生生物に対する PNECsed の導出

底生生物については、「既に得られているその組成、性状等に関する知見に基づいて、環境中において底質に分布し残留しやすいもの」である場合に評価を行うこととする。

「環境中において底質に分布し残留しやすいもの」か否かは評価対象物質の logKow の値で判別するものとし、logKow が 3 以上の場合に「底質に分布し残留しやすい」と分類する[1]。

底生生物を評価対象とする際、既存データが得られる場合と得られない場合があり、以下のように底生生物の PNEC である PNECsed[2]を導出する(図表 III-8 参照)。

PNECsed の導出の際には、同時に、有害性調査指示等による毒性データの追加の必要性について検討するため、不足している毒性データの種類を整理する。

[1] REACH のガイダンスにおける「一般に Koc<500～1000 の物質は底質に吸着する可能性は低い。底生生物の試験の対象とする物質は『logKoc 又は logKow≧3』をトリガー値とすることができる。」との見解に基づいた。ECHA (2012) Guidance on information requirements and chemical safety assessment, Chapter R.7b: Endpoint specific guidance, R.7.8.7 Introduction to sediment organisms' toxicity.

[2] $PNEC_{sed}$ の sed は sediment（底質）の略。

(1) 底生生物の有害性データによる PNECsed の導出

底生生物に対する信頼性のある有害性データが得られた場合、得られたデータに基づいて PNECsed を設定する。利用可能なデータが複数得られれば、慢性毒性値を優先的に使用する。また、慢性毒性値の選定の際、「異なる生息・食餌条件でのデータ数」により、不確実係数を選定する(図表 III-8 参照)。この不確実係数は REACH のガイダンスの淡水域の底生生物に対する設定に準じている[1]。

(2) 平衡分配法による PNECsed の導出

底生生物の有害性情報が得られない場合、代替的な方法として位置づけられている「平衡分配法」を適用し、水生生物に対する PNECwater から底生生物に対する PNECsed を推計する[2]。この方法では、以下を仮定している。考え方の詳細については、付属資料 III. 7. 2 に記載されている。

(ア) 底生生物と水生生物は化学物質に対する感受性が同等である。
(イ) 底質(粒子)中濃度、間隙水中濃度、底生生物中濃度は平衡状態にある。

以上の仮定のもと、PNECwater を底質中の粒子吸着態と水の間の分配係数を用いて底質中濃度に換算し、これを PNECsed とする。なお、環境中でイオン化する物質等、平衡分配法での推計が適切に実施できない化学物質については、留意する必要がある。

【基本式】

（3≦logKow＜5 の場合）

$$PNEC_{sed}[\mathrm{mg/kg\ wwt}] = \frac{Kp_{\mathrm{susp-water}}}{RHO_{\mathrm{susp}}} \times PNEC_{water} \times 1000$$

$$PNEC_{sed}[\mathrm{mg/kg\ dwt}] = PNEC_{sed}[\mathrm{mg/kg\ wwt}] \times \mathrm{CONVsusp}$$

（5≦logKow の場合）

$$PNEC_{sed}[\mathrm{mg/kg\ wwt}] = \frac{Kp_{\mathrm{susp-water}}}{RHO_{\mathrm{susp}}} \times PNEC_{water} \times 1000 \times \frac{1}{10}$$

[1] ECHA (2008) Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.10: Characterisation of dose [concentration]-response for environment, R.10.5.2.2 Calculation of PNEC for fresh water sediment using assessment factors.
[2] REACH Guidance における R.10.5.2.1 Calculation of PNEC for freshwater sediment using equilibrium partitioning.

$$PNEC_{sed}[\text{mg/kg dwt}] = PNEC_{sed}[\text{mg/kg wwt}] \times \text{CONVsusp}$$

（湿重換算）PNECsed［mg/kg wwt］＝{[浮遊物質(m^3)/水分配係数(m^3)]/浮遊物質のかさ密度(kg/m^3)}×PNECwater(mg/L)×1,000

（乾重換算）PNECsed［mg/kg dwt］＝底質PNEC［mg/kg wwt］×浮遊物質中の対象物質濃度換算係数

【各パラメータの算出方法】

① $\text{Kp}_{\text{susp-water}}\left[\frac{\text{m}^3}{\text{m}^3}\right] = \frac{\text{Ctotal susp}}{\text{Cpore susp}}$

$$= \text{Fwater susp} + \text{Fsolid susp} \times \frac{\text{Kp susp}}{1{,}000} \times \text{RHOsolid}$$

[浮遊物質(m^3)/水分配係数(m^3)]

＝浮遊物質中の対象物質濃度(mg/ $msusp^3$)/ 間隙水中の対象物質濃度(mg/ $mwater^3$)

＝浮遊物質の液相率(m_{water}^3/m_{susp}^3)＋浮遊物質の固相率(m_{solid}^3/m_{susp}^3)×浮遊物質の固相成分と水との分配係数(L/kgsolid)/1,000×固体密度(kg_{solid}/m_{solid}^3)

パラメータ名		単位	内容	算出又は値	備考
Fwater susp		[m_{water}^3/m_{susp}^3]	浮遊物質の液相率	0.9	デフォルト値
Fsolid susp		[m_{solid}^3/m_{susp}^3]	浮遊物質の固相率	0.1	デフォルト値
Kp susp		[L/kgsolid]	浮遊物質の固相成分と水との分配係数	Foc susp×Koc	
	Foc susp	[kg_{oc}/kg_{solid}]	浮遊物質の固相成分に対する有機炭素重量比	0.1	デフォルト値
	Koc	[L/kg]	有機炭素／水分配係数	化学物質毎に定める値	
RHOsolid		[kg_{solid}/m_{solid}^3]	固体密度	2,500	デフォルト値

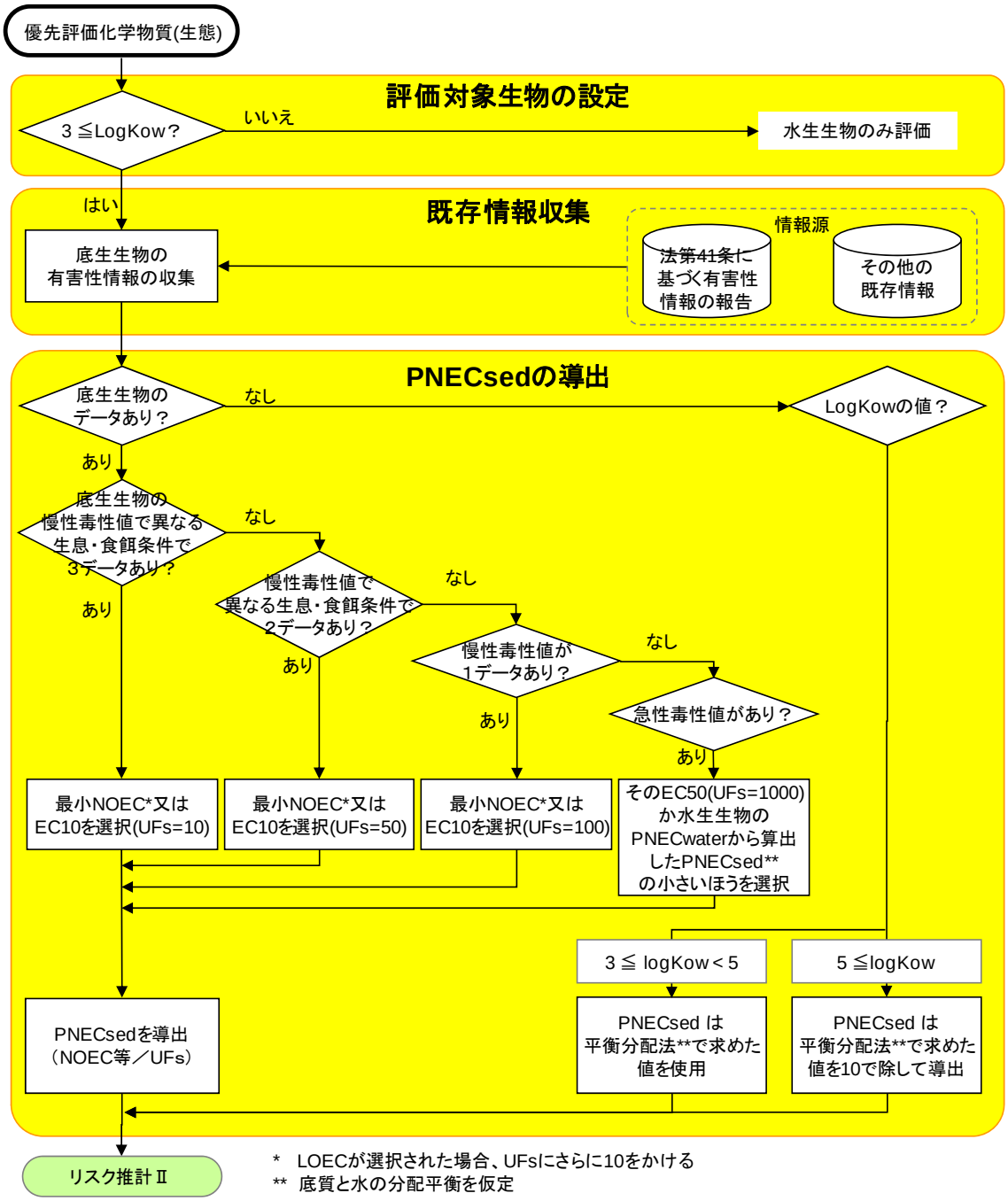
② RHOsusp（浮遊物質のかさ密度）[kgwwt/m^3]＝1,150

③ PNECwater（水質の予測無影響濃度）[mg/L]＝水生生物PNECwater

④ $\text{CONVsusp} = \text{RHOsusp}/(\text{Fsolid susp} \times \text{RHOsolid})$

【浮遊物質中の対象物質濃度換算係数（湿重量→乾重量）】＝浮遊物質のかさ密度(kg-wwt/m^3)／[浮遊物質の固相率(m_{solid}^3/m_{susp}^3)×固体密度(kg_{solid}/m_{solid}^3)]=4.6

パラメータ名	単位	内容	値	備考
RHOsusp	[kg_{wwt}/m^3]	浮遊物質のかさ密度	1,150	デフォルト値
Fsolid susp	[m_{solid}^3/m_{susp}^3]	浮遊物質の固相率	0.1	デフォルト値
RHOsolid	[kg_{solid}/m_{solid}^3]	固体密度	2,500	デフォルト値



図表 III-8　底生生物の PNECsed 導出フロー

III.4.3.4　PNEC の他の規制値等との比較検討

上記で導出した PNEC について、国内外の基準値との比較・検討を行う。

我が国を始め、米国、英国、カナダ、ドイツ、オランダ等で定められている水生生物保全に関する基準等を調査し、基準値等が定められている場合は、当該基準値の導出に用いられた毒性値や係数等を精査する。また、既存のリスク評価書等を調査し、既に評価が行

われている場合は、当該評価における PNEC 等の有害性評価値のの導出に用いられた毒性値や係数等を精査する。これらを用いて、本評価において導出された PNEC の妥当性の検証を行う。

III.4.4 有害性調査指示の項目の特定

優先評価化学物質のリスクが相当広範な地域で懸念され、長期毒性の該当性について判定する必要があると認めるに至ったときは、国は法第 10 条第 2 項に基づき、製造・輸入事業者に対して長期毒性に係る有害性の調査指示を行うこととなる。優先評価化学物質に対する有害性調査指示の試験項目は省令[1]に定められており、生態影響に関する有害性については以下の項目である。

(ア) 藻類の生長に及ぼす影響に関する試験
(イ) ミジンコの繁殖に及ぼす影響に関する試験
(ウ) 魚類の初期生活段階における生息又は生育に及ぼす影響に関する試験
(エ) ユスリカの生息又は生育に及ぼす影響に関する試験

(ア)～(エ) のいずれの項目の有害性調査指示を行うかは、有害性評価Ⅱにおける精査と、評価Ⅱ(暴露評価、リスク推計) の結果を踏まえて検討を行う。基本的には、相当広範な地域でリスクが懸念される対象生物に係る長期毒性の判断に必要な範囲が対象となる。　また、有害性調査の試験対象物質については、評価対象物質を踏まえて指示内容に含める。有害性調査指示を行うには、これらの検討項目について審議会の意見を聴く必要がある。

なお、評価Ⅱ終了の時点で有害性調査指示を行う場合は、暴露評価についても十分な情報に基づく結果が得られていることが前提となる。

III.5 有害性評価Ⅲ

有害性評価Ⅲは、基本的には有害性評価Ⅱと同様である。

暴露情報の精査等が必要であるとして評価Ⅲを行うこととなった場合、暴露情報の収集等のために相応の時間を費やすことがありうる。評価Ⅲを行う際に、有害性情報について過去の既知見収集時点以降の各情報源の更新状況を調査し、追加収集される有害性データがあれば、必要に応じて精査を行い、キースタディ、不確実係数、PNEC 等の見直しを行う。

[1] 新規化学物質に係る試験並びに優先評価化学物質及び監視化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める省令

III.6 リスク評価 (二次) における有害性評価

リスク評価（二次）は、法第 10 条第 2 項の規定に基づく有害性調査指示により新たに得られた長期毒性に係る有害性情報を用いてリスク評価を行う段階である[1]。

新たに得られた有害性情報についてリスク評価（一次）の段階で収集された有害性情報を踏まえて精査し、キースタディ、不確実係数の設定等、専門家による個別判断に基づき PNEC の見直しを行う。

[1] 既知見により長期有害性情報が得られ、長期毒性に係る判定が行える場合には、リスク評価（二次）は行わず、リスク評価（一次）において第二種特定化学物質の指定や優先評価化学物質の取消し等の判断がなされる。

III.7 付属資料

III.7.1 PNEC 導出に用いる不確実係数 (水生生物)

水生生物の有害性評価では、急性及び慢性毒性のデータが 3 栄養段階でそろっているかどうかが判断の基礎となり、3 栄養段階のうち何種類のデータが得られるかにより、不確実係数積（UFs: Uncertainty Factors）が決定されている。

本ガイダンスでは、採用する毒性試験に合わせた不確実係数（UF: Uncertainty Factor）を用いている（Ⅲ.3.2 の図表 III-4 ）。これらは、基本的に EU-TGD 及び REACH の考え方も参考にし、まとめている。

国際機関等で採用されている水生生物の PNEC 算出のための UFs を図表 III-9 に示す。優先評価化学物質の中で、例えば新規化学物質由来の物質には 3 栄養段階の急性毒性試験値のみが得られている場合がほとんどであり、その場合、EU-TGD[1]及び REACH[2]では 1,000、OECD におけるワークショップで示された一つの報告[3]では 100 になり、本ガイダンスの手法では、10×ACR (ACR=10～100)である。

図表 III-9　各国際機関における水生生物の生態影響評価における不確実係数積等

異なる栄養段階の水生生物 (魚、甲殻類(ｵｵﾐｼﾞﾝｺ等)、藻類)に対する採用毒性値	OECD (Workshop Report)	EU-TGD	EU-REACH	ECETOC	EPA (OPPT/TSCA)
急性毒性 L(E)C50 が 1ﾃﾞｰﾀのみ	1,000	－	－	－	1,000
急性毒性 L(E)C50 が 3ﾃﾞｰﾀある	100	1,000	1,000	200	100
長期毒性試験の EC10 あるいは NOEC が 1ﾃﾞｰﾀのみ	－	100	100	－	－
長期毒性試験の EC10 あるいは NOEC が 2ﾃﾞｰﾀあり	－	50	50	5	－
長期毒性試験の NOEC が 3ﾃﾞｰﾀあり	10	10	10	－	10
種の感受性分布方法(SSD)が適用できる	－	5～1 case by case	5～1 case by case	－	－
野外ﾃﾞｰﾀあるいはﾓﾃﾞﾙｴｺｼｽﾃﾑのﾃﾞｰﾀがある	－	case by case	case by case	1	1

[1] ECB (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. PartⅡ, Chapter 3, 3.3.1.1, pp.101
[2] ECHA (2008) Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.10: Characterization of dose [concentration]-response for environment, pp.19
[3] OECD(1992) Report on the OECD Workshop on the Extrapolation of Laboratory Aquatic Toxicity Data to the Real Environment. Environment Monograph no.59

III.7.2 底生生物の有害性評価

底生生物の有害性評価は、EU-TGD の考え方を参考に、「底質への移行・蓄積が予想され、底生生物に対する毒性評価が必要な物質」に対して評価Ⅱ以降行うこととしている。

具体的には、logKow の値が 3 以上の物質を識別し、評価する。ただし、3≦logKow＜5 の物質に関しては底質中の間隙水の評価であり、logKow の値が 5 以上の物質に関しては、底質中の間隙水の評価に加え、底質粒子に吸着した物質の摂取による毒性の評価を行う必要がある。

EU-TGD 及び REACH には以下の記載がある。

「大部分が底質に沈着又は吸着する可能性のある物質については、底生生物に対する毒性を評価しなければならない。さらに、海洋水系において難分解性であることがわかっており、底質に経時的に蓄積すると考えられる物質については、海底質影響評価を行う必要がある。一般に、Koc＜500～1,000 [L/kg]の物質は、底質に吸着する可能性が低い。試験の対象とする物質を絞り込むため、logKoc 又は logKow≧3 を底質影響評価におけるトリガー値とすることもできる。」[1]。

また、「底質影響評価に用いるトリガーとなる物質の主な特性は、底質上への吸着又は結合する可能性である。底質影響評価のトリガー値として logKow3 が提案される。このトリガー値を上回る物質については、少なくとも平衡分配法によるスクリーニング評価を実施しなければならない。LogKow が 3～5 の物質の場合、PECsed と PNECsed は共に対応した水相データからモデル化されていることから、このスクリーニング評価では底質の特性比は水相のものと同じになる。logKow が 5 を超える物質又はそれに相当する高い吸着性や結合する性質を有する物質（イオン性物質、界面活性剤、底質に化学的に結合する物質；これら全ての物質の吸着では、疎水性、即ち logKow はトリガーにならず、他のメカニズムがトリガーとなる。）については、特に注意する必要がある。これらの化合物については、より包括的な底質影響評価が必要である。」[2]

すなわち、logKoc 又は logKow ≧3 を底質影響評価における判断基準値としているが、logKow が 3～5 の物質は、底質中の間隙水の評価を行っており、logKow ≧5 の物質は間隙水に加え、底質粒子に吸着した物質による毒性の評価を行うものとなっている。

上述のように、EUでは、KocあるいはKowの両方が基準に採用されているが、一般的に工業化学品のlogKoc（実測値）は極めて入手困難である。したがって、本ガイダンスにおいては、logKowを基準として用いる。

---

[1] ECB (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. PartⅡ, Chapter 3, 3.5 の仮訳

[2] ECHA(2012)：Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment Chapter R.7b:Endopoint specific guidance R.7.8 Aquatic toxicity; long-term toxicity to sediment organisms」R.7.8.12.2 Testing strategy for toxicity to sediment organisms の仮訳

国内の状況としては、環境省の既存物質点検事業[1]において、平成16年度からOECDのテストガイドライン218[2]に従って底生生物に対する毒性試験が開始されている。

不確実係数の設定に関しては、基本的に水生生物の場合と同様で、米国TSCA及びEU-TGDで用いられている係数を参考にする。ただし、水生生物の場合、「異なる栄養段階」のデータ数により不確実係数（積）が変わるが、底生生物では、「異なる生息・食餌条件」での底生生物の毒性データを採用して不確実係数積を設定する。参考とする米国TSCAの新規化学物質の審査における底生生物の毒性値のクライテリアでは、急性毒性EC50が1［mg/L］及び慢性毒性NOECが0.1［mg/L］という場合が高懸念濃度となっていることから[3]、底生生物の急性慢性毒性比（ACR）を10とおいていることがわかる。また、EU-TGDでは、慢性毒性試験結果の有無により、UFが設定されている。

前述したように通常、底生生物に対する毒性データが取得されている物質は極めて少ない。したがって何らかの方法で底生生物に対する無影響濃度、すなわちPNECsedを推定する必要がある。EU-TGDや米国EPAではデータの欠落を補うため、スクリーニングアプローチとして平衡分配法（Equilibrium Partitioning Method）を提案している。このスクリーニングの結果は、底生生物を用いた全底質試験を実施するかどうかを決めるトリガーとすることができる。すなわち、平衡分配法で「PEC／PNEC比 ＞ 1」となれば、底質添加による底生生物試験を行う必要があるとされている。

評価Ⅱでは、底生生物の毒性試験データが得られない場合の代替措置として平衡分配法を採用する。Ⅲ.4.3.3にも記載したが、この方法では以下を仮定している。

・底生生物と水生生物は化学物質に対する感受性が同等である。
・底質（粒子）中濃度、間隙水中濃度、底生生物中濃度間が平衡状態にある。

さらに、EU-TGD では、logKow≧5 の場合、底質に吸着した物質の摂取を考慮し、不確実係数（EU-TGD では assessment factor）として 10 を加味するとしている。つまり、5＞logKow≧3 の場合で求めた PNECsed の値を 10 分の 1 にするということになる。

以上の仮定のもと、PNECwater を底質と水の間の分配係数を用いて底質中の濃度に換算し、これを PNECsed とする。PNECsed は底質の乾燥重量あたりの化学物質濃度である。

[1] 「化学物質の生態影響試験について」http://www.env.go.jp/chemi/sesaku/seitai.html
[2] OECD TG 218 “Sediment-Water Chironomid Toxicity Using Spiked Sediment”
[3] Eastern Research Group, Inc. (2001) Revised Draft New Chemicals Decision Guidelines Manual. Prepared for U.S. EPA, OPPT. EPA Contract No. 68-W6-0022.

III.7.3 底生生物に係る生息・食餌条件の例

ECHA ガイダンス[1]より抜粋した生息・食餌条件の例を以下に示す。

図表 III-10　底生生物に係る生息・食餌条件の例

学名	分類群	生息条件	摂餌条件
Chironomus sp.	insect	freshwater , endobenthic	Suspension and deposit feeder
Lumbriculus variegatus	oligochaete	freshwater, endobenthic	Sediment ingestor
Hyalella azteca	amphipod	Freshwater, Epibenthic	Detrivore, some subsurface deposit feeding
Hexagenia sp.	insect	freshwater, endobenthic	Surface particle collector
Tubifex tubifex	oligochaete	freshwater, endobenthic	Sediment ingestor
Diporeia spec.	amphipod	freshwater, endobenthic	Deposit feeder
Caenorhabiditis elegans	nematode	freshwater, endobenthic	bacterial ingestor
Leptocheirus plumulosus	amphipod	estuarine, endobenthic	Suspension and deposit feeder
Ampelisca abdita	amphipod	marine, endobenthic	Suspension and deposit feeder
Eohaustorius esturaius	amphipod	estuarine, endobenthic	Deposit feeder
Rhepoxynius abronius	amphipod	marine endobenthic	Meiofaunal predator, deposit feeder
Neanthes arenaceodentata *Neanthes virens*	polychaete	marine, endobenthic	Omnivorous deposit feeder
Corophium volutator	amphipod	marine, endobenthic	Suspension and deposit feeder

[1] ECHA (2012) Guidance on information requirements and chemical safety assessment, Chapter R.7b: Endpoint specific guidance, R.7.8.7 Introduction to sediment organisms' toxicity

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

Ⅳ．排出量推計

Ver.2.0

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	平成26年　6月	初版
Ver. 1.1	平成 26 年 12 月	Ⅳ.7.5 を追加
Ver. 2.0	令和 2 年　5 月	化審法改正（平成 29 年）を踏まえ修正

目　次

IV. 排出量推計 4
IV.1 はじめに 4
IV.1.1 本章の位置づけ 4
IV.1.2 他の章との関係 4
IV.2 前提と基本的な考え方 6
IV.2.1 用語の基本的概念 6
IV.2.2 リスク評価の手段としての製造数量等の届出制度 10
IV.2.3 排出量推計の対象範囲 14
IV.2.4 排出量推計の構成要素 15
IV.2.5 排出シナリオの設定 16
IV.2.6 排出量の推計 33
IV.3 暴露評価Ⅰにおける排出量推計 40
IV.3.1 暴露評価Ⅰにおける排出量推計の目的 40
IV.3.2 暴露評価Ⅰにおける排出量推計に共通する事項 41
IV.3.3 排出源ごとの暴露シナリオにおける排出量推計 43
IV.3.4 用途等に応じた暴露シナリオにおける排出量推計 43
IV.4 暴露評価Ⅱにおける排出量推計 46
IV.4.1 暴露評価Ⅱにおける排出量推計の目的 46
IV.4.2 評価Ⅰにおける排出量推計との違い 46
IV.4.3 暴露評価Ⅱにおける排出量推計に共通する事項 47
IV.4.4 PRTR 情報の利用 52
IV.4.5 排出源ごとの暴露シナリオにおける排出量推計 56
IV.4.6 用途等に応じた暴露シナリオにおける排出量推計 59
IV.4.7 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおける排出量推計 65
IV.4.8 残留性の評価のための排出量推計 66
IV.5 暴露評価Ⅲにおける排出量推計 67
IV.6 リスク評価（二次）における排出量推計 69
IV.7 付属資料 70
IV.7.1 製造数量等の届出情報の確認 70
IV.7.2 化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表 71
IV.7.3 用途分類表の設定方法 77
IV.7.4 「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」の設定方法 126

IV.7.5 PRTR 情報の利用 180
IV.7.6 排出量推計の検証 204

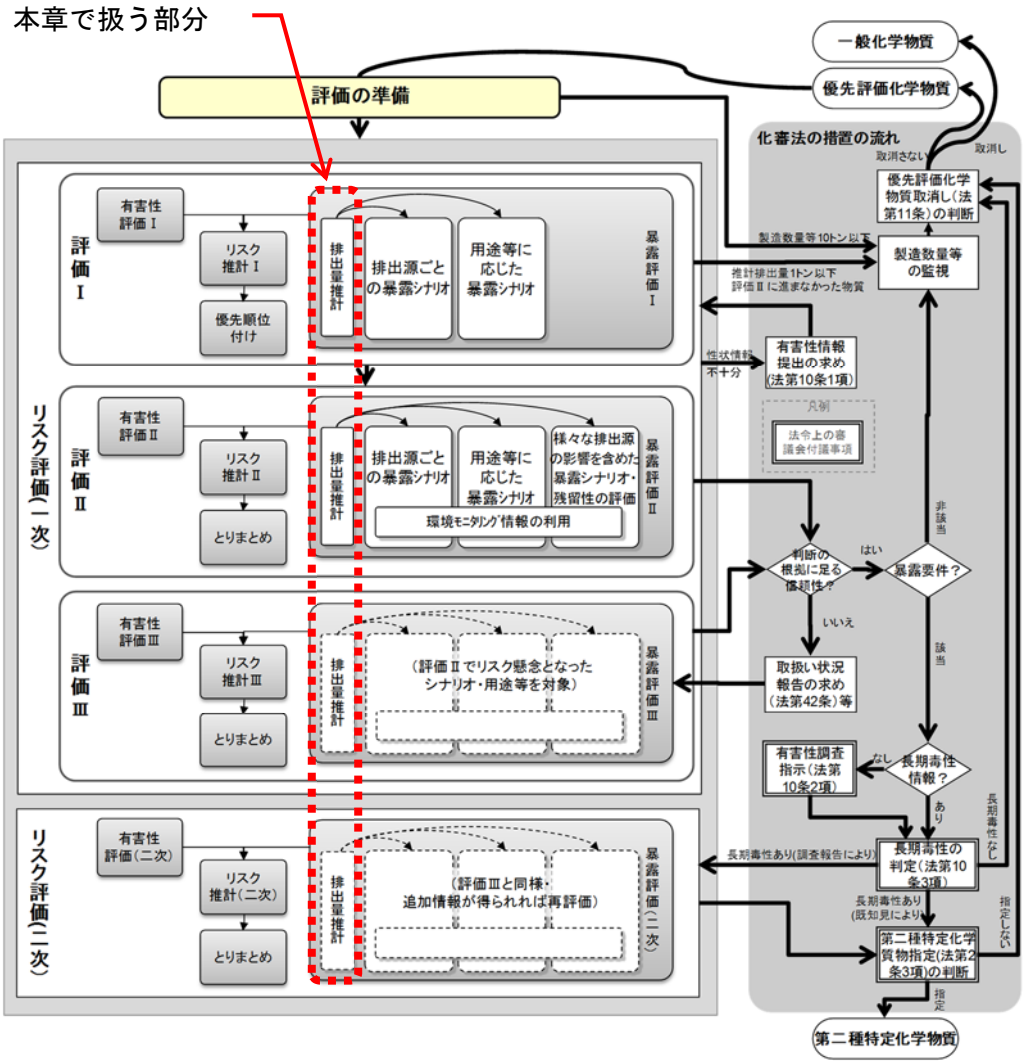
Ⅳ. 排出量推計

Ⅳ.1 はじめに

Ⅳ.1.1 本章の位置づけ

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、排出量推計について記載する。リスク評価の手順フロー全体において本章で扱う部分を図表 Ⅳ-１に示す。

排出量推計は、評価段階に応じて４つの段階（暴露評価Ⅰ～Ⅲ及び暴露評価(二次)）があり、そのいずれにも設けられている。



図表 Ⅳ-１　リスク評価の手順フローにおける本章で扱う部分

Ⅳ.1.2 他の章との関係

排出量推計の目的は、評価の準備（Ⅰ章）で得られた製造数量等の届出情報（詳細は

IV.2.2.1 を参照）と物理化学的性状を用いて、優先評価化学物質の環境中への排出量を推計することである。

推計した排出量は、主に暴露評価Ⅰ,Ⅱで暴露量の推計に用いられる（V～VII 章）。さらに、推計された暴露量は有害性評価Ⅰ,Ⅱで導出された有害性評価値（Ⅱ章、Ⅲ章）とともにリスク推計Ⅰ,Ⅱに用いられる。そして、評価結果のとりまとめが行われる（Ⅸ章）。

本章では、製造数量等の届出情報を用いた排出量推計に関する基本的な考え方、手法及び手法の設定方法について解説するとともに、特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律」（以下、「化管法」という）に基づく排出量等の情報（以下、「PRTR 情報」という）の暴露評価Ⅱ以降での利用方法についても述べる。

Ⅳ.2 前提と基本的な考え方

優先評価化学物質のリスク評価を実施するためには、当該物質の環境中への排出量を把握する必要がある。

これを正確に把握するためには、優先評価化学物質を製造又は輸入した者（以下「製造・輸入者」という。）の情報に限らず、その出荷先のサプライチェーン全体、さらには消費者までについて、優先評価化学物質がどこでどのように取り扱われ、どの程度環境中へ排出されているか等の情報が必要である。しかし、化審法の優先評価化学物質すべてについてそのような情報を得ようとすると、行政及び産業界は多大なコスト・時間を費やすことになる。そのため、段階的に詳細な情報を用いた排出量推計を行い、リスク評価等にかかる全体としてのコスト・時間の効率化を図るようにしている。

排出量推計に用いることのできる情報として、製造数量等の届出情報がある。優先評価化学物質について化審法に基づき事業者から届け出られる情報は、基本的に「都道府県別・製造事業者別製造数量又は国・地域別・輸入事業者別輸入数量」、「都道府県別・詳細用途別出荷数量」であり、まずは、この限られた情報から環境中への排出量の推計を行う。

そのため、本章で解説する排出量推計のスキームでは、これらの届け出られた製造・輸入数量あるいは出荷数量に、あらかじめ設定した「排出係数」を乗じて排出量を推計する手法を用いている。この手法は、我が国の化審法に基づく製造数量等の届出情報に合わせて、EU の手法を改良したものである。EU の手法に我が国の排出実態を反映させるにあたっては、化管法の PRTR 情報や産業界からの排出の知見を考慮している。

Ⅳ.2.1 用語の基本的概念

本章における排出量推計において用いる用語の基本的概念について以下に記す。

(1) 排出量

本スキームにおける「排出量」とは 、「優先評価化学物質の製造、調合、使用、その他の取扱い[1]の過程において環境に排出される量」と定義する[2]。

具体的には、煙突や排水口からの排出だけでなく、パイプの継目からの漏出や塗装溶剤の蒸発など環境中への考えられるあらゆる排出を含むことになる。

[1] 「優先評価化学物質が使用されている製品の使用」が内包されている。

[2] PRTR 対象物質の場合は定義が以下のようになる。「第一種指定化学物質等の製造、使用その他の取扱いの過程において変動する当該第一種指定化学物質の量に基づき算出する方法その他の主務省令で定める方法により当該事業所において環境に排出される第一種指定化学物質の量として算出する量をいう」（化管法第５条より）。「等」とあり、副生成による排出量を含んでいると解釈できる。

(2) 用途

化審法において、優先評価化学物質の国内出荷先での用途に関する情報の届出は、経済産業省関係化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律施行規則第 9 条の 3 第 2 項関係の様式第 12 において定められている。

日本語で用いられる化学物質の「用途[1]」という語句には、その物質特有の機能（Function）を表す場合（例：難燃剤）と、その機能を何に用いるかという用途（これを「使用目的」という。）（例：繊維、プラスチック）を表す場合、その双方を表す場合（例：繊維用難燃剤）がある。さらには、繊維やプラスチックといった素材が成形され（いわゆる成形品のこと）、その成形品を何に用いるか（例：繊維であれば、衣類、自動車用シート、カーペットなど）を表す場合もある。また、広範な使用目的に用いられる合成樹脂に多い場合として、使用目的名称でなく、合成樹脂の名称を含んだ形で表す場合（例：エポキシ樹脂用硬化剤）がある。

リスク評価の観点で用途を捉えると、化学物質の機能は主に化学物質の構造や物理化学的性状と関連し、また、有害性や環境中運命とも関係する。一方、使用目的は主に化学物質の使われ方と関係するため、排出や暴露のシナリオに関係する。そのため、用途分類を定義するにあたっては、機能－使用目的の組み合わせで整理されることが望ましい。よって、設定された製造数量等の届出制度のための「用途分類一覧表」は、原則として、使用目的と機能を表す分類表となるように整理されている（IV.7.3 参照）。

(3) 排出係数

本スキームにおける排出係数を式 IV-1 のように定義する。また、排出係数は大気、水域の 2 つの排出先環境媒体について設定されている。

排出係数＝排出量／取扱量　　**式 IV-1**

しかし、一般的に排出量と取扱量がわかっているケースは少なく、むしろ使用方法や物理化学的性状から排出係数を設定し、式 IV-2 のように排出量を推定することに用いられる。

排出量＝取扱量×排出係数　　**式 IV-2**

排出係数の値は、「取扱量」と「排出量」に係る様々な特性（環境媒体別、用途別、業種別、使用工程別等）の影響を受ける。そのため、利用する排出係数がどのような特性の中で算出されたものであるかを見極める必要があるが、多くの既存の排出係数の値は、その特性がわからないものが多い。

本スキームの評価 I などで利用する排出係数では、製造数量等の届出制度によって得られる「詳細用途」に加えて、「環境媒体」、「物理化学的性状」、「ライフサイクルステージ」の計 4 つの特性が考慮されている。これは、化学物質別の特性や業種や使用工程、排ガス・排

[1] 用途は、OECD HPV プログラムでは「Use pattern」と呼ばれる。

水処理設備の有無などの特性によって排出係数は変わり得るが、国が収集する情報と製造数量等の届出情報で得られる範囲内ですべての化学物質に適用させることを重視させたためである。

なお、評価Ⅲでは、事業者から報告された取扱い状況に関する情報などにより、個別化学物質、個別事業所ごとなどにおいて、より確度を上げた係数を用いることも想定される。

化学物質の「取扱量」に関連する語句は、「製造数量」、「生産量」、「在庫量」、「保管量」、「保有量」、「繰越量」、「使用量」、「出荷数量」、「供給量」、「調達量」、「購入量」、「リサイクル回収量」など様々である。本スキームでは、排出係数に乗じる「取扱量」を、製造数量等の届出情報で得られる製造事業所ごとの「製造数量」、又は「用途別都道府県別出荷数量」としている[1]。

(4) ライフサイクルとライフサイクルステージ

EU において整理されている化学物質のライフサイクルの概念図[2]を基にした優先評価化学物質のライフサイクルの概念図を図表 Ⅳ-２に示す。また、図表 Ⅳ-２にある「製造(Production)」、「調合(Formulation)」、「工業的使用(Industrial use)」、「家庭用・業務用での使用 (Private use)」、「長期使用製品(Service life)」及び「廃棄処理(Waste treatment)」のそれぞれを「ライフサイクルステージ」と称する[3]。

製造数量等の届出制度で得られる優先評価化学物質のライフサイクルステージに関する情報は、「製造」と「出荷先」のみである。

そこで、本スキームでは「製造」を EU における「Production」に対応させ、「出荷先」を「Formulation」、「Industrial use」、「Private use」、「Service life」の４つのライフサイクルステージに分けることで、５つのライフサイクルステージを考慮することとしている[4]。そしてこれらライフサイクルステージを図表 Ⅳ-２のように日本語で表している。

実際の優先評価化学物質のライフサイクルは多種多様である。本スキームではそれを５つのライフサイクルステージで表したライフサイクルとして設定している。

---

[1] なお、EU(2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment (以下、「EU-TGD」という)において取扱量の定義は明確にされていない。

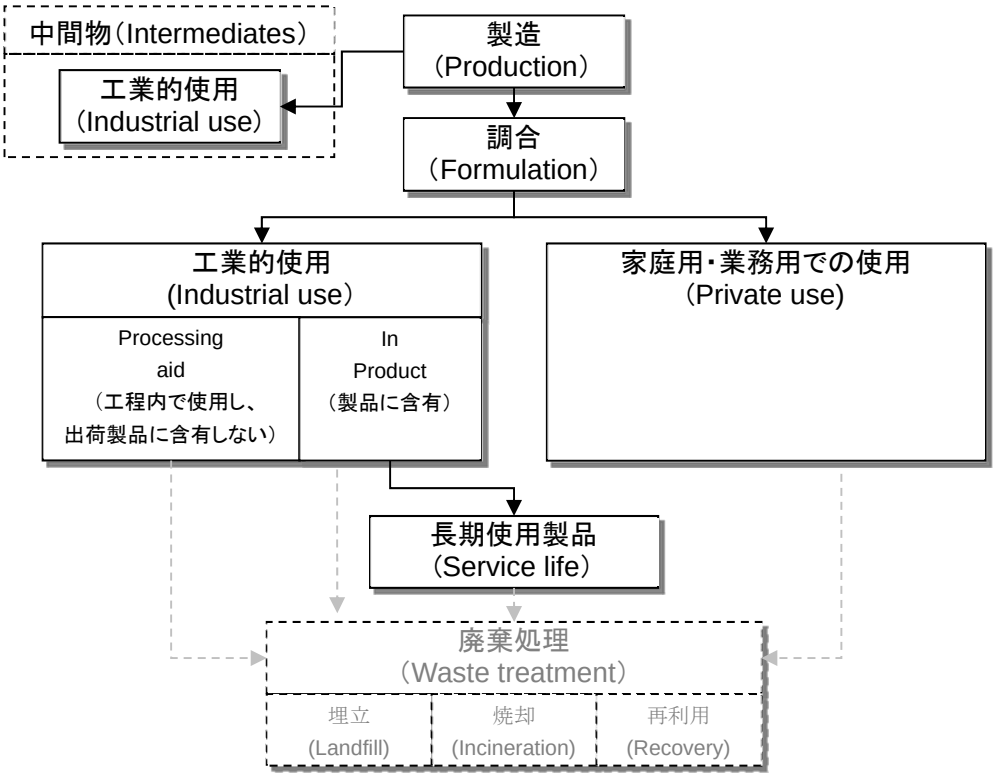
[2] EU (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. Part Ⅱ, Chapter 2, p.26, 2.3.3.1 Life-cycle of substances, Fig.3.

[3] OECD(2000)ENV/JM/MONO(2000)12 OECD Series on Emission Scenario Documents Number 1 Guidance Document on Emission Scenario Documents では「Industrial use」は「processing」、「Private use」は「use in the household」、「Waste Treatment」は「recovery/disposal」とある。「Service life」は存在しない。

[4] EU-TGD の A-table では製造（Production）、調合（Formulation）、工業的使用（Industrial use）、家庭用・業務用での使用（Private use）、廃棄処理（Waste treatment）の５段階が設定されている。ただし、廃棄処理はライフサイクルステージとしての想定はあるが、排出係数のデフォルト値はすべての産業分類で“Not applicable”であり、個別の情報が得られない限り排出量は推計できない。また、長期使用製品の使用（Service Life）段階については A-table の中にライフサイクルステージとしての設定がなく、産業分野別の Emission Scenario Document の中に情報がある場合か、個別の情報が得られる場合に考慮できる。その際も、他のステージの場合のように排出係数は取扱量に乗じる割合ではなく、単位面積当たりの排出係数であったり、年間排出量の推算式が製品寿命の関数であったりするため、排出係数以外のデータ（製品寿命等）が必要になる。本スキームでは、長期使用製品の使用段階からの排出量は「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」や「残留性の評価」で考慮するため、IV.2.5.3 及び IV.4.7 で説明する。

また、現時点では、製造数量等の届出情報から EU における「Waste treatment」にあたるライフサイクルステージに関する情報を考慮する手法は構築できていない。

なお、図表 Ⅳ-２に示した合成原料や中間体などを表す「Intermediates」は、別の化学物質に変化することでライフサイクルを終えるという特徴を持ち、EU において別途ライフサイクルが設定されており（図表 Ⅳ-２中の左上、点線囲い箇所）、化審法の優先評価化学物質のリスク評価においても別途考えることが妥当であるとし、ライフサイクルを設定した。

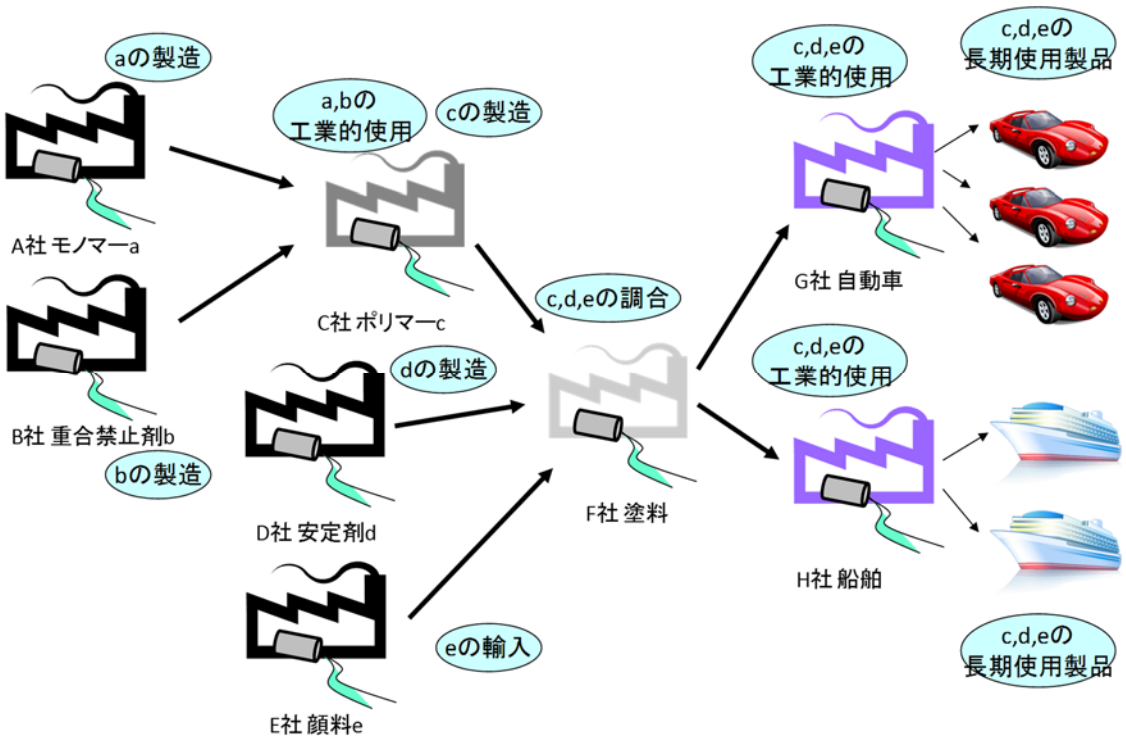


図表 Ⅳ-２　優先評価化学物質のライフサイクル及びライフサイクルステージ

ここでは、図表 Ⅳ-３において、自動車や船舶に用いられる「塗料」中の化学物質を例にライフサイクルステージについて説明する。図表 Ⅳ-３では、着目する物質に応じて A 社も C 社も製造段階に該当する事業者となる。ここでモノマーa という化学物質に着目すると、A 社がモノマーa の「製造段階」に該当し、C 社はモノマーa を購入して、ポリマーc の重合原料として使用していることから、ここでは「工業的使用段階」に該当する。一方で、ポリマーc に着目すれば、C 社が「製造段階」に該当する。

また、本スキームで定義される「製造段階」と「製造業（あるいはメーカー）」とは異なる。例えば、「塗料」であれば F 社が、「自動車」であれば G 社が、「船舶」であれば H 社がそれらの製造業（メーカー）であるが、これらを「製造段階」とは呼ばず、本スキームでは、化学物質 c,d,e 個々のライフサイクルから捉え、F 社のようなライフサイクルステージを「調合段階」、G 社、H 社のようなライフサイクルステージを「工業的使用段階」に位置

づけている。



図表 Ⅳ-３　「塗料」中の化学物質のライフサイクル及びライフサイクルステージの例

Ⅳ.2.2 リスク評価の手段としての製造数量等の届出制度

優先評価化学物質が暴露要件に該当する状況にあるか、すなわちリスクが懸念される地域が広範に生じているかを把握するため、国は製造・輸入者から製造・輸入数量及び都道府県別・詳細用途別出荷数量の前年度実績値を毎年度届け出させる。これが優先評価化学物質の「製造数量等の届出制度」である。

暴露要件に該当する状況にあるかどうかの把握には、PRTR 情報や環境モニタリング情報が利用できる場合もある。しかし、優先評価化学物質全体の中では一部の物質に限られる。したがって、すべての優先評価化学物質について環境汚染の状況を把握するためには、製造数量等の届出制度に基づく情報を使うことが基本となる。

Ⅳ.2.2.1 製造数量等の届出情報

「製造数量等の届出情報」とは、優先評価化学物質の製造・輸入者が、法第９条第１項の規定に定める事項を経済産業省令[1]様式第 12 により、毎年度、経済産業大臣に届け出るものを指す。化審法及び省令上の事項と届出様式にある項目を図表 Ⅳ-４に示す。

[1] 経済産業省関係化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律施行規則（最終改正 平成 30 年８月 31 日）

優先評価化学物質の製造数量等の届出情報は、毎年度集計され、この集計値により、評価Ⅰを行う物質を決めた上で[1]、暴露評価Ⅰの排出量推計（IV.3 参照）に用いられる。その後、評価Ⅰを経て、評価Ⅱの排出量推計においても用いられる（IV.4 参照）。

図表 IV-４　製造数量等の届出情報の項目等

省令上の事項	届出様式にある項目
優先評価化学物質の名称	・官報公示名称 ・物質管理番号 ・官報整理番号１ ・物質名称 ・CAS 登録番号（CAS RN） ・官報公示名称２ ・官報整理番号２ ・官報公示名称３ ・官報公示番号３ ・高分子化合物の該当の有無
製造した場合：製造数量※、優先評価化学物質を製造した事業所名及びその所在地 輸入した場合：輸入数量※、優先評価化学物質が製造された国名又は地域名	・製造数量の年度合計値（t） ・製造した都道府県別製造数量（t） ・製造した事業所名及び所在地 ・輸入数量の年度合計値（t） ・輸入した国・地域別輸入数量（t）
優先評価化学物質の前年度の出荷数量	・出荷数量の年度合計値（t） ・都道府県別（又は国・地域別）及び詳細用途別出荷数量（t）

※ 省令上の事項ではなく、法第９条で定める事項である。

続いて、以下に届出項目ごとの概要を示す。詳細は記載要領[2]を参考されたい。

(1) 製造した事業所名及びその所在地

優先評価化学物質を製造した者から、事業所名及び所在地が届け出られる。これにより排出源としての地理的情報が得られる。

[1] 製造・輸入数量が 10 トン以下の優先評価化学物質はリスク評価の対象とならない。
[2] 経済産業省製造産業局化学物質管理課化学物質安全室「一般化学物質、優先評価化学物質及び監視化学物質の製造数量等届出書の記載要領（2019 年度版）」 https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/ippantou/manual_2019FY_190416.pdf

(2) 製造した都道府県別製造数量又は輸入した国・地域別輸入数量

優先評価化学物質の製造・輸入者から、製造した都道府県別の前年度分の年間製造数量[1]又は輸入した国・地域別の年間輸入数量が届け出られる。なお、優先評価化学物質を製造した者が同一事業者内で他の化学物質を得るために消費した（自社内消費）分は、化審法上「製造」に該当しないため、届け出られる製造数量に含まれない。

➢ 都道府県別（又は国・地域別）及び詳細用途別出荷数量

優先評価化学物質の出荷数量は、都道府県別、詳細用途別に届け出られる。出荷に係る用途は、通常想定される用途を用途分類表[2]（詳細は Ⅳ.2.5.2 で後述）の中の用途番号（3 桁数値）及び詳細用途番号（1 桁英小文字）から選択し、記載される。また、同一都道府県内に複数の出荷先があり、用途番号・詳細用途番号が同じである場合は、それらを合計した数量が届け出られる。

輸出の場合は、海外における用途にかかわらず「#199-a 輸出用」として、輸出先の国・地域別に合計した数量が届け出られる。しかし、これらは海外への出荷数量であり国内の排出量に関係しないため、リスク評価に用いない。

➢ 出荷先都道府県[3]

出荷先都道府県とは、原則として優先評価化学物質の製造・輸入者から出荷した先の事業所（一次出荷先）が所在する都道府県を指す。なお、出荷先については独特な点が 2 点あることに留意されたい。1 つは、商社等を経由して販売した場合で、伝票類は商社を経由していても、実際に貨物の輸送を伴わない場合は、その商社等は出荷先とはならない点である。実際に貨物を搬送した事業所等が所在する都道府県が出荷先として届け出られる。もう 1 つは、自社内で消費せず、当該製造事業者の事業所で使用する場合は、その分は自社内出荷先都道府県として届け出られる点である。

(3) 高分子化合物の該当の有無

「高分子化合物」とは、「環境の汚染を生じて人の健康に係る被害又は生活環境動植物の生息若しくは生育に係る被害を生ずるおそれがないものとして平成二十一年厚生労働省・経済産業省・環境省告示第二号第一の基準（数平均分子量が千以上等）を満たした高分子化

---

[1] 届出様式上は、製造数量は都道府県別に記載し、別枠に製造場所の住所を記載するため、1 つの都道府県内に複数の製造事業所を有する事業者からの届出の場合は、その内訳は判別できない。ただし、そのようなことは稀である。

[2] 経済産業省製造産業局化学物質管理課化学物質安全室、独立行政法人製品評価技術基盤機構化学物質管理センター「化審法に用いる化学物質用途分類表 Ver. 2」
https://www.nite.go.jp/chem/risk/yusenyoto.pdf

[3] 独立行政法人製品評価技術基盤機構化学物質管理センター「用途分類方法について」３．出荷先都道府県の選び方
https://www.nite.go.jp/chem/risk/yotonituite.pdf

合物」[1]のことを指す。これは次の条件に該当する化学物質であり、この要件に該当する場合は、届出書に「○」と記される。

- １種類以上の単量体単位の連鎖により生成する分子の集合から構成され、3 連鎖以上の分子の合計重量が全体の 50%以上を占め、かつ、同一分子量の分子の合計重量が全体の 50%未満であること
- 数平均分子量が 1,000 以上であること。

この項目は平成 23 年 4 月 1 日施行法の届出様式から新たに加わった項目である。なお、排出量推計の際に、物理化学的性状データが得られない場合に、この情報（高分子化合物に該当するか否か）を用いて、排出量を推計するための排出係数の選択を分ける場合がある（IV.3.2 参照）。

以上の(1)～(3)に示した情報の他には、優先評価化学物質名や物質名称、CAS 登録番号（CAS RN）の物質情報等が排出量推計に用いられる。なお、「業種」に関する情報は、製造数量等の届出情報に含まれていない[2,3]。

IV.2.2.2 リスク評価との関係

評価Ｉを例に製造数量等の届出情報とリスク評価との関係を図表 IV-５に示す。リスク評価の中で、人や生活環境動植物が暴露される量を推計する過程でこれら製造数量等から排出量を推計し、そこから環境中濃度を推計する手順を踏む。人の健康に対するリスク評価では環境中濃度からさらに摂取量を推計する。この摂取量や暴露濃度を有害性評価値や PNEC と比較することでリスクが推計される。有害性評価値や PNEC についてはⅡ章、Ⅲ章を参照されたい。

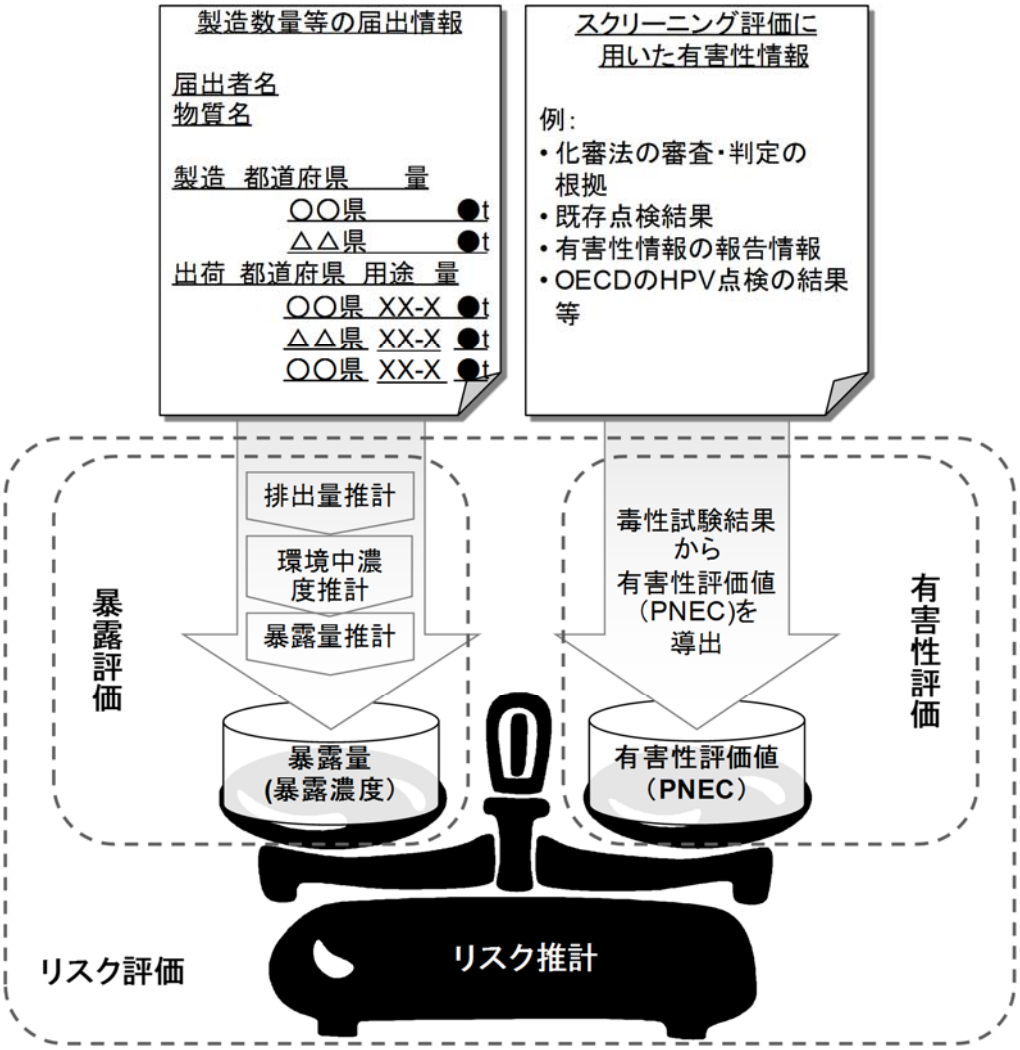
このように、製造数量等の届出情報は優先評価化学物質のリスク評価の根幹となっている。

---

[1] 平成三十年三月六日　厚生労働省　経済産業省　環境省告示第二号。「新規化学物質のうち、高分子化合物であって、これによる環境の汚染が生じて人の健康に係る被害又は生活環境動植物の生息若しくは生育に係る被害を生ずるおそれがないものに関する基準」

[2] EU REACH の CSR (Chemical Safety Report)、米国 TSCA の CDR (Chemical Data Reporting) では業種に関する情報として、我が国の日本標準産業分類にあたる NACE (Nomenclature statistique des Activités économiques dans la Communauté Européene)、NAICS (North American Industry Classification System) (以前は SIC (Standard Industry Classification))がそれぞれ求められている。

[3] 化学物質を取り扱うサプライチェーンの川下の加工業者の業種に関する情報を、製造・輸入業者に対して要求することは、現実的でなく、有益でないかもしれないと米国でも議論されている。(U.S. EPA(1993) CUI (Chemical Use Inventory) Multi-stakeholder meeting, Discussion Paper, pp.18)



図表 Ⅳ-５評価Ⅰにおける製造数量等の届出情報とリスク評価

Ⅳ.2.3 排出量推計の対象範囲

Ⅳ.2.3.1 届出情報の対象範囲

化審法における暴露評価では、化学物質の製造・使用等に起因する環境中への排出量を推計（排出量推計）し、さらに環境経由の人又は生活環境動植物の暴露量（暴露濃度）を推計する。この排出量推計は化審法の製造・輸入数量等の届出情報に基づいて行われる。なお、化審法の製造・輸入数量等の届出情報以外の排出は排出量推計の対象外であるが[1]、そのような場合は具体的には以下のとおりである。

(1) 化審法適用除外用途に係る排出

化審法第 55 条に基づく医薬品や農薬、台所用洗剤、衛生害虫用殺虫剤といった化審法の

[1] 評価Ⅱ以降で PRTR 情報が利用可能な場合は、化審法で対象としていない排出分が含まれることがある。詳細は、Ⅳ.7.5 を参照されたい。

適用除外となる用途[1]に優先評価化学物質が用いられている場合、それらの用途分の排出は対象として含まれない。

(2) 化審法の規制対象とならない排出

輸出分の国外での排出、自然発生源からの排出、自動車などの移動体に用いる燃料の燃焼や塩素漂白などによる副生成に伴う排出、工場の事故時の排出などは対象として含まれない。なお、適用除外用途の他には、「試験研究用」に用いられていたり[2]、自社内中間物として用いられていたり[3]した場合において、それら用途からの排出は対象として含まれない。

(3) その他

その他に、優先評価化学物質のライフサイクルの中で、「廃棄処理」のライフサイクルステージからの排出、例えば、溶剤のリサイクル、あるいは紙やプラスチック、金属などの資材のリサイクル事業所からの優先評価化学物質の排出のシナリオ等は現時点では考慮していない[4]。

また、輸送時の排出については本スキームの対象としていない。なお、貯蔵時の排出については各点源からの排出に含まれていると解釈する。

なお、製品に含まれる優先評価化学物質の排出については、国内でその製品が製造された場合については考慮しているが、輸入された場合には、その数量等の情報を把握していないため、考慮していない。

IV.2.3.2 評価対象物質

優先評価化学物質と評価対象物質等の関係については「Ⅰ章 評価の準備」に記載があるため、それを参照のこと。評価対象物質が複数の場合の排出量推計について、評価Ⅰの扱いは IV.3.2.1 に、評価Ⅱの扱いは IV.4.3.1 に後述する。

IV.2.4 排出量推計の構成要素

本スキームの排出量推計には、評価Ⅰ～Ⅱに共通して図表 IV-６に挙げた構成要素が含まれる。また、各々の構成要素の詳細は、他の節・項にて述べていることから、図表中に参照先を示した。

図表 IV-６ 本スキームにおける排出量推計Ⅰ,Ⅱに共通する構成要素

[1] 法第 55 条では、食品衛生法、農薬取締法、肥料取締法、飼料の安全性の確保及び品質の改善に関する法律、医薬品、医療機器等の品質、有効性及び安全性の確保等に関する法律において規定されている場合には、化審法の関連規定が適用されない。
[2] 法９条第１項第１号参照
[3] 運用通知３－６（３）参照
[4] ３省合同の審議会において今後の課題とされている。別添５ リスク評価に係る今後 https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/riskassess_kadai.pdf

構成要素		概要	参照先
1	製造数量等の届出情報の整備	製造・輸入者からの届出情報を毎年度整備	IV.2.2.1
2	排出シナリオの設定	リスク評価の実施前に予め設定	IV.2.5
	a 基本的な考え方	暴露シナリオに合わせて設定	IV.2.5.1
	b 用途の分類	排出シナリオに沿って用途を分類。「用途分類」と「詳細用途分類」を設定	IV.2.5.2 詳細は IV.7.2
	c ライフサイクルステージ	分類された用途に応じた化学物質のライフサイクルを７つ設定	IV.2.5.3
	d 排出先環境媒体	排出先の環境媒体として､大気と水域の２つを設定	IV.2.5.4
3	物理化学的性状データの選定	排出係数の選択に用いる蒸気圧と水溶解度のデータを設定	Ⅰ章参照
4	排出係数	2 で設定したシナリオと整合させた詳細用途別・ライフサイクルステージ別・排出先環境媒体別・物理化学的性状区分別の排出係数	IV.2.6.2 詳細は IV.7.2 及び IV.7.4
5	排出量の推計	1 で得られた製造数量、出荷数量、用途から 2 で設定したシナリオを選択し、3,4 のデータを使用し排出量を推計	IV.2.6 IV.3.3 検証結果は IV.7.6

図表 IV-６にある評価Ⅰ,Ⅱに共通する構成要素のうち、「2 排出シナリオの設定」については、「1 製造数量等の届出情報の整備」で得られた情報を用いて、より効率的に優先評価化学物質の排出量を推計するために、リスク評価の実施前に予め設定された。特に「2.b 用途の分類」については製造数量等の届出制度に組み込まれている。

そのため、詳細用途が製造・輸入業者から届け出られると、その詳細用途での優先評価化学物質のたどるライフサイクルが仮定され、詳細用途別・ライフサイクルステージ別・排出先環境媒体別の排出シナリオが決定する。

さらに、「3 物理化学的性状データ（蒸気圧、水溶解度）の選定」により、詳細用途別・ライフサイクルステージ別・排出先環境媒体別・物理化学的性状区分別の「4 排出係数」が選択され、「5 排出量の推計[1]」がされることになる。

なお、評価Ⅰ,Ⅱの違いについては、IV.4.2 にて後述する。

IV.2.5 排出シナリオの設定

IV.2.5.1 基本的な考え方

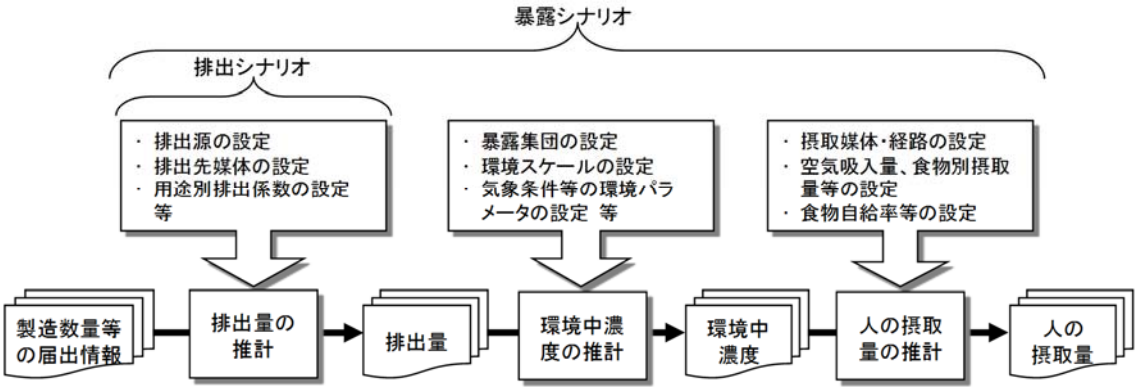
(1) 排出シナリオの位置づけ

① 暴露シナリオとの関係

暴露評価で製造数量等の届出情報から環境中濃度（生活環境動植物の暴露濃度）や人の摂

[1] 化学物質の環境への排出量を推計する手法について、OECD から公表されている。「Guidance Document on Emission Scenario Documents」を参考にした。
http://www.oecd.org/document/46/0,3746,en_2649_34379_2412462_1_1_1_1,00.html#Categories_used_in_the_OECD_ESDs

取量を推計するまでの流れを図表 Ⅳ-７に示す。図中に示すように、製造数量等の届出情報から環境中濃度（生活環境動植物の暴露濃度）や人の摂取量を推計するためには一連の仮定（シナリオ）を置く必要がある。本章では、製造数量等の届出情報から排出量を推計するまでの一連の仮定を「排出シナリオ」と呼び、排出シナリオも含めた人の摂取量あるいは生活環境動植物の暴露濃度を推計するまでの一連の仮定を「暴露シナリオ」と呼ぶ（詳細はⅤ暴露評価参照）。なお、PRTR 情報のように排出量に関する情報が得られる場合には、それらの情報を用いて暴露評価を行うことができる。



図表 Ⅳ-７ 排出シナリオと暴露シナリオの関係

② 暴露シナリオにおいて対象とする用途・ライフサイクルステージ

排出源から排出された化学物質に人や生活環境動植物が暴露されるまでの一連の仮定である暴露シナリオには、製造数量等の届出情報を用いる場合においても図表 Ⅳ-８に示すとおり複数のシナリオが設定されている。

図表 Ⅳ-８　暴露シナリオの種類と概要

シナリオ名		対応する用途分類	対象とするライフサイクルステージ※1					評価を行う段階※1		
			製造	調合	工業的使用	家庭用等使用	長期使用製品使用	評価Ⅰ	評価Ⅱ	評価Ⅲ以降
排出源ごとの暴露シナリオ		すべての用途	○	○	○			○	○	※2
用途等に応じた暴露シナリオ	水系の非点源シナリオ	#113 水系洗浄剤2《家庭用･業務用の用途》 #114 ワックス #120 殺生物剤3《家庭用･業務用の用途》				○		○	※2	
	大気系の非点源シナリオ	#120 殺生物剤 3《家庭用･業務用の用途》 #122 芳香剤、消臭剤 #147 燃料、燃料添加剤				○		○	※2	
	船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ	#117 船底塗料用防汚剤、漁網用防汚剤					○	○	○	
	地下水汚染の可能性シナリオ	#104 金属洗浄溶剤 #105 クリーニング洗浄用溶剤など※3			○	○			○	
様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ		すべての用途	○	○	○	○	○		○	

※1：「○」は対象の意
※2：前の評価を行う段階でリスクが懸念される場合は対象
※3：他にも対象とする用途あり（詳細は VI.5 参照)。

基本となる暴露シナリオは、すべての用途に関して評価Ⅰから必ず実施し、製造から工業的使用までの 3 つのライフサイクルステージをカバーする「排出源ごとの暴露シナリオ」である。このシナリオでカバーしていないライフサイクルステージ（家庭用等使用段階と長期使用製品使用段階）での排出が主となる用途に関しては、「用途等に応じた暴露シナリオ」を追加し補足することとしている。

「排出源ごとの暴露シナリオ」は、サプライチェーンの川上及び川中にあたる事業所（以下「点源」という。）での製造、調合等に伴う排出を対象とし、それら点源である排出源周辺に着目したシナリオである。

「用途等に応じた暴露シナリオ」のうち、「水系の非点源シナリオ」、「大気系の非点源シナリオ」、「船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ」は、最終製品での排出が化学物質のライフサイクル全体での排出量の大半を占めることが想定される特定の用途に着目したシナリオ

である[1]。

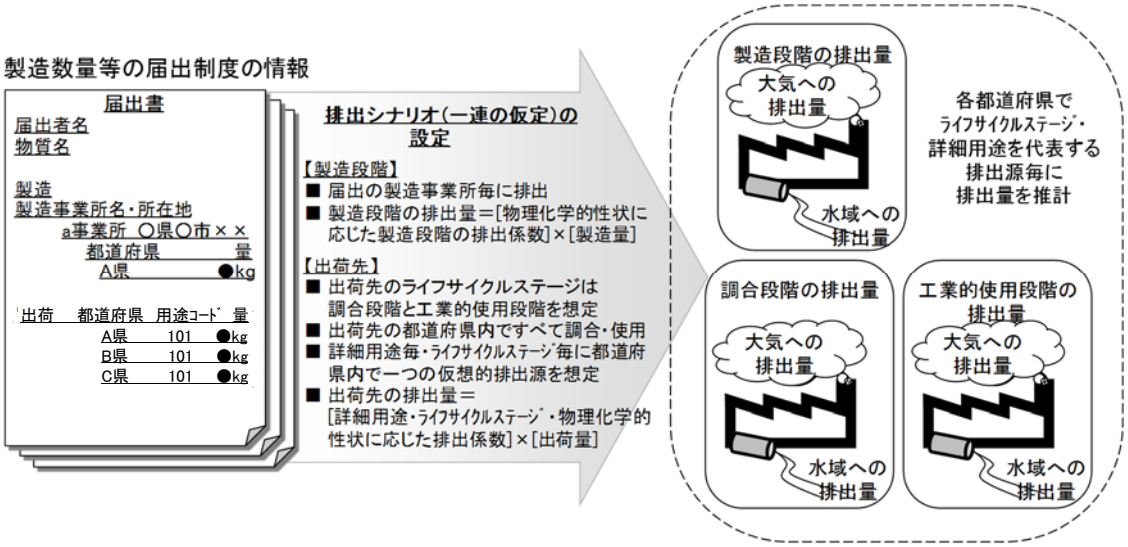
評価Ⅱで実施する「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」（製造数量等の届出情報を用いる場合）は、各ライフサイクルステージからの排出をまとめて、日本全体としての排出量を用いる広域的・長期的スケールのシナリオである。

以上のように、暴露シナリオは製造数量等の届出における用途に応じて設定されるようになっている。

(2) 基本となる排出シナリオ（排出源ごとの暴露シナリオ）

図表 Ⅳ-８に示した複数の暴露シナリオの中で、評価Ⅰからすべての用途を対象として設定する「排出源ごとの暴露シナリオ」は、暴露評価の基本となる。ここでは、「排出源ごとの暴露シナリオ」の基本的な考え方を説明する。

「排出源ごとの暴露シナリオ」は、製造数量等の届出情報を用いる場合、「仮想的排出源[2]」を設定し、そこから排出された化学物質に、それぞれの「仮想的排出源」の周辺に居住する一般国民（又は生育・生息する生活環境動植物）が環境経由で暴露されるシナリオである。「排出源ごとの暴露シナリオ」における排出シナリオをより詳しくすると図表 Ⅳ-９のようになる。



図表 Ⅳ-９基本となる排出シナリオ（排出源ごとの暴露シナリオの場合）

本スキームではこの図に示すように、製造数量等の届出情報を活用する排出シナリオを

[1] 例えば、ある優先評価化学物質に水系の非点源シナリオの対象となる水系洗浄剤《家庭用・業務用の用途》の用途があった場合、当該用途の製造段階と調合段階の排出に関しては「排出源ごとの暴露シナリオ」で評価され、家庭用等使用段階の排出に関しては「水系の非点源シナリオ」で評価される。なお、当該用途に関しては、工業的使用段階での使用は想定しておらず、排出係数を設定していない。

[2] 暴露評価において、製造数量等の届出情報に基づき、排出量を推計するために設定する仮想的な排出源のこと。物質別・ライフサイクルステージ別・出荷先都道府県別・詳細用途別に設定される。

以下の①～③の項目ごとに設定している。

① 排出源の設定……製造数量等の届出様式に記載されている「製造」と「出荷先」での「詳細用途」情報から想定されるライフサイクルを考慮し、「仮想的排出源」を設定する[1]。製造段階については届出の製造事業所ごと[2]、出荷先については詳細用途ごとに、調合段階と工業的使用段階のそれぞれ独立した排出源があると仮定する。

② 地理的分布の設定……①で優先評価化学物質の排出源を設定した後、排出源がどこに、どれくらいの数で分布しているかという「地理的分布」を設定する。「仮想的排出源」の数は、製造事業所数、詳細用途の数、出荷先都道府県数によって決まる。優先評価化学物質においての排出源の所在地について、製造事業所については化審法届出情報から得られるが、出荷先事業所については「出荷先都道府県」の情報しかなく、地理的分布を正確に把握することはできない。そのため、出荷先の「仮想的排出源」については出荷先都道府県ごとに、詳細用途別に調合段階と工業的使用段階の排出源がそれぞれ独立して１箇所ずつ分布すると仮定する[3]。

③ 時間軸の設定……排出シナリオにおける時間の捉え方は「評価に用いる年度の製造数量等の届出情報に基づく推計排出量（トン／年）が、将来にわたり継続すると仮定」している[4]。

上記の排出シナリオの設定に際しては、以下の２つの観点に基づいている。

１つは、製造数量等の届出の内容を規定する法律等に基づいて、排出源の単位を設定することに関連する。法律等では、「製造した事業所名及び所在地、都道府県別製造数量、輸入した国・地域別輸入数量、都道府県別・用途別の出荷数量」が届出事項とされている。本スキームではこれに従い、製造事業所ごとの製造数量、都道府県別・詳細用途別の出荷数量を最小単位とみなし、環境への排出量の推計ではこれらを利用し、排出源の単位を設定することとした。

もう１つの観点は、出荷数量の扱いでライフサイクルステージ・都道府県・詳細用途別に１つずつの「仮想的排出源」を設定することに関連する。この排出量の推計では、製造・輸入という国内で優先評価化学物質が取り扱われる総量を把握し、環境中への排出量をサプライチェーンの川上側から順に推計する。しかし、製造数量等の届出情報では、川下事業者の裾野がどの程度広がっているかの把握は困難である。そのため、本スキームではライフサイクルステージ別・都道府県別・詳細用途別の「仮想的排出源」という考え方を用いている。

---

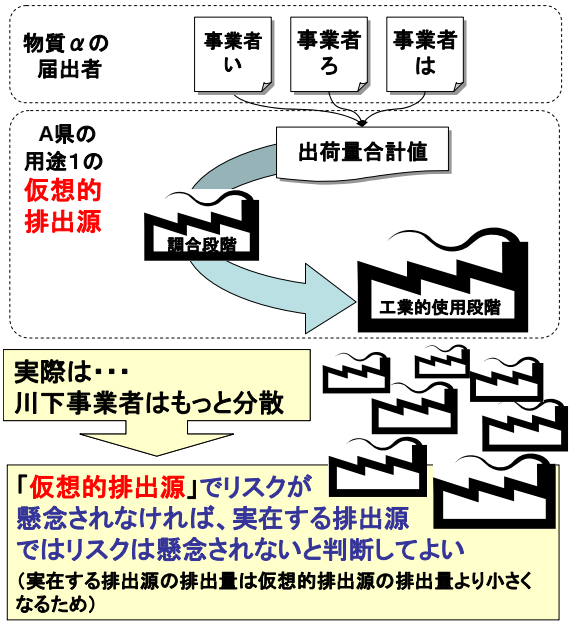
[1] 一般的には、化学物質の排出源の情報として、用途、使用工程、排出経路、排ガス・排水処理設備の設置の有無、事業所規模、業種などの情報をできる限り詳細に設定することで排出源はより明確に設定される。

[2] 届出者が１つの都道府県内に同一物質について複数の製造事業所を有する場合は、届出書の書式上、それらを分割することはできず製造段階の排出源は１箇所として扱う。このような場合には製造段階の排出源も「仮想的排出源」になるが、過去の届出実績等からそのような場合を想定していない。

[3] いくつかの詳細用途については、２箇所の調合段階を設ける等の例外があり、それらはⅣ.2.5.3 で後述する。

[4] 優先評価化学物質によっては、過去に大量に製造されたが、現在は少量しか製造されていないような場合があるため、評価Ⅱ以降の排出量推計では、暴露シナリオに応じて複数年度の届出数量を考慮する。

この考え方は、「仮想的排出源」からの排出によるリスクが懸念されないのであれば、実在する排出源がそれ以上の数に広がっていたとしても個々の排出源の排出量は「仮想的排出源」の排出量より必ず小さくなるため、リスクは懸念されないと判断してよいという仮定に基づくものである（図表 Ⅳ-１０参照）。これは製造数量等の届出情報という限られた情報から優先評価化学物質を一律に、効率的に評価するための手段である。また、評価結果は上記のとおり、実在する排出源によるリスクよりも大きめに見積もっており、リスク懸念となった場合には次の段階で情報を収集して再評価するという段階的アプローチにつながる。



図表 Ⅳ-１０　仮想的排出源を置く排出シナリオの考え方

Ⅳ.2.5.2 用途の分類

多くの場合、用途に関する情報を届け出させる目的は、化学物質のリスク評価（排出量推計）のためだけでなく、用途に応じた管理（特定の用途のみの規制や指導など）を可能とすることにある[1]。現に米国の TSCA や EU においても用途規制が行われている。

化審法において、平成 15 年改正法までに用いられた用途の分類は、「機能別分類」と呼ばれていた[2]。

この「機能別分類」は、旧第一種監視化学物質、旧第二種監視化学物質及び第三種監視化学物質に指定される際に製造・輸入者に対して国が事前に確認した用途を反映したもので

[1] SAICM Overarching Policy Strategy(OPS) B.知識と情報 (b)(i)において、「適切な場合には製品中の化学物質も含めた、化学物質のライフサイクル全体の情報が、すべての利害関係者たちにとって入手可能で、容易に利用でき、ユーザーフレンドリーであり、適正で適切であること」と記載があるように、近年では「Public access の機会の促進」という面もみられている。

[2] 経済産業省製造産業局化学物質管理課化学物質安全室（2009）第二種特定化学物質及び監視化学物質の製造数量等の届出要領［別冊］
http://warp.ndl.go.jp/info:ndljp/pid/286890/www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/specified/bessatsu21.pdf

あった。また、当時はリスク評価に用いることを前提に設定された分類ではなかった[1]。

その特徴として、化学物質ごとに独自の用途名称がつけられており、名称のつけ方や分類の深さに統一がなく、化学物質横並びでの比較ができない点があった。

そこで、排出量推計で用いることを前提とした化学物質間で統一した新たな化学物質の用途の分類（以下、「用途分類表[2]」という）を設定した（「用途分類表」の設定経緯等の詳細は IV.7.3 を参照）。

IV.2.1(2)で前述したが、設定された製造数量等の届出制度のための「用途分類表」は、原則として、使用目的と機能を表す分類となるように整理されている。ここでいう使用目的がどのライフサイクルステージでの使用目的を指すかというと、図表 IV-１１に例示するように、「調合段階」から「工業的使用段階」又は「家庭用・業務用使用段階」へ出荷される際の調剤の使用目的として位置づけられている。これは化学物質の用途ごとの排出量の違いが、「製造段階」や「調合段階」よりも「工業的使用段階」又は「家庭用・業務用での使用段階」において顕著に現れることを想定しているためである。

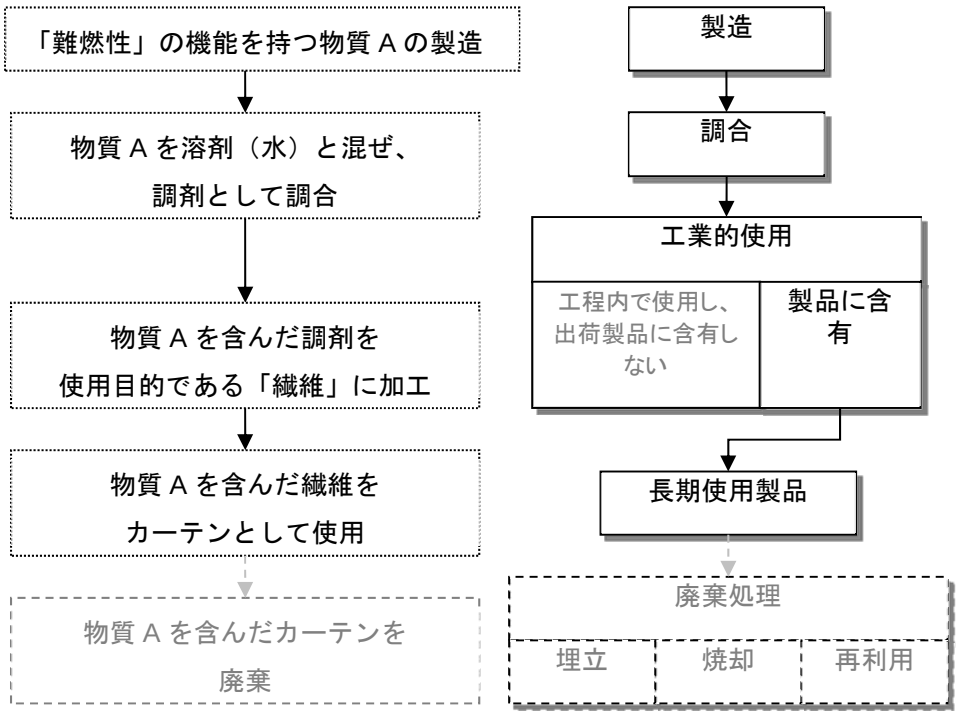
「用途分類表」は、「用途分類」と「詳細用途分類」という２つの階層で構成されている。「用途分類」は使用分野・使用目的に概ね該当し、「詳細用途分類」は機能分類に概ね該当している。例えば、「塗料・コーティング剤」という用途分類の中に、「着色剤」「可塑剤」「安定化剤」などの詳細用途分類を設定している。

また、サプライチェーンのさらに先にある成形品について、その種類ごとにどのような化学物質が含まれているかという情報が得られることは有用である。しかし、届出の義務を持つ製造・輸入者がこれらの情報を得ることは困難であり、仮に個別物質について得られたとしても、すべての化学物質、すべての用途、すべての成形品の種類に対して、排出実態（排出係数）を把握し、一般化できるほどの知見は現時点では得られていない。そのため、特定の用途を除いて[3]、どのような成形品に用いられているかの情報まで「用途分類表」に含めていない。

[1] 開放系用途か否かという別の基準でリスク評価に用いられていた。例えば、経済産業省(2006) 化学物質審議会安全対策部会安全対策小委員会（第５回）資料５ 第二種監視化学物質のリスク評価に係わる優先順位付けの考え方及びその適用結果について 参照。
http://warp.ndl.go.jp/info:ndljp/pid/286890/www.meti.go.jp/committee/materials/g70316bj.html

[2] 独立行政法人製品評価技術基盤機構化学物質管理センター「化審法に用いる化学物質用途分類表 Ver. 2
https://www.nite.go.jp/chem/risk/yusenyoto.pdf

[3] 船底に用いられる塗料（船底塗料）中の殺生物剤、漁網に用いられる殺生物剤については「船」、「漁網」という詳細な情報の提出を求めている。



図表 Ⅳ-１１　使用目的という用途のライフサイクルステージにおける位置づけの例

各用途分類、各詳細用途分類の定義、説明については、「IV.7.3.3 用途分類解説資料」に取りまとめている。

IV.2.5.3 用途とライフサイクルの関係

１組の「用途分類」と「詳細用途分類」の組合せを選択すると、その組合せでの優先評価化学物質のライフサイクルが設定される。それらは大きく以下の 7 種類に分かれる。

(1)本スキームにおける一般的な用途を有する化学物質でのライフサイクル[1]
　(※以下の(2)～(7)以外の用途)
(2)中間物のライフサイクル
(3)基材そのもの又は成形品に含有させる添加剤のライフサイクル
(4)家庭用・業務用の用途を有する化学物質のライフサイクル
(5)芳香剤、消臭剤のライフサイクル
(6)セメント原料、セメント添加剤のライフサイクル
(7)燃料、燃料添加剤のライフサイクル

上記(1)～(7)の用途について、排出を想定しているライフサイクルを図表 Ⅳ-１２に整理した。また、個々の用途分類・詳細用途分類について、どのようなライフサイクル、ライフ

[1] 出荷先での用途が「不明」な場合や、該当する詳細用途が無い場合に用途を「#198-z その他の原料、その他の添加剤」で届出がされた場合も、「本スキームにおける一般的な用途でのライフサイクル」が適用される。

サイクルステージを定義しているかは「IV.7.2.2」に一覧表として示しているので参照されたい。

図表 IV-１２　用途に応じたライフサイクルの設定状況

用途の概要※1		ライフサイクルステージ				
		製造	調合	工業的使用	家庭用等使用	長期使用製品使用
(1)	一般的な用途： (2)～(7)以外の用途	○	○	○		
(2)	中間物	○		○		
(3)	基材そのもの又は成形品に含有させる添加剤	○	○	○		○
(4)	家庭用・業務用の用途	○	○		○	
(5)	芳香剤、消臭剤	○	○※2		○	
(6)	セメント原料、セメント添加剤	○	○※3	○	○	○※4
(7)	燃料、燃料添加剤	○	○※3		○	

※1：具体的に対応する詳細用途は、本節内の各項参照
※2：調合段階を２段階に設定
※3：添加剤については調合段階を２段階に設定
※4：添加剤については設定

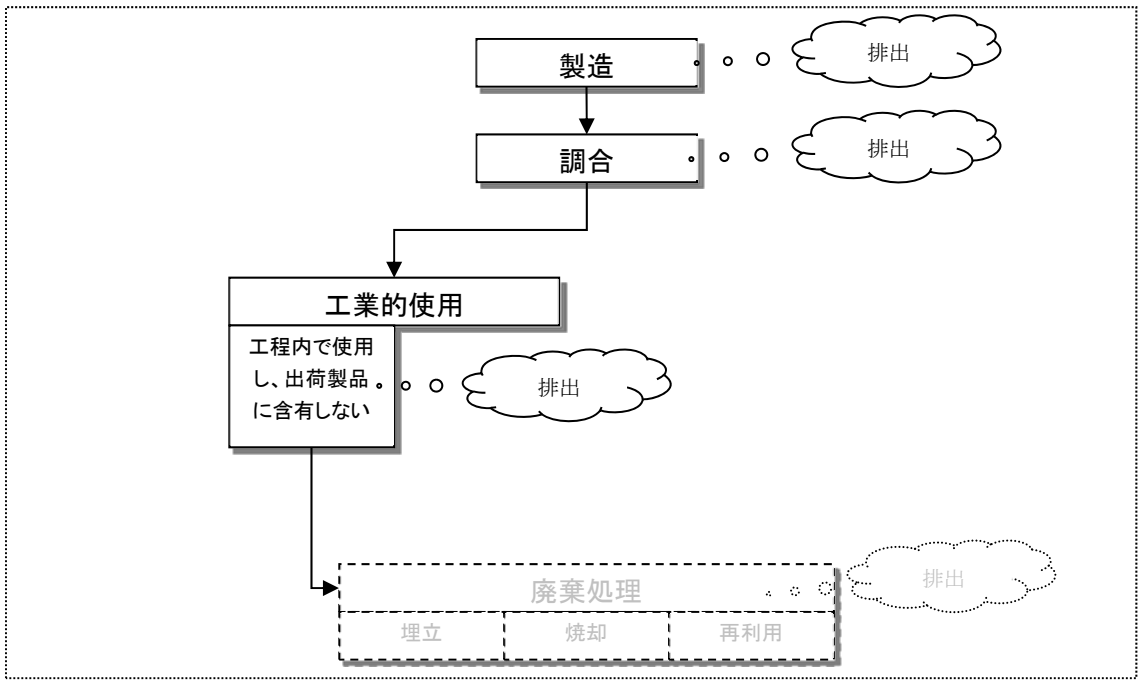
以下に(1)～(7)について、用途とライフサイクルとの関係を示す。

(1) 本スキームにおける一般的な用途を有する化学物質でのライフサイクル

一般的な用途での優先評価化学物質のライフサイクルを図表 IV-１３のように設定した。

このライフサイクルをたどる優先評価化学物質の用途は、主に事業所内で工業用に使用される用途で、成形品中にほとんど含まれず、化学反応、加工、成形などを手助けする際に用いられる。そのサプライチェーンは工業用の「洗浄用溶剤」のように比較的短く、「工業的使用段階（Industrial use）」のライフサイクルステージにおいてそのほぼ全量が使用される。その排出実態は、その他のライフサイクルと比べると、用途だけでなく、化学物質の物理化学的性状、業種あるいは事業所ごとの排ガス・排水処理設備の状況によっても大きく異なると考えられる。

排出を「製造段階」、「調合段階」、「工業的使用段階」の３つのライフサイクルステージに設定した。



図表 Ⅳ-１３　優先評価化学物質の一般的な用途でのライフサイクル

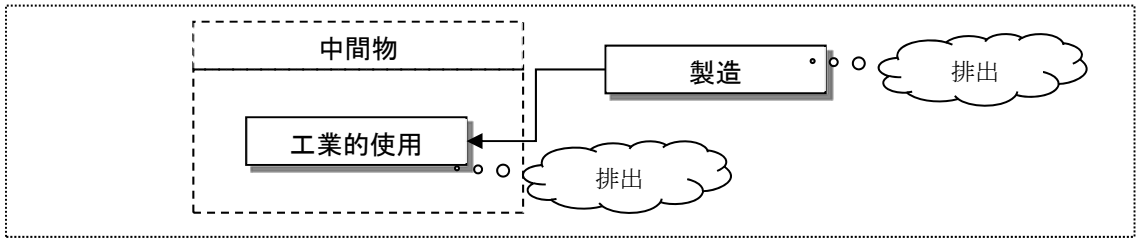
⑵ 中間物のライフサイクル

「中間物」用途の優先評価化学物質のライフサイクルを図表 Ⅳ-１４のように設定した。

用途分類「#101 中間物」詳細用途分類「a 合成原料、重合原料、プレポリマー」に該当する用途[1]の優先評価化学物質は、「製造段階」を経て「調合段階」を介さず、「工業的使用段階」のライフサイクルステージで化学反応を起こさせることにより、別の化合物へと変化するため、そこでライフサイクルを終えると仮定される。

したがって、対象となる優先評価化学物質のサプライチェーンは短く、また、より効率的に別の化学物質へと変化させることが事業者の利益につながることから、全ライフサイクルからの環境中への排出量は、非常に小さな値をとることが想像できる。

排出を「製造段階」、「工業的使用段階」の２つのライフサイクルステージに設定した。



図表 Ⅳ-１４　「中間物」用途の優先評価化学物質のライフサイクル

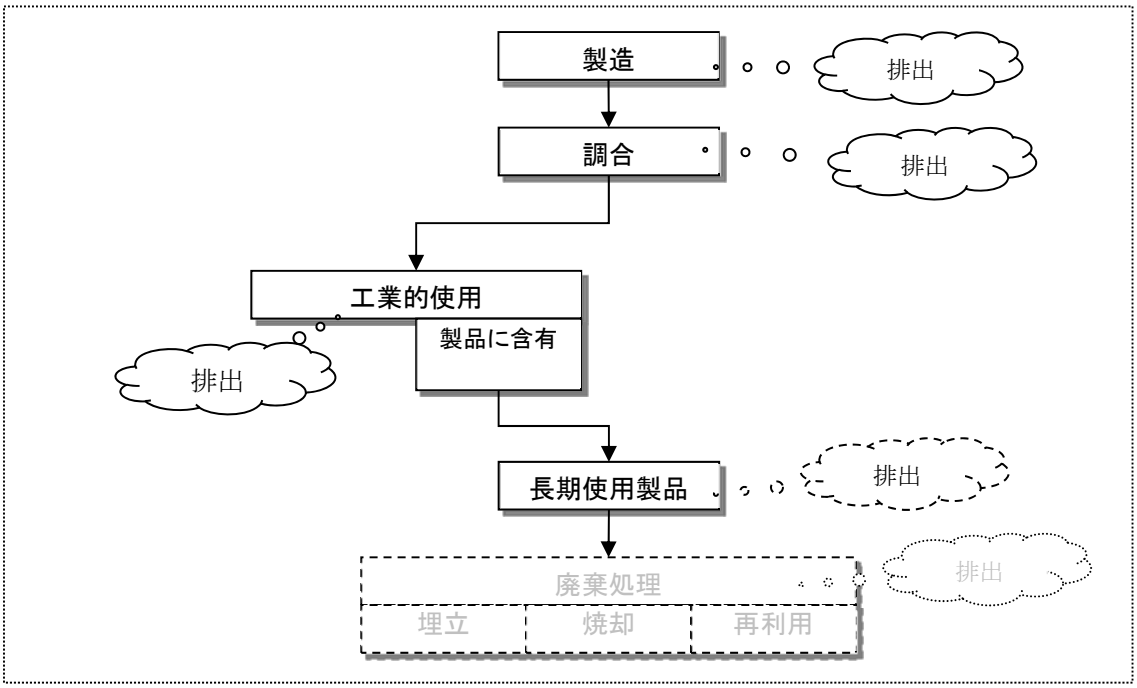
[1] 「#101-b 重合開始剤」、「#101-z その他」は、調合段階のライフサイクルステージを考慮したため、本ライフサイクルではなく、「(1) 本スキームにおける一般的な用途を有する化学物質でのライフサイクル」に該当する。

(3) 基材そのもの又は成形品に含有させる添加剤のライフサイクル

「基材そのもの又は成形品に含有させる添加剤」用途の優先評価化学物質のライフサイクルを図表 Ⅳ-１５のように設定した。ここでいう「基材そのもの」は合成繊維、プラスチック、合成ゴムなどの「高分子化合物[1]」のことを指す。また、「含有させる」とは成形品中若しくは成形品の表面に存在させることを指す[2]。

このライフサイクルをたどる優先評価化学物質は、基材や成形品に含有された後も、川下の組立産業などを介したりし、最終製品の形態となるまでのサプライチェーンが図表 Ⅳ-１５に示すよりも長く、場合によっては海外事業所を経る場合もあることが予想される。しかし、全ライフサイクルからの環境中への排出量という視点に立つと、このライフサイクルをたどる優先評価化学物質は、最終製品とともに存在することでその機能を発揮するため、基材や成形品に含有された後、最終製品の形態となるまでの間に環境中に排出されることは想定しがたい。そこで、本スキームでは基材や成形品に含有された後に最終製品の形態となるまでのサプライチェーンの長さを図表 Ⅳ-１５に示すとおり簡略化している。

排出を「製造段階」、「調合段階」、「工業的使用段階」、「長期使用製品の使用段階」の４つのライフサイクルステージに設定した。



図表 Ⅳ-１５　「基材そのもの又は成形品に含有させる添加剤」用途の優先評価化学物質のライフサイクル

基材そのもの又は成形品に含有させる添加剤のライフサイクルが想定される用途としては、図表 Ⅳ-１６の用途番号が対象となる。

[1] ここでは、「高分子化合物」を化審法上で定義されているものとしてではなく、一般用語として用いている。
[2] EU-TGD では into/onto matrix といい、これを成形品中及び/又は成形品の表面と解釈した。

図表 Ⅳ-１６　基材そのもの又は成形品に含有させる添加剤のライフサイクルが想定される用途分類

用途番号(#)	用途分類
111	着色剤（染料、顔料、色素、色材等に用いられるものをいう。）
115	塗料又はコーティング剤
117	船底塗料用防汚剤又は漁網用防汚剤
118	殺生物剤（成形品に含まれるものに限る。）
123	接着剤、粘着剤又はシーリング材
125	合成繊維又は繊維処理剤
127	プラスチック、プラスチック添加剤又はプラスチック加工助剤
128	合成ゴム、ゴム用添加剤又はゴム用加工助剤
129	皮革処理剤
130	ガラス、ほうろう又はセメント※
131	陶磁器、耐火物又はファインセラミックス
132	研削砥石、研磨剤、摩擦材又は固体潤滑剤
136	作動油、絶縁油又は潤滑油剤
138	電気材料又は電子材料
144	建設資材又は建設資材添加物

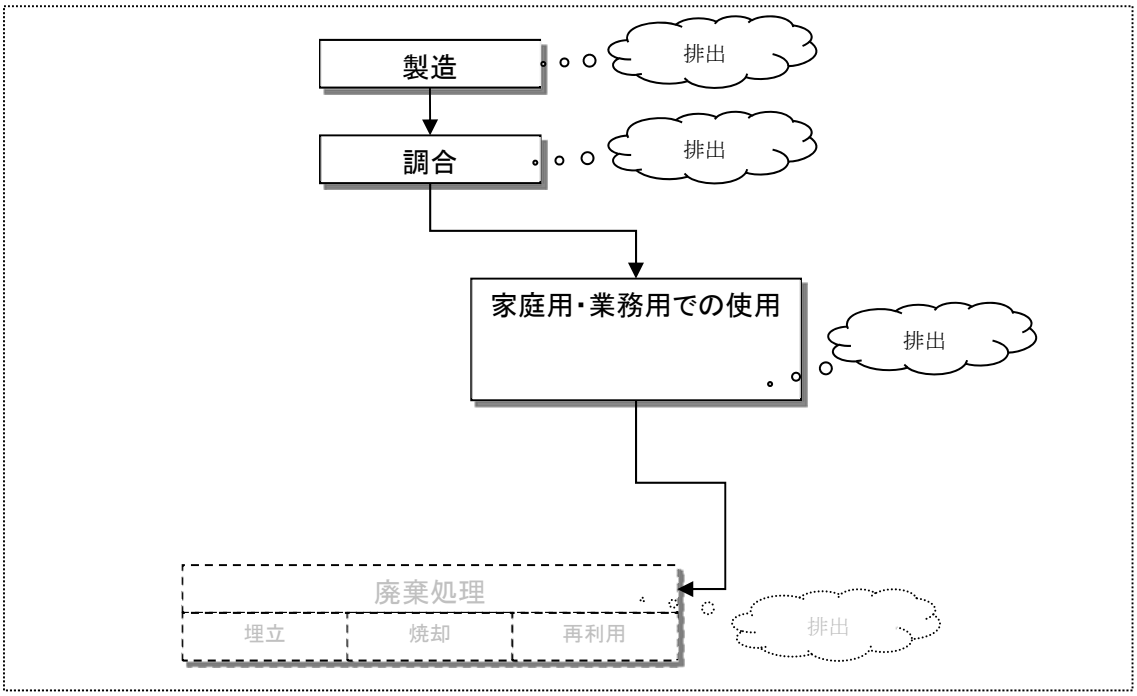
※　セメント添加剤については、後述する(6)のライフサイクルを参照されたい。

(4) 家庭用・業務用の用途を有する化学物質のライフサイクル

家庭用･業務用の用途を有する優先評価化学物質のライフサイクルを図表 Ⅳ-１７のように設定した。家庭用・業務用の用途とは、『最終的に家庭などで一般消費者個人による「優先評価化学物質が使用された製品」の使用の可能性が考えられる用途や、業務用としてオフィスビル、公園の清掃など工業的な生産活動に直接関係なく「優先評価化学物質が使用されている製品」が使用される用途』を指している。

当該用途では、開放系で「優先評価化学物質が使用されている製品」を使用することによりその機能を発揮するため、「家庭用・業務用での使用段階」のライフサイクルステージにおける排出が最も多い。

このライフサイクルをたどる用途分類の設定においては、PRTR 制度における家庭からの排出で推計対象となっている用途である「洗浄剤」、「化粧品」、「防虫剤」及び「消臭剤」と EU-TGD における「IC 5 Personal/domestic 及び IC 6 Public domain」に当てはまる Use Category を参考にしている。



図表 Ⅳ-１７　家庭用・業務用の用途を有する優先評価化学物質のライフサイクル

家庭用・業務用の用途として排出が考慮される用途は、図表 Ⅳ-１８に記載されている「#113 水系洗浄剤（家庭用又は業務用のものに限る。）」、「#114 ワックス（床用、自動車用、皮革用等のものをいう。）」及び「#120 殺生物剤（家庭用又は業務用のものに限る。）」の３つが対象となる。なお、上記３用途とは異なるライフサイクルをたどる「#122 芳香剤又は消臭剤」については、別のライフサイクル（(5)の図表 Ⅳ-１９を参照）を設定している。

図表 Ⅳ-１８　家庭用・業務用の用途として排出が考慮される用途分類

用途番号(#)	用途分類
113	水系洗浄剤（家庭用又は業務用のものに限る。）
114	ワックス（床用、自動車用、皮革用等のものをいう。）
120	殺生物剤（家庭用又は業務用のものに限る。）

上記以外の用途分類、詳細用途分類であっても、実態として家庭用・業務用での使用が存在するが[1]、その主たる用途である工業的使用に統合して取り扱うことと設定した。なお、#142-a の冷媒、冷却剤（フロン類等）は PRTR 推計対象用途で、統計資料から主たる用途が家庭用・業務用であるが、#142-b の熱媒、加熱剤は PRTR 推計対象用途ではなく、主たる用途が「工業的使用」であるため、#142 には「家庭用・業務用での使用」のシナリオ設

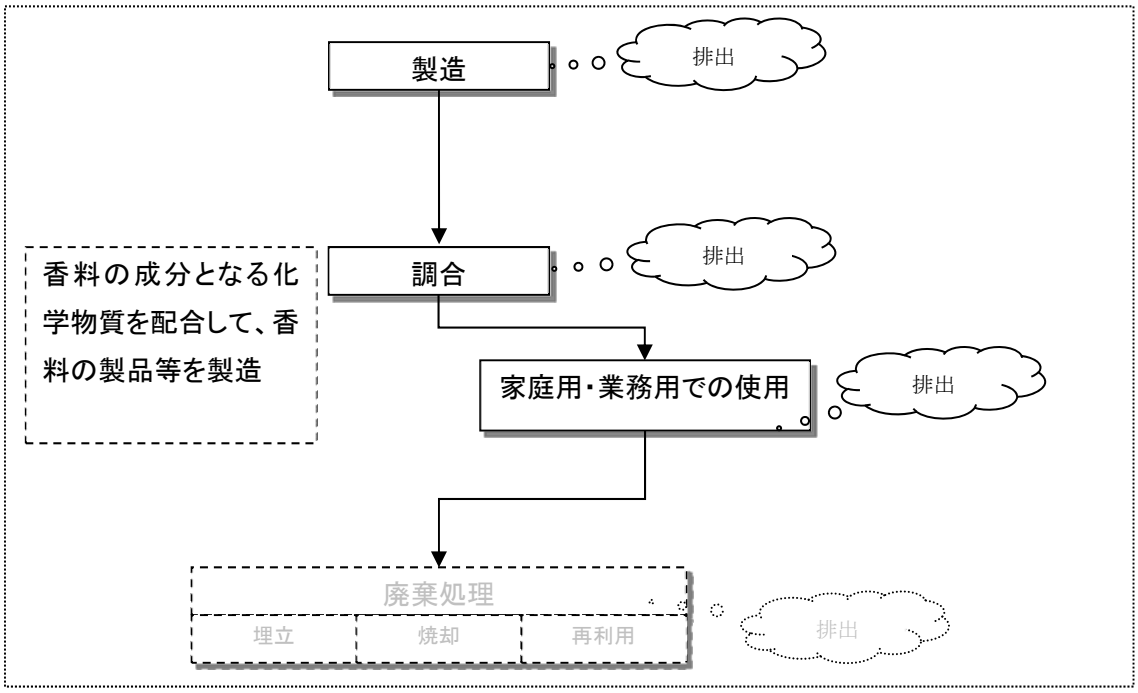
[1] 例えば、#102 塗料用、ワニス用、コーティング剤用、インキ用、複写用又は殺生物剤用溶剤、#103 接着剤用、粘着剤用又はシーリング材用溶剤、#105 クリーニング洗浄用溶剤、#108 エアゾール用溶剤又は物理発泡剤、#109 その他の溶剤（１０２～１０８までに掲げるものを除く。）、#115 塗料又はコーティング剤、#116 インキ又は複写用薬剤、#123 接着剤、粘着剤又はシーリング材、#124 レジスト材料、写真材料又は印刷版材料、#136 作動油、絶縁油又は潤滑油剤、#142 熱媒体、#147 燃料又は燃料添加剤など。

定を行わなかった。ただし、「家庭用・業務用での使用」からの排出量が「工業的使用」からの排出量に対比して無視できないこともあり得る。そのような場合には評価Ⅱ又はⅢ以降で考慮することとした。

(5) 芳香剤又は消臭剤のライフサイクル

用途分類「#122 芳香剤又は消臭剤」として使用される優先評価化学物質のライフサイクルを図表 Ⅳ-１９のように「製造段階」、「調合段階」、「家庭用・業務用での使用段階」の３つのライフサイクルステージを設定した。本ライフサイクルは、(4)のライフサイクルと同じである。

芳香剤、消臭剤は開放系で化学物質を使用することによりその機能を発揮するため、水系洗浄剤などと同様に「家庭用・業務用での使用段階」のライフサイクルステージにおける排出が最も多い。



図表 Ⅳ-１９　芳香剤、消臭剤の優先評価化学物質のライフサイクル

芳香剤、消臭剤の用途番号は「#122 芳香剤又は消臭剤」である。用途分類「#122 芳香剤又は消臭剤」の詳細用途分類「b 芳香剤」「c 消臭剤」「d 乳化剤、分散剤」「e 香料[＃113-e 及び＃122-b,c を除く]」「z その他」については、家庭用・業務用での芳香剤製品、消臭剤製品を使用する段階を想定し、主に大気への排出が考慮されるシナリオが設定されている。

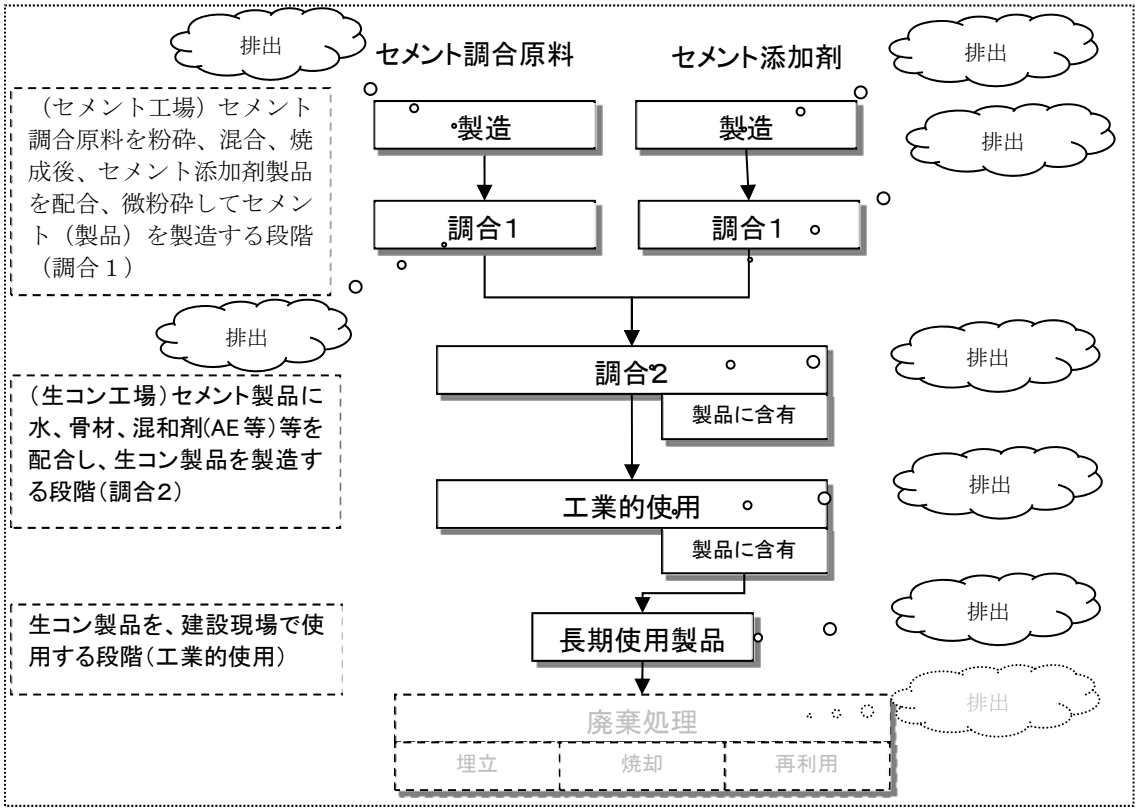
なお、用途分類表 Ver.1 では、家庭等での香料入り洗浄剤等、主に河川への排出を考慮するシナリオである詳細用途分類「a 香料（洗浄剤用）」が設定されていたが、用途分類表 Ver.2 では、「＃113 水系洗浄剤（家庭用又は業務用のものに限る。）」の「e 香料」に変更になったため、当該詳細用途は廃止されている。

(6) セメント調合原料、セメント添加剤のライフサイクル

用途分類「＃130 ガラス、ほうろう又はセメント」の詳細用途分類「g セメント調合原料」及び「h セメント添加剤（混合材、膨張剤、固化剤等）」の優先評価化学物質のライフサイクルを図表 Ⅳ-２０のように「製造段階」、「調合段階 1」、「調合段階 2」、「工業的使用段階」、「長期使用製品の使用段階」の 5 つのライフサイクルステージを設定した。本ライフサイクルは、(3)のライフサイクルの派生型であり、調合段階を 2 段階に設定している点が異なる。

「調合段階 1」は、セメント工場で、セメント調合原料を粉砕・混合・焼成後、クリンカに石膏、フライアッシュ等のセメント添加剤等の成分を配合、粉砕し、セメント製品を製造する段階を指し、「調合段階 2」は、生コン工場で、セメント製品に水、骨材、混和剤(AE 等)等を配合し、生コン製品を製造する段階を指す。また、「工業的使用段階」とは「調合段階 2」によって作られた生コン製品を、建設現場で使用する段階を指す。この工業的使用段階では、「#144 建設資材又は建設資材添加物」の「b コンクリート混和剤（強化剤、減水剤）」などの工業的使用段階と同様のシナリオを設定している。長期使用製品の使用段階」はセメント（製品）成分がコンクリート等から使用中に浸み出る段階を指す。

一方、新たに追加された詳細用途分類である「i セメント加工助剤」の優先評価化学物質のライフサイクルについては「製造段階」、「調合段階」、「工業的使用段階」の 3 つのライフサイクルステージを設定した。当該詳細用途は、セメント工場、調合（粉砕）工程等でクリンカ補助剤（粉砕助剤）等として、工業的に使用されることを想定している。



図表 Ⅳ-２０　セメント原料及びセメント添加剤の優先評価化学物質のライフサイクル

セメント調合原料、セメント添加剤、セメント加工助剤の詳細用途分類は、図表 Ⅳ-２１に示すように「#130 ガラス、ほうろう、セメント」の「g セメント調合原料」、「h セメント添加剤（混合材、膨張剤、固化剤等）」及び「i セメント加工助剤」となる。

図表 Ⅳ-２１　セメント関連の用途として排出が考慮される用途分類・詳細用途分類

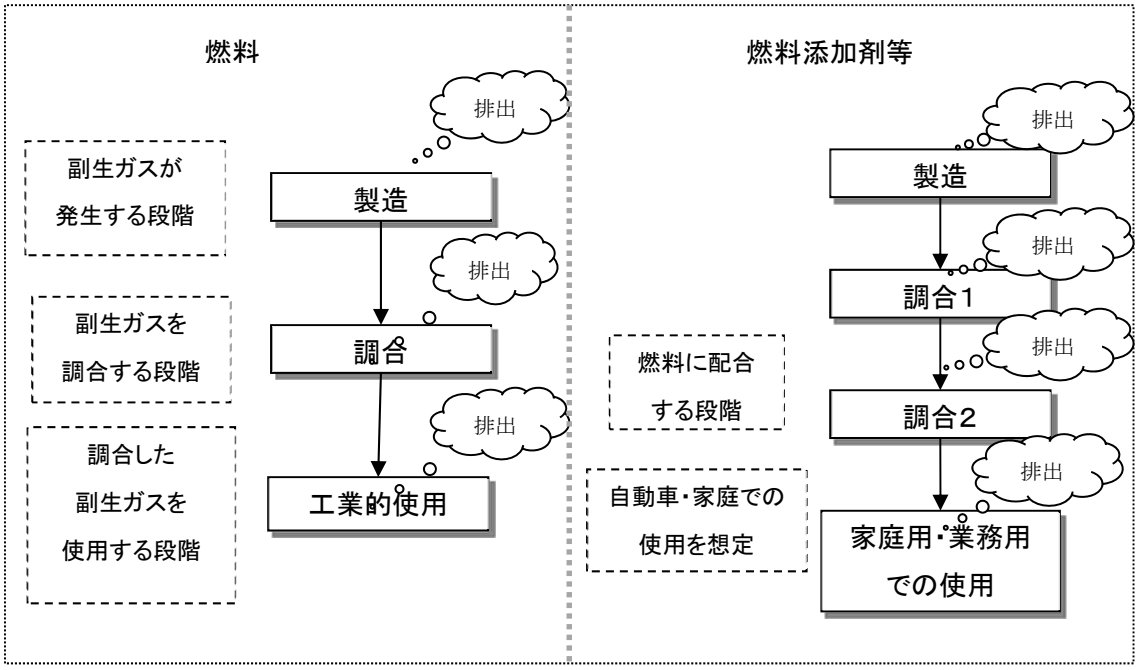
用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類
130	ガラス、ほうろう又はセメント	g	セメント調合原料
		h	セメント添加剤（混合材、膨張剤、固化剤等）
		i	セメント加工助剤

(7) 燃料、燃料添加剤のライフサイクル

用途分類「#147 燃料又は燃料添加剤」の詳細用途分類「a 燃料」[1]の優先評価化学物質のライフサイクルを図表 Ⅳ-２２のように「製造段階」、「調合段階」、「工業的使用段階」の３つのライフサイクルステージに設定した。

また、詳細用途分類「b 燃料添加剤（清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等）」、「c 燃焼改良剤（燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等）」、「d 氷結防止剤、着臭剤」（以下、「燃料添加剤等」とする）の優先評価化学物質のライフサイクルを「製造段階」、「調合段階 1」、「調合段階 2」、「家庭用・業務用での使用段階」の４つのライフサイクルステージに設定した。

[1] 揮発油等の品質の確保等に関する法律（品確法）の対象である自動車に給油される揮発油等の「燃料」については、「（3）他の法律による上市規制が課されうる化学物質」として届出不要となっている。
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/dodokede_menjo220423.pdf



図表 Ⅳ-２２　燃料又は燃料添加剤の優先評価化学物質のライフサイクル

燃料又は燃料添加剤の用途番号は、図表 Ⅳ-２３に示すように「#147 燃料又は燃料添加剤」となる。

図表 Ⅳ-２３　燃料関連の用途として排出が考慮される用途分類・詳細用途分類

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類
147	燃料又は燃料添加剤	a	燃料
		b	燃料添加剤（清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等）
		c	燃焼改良剤（燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等）
		d	氷結防止剤、着臭剤

IV.2.5.4 排出先環境媒体

排出先環境媒体については、大気と水域（表層水を想定）の 2 つの媒体別に排出シナリオを設定した。

本スキームにおける排出係数設定の基礎とした EU-TGD A-table では、排出先環境媒体に大気、排水（Waste water）、表層水（Surface water）、土壌、固形廃棄物の 5 区分を設定している。

本スキームで排出先環境媒体として大気と水域の 2 区分を設定した理由は以下のとおりである。

・ PRTR 制度による届出排出量の実態で環境への排出先の主要環境媒体は大気と水域

であること

- PRTR制度による届出排出量をみると土壌への排出は重金属等の限定的な実態しかなく、土壌排出により想定される地下水汚染の可能性については別途考慮すること（VI.5 地下水汚染の可能性シナリオ　参照）
- 廃棄物については、現時点では本スキームにおいて考慮していないこと

また、EU-TGD では排水として排出する場合、その後、活性汚泥処理を伴う下水処理場を介し、表層水へ排出されることを仮定していることから、排水と表層水の排出係数を区別している。本スキームでは、個別の排出源の情報が得られない中で排出量の過小評価を回避するためと、以下の 2 点を理由に、各仮想的排出源は下水処理場へもつなげておらず、生物学的処理をせずに河川へ排出するシナリオを想定している。そのため、排出係数の設定では EU-TGD の A-table から排水と表層水の排出係数の区別をせずに利用している。

- 各仮想的排出源が活性汚泥処理をしているかどうか、又は下水処理場へ排出しているかどうかはわからないこと
- PRTR 届出事業所を精査すると、河川への排出量が大きい事業所には活性汚泥処理をしていない事業所があること

IV.2.6 排出量の推計

IV.2.6.1 基本的な考え方

一般的に、排出量の算出方法には、物理化学的性状、物質収支（取扱量－製品中への含有量－廃棄量）、実測、排出係数、物性値等を用いた工学的な計算、専門家判断などから求める方法がある[1,2]。

本スキームでは、製造数量等の届出情報を用い、その中の用途の情報によって定まる排出シナリオに沿って優先評価化学物質の排出量を推計する。また、暴露評価の対象（人、生態）や暴露シナリオに合わせ、排出経路（排出先の環境媒体（大気、水域））ごとにそれぞれ排出量を推計する。なお、排出量の推計には、環境挙動・環境中運命は含まれない。

また、本スキームにおける排出量の精度は、前述の IV.2.5.1 (2)①～③に関連した情報に依存することに留意する必要がある。特に、「①排出源の設定」、「②地理的分布の設定」においては「詳細用途」と「詳細用途ごとの出荷先」に関して事業者が届け出た情報の精度に依存する。

本スキームの排出量推計における基本的な考え方を以下に列挙する。

（ア）排出量は、製造数量等の届出制度に基づく届出数量（製造数量、出荷数量）からラ

[1] 経済産業省・環境省, PRTR 排出量等算出マニュアル第Ⅲ版
[2] OECD(2006) Comparison of Emission Estimation Methods Used in Pollutant Release and Transfer Registers (PRTRs) and Emission Scenario Documents (ESDs): Case Study of Pulp and Paper and Textile Sectors, , ENV/JM/MONO6 OECD SERIES ON TESTING AND ASSESSMENT No.52

イフサイクルステージ別・詳細用途別の取扱量を求めた後、それぞれの排出係数を乗じて算出される。

（イ）排出係数はライフサイクルステージ別・詳細用途別・物理化学的性状の区分別に設定される。

（ウ）排出係数は排出先の環境媒体として２つの媒体（大気と水域）別に設定される。

（エ）ライフサイクルステージとして、製造段階、調合段階、工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階、長期使用製品の使用段階の５つを考慮する。

（オ）排出源ごとの暴露シナリオでは、製造段階、調合段階、工業的使用段階の３つのライフサイクルステージを考慮する。

（カ）排出源ごとの暴露シナリオでは、(オ)のライフサイクルステージごとに仮想的排出源を仮定し、それぞれの排出量を推計する。

（キ）排出源ごとの暴露評価では、(オ)のライフサイクルステージごとの仮想的排出源からの水域への排出は、下水処理場を経由せず河川に排出されると仮定する。

（ア）については IV.2.6.3 で後述する。（イ）（ウ）（キ）については IV.2.6.2 で後述する。（エ）（オ）（カ）については IV.2.5.1(2)で前述している。

IV.2.6.2 排出係数の整備

本スキームの排出量推計手法は、EU-TGD における排出係数を用いる手法とその排出係数一覧表（「A-table」と呼ばれている）を基礎にしている。EU-TGD A-table の排出係数は、産業分類・ライフサイクルステージ・メインカテゴリー（工程における取扱いの大まかな分類）[1]・物理化学的性状・用途・EU 域内供給量といった、化学物質とその使われ方の複数の属性によって、排出先環境媒体ごとに設定されている。すなわち個別の化学物質ごとではなく、これらの属性で化学物質をグループに括り、同じグループに属する化学物質は排出係数が同じとみなす手法である。製造数量等の届出制度上、EU で使用しているすべての属性の情報は得られないため、得られる範囲で排出量推計が可能となるよう、本スキームでは以下に挙げた属性で排出係数を決定できるようにした。

- ライフサイクルステージ
- 詳細用途
- 物理化学的性状（蒸気圧、水溶解度）

ライフサイクルステージについては、基礎とした EU-TGD の A-table がライフサイクル

[1] メインカテゴリーは、製造・調合・工業的使用のライフサイクルステージごとに 3～4 分類ずつ、合計 11 分類設定されている。例えば、製造段階の Ia：連続工程で製造され消費される自家消費の中間物、製造段階の Ib：製造後、自社で一旦保管される中間物又は連続工程で製造される中間物以外の化学物質、といった分類である。工程における装置の使い方、開放系で使うか否かといった観点から分類されている。メインカテゴリーは SIDS 項目の１つでもある。EU (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. Part Ⅱ, Appendix I Emission factors for different use categories.

ステージ別に構成されていること、製造数量等の届出制度に基づく情報が「製造」と「出荷先」の少なくとも 2 つの段階のライフサイクルステージに分かれていることから、本スキームの排出量推計においても考慮することにした。考慮するライフサイクルステージは IV.2.5.2 で示したとおり、EU-TGD に準拠して製造段階、調合段階、工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階、長期使用製品の使用段階の 5 段階とした[1]。

詳細用途については、製造数量等の届出制度において出荷数量が詳細用途別に届け出されており、この情報を活用するためと、EU-TGD の A-table においても部分的に排出係数の選択に用途（Use Category）が組み込まれているため考慮することにした。

物理化学的性状については、基礎とした EU-TGD の A-table が大気への排出係数については概ね蒸気圧の区分別に、水域への排出係数については概ね水溶解度の区分別に設定されていることから、これらを反映させるためにこの 2 つの性状を考慮することにした。

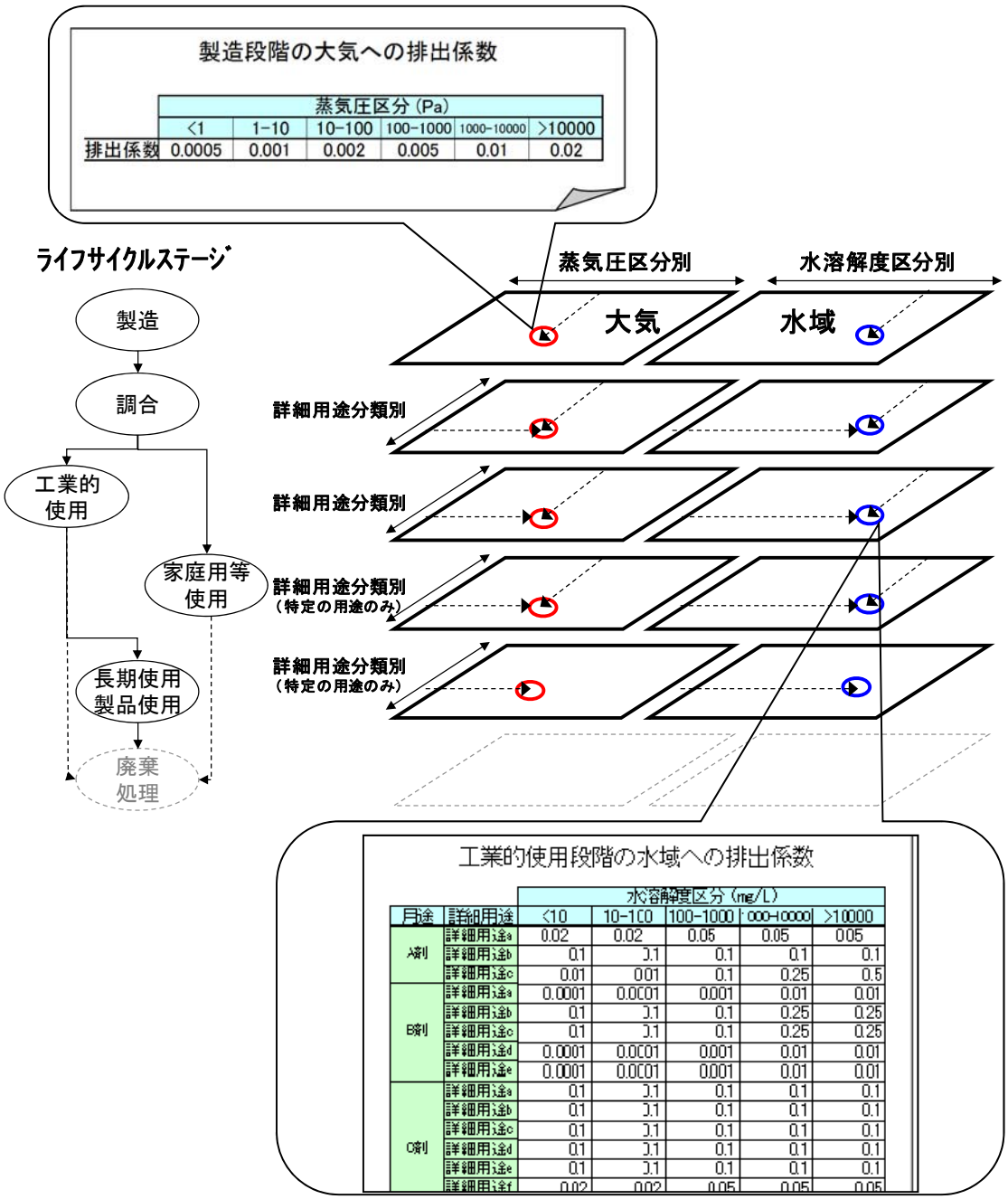
なお、水域への排出量の推計における化審法の分解性の判定結果（難分解性／良分解性）等の反映については、「IV.3.2.2 下水処理場等での除去率の扱い」で後述する。

以上より、本スキームで適用する排出係数は、以下のような形態で整備した。

- 5 つのライフサイクルステージ別
- 大気への排出係数は蒸気圧の区分別
- 水域への排出係数は水溶解度の区分別
- 調合段階についてはすべての詳細用途別
- 工業的使用段階については家庭用・業務用での使用段階が設定されていないすべての詳細用途別
- 家庭用・業務用での使用段階については特定の詳細用途についてのみ
- 長期使用製品の使用段階については特定の詳細用途についてのみ

排出係数の整備イメージを図表 IV-２４に示した。整備した結果は「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」として IV.7.2 に収載した。

[1] EU-TGD の A-table については製造段階、調合段階、工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階、廃棄処理段階の 5 段階が設定されている。ただし、廃棄処理段階はライフサイクルステージとしての想定はあるが、排出係数のデフォルト値はすべての産業分類で “Not applicable” であり、個別の情報が得られない限り排出量は推計できない。また、長期使用製品の使用段階については A-table の中に排出係数のデフォルト値はなく、産業分類別の Emission Scenario Document の中からか、個別の情報が得られる場合に考慮できる場合がある。



図表 Ⅳ-２４　本スキームに適用する排出係数の整備イメージ

Ⅳ.2.6.3 排出源ごとの暴露シナリオにおける排出量の推計式

「排出源ごとの暴露シナリオ」における排出量推計では、ライフサイクルステージ・詳細用途・物理化学的性状の区分が同じ場合は、用いられる排出係数の値は同じになる。

製造数量等の届出情報から仮想的排出源ごとの排出量を推計する具体的手順は、ライフサイクルステージごとに以下(1)～(3)のとおりである。これらの手順は評価段階を通じて基

本的に共通である[1]。「排出源ごとの暴露シナリオ」では、これに合わせて、製造段階と出荷先の排出量を下式のように別々に算出する。また、排出先環境媒体は大気と水域の 2 つを設定し、媒体別に排出係数を設定している[2]。

(1) 製造段階の排出源ごとの排出量推計

① 評価対象年度の届出情報から、評価対象物質[3]の情報を抽出
② 製造事業所ごとに製造数量を整理
③ 排出係数一覧表より、評価対象物質の蒸気圧区分に該当する製造段階の大気への排出係数を選択（図表 IV-２４参照）
④ 排出係数一覧表より、評価対象物質の水溶解度区分に該当する製造段階の水域への排出係数を選択（図表 IV-２４参照）
⑤ ②の数量に③の排出係数を乗じて大気への排出量を算出(式 IV-3)
⑥ ②の数量に④の排出係数を乗じて水域への排出量を算出（式 IV-4）
⑦ 評価対象物質の対象年度の届出に含まれるすべての製造事業所について⑤と⑥を算出

製造段階の排出量

製造段階の大気への排出量＝製造数量×製造段階の大気への排出係数　　**式 IV-3**

製造段階の水域への排出量＝製造数量×製造段階の水域への排出係数　　**式 IV-4**

(2) 調合段階の排出源ごとの排出量推計

① 評価対象年度のすべての届出者からの国内出荷数量を詳細用途別・都道府県別に集計
② 排出係数一覧表より、詳細用途と評価対象物質の蒸気圧区分に該当する調合段階の大気への排出係数を選択（図表 IV-２４参照）
③ 排出係数一覧表より、詳細用途と評価対象物質の水溶解度区分に該当する調合段階の水域への排出係数を選択（図表 IV-２４参照）
④ ①の数量に②の排出係数を乗じて大気への排出量を算出(式 IV-5 式 IV-5)
⑤ ①の数量に②の排出係数を乗じて水域への排出量を算出(式 IV-6 式 IV-6)
⑥ 評価対象物質の対象年度の届出に含まれるすべての詳細用途に関し都道府県別に調合段階の仮想的排出源について④と⑤を算出

出荷先（調合段階）の排出量

---

[1] 評価Ⅲでは、排出係数一覧表のデフォルト排出係数の代わりに具体的な排出量や排出係数が得られれば、推計に反映することになる（0 参照）。
[2] 排出係数の値は、各環境媒体別の合計が 1 を超える場合があるが、取扱量より排出量が大きくならないように正規化して 1 を超えない値になるように調整して排出量の推計に用いる。
[3] 評価対象物質が変化物の場合、排出量推計では親化合物の情報を用い、親化合物の排出量を推計したのち、環境中濃度推計モデルに入力する際は、変化物の排出量に親化合物と変化物の分子量と、１分子の親化合物から生成する変化物の分子数を用いて換算する。後出の(2)(3)も同様である。

詳細用途ｉの調合段階の大気への排出量＝詳細用途ｉの出荷数量×詳細用途ｉの調合段階の大気への排出係数　**式 IV-5**

詳細用途ｉの調合段階の水域への排出量＝詳細用途ｉの出荷数量×詳細用途ｉの調合段階の水域への排出係数　**式 IV-6**

(3) 工業的使用段階ごとの排出源の排出量推計

① 排出係数一覧表より、評価対象物質の蒸気圧区分に該当する工業的使用段階の大気への排出係数を選択（図表 IV-２４参照）

② 排出係数一覧表より、評価対象物質の水溶解度区分に該当する工業的使用段階の水域への排出係数を選択（図表 IV-２４参照）

③ [評価対象年度のすべての届出者からの国内出荷数量－調合段階の大気への排出量－調合段階の水域への排出量]に①の排出係数を乗じて大気への排出量を算出（式 IV-7, 図表 IV-２５参照）

④ [評価対象年度のすべての届出者からの国内出荷数量－調合段階の大気への排出量－調合段階の水域への排出量]に②の排出係数を乗じて水域への排出量を算出（式 IV-8, 図表 IV-２５参照）

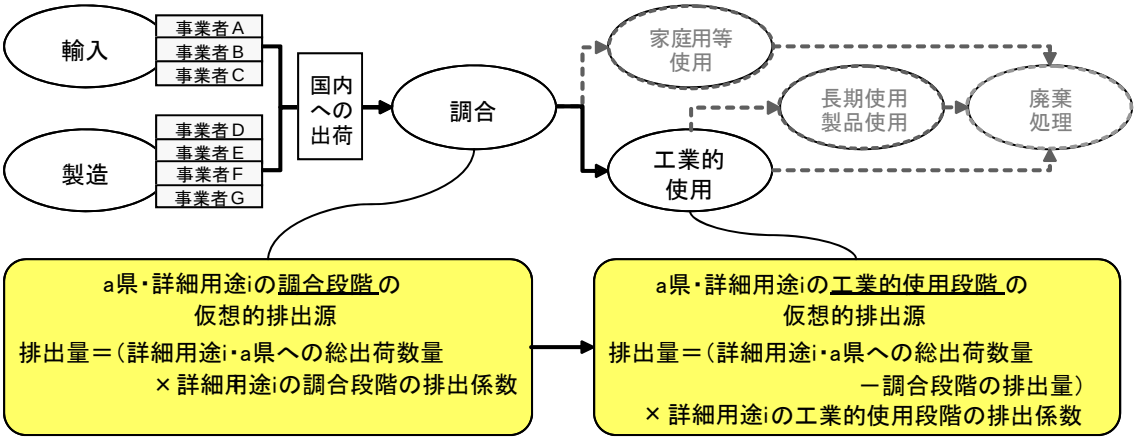
⑤ 評価対象物質の対象年度の届出に含まれるすべての詳細用途に関し都道府県別に工業的使用段階の仮想的排出源について③と④を算出

出荷先（工業的使用段階）の排出量

詳細用途ｉの工業的使用段階の大気への排出量＝(詳細用途ｉの出荷数量－用途ｉの調合段階の排出量)×詳細用途ｉの工業的使用段階の大気への排出係数　**式 IV-7**

詳細用途ｉの工業的使用段階の水域への排出量＝(詳細用途ｉの出荷数量－用途ｉの調合段階の排出量)×詳細用途ｉの工業的使用段階の水域への排出係数　**式 IV-8**

国内の出荷先については、IV.2.5.3 で示した排出シナリオのとおり、本スキームにおける一般的な用途では、調合段階と工業的使用段階の 2 つのライフサイクルステージを仮定している。そこで、出荷数量については上式では都道府県別であることを略記しているが、すべての事業者からの出荷数量を詳細用途別・都道府県別に合計し、詳細用途毎に出荷先の都道府県に調合段階と工業的使用段階の 1 つずつの仮想的排出源を設定している。工業的使用段階の排出量は、式 IV-7、式 IV-8 及び図表 IV-２５に示すように、出荷数量から大気及び水域への調合段階の排出量を差し引いた数値を工業的使用段階における取扱量とみなし、これに排出係数を乗じて算出する。



図表 Ⅳ-２５　各ライフサイクルステージと出荷数量の取扱い

IV.3 暴露評価Ⅰにおける排出量推計

IV.3.1 暴露評価Ⅰにおける排出量推計の目的

暴露評価Ⅰの目的は、リスク推計Ⅰに用いる環境経由の暴露量（又は暴露濃度）（人健康の場合は摂取量、生態の場合はPEC[1]）の推計であり、次の段階（評価Ⅱ、有害性情報提出の求め等）を実施するための優先順位付けを行うことである。

したがって、暴露評価Ⅰにおける排出量推計の目的は、優先評価化学物質すべてにおいて暴露評価できるように排出量を推計することである。また、リスク推計Ⅰに用いる有害性情報を有しない優先評価化学物質に関しては、有害性情報提出の求めを行う必要性の判断の指標とするためにも排出量を推計する。

なお、優先順位付けの参考とするために、PRTR情報が得られれば、PRTR情報を利用する。ただし、評価Ⅰでは、化学物質を取り扱う事業者が事業所ごとに届け出た排出量及び移動量を国が集約した「届出データ」のみを使用し、国が排出量を推計する「届出外排出量データ」は使用しない。

ここでは、製造数量等の届出情報とPRTR情報の主な特徴を図表 IV-２６に示す。

なお、PRTR情報の利用方法についての詳細は、IV.4.4を参照されたい。また、利用する際の留意点についてはIV.7.5を参照されたい。

図表 IV-２６　化審法の製造数量等の届出情報と化管法のPRTR情報の主な特徴

	化審法 製造数量等の届出情報	化管法 PRTR情報
届出対象者	製造・輸入者	取扱事業者
届出内容※	製造数量（事業者及び事業所単位） 輸入数量（事業者単位） 出荷数量（事業者単位）	排出量（事業所単位） 移動量（事業所単位）
届出対象物質	優先評価化学物質	第一種指定化学物質
届出対象外となる条件を持つ項目	上記数量、用途、製品形態	業種、常用雇用者数、製品形態、製品中含有量、取扱量
公開内容	年間の製造・輸入数量の合計値が100トン以上の物質の合計数量が実数で公開。事業者名称は非公開。	年間の排出量等の合計値ならびに事業所ごとの名称や届出数量が実数で公開。
その他備考	本スキームにおいて、国が届出情報を用いて排出量を推計。	届出対象外の部分は、国が排出量を推計し、公開。

※ 簡略的にいえば、事業者は会社単位、事業所は工場単位である。

[1] PEC：予測環境中濃度。Predicted Environmental Concentration の略。

IV.3.2 暴露評価Ⅰにおける排出量推計に共通する事項

IV.3.2.1 評価対象物質が複数の場合の扱い

優先評価化学物質のリスク評価においては、リスク評価の実質的な「評価対象物質」は、複数の物質である場合がある。そのような場合、評価Ⅰでは、原則として優先評価化学物質ごとに評価対象物質を１つに決めて評価を行うこととする[1,2]。

評価対象物質が複数になりうる例として（ア）～（ウ）が挙げられ、それぞれについて評価Ⅰの排出量推計における評価対象物質の設定の考え方を以下に示す。

（ア）構造の一部又は構成部分に優先評価化学物質を含む化学物質[3]が、製造数量等の届出の対象となる場合：

必要に応じて評価対象物質を複数設定する例である。評価Ⅰでは、優先評価化学物質の指定名称の化学物質を評価対象物質とし、その物理化学的性状データを用いて排出量を推計する。

例えば、優先評価化学物質名は「A」であり、「A」の製造数量等の届出対象として「A を含む塩」も含まれ、その届出があった場合、評価Ⅰにおいては届出がされた「A を含む塩」の製造数量等を「A」の製造数量等に分子量換算した後に排出量推計に用いる。

（イ）分解度試験より変化物が生じることが判明している優先評価化学物質の場合：

評価Ⅰでは、原則、親化合物を評価対象物質とする。ただし、親化合物の有害性データが得られず、変化物の有害性データが得られる場合は、変化物を評価対象物質とする。変化物を評価対象物質とする場合でも、排出時は「親化合物」であると想定し、「親化合物」の物理化学的性状データを用いて排出量を推計する[4]。

（ウ）指定された優先評価化学物質の構造の範囲に高分子化合物である化学物質と高分子化合物でない化学物質が混在し、それぞれの届出が事業者からあった場合：

評価Ⅰでは、原則、排出量がより大きく推計される高分子化合物ではない化学物質を評価対象物質とし、高分子化合物ではない物質の物理化学的性状と排出係数を用いて排出量を推計する。

---

[1] その場合、有害性評価と暴露評価では、評価対象物質が異なる場合がありうる。

[2] この簡略化は、以下の理由による。
・評価Ⅰの目的は優先順位付けであり、絶対値としての正確さは求められていないこと。
・評価Ⅰの結果のみから最終判断（優先取消し、有害性調査指示、二特指定等）が行われることはなく、最終判断の前には評価対象物質の設定も含めた精査を行うことになること。

[3] この表現は「運用通知 3-2(1)と(2)」を参照とした表現である。参照されたい。

[4] その後、数理モデルに適用する際に変化物の生成量と環境中濃度を推計している。ただし、変化物は環境水中で生成するものであるため、大気への排出量について、評価Ⅱにおいては環境媒体別に個別に判断することになる（Ⅴ章参照）。

IV.3.2.2 下水処理場等での除去率の扱い

化審法の分解性に係る判定結果（難分解性／良分解性）と、同等の分解度試験から化審法の判定基準に照らした分類（難分解性／良分解性）については、排出量推計において以下のように考慮する。

化審法の分解性の判定で用いられる分解度試験の結果は水中の生物分解によるものである。これを反映させるものとして、水域への排出において排出の前に活性汚泥処理をしていると想定されるライフサイクルステージ・用途に関し、「良分解性」の物質については、水域への排出量に活性汚泥処理による除去率に相当する係数を乗じる。そのような用途は、「水系の非点源シナリオ」にあてはめる用途である。すなわち家庭用や業務用の洗浄剤等の用途であり、詳細は IV.2.5.3 (4)に記載している。これらの用途の家庭用等使用段階の水域への排出に関しては、「良分解性」である優先評価化学物質では、下水処理場での除去率として 0.67 を用いる。この係数 0.67 の設定根拠は IV.7.3 に記載している。

また、ここで用いる分解性情報は、（I 章 評価の準備）で選定した情報である。

IV.3.2.3 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

物理化学的性状（蒸気圧、水溶解度）データが得られない優先評価化学物質の排出係数については、原則、詳細用途別ライフサイクルステージ別の排出係数の中で、大気、水域いずれの排出係数についても最も高い値を付与する。ただし、高分子化合物であるか否か[1]でその設定方法が異なることに留意する必要がある。

評価 I では、高分子化合物であれば、詳細用途別ライフサイクルステージ別の排出係数の中で、大気への排出係数については最も低い値を、水域への排出係数については最も高い値を付与する。例えば、一般的には、5 つある水溶解度区分のうち、「10,000mg/L 以上」の区分の値が最も高い値である。しかし、特定の詳細用途においては、この区分の値の欄がハイフン「-」（この詳細用途に用いられる化学物質の水溶解度が 10,000mg/L 以上であることは詳細用途の定義から想定されないという意味）で示されている場合がある。そのような場合もあるため、5 つある水溶解度区分のうち、水域への排出係数について最も高い値を付与するとしている。このような値を用いた場合、推計排出量は実際の物理化学的性状データを用いた際と同等か、より大きめに見積もられるように設定している。

なお、評価Ⅱ以降では、そのような優先評価化学物質は個別に対応する。

IV.3.2.4 長期使用製品の使用段階からの排出の扱い

評価 I においては、長期使用製品の使用段階からの排出は、用途等に応じた暴露シナリオの１つである「船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ」に適用する詳細用途からの排出のみ考慮する（図表 IV-８参照）。

[1] 高分子化合物であるか否かは製造数量等の届出情報において製造・輸入者がその項目にチェックしているか否かで判断する。

IV.3.3 排出源ごとの暴露シナリオにおける排出量推計

製造数量等の届出情報から仮想的排出源ごとの排出量を推計する具体的手順は、ライフサイクルステージごとに IV.2.6.3 に前述したとおりである。

IV.3.4 用途等に応じた暴露シナリオにおける排出量推計

基本となる排出源ごとの暴露シナリオのみでは、環境への主要な排出に係る暴露をカバーできない。そのため、そのような用途等に関しては、排出源ごとの暴露シナリオに追加して、「用途等に応じた暴露シナリオ」をそれぞれ設定する。概要を図表 IV-２７に示す。詳細は（VI 暴露評価～用途等に応じた暴露シナリオ）を参照されたい。

図表 IV-２７　評価Ⅰにおける用途等に応じた暴露シナリオ（排出シナリオ含む）の概要

暴露シナリオ名	対応する用途分類	対応するライフサイクルステージ	概要
水系の非点源シナリオ	･#113 水系洗浄剤 2《家庭用･業務用の用途》 ･#114 ワックス #120 殺生物剤 3《家庭用･業務用の用途》	家庭用・業務用での使用段階	家庭等で使用され下水を通じて下水処理場に化学物質が集まり、そこから河川へ排出される化学物質に暴露される暴露集団を想定。該当する用途の全国出荷数量から国民一人当たりの使用・排出量に換算して原単位ベースで代表的濃度を推計するシナリオ。
大気系の非点源シナリオ	･#120 殺生物剤 3《家庭用･業務用の用途》 ･#122 芳香剤、消臭剤 ･#147 燃料、燃料添加剤	家庭用・業務用での使用段階	非点源（家庭や移動体等）で大気への排出が想定される用途について、大気経由の暴露量を推計するシナリオ。
船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ	･#117 船底塗料用防汚剤、漁網用防汚剤	長期使用製品の使用段階	船底塗料用防汚剤や漁網用防汚剤は、長期使用製品の使用段階における海域への排出を想定したシナリオ。

IV.3.4.1 水系の非点源シナリオにおける排出量推計

水系の非点源シナリオにおける排出シナリオでは、家庭用・業務用の用途で使用される優先評価化学物質は、製造数量等の届出制度による出荷先都道府県を最終消費地とはみなさず、最終的には消費者全体に行き渡り、使用されると想定する。当該シナリオに該当する用途からの優先評価化学物質の水域への排出は、全量が仮想的な下水処理場へ移動するものとし（評価Ⅰの場合）、仮想的な下水処理場では、良分解性の物質では除去率、難分解性又は分解性が不明の物質では分解等で除去されずに、下水処理場への流入濃度＝下水処理場

からの排出濃度とする。

以上の排出シナリオに基づいた具体的な排出量推計の手順は以下のとおりである。

① 評価を実施する年度の届出情報[1]から、評価対象物質の情報を抽出する。

② ①に含まれる用途の情報から家庭用・業務用での使用段階に係る用途を抽出する（図表 IV-２７参照）。

③ ②に該当する詳細用途ごとに、すべての届出者からの出荷数量を合計する（詳細用途別の全国出荷数量）。

④ 家庭用・業務用での使用段階の排出係数一覧表より、②で対応付けた詳細用途と、排出係数一覧表より、評価対象物質の水溶解度区分に該当する家庭用・業務用での使用段階の水域への排出係数を選択する（図表 IV-２４参照）。

⑤ ③の全国出荷数量から調合段階の排出量（大気分＋水域分）を引き、④の排出係数を乗じて水域への詳細用途別の全国排出量を算出する。

⑥ ⑤の詳細用途別の全国排出量に関し、②で対応付けた詳細用途すべてを合計する（全国排出量）。

この結果、評価対象物質ごとに１つの値が求められる。

⑦ ⑤の全国排出量を日本の人口で除して排出量原単位（kg/year/人）を算出する（式 IV-9 式 IV-9）。

排出量原単位を生活排水原単位（m^3/day/人）で除して家庭等からの排水濃度（mg/m^3）を算出し、「家庭等からの排水濃度＝下水処理場への流入濃度」とみなす（式 IV-10）。

下水処理場への流入濃度に下水処理場での除去率を考慮して下水処理場からの排出濃度を算出する（式 IV-11）。その際、評価対象物質が良分解性である場合は、下水処理場での除去率として暴露評価Ⅰでは 0.67 を使用する。この 0.67 の設定根拠は IV.7.4.3 (4)に記載されている。一方、評価対象物質が難分解性又は分解性不明の場合の除去率は０（除去されない）とする。

水系の非点源シナリオの排出量

国民一人当たり排出量原単位　　**式 IV-9**

$$=\left[\sum_{詳細用途}\{(詳細用途iの出荷数量-詳細用途iの調合段階の排出量)\times詳細用途iの家庭用・業務用での使用段階の水域への排出係数\}\right]/日本の人口$$

家庭等からの排水濃度　　**式 IV-10**

＝一人当たり排出量原単位／一人当たり水使用量原単位

＝下水処理場への流入濃度

[1] 「評価を実施する年度」と、評価に用いる「届出情報」の年度とは、評価Ⅰでは１年ずれる。それは「届出情報」が前年度実績分の情報であるためである。

下水処理場からの排水濃度＝下水処理場への流入濃度×(１－下水処理場での除去率)　　式 IV-11

IV.3.4.2 大気系の非点源シナリオにおける排出量推計

大気系の非点源シナリオの排出シナリオについても、水系の非点源シナリオの排出シナリオと同様に、製造数量等の届出制度による出荷先都道府県を最終消費地とはみなさず、最終的には消費者全体に行き渡り、使用されるとする。当該シナリオに該当する用途からの優先評価化学物質の大気への排出量は、全国排出量を人口等の指標に案分し仮想的排出源の排出量を推計する。具体的な排出量推計の手順は以下のとおりである。

① 評価を実施する年度の届出情報から、評価対象物質の情報を抽出する。
② ①に含まれる用途の情報から家庭用・業務用での使用段階に係る用途を抽出する（図表 IV-２７参照）。
③ ②に該当する詳細用途ごとに、すべての届出者からの出荷数量を合計する（詳細用途別の全国出荷数量）。
④ 家庭用・業務用での使用段階の排出係数表より、②で対応付けた詳細用途と、排出係数一覧表より、評価対象物質の蒸気圧区分に該当する家庭用・業務用での使用段階の大気への排出係数を選択する（図表 IV-２４参照）。
⑤ ③の全国出荷数量から調合段階の排出量（大気分＋水域分）を引き、④の排出係数を乗じて大気への詳細用途別の全国排出量を算出する。
⑥ 詳細用途別の全国排出量を詳細用途とライフサイクルステージに応じた統計情報（人口等）を用いて割り振りする[1]。
⑦ ⑥で割り振った排出量を同じ指標ごとに合計
⑧ ⑦の合計排出量を用いて大気経由の暴露量を推計する。

IV.3.4.3 船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオにおける排出量推計

船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオにおける排出シナリオは、当該用途の長期使用製品の使用段階における海域への排出に着目したものである。長期使用製品の使用段階からの排出は、船底塗料用・漁網用防汚剤の用途（用途分類#117）を除いて確立されておらず、現段階では評価Ⅱ以降で考慮するため、長期使用製品の使用段階の排出シナリオの考え方及び排出量推計手順については、評価Ⅱで解説する（IV.4.3.5 参照）。

[1] ⑥の割り振りの方法の詳細はⅥ章（暴露評価～用途等に応じた暴露シナリオ）を参照されたい。

IV.4 暴露評価Ⅱにおける排出量推計

IV.4.1 暴露評価Ⅱにおける排出量推計の目的

暴露評価Ⅱの目的は、入手可能な情報を用いて、対象物質の暴露の状況を推計することである。そのため、暴露評価Ⅰに比べて、暴露評価Ⅱでは評価対象物質が有する情報の多寡に応じた推計を行うことになる。

したがって、暴露評価Ⅱにおける排出量推計の目的は、対象物質の排出の状況を推計すること、また、推計に用いた情報の多寡を捉えることである。

IV.4.2 評価Ⅰにおける排出量推計との違い

暴露評価Ⅱでは、評価Ⅱの対象となった優先評価化学物質について、暴露評価Ⅰで用いた情報を精査し、さらに各種の既存情報を追加する。

評価Ⅰにおける排出量推計との違いを図表 IV-２８に示す。主な違いは、用いる既存情報を追加する点と、用いる情報を精査する点である。

図表 IV-２８　評価Ⅰにおける排出量推計との主な違い

		評価Ⅰとの主な違い
シナリオ共通	評価対象物質	・用いる情報の精査 変化物など必要に応じ評価対象物質を複数設定（IV.4.3.1 ）
	評価に用いる年度	・既存情報の追加 排出量推計に用いる情報が経年的なデータとしてあれば利用（IV.4.3.2 ）
	製造数量等の情報	・用いる情報の精査 詳細用途情報の精査等を行い、排出量を再推計（IV.4.3.3 ）
	物理化学的性状データ	・用いる情報の精査 ・評価対象物質ごとの物理化学的性状データを精査し、排出係数を選択し直して排出量を再推計（IV.4.3.4 ）
	排出に関する情報	・既存情報の追加 PRTR 届出情報、届出外推計情報とも排出量として利用 自然発生源などの化審法の情報からでは想定できない排出源に係る情報も収集し解釈に利用（IV.4.3.6 ）
シナリオ特有	排出源ごとの暴露シナリオ	・シナリオ共通の違い以外には特になし（IV.4.5）
	用途等に応じた暴露シナリオ	・既存情報の追加 下水処理場での除去率データに実測値等を利用 排出源の全国への分布状況（全国の排出量をメッシュ単位等に割り振り）（IV.4.6）
様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ		・評価Ⅰでは本シナリオによる評価を行っていない。

なお、これらの他にも、評価Ⅰとの比較はできないが、様々な排出源の影響を含めた暴露

シナリオと残留性の評価を追加する（詳細は後述）。

Ⅳ.4.3 暴露評価Ⅱにおける排出量推計に共通する事項

Ⅳ.4.3.1 評価対象物質が複数の場合の扱い

優先評価化学物質のリスク評価においては、有害性評価やリスク評価の実質的な対象物質である「評価対象物質」は、複数の物質である場合がある。そのような場合、評価Ⅰでは、原則として優先評価化学物質ごとに評価対象物質を 1 つに決めて評価を行うこととした（Ⅳ.3.2.1 参照）。

評価Ⅱにおいては、当該優先評価化学物質のリスク評価に必要な評価対象物質を設定する。その結果として、Ⅳ.3.2.1 に示した例（ア）～（ウ）については、１つの優先評価化学物質につき、複数の評価対象物質が設定されうる。

この扱いの詳細な例は、 Ⅳ.4.5.1 で後述する。

暴露評価Ⅱにおける親化合物と変化物の排出量の扱いは、評価Ⅰと同様にリスク評価対象物質が「変化物」である場合でも、排出時は「親化合物」であると想定し、すべての物質について「親化合物」の物理化学的性状データを用いて排出量を推計する[1]。

Ⅳ.4.3.2 製造数量等の届出情報等の経年的な変化に応じた扱い

評価Ⅰは、毎年度実施される。一方で、評価Ⅱは、経年的なデータもあれば用いる。また、隔年ごとに製造数量等の届出情報や PRTR 情報が大きく変動するような場合や、経年的に製造数量等の届出情報や PRTR 情報が減少傾向にある場合など、必要に応じ、経年的な推計排出量も暴露評価Ⅱの参考情報に用いることを検討する。

Ⅳ.4.3.3 製造数量等の届出情報における詳細用途の精査

評価Ⅰにおいては、優先評価化学物質の製造数量等の届出情報において詳細用途の記載があれば、製造・輸入者に照会することなく適用をしている（製造数量等の届出情報の確認については、Ⅳ.7 参照）。また、詳細用途が「#09-z その他の溶剤」若しくは「#98-z その他の原料、その他の添加剤」の場合には、その詳細用途での出荷数量の全量が環境（大気、水域）へ排出されるよう排出係数を割り当てている。さらに、上記 2 つの詳細用途以外にも、詳細用途分類番号が「y」又は「z」の場合には、その用途分類の中の最大の排出係数を割り当てている[2]。

---

[1] 評価対象物質が変化物の場合、その後、数理モデルに適用する際に変化物の生成量と環境中濃度を推計している。ただし、変化物は環境水中で生成するものであるため、大気への排出量について、評価Ⅱにおいては環境媒体別に個別に判断することになる（Ⅴ章参照）。

[2] より具体的に述べると、y は、詳細用途は選択できないが、プラスチック又はゴム製品の添加剤で出荷先で製品に含まれて、市場に出て行く薬剤。 z は、詳細用途は選択できないが、出荷先でプラスチック又はゴム製品を製造するプロセスで、加工助剤として用いられ、市場に出る製品には含まれない薬剤。

評価Ⅱにおいては、これらの詳細用途を精査する。詳細用途番号が「y」又は「z」の場合（いわゆる、詳細用途が「その他」の場合）に製造・輸入者によって記入された「具体的用途」の欄の内容を精査し、より適切な詳細用途への適用をするために必要に応じて製造・輸入者への照会を検討する。

また、「その他」の詳細用途以外に、「大気系の非点源シナリオ」、「水系の非点源シナリオ」、「船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ」、「地下水汚染の可能性シナリオ」が適用される詳細用途への届出があった場合にも届出内容を精査し、必要に応じて製造・輸入者への照会を検討する。

IV.4.3.4 物理化学的性状データの精査

評価Ⅱでは、物理化学的性状データに関して、必要に応じて精査を行い、キースタディの見直しを行う。それでも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ついては、評価Ⅰと同様なデフォルト値の採用の有無も含めて個別に判断する。

IV.4.3.5 長期使用製品の使用段階の排出量推計

長期使用製品の使用段階の排出量推計は、すべての暴露シナリオに共通に用いられないが、複数の暴露シナリオで共通するため、ここで述べる。

優先評価化学物質を含有する最終製品の中には、電化製品、自動車、家具などの耐久消費財のように使用期間（あるいは製品の耐用年数）が長いものがある。本スキームでは使用年数が１年を超える最終製品を「長期使用製品[1]」と呼ぶ。

長期使用製品の使用段階の排出は、評価Ⅰでは船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオにおいて考慮したが、評価Ⅱにおいては、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおいても考慮する（図表 IV-８参照）。

長期使用製品の使用段階の排出量推計の考え方及び推計手法について、以下に示す。

(1) 排出量推計の考え方

長期使用製品からの排出シナリオは、最終製品中に含まれる優先評価化学物質が環境中に徐放されるということを想定している。例えば、樹脂等の基材又は成形品に含有された添加物あるいは塗布された物質が、その製品の使用期間の間に徐々に放出されること等が該当する。このようなシナリオの排出量を推計するため以下①～④の仮定を置く。

① 当該用途の最終製品（長期使用製品）は、詳細用途別に一律の使用期間とする。例え

---

y の排出係数には、詳細用途分類のうち、添加剤に該当する詳細用途分類の中の最大の排出係数の値が設定されている。 z の排出係数には、詳細用途分類のうち、加工助剤に該当する詳細用途分類の中の最大の排出係数の値が設定されている。

[1] 長期使用製品は成形品である。なお、本スキームでは、EU の REACH のように Article（成形品）からの排出を「意図的」か「非意図的」かに区別していない。

ば、使用期間を 10 年とすると、優先評価化学物質を含んだ最終製品が出荷された年から 10 年後に一斉に廃棄される。

② 長期使用製品の基材に含まれている間は、優先評価化学物質は安定で分解は起こらない。

③ 使用期間中に、含有される優先評価化学物質が一定の速度で環境中へ排出される。

④ 排出係数は「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」の「長期使用製品の使用段階」の詳細用途別排出係数（IV.7.2 参照）を適用する。

個々の長期使用製品中に含まれる優先評価化学物質の排出は微々たるものであっても、毎年社会（市場）に供給され、社会で長期間使用される製品の量（市中ストック量）によっては、長期使用製品からの排出量がその他のライフサイクルステージからの排出量と拮抗することもあり得る。そのことから、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ（製造数量等の届出情報を用いる場合）のような広域的・長期的スケールの数理モデルを用いて暴露評価を行う際には、製造数量等の届出情報による点源からの排出だけでなく、長期使用製品の使用段階の排出も含めた排出量も加味して暴露状況や残留性を推計する。

(2) 適用範囲

長期使用製品の使用段階からの排出は、IV.2.5.3 (3)の図表 IV-１５に示すように「基材そのもの又は成形品に含有させる添加剤」用途の優先評価化学物質のライフサイクルのうち「長期使用製品の使用段階」のライフサイクルステージからの排出に相当する。長期使用製品の使用段階からの排出量推計を適用するか否かは詳細用途から判別し、IV.2.5.3 (3)の図表 IV-１６に記載の用途分類が該当する。さらに、該当する詳細用途は成形品に添加される用途等から抽出した。例えば、塗料やプラスチック等の樹脂基材に含まれる添加剤等であり、具体的に用途分類一覧表の中のいずれが該当するかは、「IV.7.2 化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」を参照されたい。該当詳細用途に関して、大気と水域それぞれへの排出係数と使用期間のデフォルト値を設定している[1]。

優先評価化学物質の出荷数量とともに届け出られている詳細用途が前記に該当すれば本排出量推計を適用する。

EU-TGD[2]では、このライフサイクルステージを「Service life」と呼んでいる。これは、Emission during service-life of long-life articles という意味で、長期使用製品からの排出のライフサイクルステージを指している。また、このような EU-TGD の考え方を受けて OECD において、このライフサイクルステージのガイドライン[3]が作成されている[4]。

---

[1] 長期使用製品の使用段階の排出係数と使用期間は REACH のガイダンス（ECHA (2008) Guidance on information requirements and chemical safety assessment. Chapter R.16: Environmental Exposure Estimation.） 若しくは OECD の Emission Scenario Document から収集した。

[2] EU (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. Part I, Chapter 2, pp.36-41.

[3] OECD (2008) Complementing Guideline for Writing ESDs: The Life-Cycle Step “service-life”. OECD SERIES ON EMISSION SCENARIO DOCUMENTS No. 19.

[4] 国内でも、独立行政法人産業技術総合研究所や独立行政法人国立環境研究所においてその評価手法が検

本スキームにおいては、長期使用製品からの排出は次の２つのシナリオで考慮する[1]。

① 用途等に応じた暴露シナリオにおける船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ
② 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ（製造数量等の届出情報を用いる場合）

①では長期使用製品[2]の使用段階において海域へ排出されるが、その排出量を推計する。②では点源からの排出量に長期使用製品の使用段階の排出も含めた排出量も加味し、広域的・長期的スケールの数理モデルを用いて暴露状況や残留性を推計する。

(3) 長期使用製品の使用段階の排出量推計

長期使用製品の使用段階の排出量推計の手順は以下のとおりである。

① 評価対象年度の届出情報から、評価対象物質の情報を抽出
② 図表 IV-１６に含まれる詳細用途から、長期使用製品の使用段階に係る詳細用途を抽出
③ 該当する詳細用途について、製造・輸入者から届け出られた出荷数量を合計（全国出荷数量）し、そこから当該詳細用途に係る調合段階と工業的使用段階の排出量（排出源ごとの暴露シナリオで算出している排出量）の全国合計値を差し引いて「長期使用製品中の優先評価化学物質の市中への年間投入量」を算出
④ 長期使用製品の使用段階の排出係数一覧表より、詳細用途に係る大気と水域それぞれへの排出係数[3]を選択（IV.7.2 参照）
⑤ ③の「長期使用製品中の化学物質の市中への年間投入量」に、④で選択した排出係数を式　IV-14 に入力して大気、水域それぞれへの全国排出量を算出

OECD によれば、使用期間の長い（1 年超）最終製品中に含まれる化学物質は、製品中からその一部は排出されるが年々社会に蓄積される（化学物質の市中ストック）。やがて、市中への投入量と市中からの廃棄量、それに長期使用製品からの環境中への排出量が定常状態に達する。定常状態に達し、排出係数が小さい場合（＜1% [/年]）の単純化された排出量の求め方は次式（式　IV-12, 式　IV-13）のようになる。

対象物質の長期使用製品から各環境媒体への全国排出量[トン/年]　　**式　IV-12**

討され、詳細リスク評価書（フタル酸エステル類、塩素化パラフィン、デカブロモジフェニルエーテル）や難燃剤のリスク評価の中で活用されている。

[1] 上記シナリオの他に、用途等に応じた暴露シナリオにおける非点源シナリオにおいて長期使用製品の使用段階からの排出も想定される際には、例外的に対応することも検討する。

[2] 「漁網」は定義上では「長期使用製品」に該当しないが含めている。

[3] IV.7.2「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」に記されている長期使用製品の使用段階における排出係数の値は、使用期間をすでに乗じた値である。また、値の欄が「＊」とある詳細用途の場合、当該ライフサイクルステージからの排出が想定されるものの、現段階では数値を設定しないため、リスク評価において長期使用製品の使用に係る評価を行う段階で値を設定すべく検討を行うことになる。また「§」とある詳細用途分類番号が z の場合、具体的用途の記載内容に応じて、当該ライフサイクルステージからの排出が想定される用途かどうかをまず検討する。想定される場合は上記「＊」と同様の扱いとする。

＝環境媒体別排出係数[/年]×長期使用製品中の対象物質の市中への
年間投入量[トン/年]×使用期間[年]

対象物質の長期使用製品から全環境媒体への全国排出量[トン/年]　　式　IV-13

＝環境媒体別排出係数の和[/年]×長期使用製品中の対象物質の市中への
年間投入量[トン/年]×使用期間[年]

定常状態に達しているとの前提を置けば、上式のように単純になり、長期使用製品からの優先評価化学物質の排出量は、次式（式　IV-14）のように求められる。

全国排出量[トン/年]　　式　IV-14

＝排出係数[/年]×市中への年間投入量[トン/年]×使用期間[年]

上式では、長期使用製品に使用される化学物質の社会への投入量、廃棄量、環境中への排出量の物質収支における定常状態を仮定している。

なお、この推計方法では、評価対象年度の出荷数量が将来にわたって継続すると仮定した排出量が推計される。過去に大量に使われ現在は出荷数量が減少しているような場合は過小評価となるため、製造数量等の届出情報で過去の推移を確認し、適宜、出荷数量について過去の最大値や期間平均値を適用するものとする。

IV.4.3.6 その他の排出源に係る情報収集

優先評価化学物質の排出源は、化審法の届出情報から想定される製造・使用等に関連するものだけとは限らない。例えば、火山活動や植物等といった自然発生源や環境中での他の化学物質からの生成等、様々なものがあり得る。

評価Ⅱでは、暴露評価Ⅱの結果の解釈に利用するため、対象物質の排出源に係る情報を図表 IV-２９に例示する既存の情報源から収集する。

図表 IV-２９　その他の排出源に係る情報源の例

情報源	抽出する情報
NITE：「化学物質の初期リスク評価書」	発生源情報の「その他の排出源」
HSDB: Hazardous Substance Data Bank	Environmental Fate & Exposure の中の Natural Pollution Sources と Artificial Pollution Sources
WHO/IPCS：「環境保健クライテリア（EHC）」	Sources of human and environmental exposure
Howard, P.H. eds. Handbook of Environmental Fate & Exposure Data for Organic Chemicals.	Natural Sources と Artificial Sources
GDCh: BUA Report	Emission from other areas 等
PRTR の推計対象排出源	「推計対象とした排出源と対象化学物質」における推計の有無等の情報
化審法審査情報	評価対象物質が分解物となっている親化合物の有無。「有り」の場合にはその親化合物の情報

このような定性的な情報は、特定の排出源の影響を受けていないと考えられる地域（一般環境）において環境モニタリング情報で「リスク懸念」となる場合等に、化審法の管理措置の対象となる優先評価化学物質の「リスク懸念」への寄与がどの程度あるか否かといった結果の解釈の手がかりとなり得る。

IV.4.4 PRTR 情報の利用

ここでは、評価Ⅱにおける PRTR 情報の利用についての全体像、化審法の製造数量等の届出情報との地理的データの違い、PRTR 情報の利用における留意点を順に述べる。

また、次項以降では、各暴露シナリオに PRTR 情報を利用する場合の具体的な手順を、暴露シナリオごとに記載する。

なお、これら PRTR 情報は、平成 13 年度実績が平成 14 年度から公表されて以来、毎年、その前年度までの実績が公表されている。PRTR 制度の概要については、IV.7.5 に記載しているので参照されたい。

(1) PRTR 情報の利用についての全体像

評価Ⅱにおける排出量推計では、毎年度化管法に基づいて公表される[1]PRTR 情報を排出量データとして利用する。

化管法に基づく PRTR 情報には、大きく 2 種類ある。

1 つは、化学物質を取り扱う事業者が事業所ごとに届け出た排出量及び移動量を国が集約した「届出データ」であり、もう 1 つは、国が排出量を推計する「届出外排出量データ」である。

「届出データ」は排出量と移動量に分けて届け出られる。排出量については排出先環境媒体別に届け出られる。移動量については、下水道への移動と廃棄物としての移動に分けて届け出られる。また、「届出データ」は事業所ごとのデータであり、事業所すなわち排出源の住所が特定される点源のデータである。

「届出外排出量データ」は、大きく 4 つに区分されている。届出の対象業種であるが取扱量や雇用者数が一定基準に満たない等の理由により届出対象とならなかった「対象業種届出外」、届出対象の業種以外の「非対象業種」、それに「家庭」、「移動体」からの排出量である。

「届出外排出量データ」には、「届出データ」と異なる特徴が 2 つある。1 つは、排出先

[1] 例えば、以下のウェブサイトで公表されている。
PRTR 制度 集計結果の公表：
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/prtr/6.html
PRTR インフォメーション広場：
http://www.env.go.jp/chemi/prtr/risk0.html
PRTR 制度(データの参照と活用)：
https://www.nite.go.jp/chem/prtr/prtr_katsuyou.html

環境媒体別に推計されていない点[1]であり、もう１つは、都道府県別の推計排出量という形で集計されている点である。

これら２点に対して、暴露評価に用いる数理モデルに適用させる際に、「届出外排出量データ」の加工が必要となる。前者に対応した加工は「排出先環境媒体への案分」であり、後者に対応した加工は「地図上の区画（メッシュ）への割り振り」である。

本スキームでは以上のような PRTR 情報を収集し、これらのデータを暴露評価Ⅱにおける各暴露シナリオと残留性の評価のために利用する。ただし、原則として、評価Ⅰにおいてすでにリスク推計がなされた暴露シナリオ（例えば、大気系の非点源シナリオや水系の非点源シナリオ）については、リスク推計Ⅰの結果、「リスク懸念」となった場合のみ、評価Ⅱにおいて PRTR 情報を利用した暴露評価を行う[2]。

暴露評価の各シナリオに対して、前述した PRTR 情報のどのデータが適用されるかを図表 Ⅳ-３０に示した。

図表 Ⅳ-３０ PRTR 情報の種類と暴露評価の各シナリオへの適用（○が適用する部分）

PRTR情報の種類			暴露評価					
			排出源ごとのシナリオ	用途等に応じた暴露シナリオ				様々な排出源の影響を含めたシナリオ
				大気系の非点源	水系の非点源	船底塗料用・漁網用防汚剤	地下水汚染の可能性	
届出データ	排出量データ	大気への排出量	○	×	×	×	×	○
		公共用水域への排出量	○	×	×	×	×	○
		土壌への排出量	×	×	×	×	×※5	○
		埋立	×	×	×	×	×※5	×
	移動量データ	下水道への移動量	○※1	×	○※3	×	×	○※6
		廃棄物としての移動量	×	×	×	×	×	×
届出外排出量データ	対象業種届出外	排出先環境媒体別に排出量を案分する必要がある	○※2	○	○※4	×	×	○
	非対象業種		×	○	○※4	検討中	×	○
	家庭		×	○	○※4	×	×	○
	移動体		×	○	○※4	×	×	○

※1 移動先の下水処理場が特定可能であるため、排出源として扱う。本スキームにおいて下水処理除去率を乗じて排出量を算出する。
※2 化審法の製造事業者が常用雇用者数21人未満のためPRTR届出データが無い場合に検討する。
※3 下水処理施設からの推計排出量（対象業種届出外）に内包されている場合は重複しないように検討する。
※4 必要に応じて、汚水処理未普及地域の濃度も算出する。
※5 シナリオには用いないが、PRTR情報において排出等がないかを確認する。
※6 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計において必要に応じて用いる。

「排出源ごとのシナリオ」には、「届出データ」のうち主に大気と公共用水域への排出量データを用いる。その他に、「移動量データ」のうち、「下水道への移動量」のデータも利用

[1] 届出外排出量データには、排出先環境媒体別に推計されているものもある。
[2] 例外としては、評価Ⅱにおいて、物理化学的性状や詳細用途等の情報を精査又は追加したことによって、評価Ⅰの各暴露シナリオでの結果を見直す必要が生じた場合が挙げられる。

する。ただし、「下水道への移動量」データについては、移動先の終末下水処理施設が特定できたデータについてのみ排出源として扱う。また、化審法において届出をした製造事業所が、PRTR 情報の届出データに含まれていない場合が想定される。これはその事業者の常用雇用者数が 21 人未満であると化管法上において PRTR 届出を不要とされているためである。このような場合には、PRTR 届出外排出量データのうち、対象業種届出外のデータを用いることを検討する（詳細は、IV.7.5 参照）。

「大気系の非点源シナリオ」には、「届出外排出量データ」の 4 種類を利用し、排出先環境媒体として大気への排出に案分したデータを用いる。

「水系の非点源シナリオ」には、「移動量データ」のうち、「下水道への移動量」と、「届出外排出量データ」の 4 種類を利用し、排出先環境媒体として水域への排出に案分したデータを用いる。実際には、「下水道への移動量」及び 4 種類の「届出外排出量データ」は、国によって「対象業種届出外」のうち、「下水処理施設に係る排出量」として推計され、公表されているため、この推計値を用いる。ただし、この集約された推計値には前述した「排出源ごとのシナリオ」で移動先の下水道終末処理施設が特定できた分が内包されている場合には、重複しないように検討し、その分を差し引いた値を用いる。一方で、「下水処理施設に係る排出量」に加味されない 4 種類の届出外排出量データの水域への排出量は、汚水未処理地域からの水域への排出として、必要に応じ考慮して河川水中濃度を算出する。

「船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ」には、どのように PRTR 届出外排出量データの「非対象業種」のデータを用いるかは現在検討中である。

「地下水汚染の可能性シナリオ」には、PRTR 情報は用いない[1]。

「様々な排出源の影響を含めたシナリオ」には、「届出データ」の「埋立」及び「廃棄物としての移動量」以外のすべてのデータを用いることとし、「埋立」、「下水道への移動量」及び「廃棄物としての移動量」のデータの活用方法については引き続き検討する。なお、「下水道への移動量」については、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計において必要に応じて用いる。

また、もう 1 つの PRTR 情報の暴露評価への利用方法として、「環境モニタリングデータを用いた暴露評価」との関係がある。これは、評価Ⅱ以降の評価対象物質が PRTR 対象物質でもあり、かつ、環境モニタリング調査がされた物質である場合には、PRTR 届出事業所の住所からその緯度・経度の情報を整備する。緯度・経度の情報は、環境モニタリングの測定地点が PRTR 届出事業所（すなわち排出源）と近接しているか否かの判断のため、環境モニタリング測定地点と PRTR 届出事業所間の距離を算出する際に用いられる。詳細は、VIII 章を参照されたい。

最後に、「残留性の評価」への利用については、「様々な排出源の影響を含めたシナリオ」と同様に「届出データ」の「埋立」及び「廃棄物としての移動量」以外のすべてのデータを

[1] 「地下水汚染の可能性シナリオ」では PRTR 情報を直接利用しない。しかし、このシナリオを適用しない場合に、PRTR 情報における「土壌への排出量」又は「埋立」のデータがゼロかどうかの確認は、TCCR 原則（IX章参照）のうち、Consistency（整合性）が担保されているかどうかという観点から、リスク評価書をとりまとめるにあたって必要である。

用いる。

(2) 製造数量等の届出情報との地理的データの違い

製造数量等の届出情報に基づいて推計された排出量と PRTR 情報では、図表 Ⅳ-２６に示したようにデータの内容が異なる。

また、PRTR 情報にも「PRTR 届出データ」と「PRTR 届出外排出量データ」があり、これらのデータの質は異なる。

ここでは、これらの情報が有する地理的データの違いを述べる。

製造数量等の届出情報では、製造・輸入数量の合計値という形で、国内で優先評価化学物質が取り扱われる総量が把握できる。製造数量等の届出情報に基づく排出量推計手法は、国内で取り扱われる総量のうち、環境中への排出量がどの程度かを推計する手法である。この手法は、製造・輸入者が製造・輸入した事業所の所在地等を届け出ることで、川上における排出量を地理的な分布も含めて把握される一方で、サプライチェーンの川中・川下事業者の裾野がどの程度広がっているかの把握は困難であり、「仮想的排出源」を設定して排出量の推計を行うため、川中・川下事業者の全国での地理的な分布状況については不確かさを伴う。

一方で、PRTR 情報は、届出データに限れば、化学物質を取り扱っている個々の事業所が届け出た環境への排出量を国が集約したものである。すなわち、製造数量等の届出情報に基づく暴露評価と異なり、「仮想的排出源」ではなく、これらは「実在する排出源」からの排出ということになる。実在する各都道府県内の個別の事業所ごとの排出量を用いるという点で、製造数量等の届出情報に比べ、PRTR 情報（届出データ）は地理的な分布状況についての不確かさは伴わない。さらに、公共用水域への排出量データについては、排出先の河川、湖沼、海域等の名称が、また下水道への移動量については、移動先の下水道終末処理施設の名称が届出データに付随されていることから優先評価化学物質の地理的な分布状況をより把握することが可能となる。

(3) PRTR 情報の利用における留意点

評価Ⅱにおいて優先評価化学物質が PRTR 対象物質でもある場合、PRTR 情報、特に届出データは PRTR 対象物質ごと取扱い事業所ごとに得られるため、都道府県別詳細用途別出荷数量と物理化学的性状から推計する仮想的排出源ごとの推計排出量より、一般的には実態を反映していると考えられる。

しかし、PRTR 情報が得られれば、優先評価化学物質の排出源がすべて網羅できるというわけではない。また、PRTR 情報には化審法で対象としていない範囲の排出量が含まれている。

そこで、ここでは、PRTR 情報の利用における留意点について述べる。留意点を図表 Ⅳ-３１に総論と各論とに分けて示す。「届出データ」について、化審法対象外分を取り除くことが基本的に不可能であることから、基本的に、取り除くことなく評価Ⅱにおいて利用する。また、「届出外排出量データ」について、用途等の対象範囲の観点で化審法対象外分を取り

除くことが基本的に可能であることから、基本的に、化審法の寄与分を考慮しつつ、評価Ⅱにおいて利用する。

これらの点に留意しながら製造数量等の届出情報と補完しあう形で評価に用いる必要がある。なお、留意点の詳細については、IV.7.5 を参照されたい[1]。

図表 IV-３１　PRTR 情報の利用における留意点

		留意点
総論	物質の対象範囲	優先評価化学物質の指定・届出の単位と一致しない
	用途の対象範囲	化審法の対象範囲より広い
	（上記以外で）届出が不要となる要件	年間取扱量、事業者の常用雇用者数等によっては PRTR 制度における届出が不要
各論	PRTR 届出データ（化審法では推計対象としていない量が含まれる）	自家消費（自社内中間物）分の排出量が含まれる
		試験研究用分の排出量が含まれる
		副生成分の排出量が含まれる
		特別要件施設分※1 の排出量が含まれる
		輸入製品中からの排出量が含まれる
	PRTR 届出外排出量データ	推計される排出源によっては化審法の対象範囲より広い

※　化管法施行規則第 4 条 1 ハニホヘトチに示されている鉱山保安法により規定される特定施設(金属鉱業、原油・天然ガス鉱業に属する事業を営む者が有するものに限る。）、下水道終末処理施設（下水道業に属する事業を営む者が有するものに限る。）、廃棄物の処理及び清掃に関する法律により規定される一般廃棄物処理施設及び産業廃棄物処理施設（ごみ処分業及び産業廃棄物処分業に属する事業を営む者が有するものに限る。）、ダイオキシン類対策特別措置法により規定される特定施設

IV.4.5 排出源ごとの暴露シナリオにおける排出量推計

評価Ⅱでは、製造数量等の届出情報を用いる排出量推計に加えて、PRTR 情報も得られれば並行して用いる。

IV.4.5.1 製造数量等の届出情報を用いた排出量推計

製造数量等の届出情報を用いた「排出源ごとの暴露シナリオ」に関する排出量推計の考え方と方法は、基本的には評価Ⅰと同様である（IV.2.5.1 (2)及び IV.3.3 参照）。

評価Ⅰと異なる点は評価対象物質が複数の場合の扱いである。評価対象物質が複数になり得る例として以下の（ア）～（ウ）はすでに述べた。

このような例の場合、評価Ⅱでは評価対象物質について複数とするか否かを検討することになる。その結果によっては、（ア）と（ウ）のように仮想的排出源の設定が異なってく

[1] 平成 23 年度第 6 回薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会化学物質調査会化学物質審議会安全対策部会第 5 回評価手法検討小委員会第 115 回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会(2011) 「参考資料４　PRTR 情報の利用について（留意点）」も参照されたい。
http://warp.ndl.go.jp/info:ndljp/pid/8813165/www.env.go.jp/council/05hoken/y051-115/ref04.pdf

ることがある。

(ア) 構造の一部又は構成部分に優先評価化学物質を含む化学物質が、製造数量等の届出の対象となる場合：
例えば、優先評価化学物質名は「A」であり、「A」の製造数量等の届出として「A を含む塩」も含まれていた場合、詳細用途が同じ場合でも、排出源を別と仮定するかどうか、個別に検討する。なお、詳細用途が異なれば「A」を取り扱う排出源と「A を含む塩」を取り扱う排出源は別と仮定して仮想的排出源の設定を行う。

(イ) 分解度試験より変化物が生じることが判明している優先評価化学物質の場合：
親化合物と変化物（複数の場合を含む）の両方を評価対象物質とする場合においても、排出時は「親化合物」であると想定し、「親化合物」の物理化学的性状データを用いて排出量を推計する。その後、環境中濃度を推計するための数理モデルに適用する際に、評価対象物質ごとに変化物の生成量を求め、複数通りの環境中濃度推計を行う[1]。すなわち、この例では仮想的排出源の設定は変わらないが、個々の仮想的排出源の暴露量推計を評価対象物質ごとに複数通り行う。

(ウ) 指定された優先評価化学物質の構造の範囲に高分子化合物である化合物と高分子化合物でない化合物が混在し、それぞれの届出が事業者からあった場合：
高分子化合物に該当する化合物を取り扱う排出源と高分子化合物に該当しない化合物を取り扱う排出源は別と仮定して仮想的排出源の設定を行うか否か検討する。

IV.4.5.2 PRTR 情報の利用

PRTR 情報が得られる場合、PRTR 情報は排出量データであるため排出量推計の必要はなく、「排出源ごとの暴露シナリオ」に当てはめて利用する。

PRTR 情報には、事業者が届け出た「届出データ」と国が推計した「届出外排出量データ」があることは前述した（IV.4.4(1)参照）。

「排出源ごとの暴露シナリオ」では、原則「届出データ」のみを用いる。

「届出データ」では、届出事業所ごとの「大気への排出量」と「公共用水域への排出量」が得られるため、それらをそのまま排出源ごとの環境媒体別排出量として利用する[2]。

さらに、「届出データ」では、届出事業所ごとの「下水道への移動量」と「移動先の下水道終末処理施設の名称」が得られるため、下水処理施設ごとの公共用水域への排出量を推計する。

具体的には、以下の手順となる。

[1] ただし、分解度試験による変化物は環境水中で生成するものと想定されるため、大気への排出において、変化物になるとみなすかどうかは、評価対象物質ごとに判断する。
[2] これらの PRTR 届出事業所の中には、特別要件施設のため、下水道業（下水処理施設）が含まれる場合がある。

① 各事業所からの届出データにおいて、対象物質の移動先の下水道終末処理施設の名称が同じ「下水道への移動量」を集計する。
② ①で集計された「下水道への移動量」の合計を、各下水道終末処理施設への対象物質の流入量とする。
③ ②で得られた流入量に別途算出した下水道終末処理施設での除去率を乗じ、この値を各下水道終末処理施設からの水域への排出量とする。

なお、③の計算の際の、基本的な考え方は、Ⅳ.4.6.1 (1)と同様に以下のようになる。

まず評価Ⅰにおけるデフォルトの除去率[1]を適用する。この際、リスク推定Ⅱの結果が「リスク懸念」となるようであれば、別途、下水道終末処理施設での除去率を精査する。精査においては、対象物質の下水道終末処理施設での物質個別の除去率に係る実測データの利用や物質個別の物理化学的性状データを用いて、EU のリスク評価で用いられている下水処理場モデル Simple Treat[2]等で推測された値の利用を検討する（詳細は、Ⅳ.7.4.3 参照）。

排出源ごとの暴露シナリオに PRTR 情報を利用する場合、製造数量等の届出情報を用いた推計排出量と異なるのは以下の点である。

① 排出源は「仮想的排出源」ではなく具体的な事業所名と住所を備えた「PRTR 届出事業所」や「下水道終末処理施設」である。
② 大気、水域別の排出量は国による仮定に基づく推計値ではなく、事業者による届出情報である。
③ 水域への排出量については、排出先水域名が届け出られているため、河川への排出と海域への排出にシナリオを分ける（水域濃度推計における推計と人の暴露シナリオもそれに応じて変わる）。
④ 排出源のライフサイクルステージ（製造・調合・工業的使用段階等）並びに関連用途の情報は PRTR 届出項目に無いため不明である。ただし、排出源ごとに届出事業所の業種分類が得られる。
⑤ 同一事業所内での消費分からの排出量も含まれる（化審法の製造数量等の届出では、自社内中間物として消費された分は含まれない）。
⑥ 化審法の対象とならない排出量（例：副生成）や、適用除外用途に係る事業所（例：農薬の調合等）からの排出量も含まれる[3]（製造数量等の届出情報では届出に含まれない）。
⑦ 製造数量等の届出情報に含まれる対象物質と PRTR 制度対象物質は必ずしも一致しない場合がある[4]。

---

[1] 良分解性判定の対象物質には 67%を、それ以外には 0%を用いる。
[2] RIVM(1996) Simple Treat 3.0: a model to predict the distribution and elimination of chemicals by sewage treatment plants なお、RIVM(2013) Evaluation of the Simple Treat model において、Simple Treat model の適用対象となる物質の範囲について、医薬品、殺生物剤、界面活性剤といった用途に用いられる物質を例に検討がなされている。この結果については反映できていないため、適宜考慮することとする。
[3] PRTR の届出排出量が化審法の対象外となるかどうかの判別は基本的には不可能であるため、評価Ⅱにおいて取り除くことなく利用する。
[4] 優先評価化学物質の場合は、化審法の運用通知に基づき 1 つの優先評価化学物質に複数の化合物が含ま

⑧　優先評価化学物質を取り扱う事業所が PRTR 制度における「対象業種届出外（常時使用する従業員の数が 21 人未満の事業者）」、「非対象業種」に該当する場合、PRTR 届出データには含まれない。

上記のうち、①～③については暴露情報が実態をより反映したものとなるため PRTR 情報を用いる大きな利点である。一方、⑤～⑧については PRTR 情報を用いる際に注意を要する点である[1]。

④に関連し、PRTR 届出データではライフサイクルステージは判別できないため、製造数量等の届出情報に基づく場合のようにライフサイクスルステージで分けた暴露評価は行わない。

ただし、製造数量等の届出情報の製造事業所名から PRTR 届出データのどれが製造事業所からの排出量に相当するのかを確認する。これは、上記の⑧と関係しており、製造事業所が PRTR 制度における「対象業種届出外（常時使用する従業員の数が 21 人未満の事業者事業者）」に該当する場合には PRTR 届出情報には当該排出量は含まれないため、PRTR 届出外排出量データで補完する必要があるか、あるいは、PRTR 届出データを用いたリスク推計結果からとりまとめの結論を導く場合であっても、製造数量等の届出情報で補完する必要があるかどうかを確認するためである。

IV.4.6 用途等に応じた暴露シナリオにおける排出量推計

評価Ｉと同様に、「排出源ごとの暴露シナリオ」のみでは環境への主要な排出に係る暴露を評価できない用途等に関しては、図表 IV-２７で前述した「用途等に応じた暴露シナリオ」を追加する。

PRTR 届出外排出量データが得られている場合にも、必要に応じて[2]「用途等に応じた暴露シナリオ」を追加して暴露評価を行う。

以下に、「用途等に応じた暴露シナリオ」に含まれる暴露シナリオごとの排出量推計の考え方と方法を示す。

れ得る。
運用通知：化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/about/laws/laws_h30120351_0.pdf
「3 第一種特定化学物質、第二種特定化学物質、監視化学物質、優先評価化学物質及び一般化学物質の製造等の取扱い」に基づき、既存名簿上に収載されていないが新規化学物質としては取り扱わないもののうち、構造の一部に優先評価化学物質が含まれていたり（分子間化合物、包摂化合物、水和物、複塩、固溶体、ブロック重合物、グラフト重合物に限る）、構成の一部に優先評価化学物質の構成部分（アニオン又はカチオンに限る）を有するもの（付加塩、オニウム塩に限る）となっていたりするものについては、優先評価化学物質を含む混合物として取り扱い、製造数量等の届出の義務がある。

[1] ⑥、⑦及び⑧については PRTR 情報を用いたリスク推計結果からとりまとめの結論を導く際に考慮する点である（Ⅸ章参照）。

[2] 水系の非点源シナリオと大気系の非点源シナリオについては、後述の「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」の PRTR 情報を用いた数理モデルによって包含される場合には、必ずしも追加する必要がない場合が考えられる。

IV.4.6.1 水系の非点源シナリオにおける排出量推計

評価Ⅱでは、原則、評価Ⅰで「水系の非点源シナリオ」で「リスク懸念」となって評価Ⅱに進んだ場合に、製造数量等の届出情報を用いる排出量推計に加えて、PRTR 情報も得られれば並行して用いる。

(1) 製造数量等の届出情報を用いる場合

評価Ⅱの水系の非点源シナリオの製造数量等の届出情報を用いた排出量推計において、評価Ⅰ（IV.3.4.1 参照）と異なるのは以下の点である。

(ア) 詳細用途を精査する。具体的には、製造・輸入者に対し、詳細用途について照会する。

(イ) 物理化学的性状データを精査し、蒸気圧、水溶解度の採用値を変更した場合は、排出係数を選択し直す。

(ウ) 評価Ⅰで用いた数理モデルよりも詳細な河川水中濃度モデル等[1]を必要に応じて[2]用いて、評価ごとに１つの暴露量ではなく、全国のメッシュ（地図上の区画）ごとに暴露量を推計する。この場合は数理モデルにメッシュごとの排出量を入力する必要があり、家庭等での化学物質の使用量に比例すると考えられる統計情報（人口密度など）を用いて全国排出量をメッシュ単位に比例配分し、メッシュ単位の排出量を求める。このことは、評価Ⅰでは全国出荷数量から国民一人当たりの使用・排出量に換算して原単位ベースで推計したものを、評価Ⅱでは、必要に応じてより詳細に全国分布を推計することを意味する[3]

(エ) 下水処理場での除去率には、評価Ⅰにおけるデフォルトの除去率を適用する。この際、リスク推定の結果が「リスク懸念」となるようであれば、別途、下水道終末処理施設での除去率を精査する。精査においては、対象物質の下水道終末処理施設での物質個別の除去率に係る実測データの利用や物質個別の物理化学的性状データを用いて、EU のリスク評価で用いられている下水処理場モデル Simple Treat[4]等で推測された値の利用を検討する（詳細は、IV.7.4.3 参照）。

(オ) 評価Ⅰでは下水処理場を経由するシナリオに基づく暴露量のみを推計していたが、

---

[1] 未処理水の希釈率検討（VI.6.2.3 参照）でも利用されていた SHANEL（正式名称：産総研－水系暴露解析モデル（AIST-SHANEL））などを使うことを想定している。このモデルでは全国１級 109 水系における 1km メッシュ単位の月平均の化学物質の河川水中濃度を推計することができる。

[2] 評価Ⅰと同じモデルによる暴露量推計手法であっても、物理化学的性状や用途、有害性評価値を精査しリスク推計し直すことで「リスク懸念」とならない場合がある。その場合は詳細なモデルをわざわざ用いる必要はないとも考えられる。

[3] メッシュ単位に排出量を割り振ることにより、河川水中濃度推計においても評価Ⅰより詳細な数理モデルを適用することを検討する。

[4] RIVM(1996) Simple Treat 3.0: a model to predict the distribution and elimination of chemicals by sewage treatment plants なお、RIVM(2013) Evaluation of the Simple Treat model において、Simple Treat model の適用対象となる物質の範囲について、医薬品、殺生物剤、界面活性剤といった用途に用いられる物質を例に検討がなされている。この結果については反映できていないため、適宜考慮することとする。

評価Ⅱでは、必要に応じて[1]汚水処理施設の未普及地域において家庭等から直接河川に排出するシナリオに基づく暴露量も推計する。

(2) PRTR 情報の利用

「水系の非点源シナリオ」では、製造数量等の届出情報を用いる場合には、下水処理場を経由した排出量を推計することを前述した。

PRTR 情報を利用する場合には、届出データと届出外排出量データに含まれている下水処理場からの排出に係るデータを理解する必要がある。

PRTR 届出データにおいて、一部の PRTR 第一種指定化学物質[2]については下水道業を営む事業所からの排出量データが含まれている。ただし、これらの排出量データは排出源の位置が特定できるデータであることから、本スキームでは「排出源ごとのシナリオ」に用いられる。

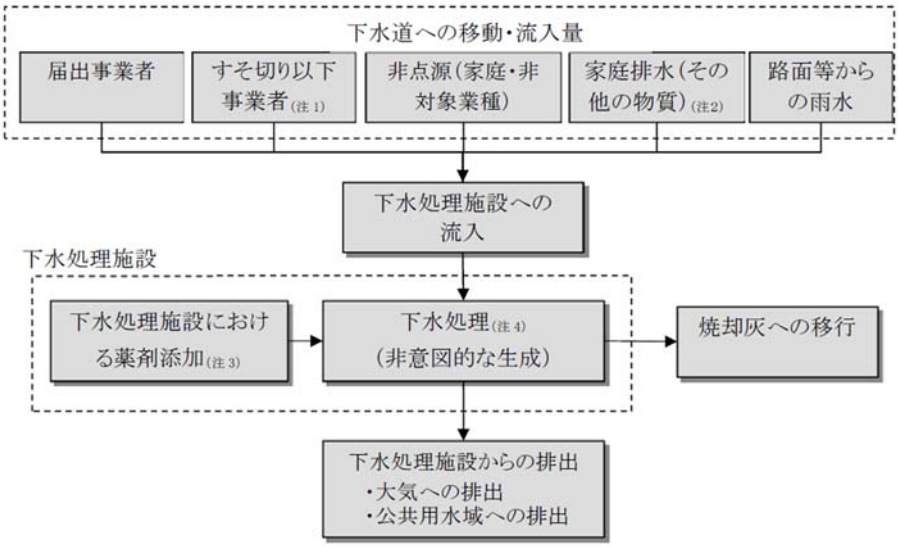
PRTR 届出外排出量データに、平成 19 年度実績からは、下水処理施設からの推計排出量が加えられた。これは「下水処理施設に係る排出量」と呼ばれている。この化管法における推計排出量には PRTR 届出データの 1 つである届出事業者からの「下水道への移動量」と国が推計する「届出外排出量データ（すそ切り以下事業者、非対象業種、家庭)」の下水道への移動量が集約されている。そのため、「水系の非点源シナリオ」においては、「下水処理施設に係る排出量」データを用いることで、PRTR 情報に含まれる下水処理場を経由した排出量の大半[3]を網羅できる。化管法の公開資料から下水処理施設に係る流入・排出等のイメージを図表 Ⅳ-３２に示す。

---

[1] 下水処理場の除去率が評価Ⅰと同じ値であっても、物理化学的性状や用途、有害性評価値を精査しリスク推計し直すことで、下水処理場を経由するシナリオでリスク懸念なしとなる場合がある。そのような場合は、下水処理場を経由するシナリオの方が安全側の評価であるため、下水処理場を経由しないシナリオの評価をわざわざ行う必要はないとも考えられる。

[2] 水質汚濁防止法の排水基準項目：排水基準を定める省令(昭和 46 年総理府令第 35 号)別表第一に掲げる排水基準項目及び別表第二に掲げる排水基準項目に掲載された 30 物質とダイオキシン類を指す。

[3] 下水道業から届け出された排出量データは含まれていない。



図表 Ⅳ-３２　化管法における「下水処理施設に係る流入・排出等のイメージ[1]」

一方で、前述したように、下水道業を営む事業所からの届出データ及び下水道への移動量の届出データは、基本的に「排出源ごとの暴露シナリオ」で用いられる。そのため、実際には、「下水処理施設に係る排出量」から「排出源ごとの暴露シナリオ」で用いた下水道への移動量データから導出した水域への排出量に相当する量を差し引いた値を「水系の非点源シナリオ」に用いる。この数量は公表されている PRTR 情報からは得られないため、本スキームにおいて算出する。なお、この際に PRTR 届出外排出量データの「下水処理施設に係る排出量」の推計に用いられた下水処理施設における除去率データについては、本スキームにおいて再度検討する（Ⅳ.7.4.3 参照）。

PRTR 情報を利用した「水系の非点源シナリオ」では、「排出源ごとのシナリオ」以外での「下水処理施設に係る排出量」が得られる場合、水域へ案分された[2]排出量を全国合計し、それを用いて、前項の製造数量等の届出情報と同様に、人口等を指標にしてメッシュ単位に割り振り、割り振った排出量を用いて暴露評価を行う。

また、下水処理施設を介さずに直接河川へ排出する汚水処理未普及地域についても前項の製造数量等の届出情報と同様に必要に応じて暴露評価を行う。この排出量は、公表されている PRTR 届出外排出量データを本スキームにおいて排出先環境媒体別に案分した水域への排出量をメッシュ単位に割り振って算出する。

本スキームにおいて「排出先環境媒体への案分」を行う際の基本的な考え方を PRTR 届出外排出量データの 4 つの区分「対象業種届出外」、「非対象業種」、「家庭」、「移動体」ごとに記載すると以下のようになる。また、4 つの区分に共通して、海域への直接の排出を想定しない。

[1,2] 経済産業省・環境省(2019) 平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法等の詳細「21. 下水道処理施設に係る排出量」
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/prtr/h29kohyo/05todokedegaiyou/syousai/21.pdf

- 「対象業種届出外」のデータについては、まず「下水処理施設に係る排出量」を差し引いた値を算出する。その量に対して、各排出先環境媒体へ案分し、水域への排出量データを求める（詳細は、IV.7.5 参照）。
- 「非対象業種」のデータについては、化学物質を含む製品の使用状況や化学物質の物理化学的性状等から個別に検討し、排出量を各排出先環境媒体へ案分し、水域への排出量データを求める。「漁網防汚剤に係る排出量」については海域における排出が想定されるため、本シナリオには用いない。
- 「家庭」のデータについても「非対象業種」と同様である。
- 「移動体」のデータについては、排出先環境媒体はすべて大気とし、本シナリオには用いない。

さらに、PRTR 届出外排出量データを利用する際には、化審法の適用除外用途等の排出量も得られることから、それらの寄与も併せた排出量であることに留意が必要である[1]。

前述のこれらの詳細は、IV.7.5 を参照されたい。

IV.4.6.2 大気系の非点源シナリオにおける排出量推計

評価Ⅱでは、原則、評価Ⅰで「大気系の非点源シナリオ」で「リスク懸念」となって評価Ⅱに進んだ場合に、「水系の非点源シナリオ」と同様に製造数量等の届出情報を用いる排出量推計に加えて、PRTR 情報も得られれば並行して用いる。

(1) 製造数量等の届出情報を用いる場合

評価Ⅱの「大気系の非点源シナリオ」の製造数量等の届出情報を用いた排出量推計において、評価Ⅰと異なる点は、IV.4.3 に前述した点のみである。なお、必要に応じて、評価Ⅰで用いた数理モデルよりも詳細なモデルを使うため、その際には全国のメッシュ（地図上の区画）ごとに暴露量を推計する。この場合は数理モデルにメッシュごとの排出量を入力する必要があり、家庭等での化学物質の使用量に比例すると考えられる統計情報（人口密度など）を用いて全国排出量をメッシュ単位に比例配分し、メッシュ単位の排出量を求める。

(2) PRTR 情報の利用

「大気系の非点源シナリオ」では、PRTR 届出外排出量データを用いる。ただし、「水域の非点源シナリオ」に用いる「下水処理施設に係る排出量」以外の PRTR 届出外排出量デ

[1] 平成 23 年度第６回薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会化学物質調査会化学物質審議会安全対策部会第５回評価手法検討小委員会第 115 回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会 「参考資料４ PRTR 情報の利用について（留意点）」各論 届出外データの推計手法の内訳と化審法対象範囲_
https://www.env.go.jp/council/05hoken/y051-115/ref04.pdf

ータは排出先環境媒体別に基本的に推計されていないため、本スキームにおいて「排出先環境媒体への案分」を行う。その際の基本的な考え方を PRTR 届出外排出量データの 4 つの区分「対象業種届出外」、「非対象業種」、「家庭」、「移動体」に分けると以下のようになる。

- 「対象業種届出外」のデータについては、まず「下水処理施設に係る排出量」を差し引いた値を算出する。その量に対して、各排出先環境媒体へ案分し、大気への排出量データを求める（詳細は、IV.7.5 参照）。
- 「非対象業種」のデータについては、化学物質を含む製品の使用状況や化学物質の物理化学的性状等から個別に検討し、排出量を各排出先環境媒体へ案分し、大気への排出量データを求める。
- 「家庭」のデータについても「非対象業種」と同様である。
- 「移動体」のデータについては、排出先環境媒体はすべて大気とする。

そして、環境媒体別に案分されたデータのうち、大気への排出量を製造数量等の届出情報と同様の手法を用い、暴露評価を行う。なお、メッシュ単位に排出量を割り振る際には、「対象業種届出外」や「非対象業種」については、人口や交通量以外の地域メッシュ統計[1]の活用も検討する。

さらに、PRTR 届出外排出量データを利用する際には、化審法の適用除外用途等の排出量も得られることから、それらの寄与も併せた排出量であることに留意が必要である[2]。

これらの詳細は、IV.7.5 を参照されたい。

IV.4.6.3 船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオにおける排出量推計

評価Ⅱにおいては、製造数量等の届出情報を用いる長期使用製品からの排出量推計に加えて、PRTR 情報も得られれば並行して用いる。なお、推計された排出量を全国にどのように割り振るかについて現在その手法を検討中である。

(1) 製造数量等の届出情報を用いる場合

評価Ⅱの船底塗料・漁網用防汚シナリオの製造数量等の届出情報を用いた排出量推計において、IV.4.3 で前述した共通する事項を検討後、長期使用段階の排出量推計を行い（IV.4.3.5 参照）、該当用途（用途分類#17）の全国出荷数量から代表的な日本の使用場所（海域）における排出量を算出し、海域中濃度を推計する。

---

[1] 総務省統計局 地域メッシュ統計
http://www.stat.go.jp/data/mesh/

[2] 平成 23 年度第 6 回薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会化学物質調査会化学物質審議会安全対策部会第 5 回評価手法検討小委員会第 115 回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会 「参考資料４ PRTR 情報の利用について（留意点）」各論 届出外データの推計手法の内訳と化審法対象範囲
https://www.env.go.jp/council/05hoken/y051-115/ref04.pdf

(2) PRTR 情報の利用

PRTR 届出外排出量データにおいて、漁網用防汚剤は漁業や水産養殖業で用いられることから、一部の PRTR 第一種指定化学物質については、非対象業種として国による推計が行われている[1]。しかし、本シナリオでの PRTR 届出外排出量データの利用は現時点では検討中である。

IV.4.7 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおける排出量推計

暴露評価Ⅱでは、前述の 2 種類の暴露シナリオに加え、「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」を新たに設定する。このシナリオでは用いる情報が製造数量等の届出情報か、PRTR 情報かによって実施する内容が、以下の（ア）、（イ）と異なる。

(ア) 製造数量等の届出情報を用いる場合

- 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計

(イ) PRTR 情報等の地理的な情報を含む排出量情報を用いる場合

- 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計
- 環境中濃度等の空間的分布の推計

ここでは、用いる情報に応じて、実施する内容を以下に順に示す。なお、本暴露シナリオの詳細については、VII 章を参照されたい。

IV.4.7.1 製造数量等の届出情報を用いた排出量推計

製造数量等の届出情報を用いる場合、「広域的・長期的スケールの暴露状況の推計」を実施する。この際、全国排出量を用い、日本全域を対象とし、定常状態を想定して多媒体モデルによる暴露状況の推計を行う。

本シナリオに適用する全国排出量とは、製造段階、調合段階、工業的使用段階、家庭用等使用段階、長期使用製品使用段階のすべてのライフサイクルステージの排出量を全国合計した値である。なお、本シナリオの評価に用いる多媒体モデルには環境媒体別の全国排出量を入力する必要があるため、排出先環境媒体別（大気と水域）に集計する。

IV.4.7.2 PRTR 情報の利用

PRTR 情報等の地理的な情報を含む排出量情報が得られる場合、「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」に適用する排出量は、排出先環境媒体別の届出データと届出外排出量

[1] 平成 29 年度届出外排出量の推計方法の詳細 -6.漁網防汚剤に係る排出量-
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/prtr/h29kohyo/05todokedegaiyou/syousai/6.pdf

データであり、届出データには「土壌への排出」も含まれている。全国排出量を用いた前述の「広域的・長期的スケールの暴露状況の推計」だけでなく、その他に、地図上の区画（メッシュ）ごとに割り振った排出量を用い、別の多媒体モデル[1]を利用した評価も併せて行う（地理情報を活用した数理モデル[2]を用いた「環境中濃度等の空間的分布の推計」という）。

PRTR 届出データについては届出事業所の住所データから、緯度経度情報を得て、メッシュ等[3]に割り振る。また、下水道への移動先となる下水道終末処理施設については住所情報、緯度経度情報を別途整備する。

届出外排出量データについては、各種統計情報を用いてメッシュ等に割り振る。

さらに、PRTR 情報を利用する際には、化審法の適用除外用途等の排出量も得られることから、それらの寄与も併せた排出量であることに留意が必要である[4]。

PRTR 届出外排出量データの１つである「下水処理施設に係る排出量」の利用の詳細は、IV.7.5 を参照されたい。

IV.4.8 残留性の評価のための排出量推計

残留性の評価とは、対象化学物質の環境中での残留状況を概観するための広域的・長期的スケールの多媒体モデルによる評価である（VII 章参照）。

残留性の評価に用いる排出量は、製造数量等の届出情報を用いる場合には、「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」におけるものと同様である。PRTR 情報が利用できる場合も、「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」におけるものと同様に排出先環境媒体別の全国排出量を用いる。

---

[1] G-CIEMS（Grid-Catchment Integrated Environmental Modeling System）：国立環境研究所において新たに開発した詳細な空間分解能を持つ GIS 多媒体モデル。

[2] 環境中に排出された化学物質が、大気、水、土壌、底質などの環境媒体間において、輸送・移動、分配され、また、化学的又は生物学的に分解される等の環境中の化学物質の動態を同時に評価するための数理モデル。

[3] G-CIEMS では大気グリッド、小流域単位での土壌、河道単位での河川それぞれへの排出量を入力する。グリッドとはメッシュと同義。

[4] 平成 23 年度第６回薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会化学物質調査会化学物質審議会安全対策部会第５回評価手法検討小委員会第 115 回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会 「参考資料４ PRTR 情報の利用について（留意点）」各論 届出外データの推計手法の内訳と化審法対象範囲 https://www.env.go.jp/council/05hoken/y051-115/ref04.pdf

Ⅳ.5 暴露評価Ⅲにおける排出量推計

評価Ⅲは、評価Ⅱのリスク評価結果が「暴露要件への該当性等の判断の根拠に足る信頼性がない」と判断された優先評価化学物質を対象に行われる。そのような物質の場合、評価Ⅱで抽出された不確実性を低減させるための暴露関連情報の種類が示される。評価Ⅲ実施に先立ち、それらの情報を入手の上、評価Ⅲに着手することになる。入手した情報を加味し、排出量や暴露量の再計算等を行う。原則として、判断の根拠に足る評価結果が得られるまでこの段階に留まると想定される。手法自体は基本的には評価Ⅱと変わらないが[1]、製造数量等の届出情報や PRTR 情報は評価Ⅱ以降も更新されることとなる。

評価Ⅲで入手される情報として、化審法第 42 条「取扱いの状況に関する報告」の求めに応じ、取扱事業者[2]から報告される情報が挙げられる。法第 42 条について逐条解説では、その趣旨について「化学物質の流通過程において実際にどのように取り扱われているのかを国が把握すること」とある。また、求める内容について「『取扱いの状況』には、詳細な用途に加え、取扱いの形態、方法等の他、取扱量、環境排出量、取引事業者名等も含まれ得る」と説明されている。

基本的には、製造・輸入者から評価Ⅱにおいて「リスク懸念」となった排出源の詳細な報告を求めていくことになる。特に、該当する優先評価化学物質が PRTR 対象物質でない場合には、評価Ⅱにおいて仮想的な排出源として評価をしていることから、より実態を反映した評価Ⅲを行うために、PRTR 届出データと同等程度に、取り扱う事業者と排出実態が把握できる情報を得るための報告を求めることとなる。評価Ⅲを実施する前に、PRTR 届出データと同等に取り扱うための事業者の名称、事業所の位置や排出実態等が把握できる情報が必要になる。

留意すべきは、法第 42 条の報告を求められる対象は、「優先評価化学物質の取扱事業者」となっており、届出を行った製造・輸入者に限られていない点である。したがって、製造・輸入者から製造・輸入時の情報の他、一次出荷先の取扱事業者の名称や出荷先事業所の場所の報告を受け、次に、一次出荷先の取扱事業者に取扱いや排出の状況報告とともに、次の二次出荷先事業者の情報を求めることも想定される。このようにして、流通過程（サプライチェーン）に沿って取扱事業者に取扱いや排出の状況を確認していくことも想定される。

化審法におけるこれまでの運用で「取扱い状況に関する報告の求め」に類する前例としては、監視化学物質の製造、輸入、使用等の状況を把握するために、監視化学物質を取り扱う川上から川下までの業界団体に対するヒアリングや情報収集を行った事例が該当する。例えば、1,2,5,6,9,10-ヘキサブロモシクロドデカンについては、業界団体（日本難燃剤協会、臭素・科学環境フォーラム、押出発泡ポリスチレン工業会、発泡スチレン工業会、日本繊維

[1] 得られる情報等に応じて暴露シナリオの見直しや適用する推計モデルの追加等は考えられる。
[2] 優先評価化学物質の製造の事業を営む者、業として優先評価化学物質を使用する者、他の業として優先評価化学物質を取り扱う者のこと。逐条解説では社会通念上その行為が優先評価化学物質に係る事業とみなされる行為を行う者とあり、運搬事業者、貯蔵業者も挙げられている。

産業連盟、社団法人日本自動車工業会）ごとの管理状況を確認し、審議会で報告している[1]。

さらには、川上の製造・輸入者は、日本化学工業協会が推進する「JIPS（Japan Initiative of Product Stewardship）」[2]や、日本塗料工業会が推進する「防汚剤及び防汚塗料の自主登録管理」[3]などの自主的な取組で収集した川中・川下事業者の取扱い状況をまとめて報告する可能性もあろう。その他、化審法の枠組み以外にも、NITE が行ったリスク評価管理研究会[4]での産官学が連携したアプローチも川中・川下の取扱い状況を確認する方法として参考になると考えられる。

一方で、サプライチェーンの裾野が広い場合、川上側の事業者がサプライチェーンを把握できていない場合、取扱い状況をとりまとめる業界団体が無い場合、あるいは、ライフサイクルステージの中でも家庭での使用が主となっている場合などには、法第 42 条に基づいて排出の状況を把握することに限界がある。そのような場合は、環境中濃度を直接知るために国による追加の環境モニタリング調査を検討する必要がある。

なお、逐条解説では、法第 42 条には事業者が違反した場合の罰則が設けられていない理由について、「これは、①報告を求められた企業が回答しなかったとしても、人の健康や動植物の生息等に被害には直接的には影響するものではないこと、②報告が得られなかった場合には、安全サイドに立って、例えば、全量が開放系用途に使用されていると仮定して安全性評価を行うこと、から報告に応じなかった場合の直接的な制裁措置を設けなかったものである。」とある。

[1] 経済産業省（2011）化学物質審議会安全対策部会安全対策小委員会（第８回）資料５参照
[2] 日本化学工業協会 GPS/JIPS ポータルサイト
http://www.nikkakyo.org/gps-jips
[3] 日本塗料工業会 防汚剤及び防汚塗料の自主登録管理
http://www.toryo.or.jp/jp/anzen/af/index.html
[4] NITE リスク評価管理研究会
https://www.nite.go.jp/chem/risk/kenkyukai.html

Ⅳ.6 リスク評価（二次）における排出量推計

この段階では、長期毒性に関する知見を得た物質を対象に、リスク評価を行う。

リスク評価（二次）の有害性評価については、有害性調査指示に基づき事業者から報告された長期毒性に係る有害性情報を用いて、有害性評価値を導出することとし、暴露評価については評価Ⅲと同様の方法を基本とするが、新たに情報が得られた場合には、それらを踏まえて、排出係数の見直しや暴露シナリオの見直しを行うなどの改善、精緻化を図ることとする。

IV.7 付属資料

IV.7.1 製造数量等の届出情報の確認

IV.7.1.1 大きな誤りの扱い

リスク評価（一次）評価 I～III 及びリスク評価（二次）においては、「一般化学物質」など「優先評価化学物質」と別の区分で届出がされているといった大きな誤りは、経済産業省において確認され、事業者に照会され、訂正がなされた上で国が評価に用いる。

IV.7.1.2 軽微な誤りの扱い

評価 I においては、以下①～⑥のような製造数量等の届出情報の軽微な誤りについては、経済産業省が届出事業者へ照会し、把握しきれなかった場合は、国が以下のように処理し、評価に用いる。

① 都道府県コードの記入がない場合は、コード番号の若い「#001 北海道」とする。
② 詳細用途の記入がない場合は、「#198-z その他の原料、その他の添加剤」とする。
③ 詳細用途番号のみに記入がない場合、存在しない番号の記入がある場合は、「z」とする。
④ 高分子化合物に該当しない優先評価化学物質について、届出情報の高分子化合物の該当性の有無に「○」が付いている場合は、削除する。
⑤ 高分子化合物に該当しない優先評価化学物質について、高分子化合物のみを対象とした詳細用途（例えば、「#115-a 塗料用樹脂、コーティング剤用樹脂」）に記入がある場合、その用途分類の「z」とする（例えば、「#115-z」）。
⑥ 出荷先に国外の国・地域別コードが記入されているが、詳細用途に「#199-a 輸出用のもの」以外が記入されている場合は、「#199-a 輸出用のもの」とする。

また、前述の①～⑥の他に、製造数量等の届出情報と選定した物理化学的性状データを用いて、IV.7.2 にて後述の「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」から排出係数を選択する際に、「－」を選択する場合が可能性としてあり得る（「－」の意味も IV.7.2 に後述）。この場合は、まず、物理化学的性状データ（蒸気圧又は水に対する溶解度）と詳細用途のどちらに誤りがあるかを確認する。前者に誤りがあれば、修正後の物理化学的性状データを用いて再度排出係数を選択し直す。前者に誤りが無ければ、詳細用途を精査し、必要に応じて届出事業者に照会する。次に、精査又は届出事業者への照会の結果、詳細用途にも誤りが無いと判断した場合は、排出係数一覧表の「－」の部分が誤っているとみなし、排出係数一覧表を見直し、見直した排出係数の値を評価に用いる。

評価Ⅱにおいては、「評価Ⅱのための準備」の「製造数量等の届出情報」の追加整備として、上記①～⑥の軽微な誤りについて、経済産業省が届出事業者への照会を行い、修正した

上で、国が評価に用いる。なお、評価 III、リスク評価（二次）の評価段階においても新たな届出者の追加、新たな詳細用途の届出書への記載の可能性があることから、必要に応じて経済産業省が届出事業者への照会を行うことになる。

IV.7.1.3 詳細用途の精査後の確認

評価Ⅱにおいては、前述の２種類の誤りの確認の他に、詳細用途に係る情報が以下の（ア）～（ウ）の場合に、届出内容を精査し、必要に応じて、届出事業者への照会を検討する。なお、精査の際には、評価Ⅰのリスク推計結果で「リスク懸念」となった暴露シナリオ（「排出源ごとの暴露シナリオ」の場合は、仮想的排出源）の詳細用途から精査していくことになる。

（ア） 詳細用途が「#109-z その他の溶剤」又は「#198-z その他の原料、その他の添加剤」の場合
（イ） 詳細用途分類番号が「y」又は「z」の場合
（ウ）「大気系の非点源シナリオ」、「水系の非点源シナリオ」、「船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ」、又は「地下水汚染の可能性シナリオ」が適用される詳細用途への届出があった場合
（エ）（ア）～（ウ）以外で、詳細用途番号に疑義がある場合

ここで、（ア）及び（イ）における「必要に応じて」とは、製造数量等の届出制度において、詳細用途番号が y 又は z の場合、届出書の「具体的用途」の欄にさらなる情報を必ず記載するように経済産業省が公表している記載要領に定めている[1]ことから、経済産業省によってその欄を確認する作業の結果、届出事業者への照会の必要があれば、という意味である。

また、（ウ）における「必要に応じて」とは、以下のような場合が想定される。例えば、ある優先評価化学物質について、「水系の非点源シナリオが適用される詳細用途として、#113-a 「水系洗浄剤（家庭用又は業務用のものに限る。）石鹸、洗剤、ウインドウォッシャー液（界面活性剤）)」であると届出をしている場合は、#112-a 水系洗浄剤（工業用のものに限る。）界面活性剤（石鹸・合成洗剤用）」の可能性、その逆に#112-a として届出されている場合は#113-a の可能性もある。#113-a と#112-a では大きくシナリオが変わるため、確認の必要があると考えられる。

IV.7.2 化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表

この一覧表は、化審法におけるリスク評価への利用を目的に作成されたものであり、製造数量等の届出情報から、環境中への化学物質の排出量を推計するために活用される。

[1] 経済産業省（2019）一般化学物質、優先評価化学物質及び監視化学物質の製造数量等の記載要領【2019 年度（2018 年度実績）届出用】　留意事項 p.3

排出係数一覧表の構成は、詳細用途別・物理化学的性状（蒸気圧・水溶解度）区分別になっている。また、ライフサイクルステージ別・排出先環境媒体（大気・水域）別に収録されていて、以下の 7 つの表が経済産業省のウェブサイトから日本語版及び英語版で公表されている[1]。

（１）大気への排出係数（製造段階）
（２）大気への 排出係数 （調合段階）
（３）大気への 排出係数 （工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階）
（４）水域への排出係数（製造段階）
（５）水域への 排出係数 （調合段階）
（６）水域への 排出係数 （工業的使用、家庭用・業務用での使用段階）
（７）大気・水域への 排出係数 （長期使用製品の使用段階）

（７）の長期使用製品の使用段階の排出係数以外は、詳細用途ごとに化学物質の物理化学的性状区分（蒸気圧、水に対する溶解度）に対応して設定されている。

一方で、特定の物理化学的性状区分に該当する化学物質が存在しないと考えられる詳細用途の場合には排出係数を設定せず、「－」で示している。

また、排出係数の値も、「－」の記載もなく、物理化学的性状区分によらず一律空欄になっている部分は、排出シナリオ上、その詳細用途でライフサイクルステージを設定していないことを意味する。詳細は、IV.7.4.3 を参照されたい。

「－」の例として、大気への排出係数については、蒸気圧区分 3（>10Pa）以上では、樹脂（#110-b、#115-a、#116-a、#123-a、#124-a、#125-a、#127-a,b、#128-a、#140-c）、などがあり、蒸気圧区分 4（>100Pa）以上では、散布剤等（#145）や着色剤（#126-a）などがある。一方、溶接用ガス（#135-c）では蒸気圧区分 5（<10000Pa）以下が「－」である。また、水域への排出係数については、水溶解度区分 3（＞100mg/L）以上では、イオン交換樹脂（#110-b、#140-c）、高吸水性材料（#127-b）、色素形成カプラー（#124-d）がある。

高分子化合物のみが該当する詳細用途、高分子化合物が用いられないとする詳細用途について整理した用途分類表を図表 IV-３３～図表 IV-３６に示す。

なお、排出係数一覧表の設定の経緯については、IV.7.3「用途分類表の設定方法」及び IV.7.4「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」の設定方法に後述している。

[1] 経済産業省（2013）「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」（改訂版）及び「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」と「スクリーニング評価用排出係数一覧表」の英語版の公表について https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/ra_emissionfactor.html

図表 Ⅳ-３３　高分子化合物のみが該当する詳細用途分類（網部分）
又は高分子化合物が用いられないとする詳細用途分類（塗りつぶしなしの部分）（１）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類
	中　間　物		
101	中間物	a	合成原料、重合原料、プレポリマー
		b	重合開始剤
		z	その他
	溶　　剤		
102	塗料用、ワニス用、コーティング剤用、インキ用、複写用又は殺生物剤用溶剤	a	塗料用溶剤、塗料希釈剤
		b	塗料剥離剤
		c	ワニス用溶剤
		d	コーティング剤用溶剤、レジスト塗布用溶剤
		e	インキ用溶剤、電子デバイス用溶剤、インキ洗浄剤、複写用溶剤
		f	殺生物剤用溶剤
		z	その他
103	接着剤用、粘着剤用又はシーリング材用溶剤	a	接着剤用溶剤、粘着剤用溶剤
		b	接着剤剥離用溶剤、糊剥離用溶剤
		c	接着用溶剤
		d	シーリング材用溶剤
		z	その他
104	金属洗浄用溶剤	a	金属洗浄用溶剤（塩素系）
		z	その他
105	クリーニング洗浄用溶剤	a	ドライクリーニング溶剤
		b	染み抜き溶剤、ドライクリーニング溶剤抽出剤
	（洗濯業での用途に限る。）	z	その他
106	その他の洗浄用溶剤（104及び105に掲げるものを除く。）	a	レジスト現像用溶剤、レジスト剥離用溶剤
	[#104,105を除く]	z	その他
107	工業用溶剤（102から106までに掲げるものを除く。）	a	合成反応用溶剤
		b	紡糸用溶剤、製膜（成膜）用溶剤
		c	分離・精製用溶剤
		d	希釈溶剤
	[#102-106を除く]	z	その他
108	エアゾール用溶剤又は物理発泡剤	a	エアゾール噴射剤、希釈剤
		b	物理発泡剤
		z	その他
109	その他の溶剤（102から108までに掲げるものを除く。）	z	その他の溶剤
	溶　剤　以　外		
110	化学プロセス調節剤	a	触媒、触媒担体
		b	イオン交換樹脂、イオン交換膜、分離膜、隔膜、濾過補助剤（脱蝋助剤等）
		c	乳化剤、分散剤
		d	重合調節（停止）剤、重合禁止剤、安定剤
		e	光学分割剤
		z	その他
111	着色剤（染料、顔料、色素、色材等に用いられるものをいう。）	a	着色剤（染料、顔料、色素、色材）
		b	蛍光増白剤
		c	発色剤、発色助剤
	[#112,113,115,116,125,126,129を除く]	z	その他
112	水系洗浄剤（工業用のものに限る。）	a	界面活性剤（石鹸・合成洗剤用）
		b	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤
		c	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（消泡剤等）
		d	防錆剤
	[#125,126,129,130,133を除く]	z	その他
113	水系洗浄剤（家庭用又は業務用のものに限る。）	a	界面活性剤（石鹸・合成洗剤・ウインドウォッシャー液用）
		b	柔軟剤
		c	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤
		d	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（酵素、蛍光増白剤、紫外線吸収剤等）
		e	香料
		z	その他
114	ワックス（床用、自動車用、皮革用等のものをいう。）	a	ワックス
		b	乳化剤、分散剤
		z	その他
115	塗料又はコーティング剤	a	塗料用樹脂、コーティング剤用樹脂
		b	着色剤（染料、顔料、光輝剤）
		c	バインダー成分前駆体（熱・光硬化塗料のモノマー・オリゴマー・プレポリマー等）
		d	架橋剤、硬化剤、増感剤、重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤
		e	可塑剤、充填剤
		f	安定化剤（酸化防止剤等）
		g	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤、導電性改良剤
		h	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、表面調整剤、造膜助剤
		i	腐食防止剤、防錆剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤
	（プライマーを含む。）	j	乾燥促進剤、湿潤剤、難燃剤、撥水剤
	[#114, 117, 125-131, 135, 138を除く]	z	その他
116	インキ又は複写用薬剤	a	インキ用樹脂、トナー用樹脂
		b	着色剤（染料、顔料、色素）、感熱色素、感圧色素、蛍光増白剤、顕色剤
		c	紫外線・電子線硬化インキのモノマー・オリゴマー・プレポリマー、増感剤、重合開始剤
		d	可塑剤、充填剤
		e	安定化剤（酸化防止剤等）
		f	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤
		g	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、造膜助剤
		h	電荷制御剤、流動性付与剤、研磨性付与剤、滑り性付与剤
		i	乾燥促進剤、湿潤剤
	（レジストインキを除く。）	z	その他

図表 Ⅳ-３４　高分子化合物のみが該当する詳細用途分類（網部分）
又は高分子化合物が用いられないとする詳細用途分類（塗りつぶしなし部分）（２）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類
117	船底塗料用防汚剤又は漁網用防汚剤	a	防汚剤用樹脂[添加剤も含む]
		b	船底塗料用防汚剤
		c	漁網用防汚剤
		z	その他
118	殺生物剤（成形品に含まれるものに限る。）	a	殺菌剤、殺虫剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤（細菌増殖抑制剤、木材の防腐剤、防蟻剤）
		b	展着剤、乳化剤、分散剤
	[#115,117,123,125,136,137を除く]	z	その他
119	殺生物剤（工業用のものであって、成形品に含まれるものを除く。）	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）
		b	ガス滅菌剤、燻蒸剤、燻煙剤
		c	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、抗菌剤
		d	展着剤、乳化剤、分散剤
	[#126,140を除く]	z	その他
120	殺生物剤（家庭用又は業務用のものに限る。）	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）
		b	繊維用・紙用防虫剤
		c	シロアリ駆除剤、防蟻剤
		d	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤、除菌剤
		e	非農耕地用除草剤
		f	展着剤、乳化剤、分散剤
		z	その他
121	火薬類、化学発泡剤又は固形燃料	a	火薬、爆薬、火工品[#121-bを除く]、煙火
		b	自動車安全部品用ガス発生剤
		c	化学発泡剤
		d	固形燃料
		z	その他
122	芳香剤又は消臭剤	（廃止）	（廃止）
		b	芳香剤
		c	消臭剤
		d	乳化剤、分散剤
		e	香料[#113-e及び#122-ｂ,ｃを除く]
	[洗浄剤用香料は#113]	z	その他
123	接着剤、粘着剤又はシーリング材	a	接着剤用樹脂、粘着剤用樹脂、シーリング材用樹脂
		b	バインダー成分前駆体（モノマー・オリゴマー・プレポリマー等、硬化剤、硬化促進剤、開始剤、カップリング剤）
		c	可塑剤、充填剤
		d	安定化剤（老化防止剤等）
		e	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤
		f	表面調整剤、乳化剤、分散剤
		g	防腐剤、防かび剤、抗菌剤
		h	難燃剤、導電剤
		z	その他
124	レジスト材料、写真材料又は印刷版材料	a	感光性・感電子性樹脂（レジスト、印刷版等）
		b	感光性・感電子性樹脂のモノマー・オリゴマー・プレポリマー
		c	感光剤、光重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤
		d	色素形成カプラー（カラー写真用）
		e	乳化剤、分散剤
		f	定着剤、安定化剤
		g	硬化剤、増感剤、減感剤、架橋密度向上剤、重合開始剤、レジスト添加剤
		h	現像剤、水溶性処理薬剤、レジスト剥離剤
		z	その他
125	合成繊維又は繊維処理剤	a	成形品基材（合成繊維、不織布）
		b	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤
		c	集束剤
		d	防炎剤、難燃剤
		e	含浸補強剤、染料固着剤（フィックス剤）
		f	帯電防止剤、親水加工剤
		g	柔軟仕上げ剤
		h	形態安定加工剤
		i	撥水剤、撥油剤、防水加工剤、防汚加工剤
		j	抗菌剤、変色防止剤、紫外線吸収剤
		k	紡糸・紡績・織編油剤、紡糸・紡績・織編油助剤
		l	洗浄剤、精練洗浄剤（ソーピング剤）、潤滑剤
		m	キレート剤
		n	漂白剤、抜染剤
		o	均染剤、浸透剤、促染剤（染色助剤）、媒染剤　、捺染用糊剤
		p	乳化剤、分散剤、消泡剤
		q	マーセル化助剤
		r	糊抜き剤
		z	その他
126	紙製造用薬品又はパルプ製造用薬品	a	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤
		b	サイズ剤、定着剤、填料
		c	コーティング剤
		d	防炎剤、難燃剤、帯電防止剤
		e	紙力増強剤、歩留向上剤、固着剤（フィックス剤）、防錆剤
		f	撥水剤、撥油剤、防水加工剤
		g	嵩高剤、柔軟剤
		h	蒸解薬液、pH調節剤
		i	スライムコントロール剤（防腐剤）、ピッチコントロール剤
		j	漂白剤、漂白浴安定剤
		k	乳化剤、分散剤、消泡剤、脱墨剤、洗浄剤
		z	その他

図表 Ⅳ-３５　高分子化合物のみが該当する詳細用途分類（網部分）
又は高分子化合物が用いられないとする詳細用途分類（塗りつぶしなし部分）（３）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類
127	プラスチック、プラスチック添加剤又はプラスチック加工助剤	a	成形品基材（プラスチック、合成皮革・人工皮革、合成紙、発泡体）
		b	高吸水性材料
		c	可塑剤、乳化剤、分散剤
		d	安定化剤（酸化防止剤等）
		e	充填剤、希釈剤、ポリマー分解促進剤
		f	結晶核剤
		g	内部滑剤、内部離型剤
		h	防曇剤、流滴剤、撥水剤
		i	難燃剤、帯電防止剤、波長変換剤
		j	外部滑剤、外部離型剤
		k	ラジカル発生剤
		l	反応注型用・注型発泡用材料（モノマー・オリゴマー・プレポリマー等）
		m	硬化剤、架橋剤（FRP用モノマー・オリゴマー・プレポリマー等）、架橋助剤、増感剤、重合開始剤
		n	硬化促進剤
	[#115-a,116-a,123-a,124-a,125-a,128-aを除く]	y	その他の添加剤（改質剤等）
	[着色剤は#111、物理発泡剤は#108、化学発泡剤は#121]	z	その他
128	合成ゴム、ゴム用添加剤又はゴム用加工助剤	a	成形品基材（エラストマー（合成ゴム））
		b	加硫促進剤、加硫促進剤助剤（加硫活性剤）
		c	加硫剤、架橋剤、架橋助剤
		d	可塑剤、補強材（接着促進剤等）、充填剤、プロセス油の基油・添加剤
		e	安定化剤（老化防止剤等）
		f	スコーチ防止剤、素練促進剤、内部滑剤、内部離型剤
		g	ラテックス凝固剤、乳化剤、分散剤、沈降防止剤
		h	難燃剤、帯電防止剤、波長変換剤
		i	外部滑剤、外部離型剤
		（廃止）	（廃止）
		k	ゴム再生剤（脱硫剤等）
		y	その他の添加剤（改質剤等）
	[着色剤は#111、物理発泡剤は#108、化学発泡剤は#121]	z	その他
129	皮革処理剤	a	なめし剤
		b	仕上げ加工薬剤（漂白剤、着色剤、着色助剤、撥水剤、撥油剤、油剤、脱脂剤、加脂剤等）
		c	準備工程（なめし前）薬剤（脱脂剤、脱灰剤等）
	[#114を除く]	z	その他
130	ガラス、ほうろう又はセメント	a	ガラス調合・成形原材料
		b	ガラス添加剤（強化剤、集束剤、防曇剤、紫外線カット剤等）
		c	ガラス加工助剤（離型剤、pH調節剤等）
		d	ほうろう調合・成形原材料
		e	ほうろう添加剤（絵付け用転写剤、フリット配合薬剤等）
		f	ほうろう加工助剤（中和剤、ニッケル処理剤等）
		g	セメント調合原料
		h	セメント添加剤（混合材、膨張剤、固化剤等）
		i	セメント加工助剤
	[着色剤は#111]	z	その他
131	陶磁器、耐火物又はファインセラミックス	a	陶磁器・耐火物・ファインセラミックスの調合・成形原材料
		b	陶磁器添加剤、耐火物添加剤、ファインセラミックス添加剤（焼結助剤等）
		c	成形助剤（バインダー、増粘剤、可塑剤、潤滑剤、乳化剤、分散剤等）
		d	滑剤、離型剤
	[着色剤は#111、電子用ファインセラミックスは#138、#139]	z	その他
132	研削砥石、研磨剤、摩擦材又は固体潤滑剤	a	研削砥石・研磨剤・摩擦材・固体潤滑剤の調合・成形原材料
		b	研削砥石・研磨剤・摩擦材・固体潤滑剤の添加剤（バインダー、増粘剤、研磨助剤、乳化剤、分散剤、摩擦調整剤、潤滑剤等）
		c	滑剤、離型剤
	[着色剤は#111]	z	その他
133	金属製造加工用資材	a	金属用添加剤（接種剤等）
		b	加工助剤（フラックス等）
		c	鋳造用粘結剤、鋳造用硬化剤、鋳造用添加剤
	[金属の合成原料は#101、着色剤は#111、表面処理は#134、溶接・ろう接は#135、金属加工油は#137]	d	鋳造用離型剤、鋳造用塗型剤
		z	その他
134	表面処理剤	a	めっき薬剤（皮膜成分原料）
		b	めっき浴添加剤（光沢付与剤、煙霧防止剤、無電解めっきの還元剤等）
		c	化成処理薬剤
		d	真空めっき（蒸着等）薬剤、溶射処理薬剤
		e	表面硬化処理（浸炭、窒化等）薬剤
		f	表面フッ素化処理薬剤、表面シリル化処理薬剤
		g	エッチング処理薬剤、スパッタリング処理薬剤、ブラスト処理薬剤
	[#104-106,112-117,123-132,138,144を除く]	z	その他
135	溶接材料、ろう接材料又は溶断材料	a	溶接フラックス
		b	ろう接フラックス（酸化防止剤等）
		c	溶接用ガス、溶断用ガス
		z	その他
136	作動油、絶縁油又は潤滑油剤	a	作動油の基油、潤滑油剤の基油
		b	絶縁油の基油
		（廃止）	（廃止）
		d	グリース増ちょう剤
		e	作動油添加剤、潤滑油剤添加剤
		f	絶縁油添加剤
	[プロセス油の基油・添加剤は＃128]	（廃止）	（廃止）
	[#137を除く]	z	その他

図表 Ⅳ-３６　高分子化合物のみが該当する詳細用途分類（網部分）
又は高分子化合物が用いられないとする詳細用途分類（塗りつぶしなし部分）（４）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類
137	金属等加工油又は防錆油	a	水溶性金属加工油の基油
		b	不水溶性金属加工油の基油、防錆油の基油
		c	水溶性金属加工油添加剤
		d	不水溶性金属加工油添加剤、防錆油添加剤
		z	その他
138	電気材料又は電子材料	a	磁性材料[#138-fを除く]、導電材料、超電導材料、蛍光体材料
		b	半導体材料、有機半導体材料、液晶材料
		c	誘電体材料、抵抗体材料、固体電解質材料、電解液材料、セパレータ材料
		d	光導波路材料(光ファイバを含む)、光学フイルム材料、電子機器用光材料
	（添加剤とプロセス加工助剤を含む。）	e	封止材、絶縁材料、シールド材料
	[#139を除く]	f	電子記憶媒体材料(磁性材料、光吸収色素等)
	[絶縁油は#136]	z	その他
139	電池材料(一次電池又は二次電池に用いられるものに限る。)	a	電解質材料、電解液材料、絶縁材料、セパレータ材料
		b	電極材料(活物質、集電体、導電剤、バインダー等)、減極剤
		z	その他
140	水処理剤	a	腐食防止剤、防錆剤、防食剤、防スケール剤、防藻剤
		b	金属イオン捕捉剤、金属イオン封鎖剤、硬水軟化剤
		c	イオン交換体(有機及び無機イオン交換体)、分離膜
		d	酸化剤、還元剤、pH調節剤
		e	消泡剤、凝集剤、濾過助剤、脱水助剤、イオン交換樹脂再生剤
		z	その他
141	乾燥剤又は吸着剤	a	乾燥剤、脱水剤
		b	吸着剤(脱臭剤、脱硝剤、ガス吸着剤等)
		c	吸収剤(脱酸素剤等)
		z	その他
142	熱媒体	a	冷媒、冷却剤
		b	熱媒、加熱剤
		z	その他
143	不凍液	a	不凍液(LLC等)
		b	防錆剤、防食剤
		z	その他
144	建設資材又は建設資材添加物	a	表面硬化剤
		b	コンクリート混和剤(強化剤、減水剤)
		c	離型剤、消泡剤
		d	木材補強含浸剤、木質板添加剤
		e	防汚剤[#117-b,cを除く]、防水剤、撥水剤
		f	建設資材
		z	その他
145	散布剤又は埋立処分前処理薬剤	a	凍結防止剤(融雪剤等)
		b	土壌改良剤、地盤改良剤
		c	消火剤
		d	人工降雨剤
		e	油処理剤
		f	粉塵結合剤、粉塵防止剤、煤塵処理剤
		z	その他
146	分離又は精製プロセス剤	a	浮選剤(捕収剤、起泡剤、条件剤)、金属浸出剤
	（鉱業又は金属製造業に使用されるものに限る。）	b	凝集剤、乳化剤、分散剤、金属捕捉剤
	[分離・精製用溶剤は#107]	z	その他
147	燃料又は燃料添加剤	a	燃料
		b	燃料添加剤(清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等)
		c	燃焼改良剤(燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等)
		d	氷結防止剤、着臭剤
	[固形燃料は#121]	z	その他
上記以外			
198	その他の原料、その他の添加剤	z	その他の原料、その他の添加剤
199	輸出用のもの	a	輸出用のもの

IV.7.3 用途分類表の設定方法

IV.7.3.1 用途分類表の設定の考え方

化審法の製造数量等の届出制度に用いられている「用途分類表」は、以下の（ア）～（エ）を土台として設定されている[1]。（ア）と（イ）については主に網羅性を確保するために、（ウ）については利便性、（エ）については国際整合性を確保することを目的とした。

（ア）　旧化審法（平成 15 年度改正法）における第一種から第三種までの旧監視化学物質、第二種特定化学物質の製造数量等の届出制度で用いられていた「機能別分類」
（イ）　「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査[2]」の「主な出荷用途[3]」
（ウ）　化学工業日報社の「新化学インデックス[4]」
（エ）　OECD HPV プログラムでも当時用いられていた「EU Technical Guidance Document(EU-TGD) Use Category (UC)[5]」

この他に、「用途分類表」には、環境への排出の実態に応じた分類を設定するという考え方が入っている。その詳細は、IV.7.4 にて後述する。

(1) 用途の網羅性と利便性

用途の網羅性を担保するにあたって、我が国における実際の化学物質の用途情報を網羅する必要があった。そのため、まず旧化審法（平成 15 年度改正法）において、第一種から第三種までの旧監視化学物質、第二種特定化学物質（合計で約 1,000 物質）の約 1,600 種類

---

[1] 当初、EU-TGD UC と一致させるという意見も出たが、
CEFIC/EHI/BfR/Ökopol/TNO/ECETOC/RIVM/BAUA(2006) EU REACH Impletation Project (RIP) 3.2-1a WP 1: DEVELOPMENT OF THE CONCEPT OF EXPOSURE SCENARIOS GENERAL FRAMEWORK OF EXPOSURE SCENARIOS SCOPING STUDY - FINAL REPORT で指摘されたように UC には以下のようないくつかの欠点があったことから、日本版の用途分類が検討された。
The UC defines the technical function of a substance into one of 55 UCs. However, numerous uses are not further differentiated and summarised in UC 0 “Others”. The list of use categories (UC) comprises two different kinds of information: functions of final products (e.g. adhesive) on the one side, and, on the other side, functions of substances in products, e.g. complexing agent. A translation between UC and the UE-EPA ChemUSES function categories is given in the TGD appendix Ia and Ib clearly demonstrating that the UC is a weak descriptor of the technical function.
The categories were introduced in the first version of the TGD on risk assessment at the end of the 1980ies to be used within the framework of the exposure assessment of New and Existing Substances. The categories provide generic information on the manufacture and uses of a substance. The IC and UC lists were established about 25 years ago and have not been revised since then. Therefore, most likely they do not reflect the current situation in the European industry. Industrial sectors such as the semiconductor industry are missing.

[2] 経済産業省が平成 20 年度まで 3 年に 1 度、実施してきた承認統計。

[3] 経済産業省化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成 13,16,19 年度実績）
http://www.meti.go.jp/statistics/sei/kagaku/index.html
平成 19 年度実績調査では、現在の用途分類の試案である「用途等コード番号表」が用いられた。

[4] 化学工業日報社 (2009) 新化学インデックス 第 3 部機能別インデックス分類を参考とした。

[5] EU (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment, PartII, Appendix I Emission factors for different use categories

あった「機能別分類」を網羅するように「用途分類」を設定し、さらに「詳細用途分類[1]」として細分化した。さらに、経済産業省によって平成 13、16 年度に実施された「化学物質の製造・輸入数量に関する実態調査」の結果から、実際に国内で使用されている化学物質の用途に関する情報を参考にした。

また、化審法において用途情報を国に届け出るのは製造・輸入者であることから、これらの事業者が日ごろ用いている用語にすることで利便性を高めることを意図した。そのため、化学工業日報社の書籍「新化学インデックス」を参考にしている。

さらに、前述の内容を反映した素案に対して、産業界にアンケート調査、ヒアリング調査を行い、その結果を反映して作成されている。

(2) 用途の国際整合性

EU-TGD UC は、EU のリスク評価に用いられていただけでなく、OECD HPV マニュアル Chapter2 に収載され、SIDS (Screening Inforamation Data Set)レポートの用途の記述に使用されていた。さらに、米国 ChemUSES（Chemical Use Standard Encoding System）との関連付けがなされた形で公開されていた[2]。

また、用途の国際整合性を検討した当時は、米国の TSCA IUR (Inventory Update Rule) の Industrial Function Category[3]がすでに公開されており、カナダの CEPA においても Functional Use Code[4]での届出がなされていた。これらは OECD レベルの文書での関連付けはなされていなかったが、その項目もまた EU-TGD UC と類似していた。

このことから、「用途分類表」の設定の際には EU-TGD UC と対応付けを行うことで OECD レベルでの国際整合性が図れると判断して作成した。

なお、2008 年 7 月に EU REACH における用途分類(Use descriptor system)が公開され[5]、IUCLID に収載されている[6]。さらに、2009 年 11 月に米国及びカナダの北米において用途分類の整合化がなされ[7]、それぞれ TSCA では 2011 年の CDR の届出の際に[8]、CEPA で

---

[1] この「詳細用途分類」が、我が国における化学物質のすべての用途を網羅しているわけではなく、代表的なものが挙げられていることに留意する必要がある。

[2] OECD (2007) Manual for Investigation of HPV Chemicals, Chapter 2: SIDS, The SIDS Plan and The Dossier, Annex1: Guidance for completing a SIDS Dossier, Annex1b, pp.114-124

[3] U.S. EPA (2006) Instruction for Reporting for the 2006 Partial Updating of the TSCA Chemical Inventory Database, p.4-12～4-13.

[4] Health Canada (2003) Proposal for priority setting for existing substances on the domestic substances list under the Canadian Environmental Protection Act, 1999 Greatest potential for human exposure, pp.63-65.

[5] ECHA (2008) Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.12:Use descriptor system　(2010.03.26 に Final guidance となっている)

[6] EU, OECD, ECHA (2008) IUCLID5 Guidance and Support “How to report identified users for REACH in IUCLID5.0” (IUCLID5.4 が 2012 年 10 月 22 日に、IUCLID5.5.1 が 2013 年 9 月 11 日に公開されている)

[7] United States Environment Protection Agency (USEPA), Health Canada, and Environment Canada (2009), Overview of Harmonized U.S.-Canada Industrial Function and Consumer and Commercial Product Codes for Chemical Inventory Reporting, Revised November 2009.

[8] U.S.EPA のウェブサイト Chemical Data Reporting (CDR) Basic Information http://epa.gov/cdr/pubs/guidance/basic.html

は 2012 年の Domestic Substances List Inventory Update Phase 2 の届出の際に[1]変更された、OECD において、2012 年に前述の EU REACH の用途分類と北米の用途分類との国際整合化作業が行われ、文書が公表されている[2]。これらの用途情報の国際整合性に関する動きとの整合化は今後の課題である[3]。

(3) 化審法特有の用途分類

前述の用途の網羅性、利便性、国際整合性を踏まえた上で、化審法の製造数量等の届出制度に用いるための用途分類表の検討において、EU-TGD UC とは異なる化審法特有の用途分類を設けている。主なものを以下に 6 つ述べる。

1 つ目として、厳密には用途ではないが、「輸出用のもの」という用途分類を設けている。これは輸出分からの国内環境への排出が無いことから、その量を除くためである。

2 つ目として、「中間物」という用途分類を設けている。これは出荷された化学物質が、出荷先でさらに化学反応を経て他の物質になる場合の用途の総称で、個別には合成原料や重合原料などを指す。

3 つ目として、排出実態が大きく異なることから「溶剤」と「溶剤以外」に分けている。これは EU-TGD の UC と大きく異なる点であるが、この考え方は、「用途分類」だけの特徴ではない。米国の IUR (Inventory Update Rule)では、「溶剤」を排出実態の異なる 3 種類に分けており[4]、また、我が国の VOC 排出量インベントリにおいても「溶剤」とそれ以外に分けており[5]、これらと同様の考え方である。その他には、EU REACH 規則施行後には、欧州の産業界である European Solvents Industry Group (ESIG)及び European Solvents Downstream Users Group (ESVOC)から溶剤の環境への排出シナリオとして Specific Environmental Release Categories (SPERCs) が 44 種類[6]公表されている[7]。

また、「溶剤」については、4 つ目の特徴である、広範な汚染の経験があった第二種特定化学物質(テトラクロロエチレン、トリクロロエチレン)の用途であることも考慮し、複数の

---

[1] Canada のウェブサイト Domestic Substances List Inventory Update2
https://www.canada.ca/en/environment-climate-change/services/evaluating-existing-substances/domestic-substances-list-inventory-update-phase-2-dsl-iu-25.html

[2] OECD (2012) Crosswalk of harmonized U.S. - Canada Industrial Function and Consumer and Commercial Product Categories with EU Chemical Product and Article Categories ENV/JM/MONO(2012)5, Series on Testing and Assessment No. 167,
http://search.oecd.org/officialdocuments/displaydocumentpdf/?cote=env/jm/mono(2012)5&doclanguage=en

[3] 2012 年以降も OECD Task Force on Exposure Assessment において検討中である。

[4] U.S. EPA (2006) Instruction for Reporting for the 2006 Partial Updating of the TSCA Chemical Inventory Database, p.4-13.

[5] 環境省 揮発性有機化合物（VOC）排出インベントリ検討会（2008）揮発性有機化合物（VOC）排出インベントリについて（報告）, p.2.

[6] 49 番まで番号は存在するが、5 つの番号が欠番である。

[7] ESIG/ESVOC(2010) Specific Environmental Release Category (SpERC) details Applicable to Petroleum Substances and Petrochemicals
http://www.esig.org/en/regulatory-information/reach/ges-library/ges-SPERCs-2/
（CEFIC(2012) Cefic Guidance Specific Environmental Release Categories (SPERCs) Chemical Safety Assessments, Supply Chain Communication and Downstream User Compliance
http://cefic-staging.amaze.com/Industry-support/Implementing-reach/Libraries/ より）

用途分類（例えば、#104 金属洗浄用溶剤や#105 クリーニング洗浄用溶剤）に分けている。この 4 つ目の特徴については、その他に第一種及び第二種特定化学物質であるトリブチルスズ化合物の用途である船底塗料用防汚剤についても、広範な汚染の経験があることが考慮され、「#117 船底塗料用防汚剤又は漁網用防汚剤」が設けられている。その際、船及び漁網が主に海洋での使用という他の「殺生物剤[1]」と環境への排出形態が異なることを理由に、「漁網用防汚剤」と併せて１つの「用途分類」として「殺生物剤」から独立させて設定している[2]。

５つ目として、各家庭で広範に消費され、環境へ排出すると考えられる用途を別扱いにし、「工業用」と「家庭用・業務用」に分けた点である[3]。「家庭用・業務用」の用途からの排出は、一般的な工場などの点源からの排出シナリオと分けてリスク評価を行うことから、別扱いとしている。

６つ目として、製造・輸入者が用途を把握できず、どの用途分類に該当するかの届出ができない場合に備えて、「その他の原料、その他の添加剤」という分類を設けている点がある。このような分類を設けていること自体は欧米でも見られるが、この「その他の原料、その他の添加剤」の用途分類は、出荷先での環境への排出実態が不明であることを意味することから、化審法では用途分類の中で最も排出が多い用途と同等の排出実態であるという扱いとしている点が特有である。

[1] 「殺生物剤」という語句は新しい用語であり、「バイオサイド（Biocide）」とも呼ばれているものを訳した語句である。なお、EU では 2013 年 9 月に Biocide Product Regulation （BPR, Regulation (EU) 528/2012)が施行されており、この規則のおける product type と呼ばれる分類との国際整合性もまた今後の検討課題である。

[2] その他の第一種特定化学物質、第二種特定化学物質の用途は EU-TGD UC においてすでに網羅されている。

[3] EU-TGD における Industrial Category(IC)にて、IC=5 (personal/domestic), IC=6 (public domain)に相当する考え方を用途分類で導入している。

IV.7.3.2 用途とライフサイクルステージの関係、排出シナリオの考え方の対応表

ここでは、本編で大きく７つに区分した用途とライフサイクルの関係をより具体的にし、各用途分類又は詳細用途分類ごとにライフサイクルステージとの関係、そのライフサイクルステージでの排出シナリオの考え方を表に整理し、図表 IV-３７～**図表 IV-４２**に示す。

図表 IV-３７　用途とライフサイクルステージの考え方（１）

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	製造段階	調合段階	工業的使用段階	家庭用・業務用での使用段階	長期使用製品の使用段階
	中間物							
101	中間物	a	合成原料、重合原料、プレポリマー	中間物（合成・重合原料、重合開始剤等）として用いられる化学物質を製造する段階	×（合成・重合原料等については調合段階は無いとした）	合成・重合反応で、化学物質を原料として使用する段階		
		b	重合開始剤		重合開始剤として用いられる化学物質を調合し、重合開始剤製品を製造する段階	重合開始剤製品（調合品）又はその成分となる化学物質を購入し、重合反応等で使用する段階		
		z	その他					
	溶剤							
102	塗料用、ワニス用、コーティング剤用、インキ用、複写用又は殺生物剤用溶剤	a	塗料用溶剤、塗料希釈剤	#102-109の各用途で溶剤として用いられる化学物質（エアゾール噴射剤及び物理発泡剤も含む）を製造する段階	塗料メーカー、インキメーカー、殺生物剤メーカー等が溶剤として調合し、塗料、インキ、殺生物剤製品等を製造する段階	溶剤又はその調合品を塗装や印刷等に使用する段階	×（家庭での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	塗料剥離剤					
		c	ワニス用溶剤					
		d	コーティング剤用溶剤、レジスト塗布用溶剤					
		e	インキ用溶剤、電子デバイス用溶剤、インキ洗浄剤、複写用溶剤					
		f	殺生物剤用溶剤					
		z	その他					
103	接着剤用、粘着剤用又はシーリング材用溶剤	a	接着剤用溶剤、粘着剤用溶剤		接着剤、粘着剤メーカー等が溶剤として調合し、接着剤や粘着剤製品等を製造する段階	溶剤又はその調合品を接着、粘着等に使用する段階	×（家庭での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	接着剤剥離用溶剤、糊剥離用溶剤					
		c	接着用溶剤					
		d	シーリング材用溶剤					
		z	その他					
104	金属洗浄用溶剤	a	金属洗浄用溶剤（塩素系）		他の溶剤や添加剤との配合や小分けなどして、金属洗浄用の溶剤製品を製造する段階	溶剤又はその配合品を金属製品の洗浄に使用する段階		
		z	その他					
105	クリーニング洗浄用溶剤	a	ドライクリーニング溶剤		他の溶剤や添加剤との配合や小分けなどして、クリーニング用の溶剤製品を製造する段階	溶剤又はその配合品を繊維製品の洗浄に使用する段階【洗濯業】	×（家庭での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	染み抜き溶剤、ドライクリーニング溶剤抽出剤					
	（洗濯業での用途に限る。）	z	その他					
106	その他の洗浄用溶剤（104及び105に掲げるものを除く。）	a	レジスト現像用溶剤、レジスト剥離用溶剤		他の溶剤や添加剤との配合や小分けなどして、レジスト現像用の溶剤製品を製造する段階	溶剤又はその配合品をレジスト用現像剤や剥離剤として使用する段階		
	[#104,105を除く]	z	その他					
107	工業用溶剤（102から106までに掲げるものを除く。）	a	合成反応用溶剤		他の溶剤や添加剤との配合や小分けなどして、工業用の溶剤製品を製造する段階	溶剤又はその配合品を、#102-106以外の工業的目的で使用する段階		
		b	紡糸用溶剤、製膜（成膜）用溶剤					
		c	分離・精製用溶剤					
		d	希釈溶剤					
	[#102-106の溶剤を除く]	z	その他					
108	エアゾール用溶剤又は物理発泡剤	a	エアゾール噴射剤、希釈剤		缶等に封入して配合し、エアゾール製品を製造する段階	エアゾール製品を購入し、噴霧して使用する段階	×（家庭での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	物理発泡剤		低沸溶剤や圧縮ガスを容器に封入し、物理発泡剤製品を製造する段階。	物理発泡剤製品を材料（樹脂やセラミックス等）の発泡に使用する段階。	×（家庭での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		z	その他					
109	その他の溶剤（102から108までに掲げるものを除く。）	z	その他の溶剤		#102-108以外の用途で溶剤を配合又は小分けする段階	#102-108以外の用途で、溶剤又は溶剤の配合品、小分け品を使用する段階	×（家庭での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
	溶剤以外							
110	化学プロセス調節剤	a	触媒、触媒担体	化学プロセス調節剤の成分となる化学物質を製造する段階	化学プロセス調節剤の成分を配合し、化学プロセス調節剤製品を製造する段階	化学反応工程で、化学プロセス調節剤製品又はその成分を使用する段階		
		b	イオン交換樹脂、イオン交換膜、分離膜、隔膜、濾過補助剤（脱色助剤等）					
		c	乳化剤、分散剤					
		d	重合調節（停止）剤、重合禁止剤、安定剤					
		e	光学分割剤					
		z	その他					

図表 Ⅳ-３８　用途とライフサイクルステージの考え方（２）

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	製造段階	調合段階	工業的使用段階	家庭用・業務用での使用段階	長期使用製品の使用段階
111	着色剤（染料、顔料、色素、色材等に用いられるものをいう。）	a	着色剤（染料、顔料、色素、色材）	着色剤等の成分となる化学物質を製造する段階	着色剤とその他の化学物質との配合又は小分けをして、着色剤、蛍光増白剤製品を製造する段階	着色剤、蛍光増白剤製品又はそれらの成分をプラスチックやガラス、ゴム製品等の着色のために使用する段階		プラスチックやゴム製品等から使用中に排出する段階
		b	蛍光増白剤					
		c	発色剤、発色助剤					
	[#112,113,115,116,125,126,129を除く]	z	その他					
112	水系洗浄剤（工業用のものに限る。）	a	界面活性剤（石鹸、合成洗剤用）	水系洗浄剤の成分となる化学物質を製造する段階	石鹸、洗剤メーカー等が水系洗浄剤成分を配合し、石鹸、洗剤製品等を製造する段階	工場内で、石鹸、洗剤製品又はそれらの成分を使用する段階		
		b	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤					
		c	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（消泡剤等）					
		d	防錆剤					
	[#125,126,129,130,133を除く]	z	その他					
113	水系洗浄剤（家庭用又は業務用のものに限る。）	a	界面活性剤（石鹸・合成洗剤・ウインドウォッシャー液用）				家庭やオフィスビル等で、石鹸、洗剤製品又はそれらの成分を使用する段階	
		b	柔軟剤					
		c	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤					
		d	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（酵素、蛍光増白剤、紫外線吸収剤等）					
		e	香料		【調合段階1】 香料メーカーが香料同士又は香料と添加剤を配合し、香料製品を製造する段階 【調合段階2】 洗浄剤メーカー等が香料製品又はその成分を界面活性剤等とさらに配合し、洗浄剤製品を製造する段階			
		z	その他					
114	ワックス（床用、自動車用、皮革用等のものをいう。）	a	ワックス	ワックス製品の成分となる化学物質を製造する段階	ワックス成分を配合し、ワックス製品を製造する段階		家庭又はオフィスビル等でワックス製品を使用する段階	
		b	乳化剤、分散剤					
		z	その他					
115	塗料又はコーティング剤	a	塗料用樹脂、コーティング剤用樹脂	塗料等の成分となる化学物質を製造する段階	塗料メーカー等が塗料成分等を配合し、塗料製品等を製造する段階	塗料製品等又はそれらの成分を購入し、自動車、船舶（下地）、建材等の塗装に使用する段階	×（家庭での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	着色剤（染料、顔料、光輝剤）					塗装された製品から使用中に排出する段階
		c	バインダー成分前駆体（熱・光硬化塗料のモノマー・オリゴマー・プレポリマー等）					
		d	架橋剤、硬化剤、増感剤、重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤					
		e	可塑剤、充填剤					
		f	安定化剤（酸化防止剤等）					
		g	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤、導電性改良剤					塗装された製品から使用中に排出する段階
		h	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、表面調整剤、造膜助剤					
		i	腐食防止剤、防錆剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤					
	（プライマーを含む。）	j	乾燥促進剤、湿潤剤、難燃剤、撥水剤					
	[#114,117,125-131,135,138を除く]	z	その他					
116	インキ又は複写用薬剤	a	インキ用樹脂、トナー用樹脂	インキ等の成分となる化学物質を製造する段階	インキメーカー等で、インキ成分等を配合し、インキ製品等を製造する段階（レジストインキ用を除く）	インキ製品等又はそれらの成分を購入し、紙等の印刷、複写等に使用する段階	×（筆記用具などの家庭での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	着色剤（染料、顔料、色素）、感熱色素、感圧色素、蛍光増白剤、顔色剤					
		c	紫外線・電子線硬化インキのモノマー・オリゴマー・プレポリマー、増感剤、重合開始剤					
		d	可塑剤、充填剤					
		e	安定化剤（酸化防止剤等）					
		f	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤					
		g	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、造膜助剤					
		h	電荷制御剤、流動性付与剤、研磨性付与剤、滑り性付与剤					
		i	乾燥促進剤、湿潤剤					
	（レジストインキを除く。）	z	その他					
117	船底塗料用防汚剤又は漁網用防汚剤	a	防汚剤用樹脂[添加剤も含む]	船底塗料用又は漁網用防汚剤の成分となる化学物質を製造する段階	殺生物剤原体、樹脂、溶剤等を調合し、船底塗料用又は漁網用防汚剤製品を製造する段階	船底塗料用又は漁網用防汚剤製品又はそれらの成分購入し、船又は漁網に塗布する段階	－	塗布された防汚剤や樹脂が船や漁網の使用中に排出する段階
		b	船底塗料用防汚剤					
		c	漁網用防汚剤					
		z	その他					
118	殺生物剤（成形品に含まれるものに限る。）	a	殺菌剤、殺虫剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤（細菌増殖抑制剤、木材の防腐剤、防蟻剤）	殺生物機能を有する化学物質（原体）や展着剤等の成分となる化学物質を製造する段階	殺生物機能を有する化学物質（原体）や展着剤等の成分となる化学物質を調合、製剤化して、殺生物剤製品を製造する段階	殺生物剤製品又はその成分を木材、紙、プラスチック、ゴム等の成形品に抗菌等の目的で練り込んだり、塗布したりする段階（特に木材中への注入や製品表面に塗布するシナリオを想定）		製品に注入又は塗布された抗菌剤等の殺生物剤が使用中にしみ出る段階
		b	展着剤、乳化剤、分散剤					
	[#115,117,123,125,136,137を除く]	z	その他					
119	殺生物剤（工業用のものであって、成形品に含まれるものを除く。）	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）			倉庫業等の事業所内において、工業製品の保管の際に、殺生物剤製品又はその成分を使用する段階		
		b	ガス滅菌剤、燻蒸剤、燻煙剤					
		c	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、抗菌剤					
		d	展着剤、乳化剤、分散剤					
	[#126,140を除く]	z	その他					
120	殺生物剤（家庭用又は業務用のものに限る。）	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）				一般消費者や駆除業者等が家庭やオフィスビル、公園等において殺生物剤製品を使用する段階	
		b	繊維用・紙用防虫剤					
		c	シロアリ駆除剤、防蟻剤					
		d	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤、除菌剤					
		e	非農耕地用除草剤					
		f	展着剤、乳化剤、分散剤					
		z	その他					

図表 Ⅳ-３９　用途とライフサイクルステージの考え方（３）

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	製造段階	調合段階	工業的使用段階	家庭用・業務用での使用段階	長期使用製品の使用段階
121	火薬類、化学発泡剤又は固形燃料	a	火薬、爆薬、火工品[#121-bを除く]、煙火	火薬類、固形燃料やエアバック用ガス発生剤、化学発泡剤等の成分となる化学物質を製造する段階	火薬、固形燃料のメーカーやエアバック、化学発泡剤のメーカー等が火薬、固形燃料やガス発生剤、化学発泡剤の成分を調合し、火薬、固形燃料製品やエアバック、化学発泡剤製品等を製造する段階	火薬、固形燃料、化学発泡剤製品を使用する段階又はエアバック等が作動する段階	×（家庭での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	自動車安全部品用ガス発生剤					
		c	化学発泡剤					
		d	固形燃料					
		z	その他					
122	芳香剤又は消臭剤	（廃止）	（廃止）					
		b	芳香剤	香料、芳香剤、消臭剤の成分となる化学物質を製造する段階	香料、芳香剤、消臭剤の成分となる化学物質を配合して、香料、芳香剤、消臭剤製品を製造する段階		家庭やオフィスビル等で香料、芳香剤、消臭剤製品を使用する段階	
		c	消臭剤					
		d	乳化剤、分散剤					
		e	香料[#113-eを及び#122-b,cを除く]					
	[洗浄剤用香料は#113]	z	その他					
123	接着剤、粘着剤又はシーリング材	a	接着剤用樹脂、粘着剤用樹脂、シーリング材用樹脂	接着剤、粘着剤等の成分となる化学物質を製造する段階	接着剤、粘着剤メーカー等が接着剤、粘着剤等の成分を配合し、接着剤、粘着剤製品等を製造する段階	接着剤、粘着剤製品又はそれらの成分を購入し、プラスチック、ゴム、木材、紙等の接着、粘着等に使用する段階	×（接着剤、粘着テープ等、家庭での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	バインダー成分前駆体（モノマー・オリゴマー・プレポリマー等、硬化剤、硬化促進剤、開始剤、カップリング剤）					接着又は粘着された製品等から使用中に排出する段階
		c	可塑剤、充填剤					
		d	安定化剤（老化防止剤等）					
		e	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤					
		f	表面調整剤、乳化剤、分散剤					
		g	防腐剤、防かび剤、抗菌剤					接着又は粘着された製品等から使用中に排出する段階
		h	難燃剤、導電剤					
		z	その他					
124	レジスト材料、写真材料又は印刷版材料	a	感光性・感電子性樹脂（レジスト、印刷版等）	レジスト材料や写真材料等の成分となる化学物質を製造する段階	レジスト材料や写真材料等の成分を配合して、レジスト材料や写真材料製品等を製造する段階	レジスト材料や写真材料製品又はそれらの成分を購入し、半導体製造や写真現像等で使用する段階	×（写真現像剤等、家庭用や業務用での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	感光性・感電子性樹脂のモノマー・オリゴマー・プレポリマー					
		c	感光剤、光重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤					
		d	色素形成カプラー（カラー写真用）					
		e	乳化剤、分散剤					
		f	定着剤、安定化剤					
		g	硬化剤、増感剤、減感剤、架橋密度向上剤、重合開始剤、レジスト添加剤					
		h	現像剤、水溶性処理薬剤、レジスト剥離剤					
		z	その他					
125	合成繊維又は繊維処理剤	a	成形品基材（合成繊維、不織布）	合成繊維（ポリマー）等を製造する段階	ポリマーに添加剤を配合して、合成繊維用のマスターバッチ等の製品を製造する段階	合成繊維ポリマーやマスターバッチ等を合成繊維の成形品製造に使用する段階		
		b	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	繊維処理剤の成分となる化学物質を製造する段階	繊維処理剤の成分となる化学物質を配合して、繊維処理剤製品を製造する段階	繊維処理剤製品又はその成分を購入し、繊維製品等を製造するため、着色、防炎、柔軟仕上げ、撥水・撥油、抗菌等の加工処理に使用する段階		繊維製品の洗濯等により排出する段階
		c	集束剤					
		d	防炎剤、難燃剤					繊維製品の洗濯等により排出する段階
		e	含浸補強剤、染料固着剤（フィックス剤）					
		f	帯電防止剤、親水加工剤					繊維製品の洗濯等により排出する段階
		g	柔軟仕上げ剤					
		h	形態安定加工剤					繊維製品の洗濯等により排出する段階
		i	撥水剤、撥油剤、防水加工剤、防汚加工剤					
		j	抗菌剤、変色防止剤、紫外線吸収剤					
		k	紡糸・紡績・繊編油剤、紡糸・紡績・繊編油助剤					
		l	洗浄剤、精練洗浄剤（ソーピング剤）、潤滑剤					
		m	キレート剤			繊維処理剤製品又はその成分を購入し、繊維製品等の加工処理工程中、洗浄剤や漂白剤、マーセル化助剤のように加工助剤として使用する段階		
		n	漂白剤、抜染剤					
		o	均染剤、浸透剤、促染剤（染色助剤）、媒染剤　、捺染用糊剤					
		p	乳化剤、分散剤、消泡剤					
		q	マーセル化助剤					
		r	糊抜き剤					
		z	その他					
126	紙製造用薬品又はパルプ製造用薬品	a	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	紙・パルプ薬品の成分となる化学物質を製造する段階	紙・パルプ薬品の成分となる複数の化学物質を購入、配合し、紙・パルプ薬品を製造する段階	蒸解工程から洗浄、漂白、脱墨、調成、着色、防炎処理などの一連の製紙工程において、紙・パルプ薬品の配合品又はその成分を使用する段階（紙・パルプの製造）		
		b	サイズ剤、定着剤、填料					
		c	コーティング剤					
		d	防炎剤、難燃剤、帯電防止剤					
		e	紙力増強剤、歩留向上剤、固着剤（フィックス剤）、防錆剤					
		f	撥水剤、撥油剤、防水加工剤					
		g	嵩高剤、柔軟剤					
		h	蒸解薬液、pH調節剤					
		i	スライムコントロール剤（防腐剤）、ピッチコントロール剤					
		j	漂白剤、漂白浴安定剤					
		k	乳化剤、分散剤、消泡剤、脱墨剤、洗浄剤					
		z	その他					

図表 Ⅳ-４０　用途とライフサイクルステージの考え方（４）

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	製造段階	調合段階	工業的使用段階	家庭用・業務用での使用段階	長期使用製品の使用段階
127	プラスチック、プラスチック添加剤又はプラスチック加工助剤	a	成形品基材（プラスチック、合成皮革・人工皮革、合成紙、発泡体）	合成樹脂（ポリマー）を製造する段階	合成樹脂等に添加剤を配合して、成形品用のマスターバッチ等の製品を製造する段階	合成樹脂又はマスターバッチ製品をプラスチックの成形加工等に使用する段階		
		b	高吸水性材料					
		c	可塑剤、乳化剤、分散剤	プラスチック添加剤、加工助剤の成分となる化学物質を製造する段階	プラスチック添加剤、加工助剤の成分となる化学物質を配合（混合）し、プラスチック添加剤製品、加工助剤製品を製造する段階	プラスチック添加剤、加工助剤製品又はそれらの成分を購入し、プラスチックの成形加工等に使用する段階		
		d	安定化剤（酸化防止剤等）					プラスチック製品の使用中に排出する段階
		e	充填剤、希釈剤、ポリマー分解促進剤					
		f	結晶核剤					
		g	内部滑剤、内部離型剤					プラスチック製品の使用中に排出する段階
		h	防曇剤、流滴剤、撥水剤					
		i	難燃剤、帯電防止剤、波長変換剤					
		j	外部滑剤、外部離型剤					
		k	ラジカル発生剤					プラスチック製品の使用中に排出する段階
		l	反応注型用・注型発泡用材料（モノマー・オリゴマー・プレポリマー等）					
		m	硬化剤、架橋剤（FRP用モノマー・オリゴマー・プレポリマー等）、架橋助剤、増感剤、重合開始剤					
		n	硬化促進剤					
	[#115-a,116-a,123-a,125-a,128-aを 除く]	y	その他の添加剤（改質剤等）					プラスチック製品の使用中に排出する段階
	[着色剤は#111、物理発泡剤は#108、化学発泡剤は#121]	z	その他					
128	合成ゴム、ゴム用添加剤又はゴム用加工助剤	a	成形品基材（エラストマー（合成ゴム））	エラストマー（合成ゴム）を製造する段階	合成ゴムに添加剤を配合して、ゴム用のマスターバッチ等の製品を製造する段階	合成ゴムやマスターバッチ製品をゴムの成形加工等に使用する段階		
		b	加硫促進剤、加硫促進剤助剤（加硫活性剤）	合成ゴムの製造に用いる添加剤、加工助剤の成分となる化学物質を製造する段階	合成ゴムの添加剤、加工助剤の成分となる化学物質を配合し、ゴム用添加剤、加工助剤製品を製造する段階	合成ゴム用添加剤、加工助剤製品又はそれらの成分を購入し、ゴムの成形加工等に使用する段階		ゴム製品使用中の磨耗により排出する段階
		c	加硫剤、架橋剤、架橋助剤					
		d	可塑剤、補強材（接着促進剤等）、充填剤、プロセス油の基油・添加剤					ゴム製品使用中の磨耗により排出する段階
		e	安定化剤（老化防止剤等）					
		f	スコーチ防止剤、素練促進剤、内部滑剤、内部離型剤					
		g	ラテックス凝固剤、乳化剤、分散剤、沈降防止剤					
		h	難燃剤、帯電防止剤、波長変換剤					
		i	外部滑剤、外部離型剤					
		（廃止）	（廃止）					
		k	ゴム再生剤（脱硫剤等）	合成ゴムの製造に用いる添加剤、加工助剤の成分となる化学物質を製造する段階	合成ゴムの添加剤、加工助剤の成分となる化学物質を配合し、ゴム用添加剤、加工助剤製品を製造する段階	合成ゴム用添加剤、加工助剤製品又はそれらの成分を購入し、ゴムの成形加工等に使用する段階		
		y	その他の添加剤（改質剤等）					ゴム製品使用中の磨耗により排出する段階
	[着色剤は#111、物理発泡剤は#108、化学発泡剤は#121]	z	その他					
129	皮革処理剤	a	なめし剤	皮革処理剤の成分となる化学物質を製造する段階	皮革処理剤の成分を配合し、皮革処理剤製品を製造する段階	皮革処理剤製品又はその成分を皮革製品の製造に使用する段階		
		b	仕上げ加工薬剤（漂白剤、着色剤、着色助剤、撥水剤、撥油剤、油剤、脱脂剤、加脂剤等）					皮革製品の使用中に排出する段階
		c	準備工程（なめし前）薬剤（脱脂剤、脱灰剤等）					
	[#114を除く]	z	その他					
130	ガラス、ほうろう又はセメント	a	ガラス調合・成形原材料	ガラス、ほうろうの調合・成形原材料、セメントの調合原料や添加剤・加工助剤の成分となる化学物質を製造する段階	ガラス調合・成形原材料又は添加剤・加工助剤成分を配合し、ガラスのマスターバッチ又はガラスの添加剤・加工助剤製品を製造する段階	ガラスのマスターバッチ又はガラスの添加剤・加工助剤製品又はそれらの成分をガラス製品の製造に使用する段階		ガラス製品から使用中に排出する段階
		b	ガラス添加剤（強化剤、集束剤、防曇剤、紫外線カット剤等）					
		c	ガラス加工助剤（離型剤、pH調節剤等）					
		d	ほうろう調合・成形原材料		ほうろう調合・成形原材料又は添加剤・加工助剤成分を配合し、フリット又はほうろう添加剤・加工助剤製品を製造する段階	ほうろうのフリット、ほうろう添加剤・加工助剤製品又はそれらの成分をほうろう製品の製造に使用する段階		
		e	ほうろう添加剤（絵付け用転写剤、フリット配合薬剤等）					ほうろう製品から使用中に排出する段階
		f	ほうろう加工助剤（中和剤、ニッケル処理剤等）					
		g	セメント調合原料		【調合段階1】 セメント工場で、セメント調合原料を粉砕・混合・焼成後、クリンカに石膏、フライアッシュ等のセメント添加剤等の成分を配合、粉砕し、セメント製品を製造する段階 【調合段階2】 生コン工場で、セメント製品に水、骨材、混和剤(AE等)等を配合し、生コン製品を製造する段階	生コン製品を、建設現場等で使用する段階		セメント（製品）成分がコンクリート等から使用中にしみ出る段階
		h	セメント添加剤（混合材、膨張剤、固化剤等）					
		i	セメント加工助剤		セメント加工助剤の成分を配合し、加工助剤製品を製造する段階。	セメント工場、調合（粉砕）工程等でクリンカー補助剤（粉砕助剤）等として使用される段階		
	[着色剤は#111]	z	その他					

図表 Ⅳ-４１　用途とライフサイクルステージの考え方（５）

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	製造段階	調合段階	工業的使用段階	家庭用・業務用での使用段階	長期使用製品の使用段階
131	陶磁器、耐火物又はファインセラミックス	a	陶磁器・耐火物・ファインセラミックスの調合・成形原材料	陶磁器、耐火物、ファインセラミックスの調合・成形原材料や添加剤・成形助剤等の成分となる化学物質を製造する段階	陶磁器、耐火物及びファインセラミックス調合・成形原材料又は添加剤・成形助剤成分を配合し、マスターバッチや添加剤・成形助剤製品を製造する段階	陶磁器や耐火物、ファインセラミックスなどの成型品を製造する際に、マスターバッチや添加剤・成形助剤製品又はそれらの成分を使用する段階		陶磁器、耐火物、ファインセラミックスの使用中にしみ出る段階
		b	陶磁器添加剤、耐火物添加剤、ファインセラミックス添加剤（焼結助剤等）					
		c	成形助剤（バインダー、増粘剤、可塑剤、潤滑剤、乳化剤、分散剤等）					
		d	滑剤、離型剤					
	［着色剤は#111、電子用ファインセラミックスは#138,139］	z	その他					
132	研削砥石、研磨剤、摩擦材又は固体潤滑剤	a	研削砥石・研磨剤・摩擦材・固体潤滑剤の調合・成形原材料	研削砥石、研磨剤、摩擦材などの調合・成形原材料や添加剤・加工助剤等の成分となる化学物質を製造する段階	研削砥石、研磨剤、摩擦材等の調合・成形原材料又は添加剤・加工助剤成分を配合し、マスターバッチや添加剤・加工助剤製品を製造する段階	研削砥石、研磨剤、摩擦材等のマスターバッチや添加剤・加工助剤製品又はそれらの成分を研削砥石、研磨剤、摩擦材製品の製造に使用する段階		研削砥石、研磨剤、摩擦材製品等の使用中に摩耗等により排出する段階
		b	研削砥石・研磨剤・摩擦材・固体潤滑剤の添加剤（バインダー、増粘剤、研磨助剤、乳化剤、分散剤、摩擦調整剤、潤滑剤等）					
		c	滑剤、離型剤					
	［着色剤は#111］	z	その他					
133	金属製造加工用資材	a	金属用添加剤（接種剤等）	金属に添加したり、金属加工や鋳造において用いられる化学物質を製造する段階	金属用添加剤、加工助剤等の成分となる化学物質を調合し、接種剤やフラックス、粘結剤等の金属用添加剤・加工助剤製品を製造する段階	金属用添加剤・加工助剤製品又はそれらの成分を金属成型品の製造に使用する段階		
		b	加工助剤（フラックス等）					
		c	鋳造用粘結剤、鋳造用硬化剤、鋳造用添加剤					
	［金属の合成原料は#101、着色剤は#111、表面処理は#134、溶接・ろう接は#135、金属加工油は#137］	d	鋳造用離型剤、鋳造用塗型剤					
		z	その他					
134	表面処理剤	a	めっき薬剤（皮膜成分原料）	めっき や化成処理、エッチング処理等の表面処理剤の成分となる化学物質を製造する段階	めっき薬剤や化成処理・エッチング処理薬剤の成分を調合し、それらの薬剤（製品）を製造する段階	めっき薬剤や化成処理・エッチング処理薬剤（製品）を購入し、工場等で使用する段階		
		b	めっき浴添加剤（光沢付与剤、煙霧防止剤、無電解めっきの還元剤等）					
		c	化成処理薬剤					
		d	真空めっき（蒸着等）薬剤、溶射処理薬剤					
		e	表面硬化処理（浸炭、窒化等）薬剤					
		f	表面フッ素化処理薬剤、表面シリル化処理薬剤					
		g	エッチング処理薬剤、スパッタリング処理薬剤、ブラスト処理薬剤					
	［#104-106,112-117,123-132,138,144を除く］	z	その他					
135	溶接材料、ろう接材料又は溶断材料	a	溶接フラックス	溶接、ろう接フラックスや溶接ガス等の成分となる化学物質を製造する段階	溶接フラックス、溶接ガス等の成分を配合し、溶接棒やはんだ、溶接ガス製品を製造する段階	溶接棒やはんだ、溶接ガス製品又はそれらの成分を購入し、溶接、ろう接溶断等で使用する段階		
		b	ろう接フラックス（酸化防止剤等）					
		c	溶接用ガス、溶断用ガス					
		z	その他					
136	作動油、絶縁油又は潤滑油剤	a	作動油の基油、潤滑油剤の基油	作動油、絶縁油、潤滑油剤の基油やそれらの添加剤の成分となる化学物質を製造する段階	作動油、絶縁油、潤滑油剤の基油に添加剤を配合し、作動油等の製品を製造する段階。 なお、脂肪酸と無機アルカリから石けん系増ちょう剤を製造後、基油と混合する段階も含まれる。	作動油、絶縁油、潤滑油剤製品又はそれらの成分を購入し、工作機械等で使用する段階	×（自動車等のブレーキ油やエンジン油等、家庭用や業務用での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	絶縁油の基油					
		（廃止）	（廃止）					
		d	グリース増ちょう剤	作動油、絶縁油、潤滑油剤の基油やそれらの添加剤の成分となる化学物質を製造する段階	作動油、絶縁油、潤滑油剤の基油に添加剤を配合し、作動油等の製品を製造する段階。 なお、脂肪酸と無機アルカリから石けん系増ちょう剤を製造後、基油と混合する段階も含まれる。	作動油、絶縁油、潤滑油剤製品又はそれらの成分を購入し、工作機械等で使用する段階	×（自動車等のブレーキ油やエンジン油等、家庭用や業務用での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		e	作動油添加剤、潤滑油剤添加剤					
		f	絶縁油添加剤					
	［プロセス油の基油・添加剤は＃128］	（廃止）	（廃止）					
	［#137を除く］	z	その他					
137	金属等加工油又は防錆油	a	水溶性金属加工油の基油	金属加工油、防錆油の基油やそれらの添加剤の成分となる化学物質を製造する段階	金属加工油や防錆油の基油に添加剤を配合し、金属加工油や防錆油の製品を製造する段階	金属加工油や防錆油製品又はそれらの成分を購入し、金属加工等で使用する段階		
		b	不水溶性金属加工油の基油、防錆油の基油					
		c	水溶性金属加工油添加剤					
		d	不水溶性金属加工油添加剤、防錆油添加剤					
		z	その他					
138	電気材料又は電子材料	a	磁性材料[#138-fを除く]、導電材料、超電導材料、蛍光体材料	電気・電子材料（磁性材料や半導体材料、封止剤等）の成分として用いられる化学物質を製造する段階	磁性材料や半導体材料、封止剤等の成分を配合し、磁性材料や半導体材料、封止剤製品等を製造する段階	磁性材料、半導体材料、封止剤製品又はそれらの成分等を電気・電子部品の製造プロセスで使用する段階		電気・電子製品の使用中に排出する段階
		b	半導体材料、有機半導体材料、液晶材料					
		c	誘電体材料、抵抗体材料、固体電解質材料、電解液材料、セパレータ材料					電気・電子製品の使用中に排出する段階
		d	光導波路材料(光ファイバを含む)、光学フィルム材料、電子機器用光材料					
		e	封止材、絶縁材料、シールド材料					
	（添加剤とプロセス加工助剤を含む）	f	電子記憶媒体材料（磁性材料、光吸収色素等）					
	［#139を除く］[絶縁油は#136]	z	その他					
139	電池材料（一次電池又は二次電池に用いられるものに限る。）	a	電解質材料、電解液材料、絶縁材料、セパレータ材料	電池材料の成分として用いられる化学物質を製造する段階	電極材料の成分を購入し、電極を製造する段階又は電解液成分を購入し、電解液として配合する段階	電極、電解液又はそれらの成分を電池製造に使用する段階		
		b	電極材料（活物質、集電体、導電剤、バインダー等）、減極剤					
		z	その他					
140	水処理剤	a	腐食防止剤、防錆剤、防食剤、防スケール剤、防藻剤	水処理剤の成分となる化学物質を製造する段階	水処理剤の成分を配合し、水処理剤製品を製造する段階	水処理剤製品又はその成分を水処理剤として使用する段階		
		b	金属イオン捕捉剤、金属イオン封鎖剤、硬水軟化剤					
		c	イオン交換体（有機及び無機イオン交換体）、分離膜					
		d	酸化剤、還元剤、pH調節剤					
		e	消泡剤、凝集剤、濾過助剤、脱水助剤、イオン交換樹脂再生剤					
		z	その他					

図表 Ⅳ-４２　用途とライフサイクルステージの考え方（６）

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	製造段階	調合段階	工業的使用段階	家庭用・業務用での使用段階	長期使用製品の使用段階
141	乾燥剤又は吸着剤	a	乾燥剤、脱水剤	乾燥剤、吸着剤の成分となる化学物質を製造する段階	乾燥剤、吸着剤成分を調合、製剤化し、乾燥剤、吸着剤製品を製造する段階	乾燥剤、吸着剤製品又はそれらの成分を乾燥剤、吸着剤として使用する段階		
		b	吸着剤(脱臭剤、脱硝剤、ガス吸着剤等)					
		c	吸収剤(脱酸素剤等)					
		z	その他					
142	熱媒体	a	冷媒、冷却剤	冷媒・熱媒の成分となる化学物質を製造する段階	冷媒・熱媒成分を配合して、冷媒・熱媒製品を製造する段階	冷媒、熱媒製品又はそれらの成分を購入し、注ぎ足しなどして使用する段階	×（エアコンの冷媒等、家庭用や業務用での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	熱媒、加熱剤					
		z	その他					
143	不凍液	a	不凍液(LLC等)	不凍液の成分となる化学物質を製造する段階	不凍液の成分を配合して、不凍液製品を製造する段階	不凍液製品又はその成分を購入し、凍結防止などに使用する段階	×（自動車のオーバーヒートの予防、凍結防止、防錆の目的で用いられる、家庭用や業務用での使用も存在するが、排出シナリオ上考慮していない。）（工業的使用段階として扱う）	
		b	防錆剤、防食剤					
		z	その他					
144	建設資材又は建設資材添加物	a	表面硬化剤	コンクリート混和剤や木材補強含浸剤等の建設資材添加物や建設資材の成分となる化学物質を製造する段階	建設資材や建設資材添加物の成分となる化学物質を配合し、木材補強含浸剤製品等を製造する段階	木材補強含浸剤製品又はそれらの成分を建設資材に配合し、建設現場等で使用する段階		建設資材添加物がコンクリート等から使用中にしみ出る段階
		b	コンクリート混和剤(強化剤、減水剤)		生コン工場で、セメント製品に水、骨材、混和剤(AE等)等を配合し、生コン製品を製造する段階	生コン製品を、建設現場等で使用する段階		
		c	離型剤、消泡剤					
		d	木材補強含浸剤、木質板添加剤		建設資材や建設資材添加物の成分となる化学物質を配合し、木材補強含浸剤製品等を製造する段階	木材補強含浸剤製品又はそれらの成分を建設資材に配合し、建設現場等で使用する段階		
		e	防汚剤[#117-b,cを除く]、防水剤、撥水剤					
		f	建設資材					
		z	その他					
145	散布剤又は埋立処分前処理薬剤	a	凍結防止剤(融雪剤等)	散布剤や埋立処分前薬剤の成分となる化学物質を製造する段階	散布剤や埋立処分前処理薬剤成分となる化学物質を配合し、散布剤や埋立処分前処理薬剤製品を製造する段階	道路等の凍結防止、土木現場での土壌改良、工場等での火災消火、人工降雨、海洋での油汚染防止又は埋立処分前の飛灰処理等のために使用する段階		
		b	土壌改良剤、地盤改良剤					
		c	消火剤					
		d	人工降雨剤					
		e	油処理剤					
		f	粉塵結合剤、粉塵防止剤、煤塵処理剤					
		z	その他					
146	分離又は精製プロセス剤	a	浮選剤(捕収剤、起泡剤、条件剤)、金属浸出剤	鉱業、金属製造業で用いられる浮選剤、金属浸出剤、金属捕捉剤等の成分となる化学物質を製造する段階	浮選剤、金属浸出剤、金属捕捉剤等の成分を配合し、浮選剤、金属浸出剤、金属捕捉剤製品等を製造する段階	浮選剤、金属浸出剤、金属捕捉剤製品等又はそれらの成分を分離・精製プロセス剤として使用する段階		
		b	凝集剤、乳化剤、分散剤、金属捕捉剤					
	（鉱業又は金属製造業に使用されるものに限る。）[分離・精製用溶剤は#107]	z	その他					
147	燃料又は燃料添加剤	a	燃料	生産活動により、副生燃料の成分となる化学物質が発生する段階	副生燃料の成分となる化学物質を配合し、副生燃料製品を製造する段階	副生燃料製品を購入し、工場で使用する段階		
		b	燃料添加剤(清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等)	燃料添加剤や改良剤の成分となる化学物質を製造する段階	【調合段階1】燃料添加剤等の成分となる化学物質を配合し、燃料添加剤、燃焼改良剤又は氷結防止剤製品を製造する段階【調合段階2】石炭、石油などの化石燃料に燃料添加剤、燃焼改良剤、氷結防止剤製品又はそれらの成分を配合し、燃料(製品)を製造する段階		燃料(製品)や燃料添加剤、燃焼改良剤、氷結防止剤製品又はそれらの成分を家庭用・業務用燃料として使用する段階	
		c	燃焼改良剤(燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等)					
		d	氷結防止剤、着臭剤					
	[固形燃料は#121]	z	その他					
	上記以外							
198	その他の原料、その他の添加剤	z	その他の原料、その他の添加剤	#101-147以外の用途で用いられる薬剤又は用途不明の薬剤の成分となる化学物質を製造する段階	#101-147以外の用途で用いられる薬剤又は用途不明の薬剤の成分となる化学物質を配合し、薬剤製品を製造する段階	薬剤製品又はそれらの成分を購入し、#101-147以外の用途又は用途不明で使用する段階		
199	輸出用のもの	a	輸出用のもの	輸出用の化学物質を製造する段階				

IV.7.3.3 用途分類解説資料

用途分類解説資料とは、化審法に基づき届出が必要な用途分類及び詳細用途分類について解説した資料である。これは用途分類表とともに、製品評価技術基盤機構において作成され、公開されている。

この一覧を図表 IV-４３～図表 IV-８１に示す。

図表 IV-４３　用途分類解説資料（１）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
	中間物			
101	中間物			中間物は、出荷先で化学反応の原料として用いられる薬剤で、使用量のほぼ全量が化学反応を起こし、かつ、得られる化合物の分子構造上の構成要素となるもの。合成原料、重合原料(モノマー、プレポリマー)、重合開始剤等が該当する。また、金属元素（例えばクロム）を製造し、出荷するために使用する金属塩(クロム酸）等も中間物に該当する。 ただし、以下①～⑤の場合、中間物に該当しない。 ①「得られる化合物」の分子構造上の構成要素とならない酸化剤や還元剤、官能基修飾剤等の薬剤は、#110-dを選択する。 ②過剰に用いられるために「ほぼ全量が化学反応を起こし」に該当しないラジカル重合、イオン重合及び重縮合反応の重合停止（禁止）剤等の薬剤は、#110-dを選択する。 ③未反応原料が生成物との混合物として出荷される場合は、未反応分については中間物としては扱わず、当該混合物の用途（#102以降）のzを選択する。 ④化学反応を起こさせることにより得られるものが製品となっていたり、その化学反応の及ぶところが局限されている場合は、中間物としては扱わず、#110以降のそれぞれ該当する用途番号を選択する。例えば、塗料、インキ、接着剤、レジスト、プラスチック成形、合成ゴム及び無機材料等で使用される反応成形用原料、バインダー成分前駆体のモノマー、オリゴマーおよびプレポリマー、架橋剤や硬化剤、光酸・塩基発生剤、発泡剤、加硫促進剤、めっき等の表面処理剤及び電気・電子用途に使用される封止剤などがある。 ⑤鋳造鋳型用の粘結剤（結合剤）や水処理剤として使用される脱酸素剤(防食剤)のように、化学反応を起こしているが、その生成物が廃棄物となり分離使用されることがない場合も中間物とせず、#110以降の該当する用途番号を選択する。
		a	合成原料、重合原料、プレポリマー	合成原料、重合原料、プレポリマーは、出荷先で合成反応、重合反応の原料として用いられる薬剤。
		b	重合開始剤	重合開始剤は、出荷先で化学反応や熱・光などの外部エネルギーによって分解し、重合の起点となるラジカルやイオン等を発生するものの総称。ただし、反応の前後で同じ物質のままで他の化合物の反応に寄与するものは「触媒」であり、#110-aを選択する。
		z	その他	

1

図表 Ⅳ-４４　用途分類解説資料（２）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
溶剤				溶剤は、他の物質を溶かし込ませる液体及び超臨界流体。なお、分散系（エマルション、サスペンジョン）の液体の分散媒も合わせて溶剤と呼ぶ。 また、溶剤と類似用途であるエアゾール噴射剤として用いられる液化ガス、圧縮ガス及び物理発泡剤も含める。なお、化審法で高分子化合物に該当する薬剤は溶剤とせず、#110以降の該当する用途を選択する。
102	塗料用、ワニス用、コーティング剤用、インキ用、複写用又は殺生物剤用溶剤			塗料・ワニス・コーティング剤・インキ・複写・殺生物剤に用いられる溶剤。 また、溶剤への添加剤（界面活性剤、溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基、防錆剤など）は、#115-h、#116-g、#118-b、#119-dまたは#120-fを選択する。
		a	塗料用溶剤、塗料希釈剤	塗料は、塗膜になる成分（固形分で、顔料や樹脂、添加剤など）、補助する成分（樹脂を溶解、分散させたりする成分）及び塗装作業を適切に行う希釈成分などからなる(#115を参照)。塗料用溶剤は、その中の補助する成分として使用される溶剤。 塗料希釈剤は、希釈成分として使用される溶剤でシンナーとも呼ばれている。なお、反応性希釈剤は#115-cを選択する。 塗料用溶剤、塗料希釈剤は、樹脂に対する溶解性から次の３つに分類される。 ①真溶剤：樹脂を溶解させることが出来る溶解性を持つもの。 ②希釈剤：これ自体に樹脂の溶解性はないが、真溶剤などと使うことで溶液となり、安定した希釈状態になるもの。 ③助溶剤：特定の樹脂を溶解する際に、これ自体に溶解性はないが、真溶剤と希釈剤の混合溶剤に助溶剤が入ると溶解の効果や揮発性が向上する。 船底塗料用・漁網用防汚剤の溶剤も、ここに該当する。
		b	塗料剥離剤	塗料剥離剤は、塗膜を剥がすために用いられる溶剤でリムーバーとも呼ばれている。
		c	ワニス用溶剤	ワニスとは、顔料を含まない透明な塗料の総称で、ワニス用溶剤は、ワニスを溶解又は希釈するために用いられる溶剤。
		d	コーティング剤用溶剤、レジスト塗布用溶剤	コーティング剤用溶剤、レジスト塗布用溶剤は、コーティング剤（#115参照）、レジスト（#124を参照）を塗布する際に用いられる溶剤。 なお、ここでコーティング及び塗布の目的は、材料表面の保護等以外にレジストのようにプロセスの一環としての塗布や写真フィルムや電子基板等の表面に光材料（写真フィルム、DVD等）や誘電材料（コンデンサ）等の機能性材料を被覆・定着させることも含まれる。
		e	インキ用溶剤、電子デバイス用溶剤、インキ洗浄剤、複写用溶剤	インキ用溶剤は、インキ（#116を参照）に使用される溶剤で、速乾性インキ溶剤、水性インキ溶剤及びオイル系インキ溶剤がある。 電子デバイス用溶剤は、印刷技術で電子デバイス（電子回路等）を製造するときに用いられる導電性インキや絶縁性インキ等の溶剤。ただし、電子材料のスピンコートやその他の塗布技術で用いられる溶剤は#102-dを選択する。なお、レジストプロセスで使われる溶剤の用途分類は、レジスト塗布の前処理（洗浄）溶剤は#106-z、レジスト樹脂の塗布溶剤は#102-d、現像剤と剥離剤・洗浄剤の溶剤は#106-aを選択する。 インキ洗浄剤は、インキを除去するために用いられる溶剤で、インキ用洗浄溶剤及びUVインキ用洗浄溶剤などがある。インキ洗油（いんきあらいゆ）と呼ばれることもある。 複写用溶剤は、インキを用いない電子写真、感圧・感熱複写、ジアゾ式複写などで用いられる複写薬剤（#116を参照）用の溶剤。 また、インキの反応性希釈剤は#116-c、レジストの反応性希釈剤は#124-bを選択する。
		f	殺生物剤用溶剤	殺生物剤用溶剤は、殺生物剤（#118～120を参照）に使用される溶剤。ただし、船底塗料用・漁網用防汚剤の溶剤は、#102-aを選択する。
		z	その他	

2

1

図表 Ⅳ-４５　用途分類解説資料（３）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
103	接着剤用、粘着剤用又はシーリング材用溶剤			接着剤・粘着剤・シーリング材に用いられる溶剤。 また、溶剤への添加剤（界面活性剤、溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基、防錆剤など）は、#123-f又は#144-zを選択する。
		a	接着剤用溶剤、粘着剤用溶剤	接着剤用溶剤、粘着剤用溶剤は、それぞれ接着剤、粘着剤（#123を参照）を溶解又は希釈するために用いられる溶剤。 なお、反応性希釈剤は#123-bを選択する。
		b	接着剤剥離用溶剤、糊剥離用溶剤	接着剤剥離用溶剤、糊剥離用溶剤は、それぞれ固着した接着剤、糊を溶かして剥離させるために用いられる溶剤。
		c	接着用溶剤	接着用溶剤は、溶剤接着の際に用いられる溶剤のことで、溶剤接着とは溶剤に溶解したり膨潤したりするプラスチックやゴムに適用される接着方法のこと。
		d	シーリング材用溶剤	シーリング材用溶剤は、シーリング材（#123を参照）に使用される溶剤。
		z	その他	
104	金属洗浄用溶剤			非水系及び準水系の金属洗浄用溶剤が該当する。ただし、水系洗浄剤は、#112又は#113を選択する。 ここで、金属とは金属材料から金属製品（装置も含む）までの全てを含む。また、溶剤への添加剤（界面活性剤、溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基、防錆剤など）は、#110-c/z又は#133-zを選択する。 ただし、塩素含有フロン類は#104-zを選択する。 非水系洗浄剤とは、炭化水素系・アルコール系・フッ素系・臭素系，塩素系洗浄剤など。 準水系洗浄剤とは、有機溶剤と水を組み合わせたタイプの洗浄剤。 なお、水系洗浄剤（#112、#113）とは、水で希釈して使用する,アルカリ，中性，酸性の3種類に分類される洗浄剤。
		a	金属洗浄用溶剤（塩素系）	金属洗浄用溶剤（塩素系）は、電気・電子部品や金属・機械部品、精密部品等の洗浄に使用される非水系の塩素系溶剤。
		z	その他	
105	クリーニング洗浄用溶剤			非水系及び準水系洗浄剤で、洗濯業において衣料を洗浄する際に用いられる溶剤が該当する。ただし、水系洗浄剤は、#112を選択する。 また、溶剤への添加剤（界面活性剤、溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基、防錆剤など）は、#110-c又は#110-zを選択する。
		a	ドライクリーニング溶剤	ドライクリーニング溶剤は、衣料及びこれ以外の布製品（カーテン・旗・人形・カーペットなど）を洗濯するために用いられる溶剤。
		b	染み抜き溶剤、ドライクリーニング溶剤抽出剤	染み抜き溶剤は、染み抜きに用いられる溶剤、ただし、溶剤ではない染み抜き剤は、＃112-aまたは＃112-bを選択する。 ドライクリーニング溶剤抽出剤は、衣類に染み付いた沸点が高い溶剤が熱乾燥により取り除けない場合に、衣類に残留している溶剤を溶解・抽出させ、衣類を乾燥させるために用いられる溶剤。
	（洗濯業での用途に限る。）	z	その他	
106	その他の洗浄用溶剤（１０４及び１０５に掲げるものを除く。）			上記#104、#105以外の非水系及び準水系の洗浄剤で、化学工業や印刷業の他にプラスチック工業、繊維工業、窯業、電気・電子工業等又は家庭用・業務用で金属以外の洗浄に用いられる洗浄用溶剤が該当する。また、溶剤への添加剤（界面活性剤、溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基、防錆剤など）は、洗浄対象用途の類似詳細用途（#124又は#138）を選択する。但し、洗浄対象用途が不明の場合は、#110-c又は#110-zを選択する。
		a	レジスト現像用溶剤、レジスト剥離用溶剤	レジストプロセスに用いられる現像用、剥離用および洗浄用の溶剤が該当する。 レジスト現像用溶剤は、光、電子線又は熱による架橋、分解又は重合などにより溶剤への溶解性が変化して耐食性画像を形成させた後、画像形成のために可溶性部分を溶かす際に用いられる現像剤（#124-h）用の溶剤。 レジスト剥離用溶剤は、リソグラフィー工程で使用され、現像されたレジストをマスクとしてエッチング等の加工工程を行った後に、不要なレジストを除去するために用いられる剥離剤（#124-h）用の溶剤。なお、溶剤に該当しない、それ自身がレジストの現像剤（例えばテトラメチルアンモニウムハイドロオキサイド）の場合には＃124-hを選択する。洗浄用溶剤としては、レジスト塗布の前処理溶剤や剥離後のリンス溶剤が該当する。ただし、水系の洗浄剤は#112を選択する。 ただし、レジスト樹脂の塗布溶剤は#102-dを選択する。
	[#104,105を除く]	z	その他	レジスト用途以外の洗浄用溶剤が該当し、電気・電子材料の製造・加工プロセスで使用される洗浄剤も該当する。

2

1

図表 Ⅳ-４６　用途分類解説資料（４）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
107	工業用溶剤（102から106までに掲げるものを除く。）			上記（#102～106）以外で、主に工・鉱業で用いられる溶剤、分散媒が該当する。ただし、溶剤への添加剤（界面活性剤、溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基、防錆剤など）は#110-c又は#110-zを選択する。ただし、紡糸・製膜（成膜）用溶剤の添加剤は、＃125または＃127を選択する。
		a	合成反応用溶剤	合成反応用溶剤は、合成反応に使用される溶剤で、反応溶媒と呼ばれることもある。 合成反応に使用された溶剤（＃107-a）が、後工程で別の用途（例えば、#107-b、c、d、z等）に使用されている場合は、その用途を選択する。
		b	紡糸用溶剤、製膜（成膜）用溶剤	紡糸用溶剤、製膜（成膜）用溶剤は、高分子物質を紡糸又は製膜（成膜）する際に高分子物質を溶解して均一な溶液を得るために用いられる溶剤。 合成反応に使用された溶剤（＃107-a）が、後工程で別の用途（例えば、#107-b、c、d、z等）に使用されている場合は、その用途を選択する。
		c	分離・精製用溶剤	分離・精製操作に用いられる溶剤が該当する。このような溶剤は抽出溶剤、精製溶剤、吸収溶剤、晶析溶剤および共沸蒸留溶剤などと呼ばれる。 抽出溶剤は、液体又は固体の原料を溶剤と接触させ、原料中に含まれている溶剤に可溶な成分を選択的に分離する溶剤。ただし、抽出溶剤に加えて用いられる添加剤（錯イオン形成剤や酸・アルカリなど）は、#110-z又は#146-aを選択する。 吸収溶剤（吸収溶媒）とは、気体の原料を溶剤と接触させ、原料中に含まれている溶剤に可溶な成分を選択的に分離する溶剤。吸収には化学吸収と物理吸収があり、例えば、モノエタノールアミンで炭酸ガスや硫化水素などの酸性ガスを吸収することは化学吸収といい、パーフルオロカーボンで酸素を吸収することは物理吸収という。ただし、溶剤に加えて用いられる酸やアルカリなどの吸収剤（例えば、SOxをCaCO3溶液で吸収して石膏として回収する場合）は、#141-cを選択する。 晶析溶剤とは、溶液中の成分の濃度を過飽和にすることによって、その成分を結晶化させる操作（晶析）に用いられる溶剤。 共沸蒸留溶剤として用いられる第三共沸成分（水ーエタノール系に対するベンゼン等）もここに該当する。
		d	希釈溶剤	希釈溶剤は、ある物質の濃度を低くするために加えられる溶剤で、それ自体の溶解性は大きくても小さくても良いが、真溶媒と混合して用いられることで均一な希釈溶液になるもの。 なお、反応性希釈剤はここには該当せず、各々の具体的用途の詳細用途を選択する。たとえば、成形樹脂用途の不飽和ポリエステル樹脂の反応性希釈剤であるスチレンは#127-mを選択する。
	[#102-106を除く]	z	その他	
108	エアゾール用溶剤又は物理発泡剤			液化ガスや圧縮ガスの物理変化による噴射力等を利用する用途に用いられる薬剤。 エアゾールとは、気体中に固体又は液体の微粒子が分散浮遊しているコロイド状態をいう。エアゾール用溶剤は、そのエアゾールを作る際に用いられる溶剤。 物理発泡剤は、材料を発泡させる発泡剤（化学発泡剤（#121-c参照）と物理発泡剤に分類される）の一種。
		a	エアゾール噴射剤、希釈剤	エアゾール噴射剤は、密閉容器に充填した液体や粉体を噴射ノズルから霧状（コロイド状）に噴射させるためのガス又はガスを発生させる薬剤で、炭化水素、ハロゲン化炭化水素、エーテル、炭酸ガスなどの液化ガスや圧縮ガスがある（液化ガスや圧縮ガスだけのダストクリーナー等も含む）。ただし、充填される液体や粉体の例としては、剥離（溶）剤、洗浄（溶）剤、ワックス、塗料、インキ、殺生物剤、芳香剤、接着剤、洗浄剤、防錆潤滑剤、消火剤等があり、その機能や用途に応じて#108以外の該当する用途を選択する。 希釈剤は、容器内に充填する液体や粉体を希釈や分散させるために用いられる溶剤又は薬剤。
		b	物理発泡剤	物理発泡剤は、蒸発型発泡剤ともいわれ低沸溶剤の蒸発や圧縮ガスの放圧によって生ずる物理的変化によって材料（樹脂やセラミックス等）を発泡させる薬剤で、脂肪族炭化水素、ハロゲン化脂肪族炭化水素、不活性ガス等がある。
		z	その他	
109	その他の溶剤（102から108までに掲げるものを除く。）	z	その他の溶剤	上記#102～108に含まれない、その他の溶剤はここに該当する。なお、溶剤への添加剤（界面活性剤、溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基、防錆剤など）は#110-c又は#110-zを選択する。

2

3

1

図表 Ⅳ-４７　用途分類解説資料（５）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
	溶剤以外			主剤を補助する薬剤の詳細用途は、特段用途が設けられていない場合は、原則として、主剤と同じ詳細用途とする。
110	化学プロセス調節剤			化学プロセス調節剤は、化学プロセスに関わる単位操作（例えば、反応、発酵、分離・精製、攪拌・混合、伝熱、流動、調湿・乾燥、集塵、成形、洗浄など）の制御等のために用いられる薬剤の総称。ただし、化学プロセス操作に関する（詳細）用途が他に設定されている場合には、#110とはせず、当該用途を優先して選択する。例えば、溶剤は#102～#109、工業用途の水系洗浄剤は#112、表面処理剤は#134、電気・電子材料用プロセスは#138、水処理剤は#140、吸着剤は#141、熱媒体は#142、鉱業・金属業の分離・精製プロセス剤は#146を選択する。 なお、石油精製等の製造プロセス調節剤は#110に該当する。
		a	触媒、触媒担体	化学反応を調節する薬剤及びそれらへの添加剤や助剤、等が該当する。 触媒は、少量使用して化学反応の速度を増し、かつ理論上は反応の終わりにも化学的に不変のまま残留する物質。自動車排ガス浄化触媒も該当する。 触媒担体は、少量の触媒の活性を大きくするために用いられる支持体や希釈剤などで、無機物や有機高分子などが用いられる。 なお、触媒失活剤、触媒吸着剤、助触媒などの触媒助剤もここに該当する。 天然の酵素や菌体は化審法対象外であるが、それらへの添加剤等として使用される化学物質や化学修飾された酵素・微生物触媒はここに該当する。
		b	イオン交換樹脂、イオン交換膜、分離膜、隔膜、濾過補助剤（脱蝋助剤等）	分離・精製（イオン交換、吸着、吸収、蒸留、抽出、再結晶、乾燥、ろ過などの単位操作）を調節する薬剤が該当する。 イオン交換樹脂は、イオン交換能を持つ有機高分子化合物で、陽イオンを交換する陽イオン交換樹脂と陰イオンを交換する陰イオン交換樹脂の総称。なお、イオン交換用途に用いられる無機イオン交換体も含む。 イオン交換膜は、正又は負の電荷を持つ電荷膜で、多数のイオン交換基を備えた多孔性の合成膜。なお、燃料電池等の電気・電子材料に用いられるイオン交換体は、＃138-cを選択する。分離膜は、分離技術のうち膜を用いて物質を分離する膜分離プロセスに使用される膜。膜表面に開いた穴の孔径や膜に対する物質の溶解度差等を利用して、液体や気体の中に含まれている粒子の除去や、溶液又は溶液中に溶け込んでいる物質のろ過、濃縮、精製など、様々な分離操作を行うもの。 隔膜は、陽極部分と陰極部分を分離する多孔性又は透過性の膜。 濾過補助剤は、濾材の目づまり等を防ぎ、濾過性能を増加させるために用いられる薬剤。なお、ここで脱蝋とは、潤滑油や灯・軽油、植物油等のろう分（ワックス）を除去し品質の向上を図ること、 脱蝋助剤はその除去を容易にするために用いられる薬剤。ただし、水処理で使われるイオン交換樹脂や濾過助剤等のプロセス調節剤は、#140を選択する。また、鉱業、金属製造業において、不純物金属等を分離除去する工程で用いられる薬剤及び浮遊選鉱に用いられる薬剤は#146を選択する。
		c	乳化剤、分散剤	混合等（乳化、分散、等）の単位操作を調節する薬剤が該当する。 乳化剤は、二相間の表面張力を減ずることによって不完全混合の二液又は固体と液体の分散を促進しかつ持続する界面活性剤。 分散剤は、微粒子を分散媒中に浮遊又は懸濁させて安定な分散系をつくるために用いられる薬剤。 例えば、製造プロセス（乳化重合、分散重合等）に用いられる乳化剤、分散剤もここに該当するが、出荷する重合体に乳化剤が含まれるか否かによって用途分類が異なる。 ①出荷重合体がエマルジョンから凝固（乳化剤を分離）された形で出荷される場合は、乳化剤の用途は#110-c。 ②乳化剤が分離されず、出荷重合体に含まれて出荷される場合は、重合体出荷先における重合体の用途における分散剤に該当。例えば、出荷重合体が接着剤に使用される場合は#123-fに該当。また、出荷重合体が、その他の具体的な用途（例えば、ゴム（＃128）、プラスチック（＃127）、塗料（＃115）、紙・パルプ薬品（＃126）等）に使用されることが分かっている場合は、その具体的用途を選択します。 なお、重合体出荷先における用途が不明の場合は、#110-cを選択。 また、#104～#107の溶剤添加剤等（界面活性剤、溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）の一部もここに該当する。

2

1

図表 Ⅳ-４８　用途分類解説資料（６）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		d	重合調節（停止）剤、重合禁止剤、安定剤	自らが反応することによって化学プロセスを調節する薬剤で、①目的反応生成物の分子構造上の構成要素として取り込まれないもの、又は②取り込まれても、過剰に用いられるために「ほぼ全量が化学反応を起こし」に該当しないもの。即ち、#101の定義に該当しないもの。 重合調節（停止）剤は、ラジカル重合、イオン重合及び重縮合反応等において重合度を調節したり又は重合反応を停止したりするために用いられる薬剤。たとえば、ラジカル重合時のフェノール誘導体、イオン重合時の酸、塩基及び重縮合時のモノカルボン酸やモノアルコール等が該当する。 重合禁止剤は、光や熱の影響によって重合反応を起こしやすい物質に添加して、その反応を阻害する薬剤。 安定剤（保存剤）は、中間物及び溶剤（#101～#109）の貯蔵や輸送の際に化学物質の重合や分解を防止するために添加される薬剤。 その他に、化学反応において、官能基の反応性や選択性等を調節するために使用される官能基修飾剤（例えばアセチル化剤、シリル化剤、アルカリ化剤等）、酸化剤及び還元剤のうち、上記の条件①又は②に該当するものはここに含まれる。ただし、条件①及び②に該当しない官能基修飾剤、酸素化剤、水素化剤等は#101-aを選択する。
		e	光学分割剤	光学分割剤は、光学異性体の混合物（ラセミ体）をそれぞれの異性体に分離するために用いられる薬剤。
		z	その他	
111	着色剤（染料、顔料、色素、色材等に用いられるものをいう。） ［#112,113,115,116,125,126,129を除く］			着色するための染料、顔料、色素及び色材及びこれらが用いられるときに使用する助剤や添加剤が該当する。ただし、水系洗浄剤（#112,#113）、塗料（#115）、インキ（#116）、繊維処理剤（#125）、紙・パルプ薬品（#126）及び皮革処理剤（#129）として用いられる着色剤は除く。
		a	着色剤（染料、顔料、色素、色材）	染料は、溶媒に溶解し染着可能な染料の総称。なお、媒染剤等の助剤も含まれる。 顔料は、水や溶剤に溶けない無彩又は有彩の粉末状の薬剤。着色、補強、増量などの目的で用いられる。 色素は、有色化合物をいい、色材は、着色材料で染料や顔料の総称。 なお、ガラス、陶磁器・ファインセラミックス、セメント及び木材などの着色にあたって、被着色材料の成分等と反応して着色する無機発色剤（例えば、銅、鉛、コバルト、鉄、クロム、マンガン等の金属化合物等）もここに該当する。
		b	蛍光増白剤	蛍光増白剤は、近紫外部の光を吸収し、紫青又は青の蛍光を発し白く感じさせる染料。
		c	発色剤、発色助剤	発色剤は、化学反応、吸着、吸収などの結果、反応物質や生成物質に特有の色を現させるもので、ここには有機発色剤・発色助剤が該当する。例えば、プラスチック（フィルム等）用の感熱・感圧発色剤がある。ただし、無機発色剤は、#111-aを選択する。 発色助剤は、発色性能を高めたり、安定させる薬剤で、例えば、ロイコ染料を発色させる顕色剤などがある。 ただし、インキ（感圧・感熱）用及び写真用の発色剤、発色剤助剤は、#116-b及び#124-dを選択する。
		z	その他	

2

1

図表 Ⅳ-４９　用途分類解説資料（７）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
112	水系洗浄剤 （工業用のものに限る。） [#125,126,129,130,133を除く]			水系洗浄剤の基本成分は、界面活性剤、ビルダー、添加（補助）剤、防錆剤などから構成される。化学的性状から分類すると、酸性洗浄剤、中性洗浄剤、アルカリ洗浄剤に分けられる。電解洗浄などの種々の洗浄方法で用いられる薬剤もここに該当する。 （工業用）とは、電気・電子部品や金属・機械部品、精密部品等を洗浄する際や、反応装置等を洗浄する際など工業的な生産活動および洗濯業において消費される場合が該当する。 ただし、対象材料（対象製品）の製造・加工段階の洗浄に使用する薬剤で、「洗浄剤」、「漂白剤」、「加工助剤(その内、洗浄に用いられるもの)」等の詳細用途名(y,zは除く)が他に明記されている場合は、当該用途を優先的に選択する（例えば、繊維処理剤（＃125）、紙・パルプ薬品（＃126）、皮革処理剤（＃129）、ガラス、ほうろう、セメント（＃130）、金属製造加工用資材（＃133）等がある）。設定されていない場合にはここに該当する。 なお、種々の材料からなる製品（繊維、紙、皮革、プラスチック、ゴム、金属、無機材料等）の使用段階の工業的洗浄（洗濯業を含む）に用いる水系洗浄剤は、ここに該当する。
		a	界面活性剤（石鹸・合成洗剤用）	界面活性剤（石鹸・合成洗剤用）は、水に不溶の液体を乳化したり、粉末・固体を水中に分散させたり、繊維や金属の表面の汚れを洗浄したりする作用がある一群の化合物。
		b	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤	無機アルカリ、有機アルカリは、溶液をアルカリ性に保つことにより、アルカリの化学的作用を主体として汚れや油脂、たんぱく質を取りやすいようにするもの。 無機酸、有機酸は、溶液を酸性に保つことにより酸性の化学的作用を主体として汚れや金属類を溶解する性質があり、それらを取り除きやすいようにするもの。 たとえば、種々の材料からなる製品の酸洗浄、酸浸せき、アルカリ洗浄、アルカリ浸せきに用いられる薬剤なども該当する。ただし、材料加工方法として用いられるウェットエッチングは#134-gを選択する。レジスト関係は、＃124を、ただし、レジストの溶剤は、＃102-dまたは＃106-aを選択する。 なお、エッチングとは、被処理材料の不要な全面または一部を化学的又は電気化学的に除去すること。 洗浄とは、液体等を用い、表面の汚染物質（スケール、油脂、酸化膜、その他の汚れ等）を化学的に溶解し、又は機械的に除去すること。 漂白剤は、着色不純物を分解除去して白色度を増させるもの。酸化漂白剤と還元漂白剤があり、酸化漂白剤は更に塩素系漂白剤と酸素系漂白剤に分けられる。
		c	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（消泡剤等）	ビルダーは、洗浄剤に添加してその洗浄作用を向上させるために用いられる薬剤。 キレート剤は、金属イオンに配位して、環状構造を持つキレート化合物を形成する薬剤。 再付着防止剤は、洗浄によって落ちた汚れが再び対象物に付かないようにするために用いられる薬剤。 添加（補助）剤は、界面活性剤の働きを助けたり、洗浄剤の利便性等を向上させるために添加される薬剤で、着色剤もここに含まれる。 消泡剤は、破泡剤や抑泡剤の総称。着色剤（用語の定義は、#111を参照）は、洗浄剤の洗浄力を低下させないように低い割合で配合し、洗浄剤を目視できるようにするために用いられる薬剤。 水系洗浄剤の溶解剤はここに該当する。
		d	防錆剤	防錆剤（腐食抑制剤）は、腐食速度を遅くする目的で添加するもので、物理的あるいは化学的作用によって金属表面に吸着し、又は化学反応によって防食皮膜を形成し金属と腐食液の接触を遮断する薬剤。
		z	その他	

2

1

図表 Ⅳ-５０　用途分類解説資料（８）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
113	水系洗浄剤（家庭用又は業務用のものに限る。）			（家庭用又は業務用）とは、最終的に家庭などで衣類の汚れや住まいの汚れを洗浄するために一般消費者個人によって消費される場合や、業務用としてオフィスビル、公園の清掃など工業的な生産活動に直接関係なく消費される場合が該当する。 ただし、食品衛生法に規定する「洗浄剤（洗浄剤であつて野菜若しくは果実又は飲食器の洗浄用に供されるもの）」及び医薬品、医療機器等の品質、有効性及び安全性の確保等に関する法律（旧薬事法）（以降、薬機法と記載する）に規定する「医薬品」、「医薬部外品」、「化粧品」に該当する水系洗浄剤は、化審法の適用除外であるため製造数量等の届出は必要ない。
		a	界面活性剤（石鹸・合成洗剤・ウインドウォッシャー液用）	界面活性剤（石鹸・合成洗剤用）は、#112-aを参照。 ウィンドウォッシャー液は、ウインドガラスを洗浄し、ガラス表面に均一な撥水膜が形成され、雨水等をはじき、ウインド面の視界を良好にする薬剤。
		b	柔軟剤	柔軟剤は、織物などの感触をよくするために用いられる薬剤。柔軟剤に使われている陽イオン界面活性剤は、洗剤に使われる陰イオン界面活性剤と違い洗浄効果はないが、柔軟仕上げ効果、帯電防止効果がある。
		c	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤の用語の定義は、#112-bを参照。
		d	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（酵素、蛍光増白剤、紫外線吸収剤等）	ビルダーの用語の定義は、#112-cを参照。添加（補助）剤は、#112-cと同様で界面活性剤の働きを助けたり、洗浄剤の利便性等を向上させるために添加される薬剤で、酵素、蛍光増白剤、紫外線吸収剤の他に消泡剤、着色剤等が該当する。 酵素は、選択的な触媒作用を持つ蛋白質などの高分子物質で、多くは単体で作用するが、複合体を形成して触媒作用を行う場合もある。（なお、酵素については化審法の届出が必要ない場合もある） 蛍光増白剤の用語の定義は、#111-bを参照。 紫外線吸収剤は、紫外線を吸収することによって、日光及び他の光源中の紫外線成分で起こる劣化を抑制する薬剤。消泡剤の用語の定義は、#112-cを参照。着色剤の用語の定義は、#112-cを参照。 水系洗浄剤の溶解剤としての有機溶剤はここに該当する。
		e	香料	香料は、香気を有する薬剤のことで、ここでは、洗浄力増強のためではなく、付加価値として、香気を加えるために添加される薬剤。洗浄剤以外の用途は#122-eを選択。 #113-eの香料に使用する添加剤もここに含まれる。
		z	その他	
114	ワックス（床用、自動車用、皮革用等のものをいう。）			天然ワックス（動植物由来、鉱物・石油等由来のもの）、合成ワックス（炭化水素を化学合成して作る）、加工・変性ワックス（酸化ワックス、配合ワックス、変性モンタンワックス、その他）があるが、ここの用途には、後2者が該当し、床用、自動車用、皮革用などのコーティング用途が該当する。また、これらを用いるときに使用する助剤や添加剤も含まれる。 ろうそく用やマッチ用は＃121-d、タイヤの老化防止剤は#128-e、包装材料用＃126-f、クレヨン用#116-a、トナー離型剤#116-h、潤滑剤は#136-e、絶縁材は#138-e、造形材料（Mw>1000)は#127-a、鋳造用（ロストワックス、離型剤）は#133-d、等を選択する。
		a	ワックス	ワックスは、表面に皮膜を形成して保護するために用いられる有機化合物を意味する。
		b	乳化剤、分散剤	乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。
		z	その他	

2

1

図表 Ⅳ-５１　用途分類解説資料（９）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
115	塗料又はコーティング剤			コーティング剤は、材料を空気、水、薬品などから保護（耐食、耐熱、耐摩耗）するために遮断し、又は電気絶縁性、装飾などの機能を付与するために、吹付け、押出、塗装などによって材料表面を覆うものをいう。ただし、製品に含まれないもの（加工助剤等）は該当しない。 塗料は、コーティング剤の一種（着色剤（顔料）を含むコーティング剤）で、溶剤を含まない粉体塗料と溶剤を含む溶剤塗料があり、後者は溶剤の揮発・乾燥によって固化・密着し、表面に塗膜を形成して保護するもの（造膜タイプ）、あるいは粘度が低く材料の内部に浸透し、材料そのものの劣化を防ぎ着色するもの（浸透タイプ）等があるが、造膜タイプは#115、浸透タイプは#144-a、#144-d又は#144-eを選択する。塗料の構成成分としては、塗膜になる成分には、主要素（樹脂、セルロース、乾性油等）、副要素=添加剤(平滑剤、可塑剤、増粘剤、乳化剤、乾燥剤等)及び着色剤（顔料等）があり、塗膜にならない成分に溶剤（#102）がある。（主要素＋副要素＋溶剤）を展色材（ビヒクル）と言う。 プライマーは、コーティング剤又は塗料と下地との間に塗られ、特別な機能を発揮する材料で、コーティング剤や塗料と下地の接着力を向上させるものを接着プライマーといい、その他に防錆、導電性、絶縁性、弾性、粘着性、浸透性などの機能を有するプライマーがある。 補修用パテには、塗料(#115)とシーリング材（#123)がある。 パテ(putty)とは、下地のくぼみ、割れ、穴等の欠陥を埋めて、塗装系の平らさを向上させるために用いられる肉盛り用の塗料。自動車などの塗装において下地を平滑にさせるために用いられる塗料「サーフェイサー」もパテの一種である。 また、コーティング剤に相当する詳細用途を有する他の用途が設定されている場合には、#115とはせず、当該用途を優先して選択する。すなわち、ワックス（#114）、船底塗料用・漁網用防汚剤（#117）、繊維処理剤（#125）、紙・パルプ薬品（#126）、プラスチック・プラスチック添加剤（#127）、合成ゴム・ゴム用添加剤（#128,）、皮革処理剤（#129）、ガラス・ほうろう・セメント（#130）、陶磁器・耐火物・ファインセラミックス（#131）、溶接材料・ろう接材料（#135）、電気・電子材料（#138）は、それらが表面コーティングのために用いられる場合であっても、コーティング剤（#115）とはせず、それぞれ該当する用途番号を選択する。
		a	塗料用樹脂、コーティング剤用樹脂	塗料用樹脂、コーティング剤用樹脂は、塗料又はコーティング剤の基本材料として用いられる薬剤で、化審法上の高分子化合物に該当するもの。バインダー（塗料やコーティング剤の塗膜強度を向上させるために用いられる薬剤で、顔料と結合（bind)し、膜を形成するビヒクルの不揮発性部分）とも呼ばれる。 なお、これらの樹脂の重合原料（モノマー）は#101-aを選択する。
		b	着色剤（染料、顔料、光輝剤）	着色剤の用語の定義は、#111を参照。 光輝剤は、塗料やコーティング剤に、透明感や高彩度のある光輝感を持たせるために用いられる薬剤。
		c	バインダー成分前駆体（熱・光硬化塗料のモノマー・オリゴマー・プレポリマー等）	熱・光硬化塗料の有機又は無機のモノマー・オリゴマー・プレポリマー等は、熱、光（紫外線）あるいは電子線等のエネルギーを与えることで反応が進み、塗料やコーティング剤を硬化させるために用いられる薬剤で、化審法上の高分子化合物に該当しないもの。高分子化合物に該当するものは、#115-aを選択する。バインダー成分前駆体は、塗料やコーティング剤の塗膜強度を向上させるために用いられる薬剤で、反応して、膜を形成するビヒクルの不揮発性部分となるもの。なお、酸化重合して塗膜成分となるオレイン酸や亜麻仁油等の乾性油や半乾性油もここに含まれる。ただし、不乾性油は#115-h（非反応消滅）を選択する。また、反応性希釈剤もここに該当する。
		d	架橋剤、硬化剤、増感剤、重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤	架橋剤は、重合体の主鎖間に分子間共有結合又はイオン結合を促進し、又は調節するために用いられる薬剤。 硬化剤は、架橋反応に加わることによって樹脂等の硬化反応を促進し、又は調節するために用いられる薬剤。 増感剤は、自ら光や電磁波を吸収して、そのエネルギーをモノマー・オリゴマー・プレポリマーに渡すことで、硬化を促進する薬剤。 重合開始剤の用語の定義は、#101-bを参照。 光酸発生剤は、光を吸収する発色団と分解後に酸となる酸前駆体により構成され、特定波長の光照射により酸が発生する薬剤で、光硬化型樹脂の感光剤として用いられる。 光塩基発生剤は、光酸発生剤と同様のメカニズムで、特定波長の光照射により塩基が発生する薬剤で、光硬化型樹脂の感光剤として用いられる。金属材料の腐食を引き起こさないという特長がある。
		e	可塑剤、充填剤	可塑剤は、塗面に伸び・タフネス・柔軟性を与えて塗膜の性能を向上させる目的で、塗料を作るときに加える薬剤。塗膜形成要素と相容性のある不揮発性又は難揮発性の液体又は固体の薬剤。 充填剤は、作業性、耐久性などの性質を改質もしくは改善させるために添加する化学的に不活性な薬剤。

2

1

図表 Ⅳ-５２　用途分類解説資料（１０）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		f	安定化剤（酸化防止剤等）	安定化剤は、以下の薬剤等の総称。 酸化防止剤は、酸化による塗膜の老化を防ぐために用いられる薬剤。 耐熱安定剤とは、熱エネルギーによる物性の劣化や変色を抑える薬剤。 紫外線吸収剤とは、#113-dの用語の定義を参照。 光安定剤とは、ラジカル捕捉作用があり、光成分で起こる物性の劣化を抑制する薬剤。主なものとしてヒンダードアミン系光安定剤がある。 ゲル化防止剤とは、反応が進行して増粘（ゲル化）するのを防止するために用いられる薬剤。
		g	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤、導電性改良剤	皮張り防止剤は、塗料が容器の中で空気との接触面に皮を作る性質を取り除くもしくは防止するために添加する薬剤。 増粘剤は、塗料溶液・分散液の粘度を増加させる薬剤。 消泡剤は、破泡剤や抑泡剤の総称。発泡を抑えることを目的とし、泡膜の表面を部分的に不均衡な状態にし、泡を不安定化させる薬剤。 ブロッキング防止剤は、製造や貯蔵、使用のときにくっつき合うのを防止するための薬剤。 平滑剤は、塗布した後に、塗料が流動して平らで滑らかな塗膜を形成するようにする薬剤。 導電性改良剤は、塗料等に帯電防止機能を付与するために用いられる薬剤。導電性塗料には帯電防止用（#115-g）、導電用（#138-a）、電磁波シールド用（#138-e）などの用途がある。 なお、自動車補修用塗料などで塗膜表面を研磨する際の作業性を向上させるために、塗膜に微粒子を含有させる研磨性付与剤もここに含まれる。
		h	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、表面調整剤、造膜助剤	乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。 例えば、製造プロセス（乳化重合、分散重合等）に用いられる乳化剤、分散剤もここに該当するが、出荷する重合体に乳化剤が含まれるか否かによって用途分類が異なる。 ①出荷重合体がエマルジョンから凝固（乳化剤を分離）された形で出荷される場合は、乳化剤の用途は#110-c。 ②乳化剤が分離されず、出荷重合体に含まれて出荷される場合は、重合体出荷先における重合体の用途における分散剤に該当。例えば、出荷重合体が塗料に使用される場合は#115-hに該当。また、出荷重合体が、その他の具体的な用途（例えば、ゴム（＃128）、プラスチック（＃127）、繊維処理剤（＃125）、紙・パ（＃126）等）に使用されることが分かっている場合は、その具体的用途を選択します。 なお、重合体出荷先における用途が不明の場合は、#110-cを選択。 なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶剤添加剤（溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）もここに該当する。 沈降防止剤(顔料などの沈澱を防止するために用いられる薬剤)、揺変剤（チキソ性付与剤）もここに該当する。 揺変剤（チキソ性付与剤）とは、タレ止剤・沈降防止剤として使用され、例として、水素添加ヒマシ油（不飽和結合が水添されているので不乾性油になっている）、植物油重合油系（同左）、界面活性剤系、等がある。 濡れ剤は、塗装時に被塗物への濡れ性を向上させる薬剤。 浸透剤は、塗料などが固体組織内部に入りやすくするための薬剤で、浸透性耐蝕塗料（コンクリート、モルタル、各種新屋根材、窯業系サイディングボードなどの下塗りおよび各種旧塗膜の塗り替え用下塗り）等に使用される。 表面調整剤は、より均一で微細な皮膜を形成させるために用いられる薬剤。 造膜助剤は、樹脂塗料等が、水分が蒸発し塗膜を形成する過程で必要な薬剤。
		i	腐食防止剤、防錆剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤	腐食防止剤は、塗膜表面に保護膜を形成し、腐食性物質に侵されるのを防止するために用いられる薬剤。 防錆剤は、塗布してさびの発生を抑える薬剤。 防腐剤は、材料の菌害を防止するために用いられる薬剤。 防かび剤は、真菌類などの防かび作用により材料の変質や劣化を防ぐために用いられる薬剤。 抗菌剤は、細菌の増殖を抑制する効果を持つ薬剤。

2

1

図表 Ⅳ-５３　用途分類解説資料（１１）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
	（プライマーを含む。）[#114,117,125-131,135,138を除く]	j	乾燥促進剤、湿潤剤、難燃剤、撥水剤	乾燥促進剤は、塗布膜における酸化重合反応による乾燥を促進させる目的で使用する薬剤。 湿潤剤は、対象物の表面での湿潤作用を促進させる薬剤。 難燃剤は、材料の燃焼を抑え、弱め若しくは遅らせるために使用する薬剤。 撥水剤は、対象物表面に水をはじく性質を与える薬剤。
		z	その他	
116	インキ又は複写用薬剤			インキは、主剤としての「顔料・染料」と「ワニス（ビヒクル）」そして「添加物（補助剤）」の3つの要素から成る。 ワニス（ビヒクル）とは、樹脂などを溶剤に溶かして作った塗料の総称で、塗料の中で、顔料・染料を分散させている液状の成分。なお、紫外線・電子線硬化型のインキはここに該当するが、電子材料等や印刷版の加工に用いられるレジストインキ（光硬化型、熱硬化型）は、#124を選択する。 複写用薬剤は、上記のようなインキを用いない電子写真、感圧・感熱複写、ジアゾ式複写などで用いられる薬剤。 なお、インキに相当する主たる薬剤として、電子写真ではトナーとキャリアからなる現像剤、感圧・感熱複写では感熱色素および感圧色素と顕色剤、ジアゾ式複写ではジアゾ化合物が用いられる。 ただし、溶剤は、#102を選択する。 クレヨン、絵の具等の筆記用具も該当する。
		a	インキ用樹脂、トナー用樹脂	インキ、トナー等の基本材料として使用される薬剤の内、化審法上の高分子化合物に該当するもの。 トナーとは帯電性を持った樹脂粒子に黒鉛・顔料等の色粒子を付着させた微粒子。 なお、これらの樹脂の重合原料（モノマー）は#101-aを選択する。
		b	着色剤（染料、顔料、色素）、感熱色素、感圧色素、蛍光増白剤、顕色剤	着色剤（染料、顔料、色素）の用語の定義は、#111を参照。 感圧色素は、酸化還元に伴って色調が変化する色素で、圧力によって顕色剤と反応して発色するロイコ染料（発色剤）。 感熱色素は、酸化還元に伴って色調が変化する色素で、熱によって顕色剤と反応して発色するロイコ染料（発色剤）。 顕色剤は、ロイコ染料（電子供与性前駆体，発色剤）を発色させるための電子受容性化合物の総称。 蛍光増白剤は、近紫外部の光を吸収し、紫青又は青の蛍光を発する薬剤で、白色インキに応用される。また、蛍光インキに使用される蛍光剤（蛍光色素）もここに該当する。
		c	紫外線・電子線硬化インキのモノマー・オリゴマー・プレポリマー、増感剤、重合開始剤	紫外線（電子線）硬化インキのモノマー・オリゴマー・プレポリマーは、紫外線（電子線）の照射により、瞬間的に硬化し皮膜を形成し、紫外線硬化型のインキのビヒクルの構成成分となるもの。 増感剤は、照射されたエネルギーを吸収し重合開始剤等への電子移動又はエネルギー移動により反応を開始させるために用いられる薬剤で、光重合開始剤と組み合わせて用いられる。 なお、空気中の酸素と反応して硬化し被膜を形成する乾性油などのインキ用加工油（半乾性油も含まれる）もここに該当する。ただし、インキ用鉱油（マシン油、スピンドル油等）は、#136-aを選択する。また、反応性希釈剤はここに該当する。
		d	可塑剤、充填剤	用語の定義は、#115-eを参照。
		e	安定化剤（酸化防止剤等）	用語の定義は、#115-fを参照。
		f	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤	用語の定義は、#115-gを参照。
		g	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、造膜助剤	乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶媒添加剤（溶解補助剤、可溶化剤など）もここに該当する。 沈降防止剤(顔料などの沈澱を防止するために用いられる薬剤）、揺変剤（チキソ性付与剤）もここに該当する。 濡れ剤、浸透剤、造膜助剤及び揺変剤（チキソ性付与剤）の用語の定義は、#115-hを参照。
		h	電荷制御剤、流動性付与剤、研磨性付与剤、滑り性付与剤	電荷制御剤は、キャリアとの接触・摩擦によって帯電するトナーの極性と帯電量を制御するために添加する薬剤。 なお、磁性体粉であるキャリアもここに該当する。 流動性付与剤は、インキやトナー等の粘度を下げて流動性を付与する薬剤。 研磨性付与剤は、感光ドラムのクリーニングのために使用される薬剤。 滑り性付与剤は、感光ドラムの表面上又は表面層中に用いられて滑り性を維持してクリーニング性能を向上させる薬剤。

2

1

図表 Ⅳ-５４　用途分類解説資料（１２）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
	（レジストインキを除く。）	i	乾燥促進剤、湿潤剤	用語の定義は、#115-jを参照。
		z	その他	
117	船底塗料用防汚剤又は漁網用防汚剤			船底や魚網の表面に有害な生物が付着するのを防ぐために用いられる殺生物剤（#118を参照）。 船底塗料は、船底の腐食防止・生物付着防止・生物侵入防止などに用いる塗料。
		a	防汚剤用樹脂[添加剤も含む]	防汚剤用樹脂は、表面に有害な生物が付着するのを防ぐ防汚塗料の塗膜成分。主として船底塗料や漁網の塗膜として用いられ、セルプラ、ふじつぼ、海藻、群体などの付着防止や汚れ止め等の性質を持つ。防汚剤が樹脂から染み出るタイプ、樹脂が加水分解して防汚剤を溶出させるタイプおよび防汚剤を用いない撥水性塗料（シリコーン系等）がある。なお、ここでは防汚剤以外の樹脂、添加剤（顔料等）も含まれる。 セルプラとは、ヒトエカンザシゴカイ（環形動物門多毛綱カンザシゴカイ科に属する海産動物）の属名。 群体とは、無性生殖によって増殖した多数の個体がくっついたままで、一つの個体のような状態になっているもののこと（主として動物および藻類に対して使われる）。
		b	船底塗料用防汚剤	船底塗料用防汚剤は、船舶等に塗膜され、海洋生物を長期間付着させない性質と均一な自己研磨性を持つ薬剤。 自己研磨性とは、塗料自身が少しずつ溶け、同時に水棲生物が嫌う成分である防汚剤も溶けていくことで、有害な生物の付着を防ぐ性質。
		c	漁網用防汚剤	漁網防汚剤は、漁業や水産養殖業で定置網や養殖場で用いられる網に塗布され、#117-bと同様の性質を持つ薬剤。染色のようにタンク中で網を薬剤につけ込んだ後、溶剤を蒸発させて塗布する。
		z	その他	
118	殺生物剤 （成形品に含まれるものに限る。） [#115,117,123,125,136,137を除く]			殺生物剤は、有害生物の働きを無害化するために用いられる農薬、医薬以外の薬剤すべてが該当する。抗菌剤、消毒剤、防腐剤、防汚剤、忌避剤など幅広い用途の薬剤が対象となり、添加剤や助剤も含まれる。ただし、#118～120においては、薬機法の適用対象である衛生害虫用の殺虫剤や殺菌・消毒剤に関係する用途は除外する。成形品には、木材・木製品、プラスチック製品、ガラス製品、陶磁器製品、金属製品などが該当する。 ただし、これらの薬剤が塗料(#115)、船底塗料用・漁網用防汚剤(#117)、接着剤(#123)、合成繊維(#125)、作動油・絶縁油・潤滑油(#136)又は金属加工油(#137)の添加剤として用いられる場合は、それぞれ該当する用途番号を選択する。また、これらの薬剤の溶剤は、#102-fを選択する。
		a	殺菌剤、殺虫剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤（細菌増殖抑制剤、木材の防腐剤、防蟻剤）	殺菌剤は、バクテリア、かびなどの菌類の繁殖を防止し、死滅させる薬剤。 殺虫剤は、有害な害虫（昆虫を含む動物）を殺す（駆除する）ために用いられる薬剤。 防腐剤は、微生物の侵入・発育・増殖を防止して、腐敗・発酵が起こらないようにする「静菌作用」を目的として使われる薬剤で、持続的に働くことが求められる。 防かび剤は、かび（真菌類や放線菌類等）の繁殖を防止する作用のある薬剤。抗菌剤は、細菌の増殖を抑制する作用のある薬剤。 木材の防腐及び防蟻剤は、木材の腐朽、虫害などの生物劣化を防止するために用いられる薬剤。木材保存剤ともいう。ただし、木材保存剤のうち、木材防火剤は、#144-dを選択する。
		b	展着剤、乳化剤、分散剤	展着剤は、植物の茎、葉や病害虫に化学物質を均一に付着させ、その効果を十分に発揮させるために乳剤、水和剤又は液剤の希釈液に添加する補助薬剤。 乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶剤添加剤（溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）もここに該当する。
		z	その他	

2

1

図表 Ⅳ-５５　用途分類解説資料（１３）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
119	殺生物剤（工業用のものであって、成形品に含まれるものを除く。） [#126,140を除く]			殺生物剤の用語の定義は、#118を参照。ただし、これらの薬剤が紙・パルプ薬品（#126-i）及び水処理剤（#140-a）の添加剤として用いられる場合は、それぞれ該当する用途番号を選択する。また、これらの薬剤の溶剤は、#102-fを選択する。 （工業用）とは、工業的な生産活動に伴って消費される用途で、ここでは、工業製品を殺菌、滅菌等をする際や、反応装置等を殺菌、滅菌等をする際などの用途が該当する。ただし、成形品を抗菌するなどの目的に用いる殺生物剤は、#118を選択する。
		a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）	病気を媒介する可能性のある虫のことを「衛生害虫」といい、蚊、ハエ、ゴキブリ、ノミ、ダニ類などを指す。衛生害虫以外の害虫で、生活の中で人を不快にさせる虫のことを「不快害虫」という。その範囲は広くクロアリ、ハチ、ブユ、ユスリカ、ケムシ、ムカデ、クモなどがその対象となる。ただし、不快害虫用殺虫剤の中でも、衣類の害虫用は、#120-b、木材の害虫用は、#118-a又は#120-cをそれぞれ選択する。ただし、衛生害虫用殺虫剤は化審法対象外である。 害虫駆除剤は、人間などにとって有害な作用をもたらす虫などを駆除する薬剤。主に殺虫剤、殺菌剤がある。 誘引剤は、害虫を誘引する物質を化学的に合成したもの。 共力剤は、それ自体は殺虫力が全く無いか又は小さいが、殺虫剤と混合して用いた場合、その殺虫力を強める働きをする薬剤。
		b	ガス滅菌剤、燻蒸剤、燻煙剤	ガス滅菌剤は、加熱によって変形しやすい物品などにガスを用いて殺菌するために用いられる薬剤。 燻蒸剤または燻煙剤は、倉庫、サイロ、船舶内等で化学物質の有効成分を加熱、煙霧化または気化して使用する薬剤。
		c	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、抗菌剤	殺菌剤は、菌を殺すことを目的とした薬剤で、殺す対象や程度を含まないため、一割の菌を殺して九割が残っている状態でも「殺菌した」ということは可能である。なお、滅菌（あるいは消毒）したという場合は、その後の微生物の混入や増殖がない限り、あるレベル以下の微生物しか存在しない（あるいは食べても発病しない）ことを示す。 消毒剤は、対象物の病原性のある微生物やウイルスを、それを使用しても害のない程度まで減らす薬剤。なお、消毒の手段として殺菌が行われることもあるが、殺菌せずに病原性を消失させることにより消毒が達成されることもある。 防腐剤、抗菌剤の用語の定義は、#118-aを参照。ただし、紙・パルプ薬品として用いられるスライムコントロール剤は#126-iを、水処理剤として用いられる防藻剤やスライム防止剤は#140-a（≪工業用途≫に限る）、家庭用・業務用で使用する殺菌剤については#120-d、をそれぞれ選択する。
		d	展着剤、乳化剤、分散剤	展着剤の用語の定義は、#118-bを参照。 乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶剤添加剤（溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）もここに該当する。
		z	その他	
120	殺生物剤 （家庭用又は業務用のものに限る。）			殺生物剤の用語の定義は、#118を参照。また、これらの薬剤の溶剤は、#102-fを選択する。 （家庭用又は業務用）とは、一般消費者個人によって消費される場合や、業務用としてオフィスビル、公園の清掃など工業的な生産活動に直接関係なく消費される用途で、ここでは、そのような用途で害虫を駆除する場合などが該当する。
		a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）	用語の定義は、#119-aを参照。
		b	繊維用・紙用防虫剤	繊維製品や紙製品に有害な作用をもたらす虫などを駆除するために用いられる薬剤。
		c	シロアリ駆除剤、防蟻剤	シロアリ駆除剤、防蟻剤は、薬品の塗布など、住宅の土台や構造材にシロアリなどの被害を防ぐために用いられる薬剤。その処置は、一般に「防蟻処理」あるいは「防蟻対策」などと呼ばれる。アリを駆除する殺虫剤(駆除剤)のほかに、アリを寄せ付けない忌避剤もある。
		d	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤、除菌剤	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤の用語の定義は、#118-a及び#119-cを参照。 除菌剤は、対象物から洗浄等によって微生物を排除する薬剤。なお、「殺菌」や「消毒」の効果を有することもある。
		e	非農耕地用除草剤	非農耕地用除草剤は、公園、庭園、駐車場、道路、運動場、宅地などで用いられる除草剤。
		f	展着剤、乳化剤、分散剤	展着剤の用語の定義は、#118-bを参照。 乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶剤添加剤（溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）もここに該当する。
		z	その他	

2

1

図表 Ⅳ-５６　用途分類解説資料（１４）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
121	火薬類、化学発泡剤又は固形燃料			使用時に反応して、その時の発生ガスの圧力または発生熱（#147を除く）を利用することによって機能を発揮する薬剤が該当する。 火薬類は、利用価値のある爆発物で火薬、爆薬及び火工品に分けられる。火薬類の製造、販売、貯蔵、運搬、消費、その他の取扱いは火薬類取締法で規制されている。 化学発泡剤は、材料を発泡させる発泡剤（化学発泡剤と物理発泡剤（#108-b参照）に分類される）の一種。 固形燃料は、人工的に固形化した固体燃料で、天然のものは該当しない。
		a	火薬、爆薬、火工品[#121-bを除く]、煙火	火薬は、火薬類のうち燃焼反応を利用する薬剤とその添加剤で爆薬に対する用語。広く火薬類の同義語として用いられることもある。 爆薬は、火薬類のうち爆轟（ばくごう）反応を利用する薬剤とその添加剤で火薬に対する用語。 火工品は、火薬又は爆薬を使用目的に応じて加工したもの。 煙火は、火薬の燃焼、爆発などに際して発生する光、音又は煙の現象を利用し、鑑賞、娯楽、信号、救難、模擬、試験などの目的に使用するように作られた火工品。 爆轟（ばくごう）とは、気体の急速な熱膨張の速度が音速を超え衝撃波を伴いながら燃焼する現象。
		b	自動車安全部品用ガス発生剤	自動車安全部品用ガス発生剤は、エアバッグやシートベルトプリテンショナーを膨張させるインフレータに使用するガス発生薬剤とその添加剤。 プリテンショナーとは、自動車の衝突時にシートベルトの帯(ウェビング)のたるみを巻き取る装置のこと。 インフレーターとは、バッグを膨らますためのガスを発生する装置。
		c	化学発泡剤	化学発泡剤は、熱分解や化学反応によって発生したガスによって材料（樹脂、セラミックス、コンクリート等）を発泡させる薬剤。
		d	固形燃料	固形燃料は、燃焼・消失して熱エネルギーを発生する人工的に固形化した薬剤。ロケット用の固形燃料も、ここに該当する。ろうそく等も含まれる。 ただし、燃料用途ではない、ろうそく（例えば模型用等）は#114-aを選択する。また、本詳細用途の薬剤と別の運命の添加剤は、各々の用途分類を選択する。たとえばアロマキャンドルの香料のように、ろうと一緒に焼失せず、揮発する香料（添加剤）は#122-eを選択する。
		z	その他	
122	芳香剤又は消臭剤			芳香剤、消臭剤は、香気を製品又は空間に付与するために用いられる薬剤と臭気を除去・緩和するために用いられる薬剤の総称。 ただし、吸着による消臭・脱臭は#141を、燃料に用いられる着臭剤は#147を、洗浄剤用香料は#113を選択する。
		（廃止）	（廃止）	
		b	芳香剤	芳香剤は、室内、自動車内、トイレ等の空間に芳香を付与するために用いられる薬剤。#122-dおよび#122-e以外の芳香剤を構成する成分が該当する。
		c	消臭剤	消臭剤は、臭気を化学的作用又は感覚的作用等で除去又は緩和する薬剤。#122-dおよび#122-e以外の消臭剤を構成する成分が該当する。 添加して臭気の発生や発散を防ぐために用いられる防臭剤を含む。
		d	乳化剤、分散剤	乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶剤添加剤（溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）もここに該当する。 また、保留剤用の有機溶剤を含む。 保留剤とは、香料調合の際及び香料使用時に成分の揮発性を落とし，香調等のバランスをくずさぬようにする助剤。 保留剤としては，沸点が高く，分子量は小さいものが用いられる。
		e	香料[#113-e及び#122-b,cを除く]	香料は、香気を有する薬剤のことで、ここでは、水系洗浄剤（#113）および芳香剤・消臭剤(#122-b,c)以外で用いられる香料が該当する。例えば、プラスチックやゴム製品、たばこ等の香気付けに用いられる香料などがある。

2

1

図表 Ⅳ-５７　用途分類解説資料（１５）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
				なお、酵素処理を経た天然香料は化審法上の化学物質に該当するが、化粧品など薬機法対象の香料、フレーバーと呼ばれる食品香料など食品衛生法対象の香料は、化審法の適用除外であるため製造数量等の届出は必要ない。
	[洗浄剤用香料は#113]	z	その他	
123	接着剤、粘着剤又はシーリング材			接着剤は、物体の間に介在することによって物体を結合することができる薬剤。なお、重合接着に用いる薬剤は#123に該当するが、溶剤接着に用いる溶剤は#103-cを選択する。 粘着剤は、常温で粘着性を有し軽い圧力で被着材に接着する薬剤。 シーリング材は、構造体の目地、間隙部分に充填して防水性、気密性などの機能を発揮させる材料で施工時には粘着性のある不定形材料の総称。接着剤、粘着剤、シーリング材に使用する溶剤は、#103を選択する。
		a	接着剤用樹脂、粘着剤用樹脂、シーリング材用樹脂	接着剤、粘着剤、シーリング材の基本材料として使用される薬剤のうち、化審法上の高分子化合物に該当するもの。
		b	バインダー成分前駆体（モノマー・オリゴマー・プレポリマー等、硬化剤、硬化促進剤、開始剤、カップリング剤）	バインダー成分前駆体は、反応して、接着剤、粘着剤、シーリング材を構成する成分となり、接着、粘着及びシーリングの強さを発揮する主要成分となる。 ここには、モノマー・オリゴマー・プレポリマー等の主剤の他に、主剤と反応して硬化を促進又は調節する硬化剤、少量添加して硬化反応を増大させる硬化促進剤、熱又は光などのエネルギーにより硬化反応を開始させる開始剤、接着剤、粘着剤及びシーリング材と部材との境界面において一層強い結合を促進又は達成するカップリング剤等の添加物も含まれる。また、反応性希釈剤もここに該当する。
		c	可塑剤、充填剤	可塑剤は、接着剤等に配合してガラス転移点や融点を低下させ、可とう性を付与するために用いられる薬剤。 充填剤は、接着剤等の作業性、耐久性、接着強さなどの性質を改良するために添加される薬剤。
		d	安定化剤（老化防止剤等）	安定化剤は、接着剤、粘着剤、シーリング材の熱、光、紫外線及び空気中の酸素などによる劣化現象を防止し、それらの安定度を増すために添加される薬剤。ここには、老化防止剤、酸化防止剤、耐熱安定剤、紫外線吸収剤、光安定剤等が該当する。 老化防止剤は、粘着剤などの老化（時間の経過と共に性能が低下する現象）を防止するために配合する薬剤。 酸化防止剤、耐熱安定剤、紫外線吸収剤、光安定剤とは、#115-fの用語の定義を参照。
		e	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤	皮張り防止剤は、塗料、接着剤等が容器の中で空気との接触面に皮を張るのを防ぐために用いられる添加剤。 増粘剤は、接着剤等に分散又は溶解させて粘度及びちょう度を調節するために配合する薬剤。 消泡剤は、破泡剤、抑泡剤の総称で、特殊な界面活性剤又はシリコーン油が使われる。 ブロッキング防止剤は、製造、貯蔵又は使用の際にくっつき合うのを防止するために配合又は塗布する薬剤。 平滑剤は、接着部の表面に、はけ目・ゆず肌・うねりなどのような微視的な高低を小さく（平滑化）するために配合される薬剤。
		f	表面調整剤、乳化剤、分散剤	表面調整剤は、接着剤、シーラント等の下地への濡れ性を向上させ、良好な接着性、シール性を得るために配合される薬剤。 乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。 例えば、製造プロセス（乳化重合、分散重合等）に用いられる乳化剤、分散剤もここに該当するが、出荷する重合体に乳化剤が含まれるか否かによって用途分類が異なる。 ①出荷重合体がエマルジョンから凝固（乳化剤を分離）された形で出荷される場合は、乳化剤の用途は#110-c。 ②乳化剤が分離されず、出荷重合体に含まれて出荷される場合は、重合体出荷先における重合体の用途における分散剤に該当。例えば、出荷重合体が接着剤に使用される場合は#123-fに該当。また、出荷重合体が、その他の具体的な用途（例えば、ゴム(＃128)、プラスチック(＃127)、塗料(＃115)、繊維処理剤(＃125)、紙・パ(＃126)等）に使用されることが分かっている場合は、その具体的用途を選択します。なお、重合体出荷先における用途が不明の場合は、#110-cを選択。

2

1

図表 Ⅳ-５８　用途分類解説資料（１６）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
				なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶剤添加剤（溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）もここに該当する。
		g	防腐剤、防かび剤、抗菌剤	防腐剤は、接着剤等の腐敗による劣化を防止するために用いられる薬剤。 防かび剤は、かび（真菌）の発生または増殖を防ぎ、あるいは除去するための薬剤。 抗菌剤は、細菌の増殖を抑制するために用いられる薬剤。
		h	難燃剤、導電剤	難燃剤は、接着剤等の燃焼を抑え、弱め若しくは遅らせるための添加剤又は処理剤。 導電剤は、接着剤等に分散させ導電性を付与するために用いられる薬剤。
		z	その他	
124	レジスト材料、写真材料又は印刷版材料			レジスト材料は、主に工業用途（半導体等の電子材料の加工や印刷版の製造など）で使用される、物理的、化学的処理に対する保護膜、及びその形成に使用される物質で、直接必要な部分にのみ印刷するレジストインキも含む。 レジストの種類（光／熱硬化型別）：レジスト膜の生成方法としては、主として感光型と感熱型（熱硬化型）がある。 レジストの種類（用途別）：具体的な用途の分類例としては、フォトレジスト（電子回路製造、印刷版製造など）、スクリーン印刷レジスト、エッチングレジスト、めっきレジスト、ソルダーレジストなどがある。 フォトレジストとは、半導体の微細加工などに利用される感光性でかつ耐食性の薬剤。露光すると感光部が溶剤に可溶になるポジ形と不溶性となるネガ形のレジストがある。感光性物質が溶剤によって取り去られて露出した下地面の部分に選択的なエッチングや不純物の拡散を行うことができる。フォトレジストにはフィルム状のものと液状のものがあり，前者をドライフィルム，後者を液状レジストという。 写真材料は、光、放射線、粒子線などのエネルギーを用いて感光物質上に視覚的に識別でき、かつ、ある期間持続性のある記録された画像（写真）及びその形成、に使用される物質のこと。 印刷版材料は、画像部と非画像部からなり画像部だけに選択的に印刷インキを受理させ、これを紙などの上に転移させて印刷画像を形成するための媒体（印刷板）及びその形成、に使用される物質。
		a	感光性・感電子性樹脂（レジスト、印刷版等）	感光性・感電子性樹脂は、光又は電子線照射によりフォトレジストのように架橋反応や重合反応が起きて分子の構造が変わり、その結果として物性的な変化が生じる薬剤で、化審法上の高分子化合物に該当するもの。樹脂そのものが、非感光性であっても、#124-cの感光性薬剤との組み合わせで、感光性組成物を構成する樹脂も含む。 なお、熱硬化型レジスト樹脂もここに含めるものとする。
		b	感光性・感電子性樹脂のモノマー・オリゴマー・プレポリマー	感光性・感電子性樹脂のモノマー・オリゴマー・プレポリマーは、光又は電子線照射により架橋反応や重合反応を起こし物性的な変化が生じる薬剤で、化審法上の高分子化合物に該当しないもの。なお、反応性希釈剤もここに該当する。
		c	感光剤、光重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤	感光剤は、写真乾板・フィルム・印画紙の表面に塗布して感光膜層を作る写真乳剤に用いられる感光性の薬剤（臭化銀など）。 光重合開始剤は、光を照射することによってフリーラジカルなどを発生させ重合反応を開始させる薬剤。 光酸発生剤、光塩基発生剤の用語の定義は、#115-dを参照。 なお、電子写真感光体は＃138-bを選択する。
		d	色素形成カプラー（カラー写真用）	色素形成カプラーは、カラー写真においてハロゲン化銀の感光性を引き金とした現像主剤とカップリング反応を起こし発色色素を生成させるために用いられる薬剤。イエロー、マゼンタ及びシアンの３種類のカプラーがある。
		e	乳化剤、分散剤	乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶媒添加剤（溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）もここに該当する。
		f	定着剤、安定化剤	定着剤は、現像により生じた可視像を固定化するために用いられる薬剤。 安定化剤は、現像時に残留ハロゲン化銀やジアゾニウム塩等の感光性を除去して、現像した画像を安定化するために用いられる薬剤。

2

1

図表 Ⅳ-５９　用途分類解説資料（１７）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		g	硬化剤、増感剤、減感剤、架橋密度向上剤、重合開始剤、レジスト添加剤	硬化剤の用語の定義は、#115-dを参照。 増感剤は、照射されたエネルギーを吸収し重合開始剤等への電子移動又はエネルギー移動により反応を開始させるために用いられる薬剤。 減感剤は、エネルギー増感反応を弱める（調節する）ために用いられる薬剤。 架橋密度向上剤は、重合物の単位体積又は単位質量あたりの架橋数を増加させるために用いられる薬剤。 重合開始剤は、ここでは光以外の熱、電子線等のエネルギーにより硬化反応を開始させるために用いられる薬剤。 レジスト添加剤は、レジストの均一塗布性、エッチング耐性あるいは作業性の向上などのために添加される薬剤。
		h	現像剤、水溶性処理薬剤、レジスト剥離剤	写真の現像剤は、現像のために用いられる消耗品（トナー、キャリヤ、現像液、スタート現像剤、補充現像剤など）の総称。 水溶性処理薬剤は、写真の現像工程で使用する水溶性の薬剤で、蛍光漂白剤等も該当する。 レジストの現像剤は、光や電子線照射による架橋、分解、重合などにより溶剤への溶解性が変化して耐食性画像を形成させた後、画像形成のために可溶性部分を溶かす際に用いられる薬剤で、一般的には溶剤（#106-a）に溶解して用いられる。 レジスト剥離剤は、リソグラフィー工程で使用され、感光性又は感熱性の物質（レジスト）を塗布したものをパターン状に露光・現像し、エッチング等の加工工程に使用した後、不要なレジストを除去するために用いられる薬剤で、一般的には溶剤（#106-a）に溶解して用いられる。なお、溶剤に該当しない、それ自身がレジストの現像剤（例えばテトラメチルアンモニウムハイドロオキサイド）の場合には＃124-hを選択する。 レジスト残渣除去薬剤もここ（レジスト剥離剤(＃124-h)）を選択する。
		z	その他	
125	合成繊維又は繊維処理剤			合成繊維は、合成高分子化合物から造られる繊維のことで、繊維製品とは紡糸（紡績）、撚糸、織編、染色及び縫製の各工程を経て製造される製品や不織布をいう。なお、無機材料からなる繊維、例えばガラス繊維は#130、炭素繊維、シリコンカーバイド繊維、ロックウール、スラッグ繊維等は#131を選択する。 ①紡糸（紡績）とは、低分子化合物（モノマー）を多数結合（重合）させた合成高分子を液体にして紡糸口金（ノズル）から押し出し繊維にすることで、紡糸方法には溶融紡糸、乾式紡糸、湿式紡糸、ゲル紡糸及び液晶紡糸等がある。②撚糸とは、長繊維糸（フィラメント糸）や紡績糸（スパン糸）に撚（よ）りをかけること。③織編とは、糸を縦と横に組み合わせ一定の規則によって交錯し平面上に仕上げる製織／編目を経方向又は緯方向に連続して布を形成する製編のこと。④染色とは、繊維材料に化学的・物理的加工を施して色や模様、機能性や感性を付与し全体の商品価値を高めることで、染色加工には準備、染色、仕上の各工程がある。⑤縫製とは、１枚又は複数枚の布を針と糸でかがったり、縫い合わせて製品を作ることで、糸と針を用いられること以外に接着、溶着などの方法もある。 繊維処理剤は、各種繊維製品の加工・処理工程で用いられる添加剤、加工助剤の薬剤のことで、天然繊維に用いられる加工・処理薬剤も該当する。 なお、繊維処理剤の溶剤については、その繊維処理操作と機能が類似する用途が設定されている場合は、その用途を選択する。例えば、コーティングする薬剤の溶剤は#102-d、洗浄剤の溶剤は#106-z、紡糸用溶剤は#107-b、および繊維樹脂内部に薬剤を含ませるために用いる溶剤は#107-d、等を選択する。
		a	成形品基材(合成繊維、不織布)	成形品基材は、ここでは合成繊維又は不織布の成形品の基本材料として使用される薬剤で、化審法上の高分子化合物に該当するもの。
		b	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	着色剤（染料、顔料）の用語の定義は、#111を参照。蛍光増白剤の用語の定義は＃111-bを参照。
		c	集束剤	集束剤は、繊維の紡糸工程でフィラメントを集束してストランドにするとき、結束性を与えて次工程の作業性を高めるために用いられる薬剤、ヤーン系及びロービング系の集束剤がある。

2

1

図表 Ⅳ-６０　用途分類解説資料（１８）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		d	防炎剤、難燃剤	防炎剤は、材料が燃え広がるのを防ぐための添加又は処理薬剤。 難燃剤の用語の定義は、#123-hを参照。
		e	含浸補強剤、染料固着剤（フィックス剤）	含浸補強剤は、繊維に含浸させ機械的強度を増加させるために用いられる薬剤。 染料固着剤は、染料、媒染剤などを繊維に固定するのに用いられる薬剤。
		f	帯電防止剤、親水加工剤	帯電防止剤は、電荷の蓄積を防止する目的で材料に少量添加又はその表面に塗布して用いられる薬剤。 親水加工剤は、ここでは疎水性の繊維に親水性を付与するために用いられる薬剤。
		g	柔軟仕上げ剤	柔軟仕上げ剤は、織物などの感触を柔らかく仕上げるために用いられる薬剤。
		h	形態安定加工剤	形態安定加工剤は、セルロース、セルロース／ポリエステル混紡などの織物、縫製品において、洗濯後の防しわ性、防縮性等の形態安定性を付与するために用いられる薬剤。
		i	撥水剤、撥油剤、防水加工剤、防汚加工剤	撥水剤は、繊維などの表面に水をはじく性質を与えるために用いられる薬剤。 撥油剤は、繊維などの表面に油をはじく性質を付与するために用いられる薬剤で、主に有機フッ素化合物が用いられる。 防水加工剤は、織物などに水を通しにくくするための加工の際に使用される薬剤。 防汚加工剤は、繊維品を汚れにくくするか又は汚れを落ちやすくための加工の際に使用される薬剤。 高吸放湿性加工剤を含む。
		j	抗菌剤、変色防止剤、紫外線吸収剤	抗菌剤は、繊維の細菌の増殖を抑制する働きのある薬剤。 変色防止剤は、繊維の色の色相・彩度・明度のどれか一つ又は一つ以上が変化することを防ぐために用いられる薬剤。 紫外線吸収剤の用語の定義は、#113-dを参照。 酸化防止剤(用語の定義は、#115-fを参照)を含む。
		k	紡糸・紡績・織編油剤、紡糸・紡績・織編油助剤	紡糸・紡績・織編油剤は、紡糸・紡績・織編工程で糸の潤滑性、静電気防止性及び均一延伸性、繊維・織物の金属との摩擦低減性、静電気防止性を与えるために用いられる薬剤。 紡糸・紡績・織編油助剤は、紡糸・紡績・織編油剤の機能を高めるために添加される助剤。 なお、紡糸用溶剤（防止液用及び凝固液用）は#107-bを選択するが、それらの溶剤への添加剤（溶剤以外のもの）はここに該当する。
		l	洗浄剤、精練洗浄剤（ソーピング剤）、潤滑剤	洗浄剤は、ここでは繊維等の清浄のために用いられる水系洗浄剤に配合される薬剤。ただし、製造機械、装置等の清浄のために用いられる水系洗浄剤に配合される薬剤は、＃112を選択する。なお、非水系および準水系洗浄剤は#106-zを選択する。 精練洗浄剤は、繊維及び繊維製品に付着している天然不純物、加工剤、汚れなどを取り除いて、清浄な状態にするために用いられる薬剤。 潤滑剤は、ここでは機織りの際に繊維の滑りを良くするために用いられる薬剤。無色で粘度の低いスピンドル油のようなものが使用される。
		m	キレート剤	キレート剤は、キレート結合によって金属イオンを封鎖し、金属イオンの活性を抑制するために用いられる薬剤。
		n	漂白剤、抜染剤	漂白剤は、酸化又は還元反応によって有色物を漂白するために用いられる薬剤。繊維製品製造時の漂白剤はここに該当するが、繊維製品（衣類やリネン）使用時の漂白剤は、＃112-b/＃113-cを選択する。 抜染剤は、あらかじめ地染めされた糸、布に捺染のりを印捺して、その部分の地色を脱色するために用いられる薬剤。
		o	均染剤、浸透剤、促染剤（染色助剤）、媒染剤、捺染用糊剤	均染剤は、繊維を均一に染色するために用いられる薬剤。 浸透剤は、染料や薬剤等の浸透性を助長し染色ムラの防止や作業性の向上の他、綿などにシルケット加工（絹様光沢加工）と呼ばれるアルカリ処理をする際のアルカリの浸透性を高めるために用いられる薬剤。 促染剤は、染色の際、染着を促進するために用いられる染色助剤のことで、酢酸、蟻酸等が該当する。 媒染剤は、染色を助けるために用いられる薬剤。染料が直接繊維に染着しないとき、あらかじめ繊維に適当な金属化合物の水溶液をしみ込ませておくと、その金属イオンと染料分子が繊維上で結合して水に溶けない色素に変わり丈夫な染色が得られる。 捺染用糊剤は、染料を布などに直接すり付けて染色する際や型紙を用いて染料をすり込み模様を表す際に、染料に混ぜて使用される糊剤。

2

1

図表 Ⅳ-６１　用途分類解説資料（１９）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		p	乳化剤、分散剤、消泡剤	乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。 例えば、製造プロセス（乳化重合、分散重合等）に用いられる乳化剤、分散剤もここに該当するが、出荷する重合体に乳化剤が含まれるか否かによって用途分類が異なる。 ①出荷重合体がエマルジョンから凝固（乳化剤を分離）された形で出荷される場合は、乳化剤の用途は#110-c。 ②乳化剤が分離されず、出荷重合体に含まれて出荷される場合は、重合体出荷先における重合体の用途における分散剤に該当。例えば、出荷重合体が繊維処理剤に使用される場合は#125-pに該当。また、出荷重合体が、その他の具体的な用途（例えば、ゴム(#128)、プラスチック(#127)、塗料(,#115)、接着剤(#123)、紙・パ(#126)等）に使用されることが分かっている場合は、その具体的用途を選択します。重合体出荷先における用途が不明の場合は、#110-cを選択。 なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶剤添加剤（溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）もここに該当する。 消泡剤は、破泡剤、抑泡剤の総称で、特殊な界面活性剤又はシリコーン油等が用いられる。
		q	マーセル化助剤	マーセル化助剤は、繊維のマーセル化（絹様の光沢を付与する加工）の際に、濃厚なアルカリ液が繊維に均一に浸透するのを促進するために用いられる薬剤。
		r	糊抜き剤	糊抜き剤は、精練、染色の前に織物などに付いているのりを除去するために用いられる薬剤。
		z	その他	
126	紙製造用薬品又はパルプ製造用薬品			紙とは、植物繊維その他の繊維をこう着させて製造したものをいい、ここでは素材として合成高分子を用いた合成紙のほか、繊維状無機材料を配合した紙は含まない。 紙製造用薬品は、その紙を製造する際に用いられる薬剤。 ただし、感圧紙、感熱紙に用いられる薬剤は、#116を選択する。 パルプとは、木材その他の植物から機械的又は化学的処理によって抽出したセルロース繊維の集合体。 パルプ製造用薬品は、木材その他の植物からパルプを得る際に用いられる薬剤。
		a	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	着色剤（染料、顔料）の用語の定義は、#111を参照。蛍光増白剤の用語の定義は、#111-bを参照。
		b	サイズ剤、定着剤、填料	サイズ剤は、紙への水の吸収、浸透を遅らせたり防止したりしてインクや絵具などの滲みを抑えるために用いられる薬剤で、酸性及び中性サイズ剤がある。 定着剤は、サイズ剤を紙の繊維に定着させるために用いられる薬剤。 填料は、紙の繊維間の隙間を埋め不透明度、白色度、平滑度、インク吸収性及び柔軟性等、印刷適性を向上させるために用いられる薬剤。
		c	コーティング剤	コーティング剤は、紙器はじめ出版物の表紙などの印刷紙等にコートし、硬化させて皮膜を作ることにより、表面に光沢を与え、より意匠性を高めるとともに、表面を汚れやすり傷等から保護するために用いられる薬剤。
		d	防炎剤、難燃剤、帯電防止剤	防炎剤の用語の定義は、#125-dを参照。 難燃剤の用語の定義は、#123-hを参照。 帯電防止剤の用語の定義は、#125-fを参照。
		e	紙力増強剤、歩留向上剤、固着剤（フィックス剤）、防錆剤	紙力増強剤は、紙に含浸させて機械的強度を増加させるために用いられる薬剤。 歩留向上剤は、ウェットパートにおけるパルプや填料その他の定着を向上させる薬剤。 固着剤は、染料等を紙の繊維に固着させるために用いられる薬剤。 防錆剤は、金属が腐食環境におかれたときに電気化学作用で発生するさびを防止するために、紙に含浸させて用いられる薬剤。
		f	撥水剤、撥油剤、防水加工剤	用語の定義は、#125-iを参照。
		g	嵩高剤、柔軟剤	嵩高剤は、少ないパルプ量でこれまでと同じ厚さの紙を抄紙できるように添加される薬剤で、省資源化の他、不透明度、白色度、クッション性などの紙物性を向上させる働きがある。 柔軟剤は、紙・パルプなどを柔らかくするために用いられる薬剤。
		h	蒸解薬液、pH調節剤	蒸解薬液は、紙の原料となる木材チップを高温高圧下で蒸煮し、パルプ繊維を取り出す際に用いられる薬剤。 pH調節剤は、水、水溶液のpHを調節するために用いられる薬剤(酸、アルカリ)。

2

1

図表 Ⅳ-６２　用途分類解説資料（２０）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		i	スライムコントロール剤（防腐剤）、ピッチコントロール剤	スライムコントロール剤は、製紙工程において発生する微生物をコントロールすることにより、スライムの形成を防ぎ、品質の劣化防止と安定操業を確保するために用いられる薬剤。 ピッチコントロール剤は、製紙工程において、原料の木材に含まれる天然系不純物（ピッチ）や古紙及び損紙由来で混入する接着剤やラテックスなどの合成系不純物（スティッキー）を低減するために用いられる薬剤。
		j	漂白剤、漂白浴安定剤	漂白剤は、酸化又は還元反応によって紙・パルプの有色物を漂白する薬剤。 漂白浴安定剤は、紙・パルプの漂白効果を向上させるために漂白浴に添加して用いられる薬剤。
		k	乳化剤、分散剤、消泡剤、脱墨剤、洗浄剤	乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。 例えば、製造プロセス（乳化重合、分散重合等）に用いられる乳化剤、分散剤もここに該当するが、出荷する重合体に乳化剤が含まれるか否かによって用途分類が異なる。 ①出荷重合体がエマルジョンから凝固（乳化剤を分離）された形で出荷される場合は、乳化剤の用途は#110-c。 ②乳化剤が分離されず、出荷重合体に含まれて出荷される場合は、重合体出荷先における重合体の用途における分散剤に該当。例えば、出荷重合体が紙・パルプ薬品に使用される場合は#126-kに該当。また、出荷重合体が、その他の具体的な用途（例えば、ゴム（＃128,）、プラスチック（＃127）、塗料（＃115）、接着剤（＃123）、繊維処理剤（＃125）等）に使用されることが分かっている場合は、その具体的用途を選択します。重合体出荷先における用途が不明の場合は、#110-cを選択。 なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶剤添加剤（溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）もここに該当する。 消泡剤の用語の定義は、#115-gを参照。 脱墨剤は、古紙からインキなどの不要成分を除去するために使用される薬剤。 洗浄剤は、ここでは紙・パルプの汚れ等の不要成分の除去のために用いられる薬剤。ただし、製造装置の清浄のために用いられる薬剤は＃112を選択する。
		z	その他	
127	プラスチック、プラスチック添加剤又はプラスチック加工助剤			プラスチックは、高分子化合物を主原料として人工的に有用に形作った固体で、合成皮革・人工皮革及び合成紙を含むが、繊維、ゴム、塗料、接着剤などは除く。 プラスチック添加剤は、プラスチックの機能や生産性、安定性等の特性などを向上させるために添加される薬剤。 プラスチック加工助剤は、プラスチックの加工時に、その加工性や作業性を向上させるために用いられる薬剤。 ただし、発泡剤は#108（物理発泡剤）,＃121（化学発泡剤）を選択する。 また、構造材料ではなく、電気・電子材料として用いられるプラスチックは、#138を選択する。 具体的用途（例えば、塗料(＃115-a)、インキ、複写用薬剤（トナー等）(＃116-a)、接着剤(＃123-a)、レジスト材料（＃124-a）、繊維処理剤(＃125-a)、ゴム(＃128-a)、等）が使用されることが分かっている場合には、#127とはせず、当該用途を優先して選択する。 着色剤は#111を選択する。
		a	成形品基材(プラスチック、合成皮革・人工皮革、合成紙、発泡体)	成形品基材は、プラスチック、合成皮革・人工皮革、合成紙又は発泡体成形品の基本材料として使用される薬剤で、化審法上の高分子化合物に該当するもの。 造形材料（Mw>1000)を含む。
		b	高吸水性材料	高吸水性材料は、自重の数百倍以上の水を吸収し、それを保持して含水高分子ゲルとなることができる薬剤で、化審法上の高分子化合物に該当するもの。
		c	可塑剤、乳化剤、分散剤	可塑剤は、プラスチックに添加して塑性柔軟性、加工性を改良するために用いられる薬剤。 乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。分散剤は、樹脂に樹脂添加剤や異種の樹脂を分散・相溶化させる薬剤。 例えば、製造プロセス（乳化重合、分散重合等）に用いられる乳化剤、分散剤もここに該当するが、出荷する重合体に乳化剤が含まれるか否かによって用途分類が異なる。 ①出荷重合体がエマルジョンから凝固（乳化剤を分離）された形で出荷される場合は、乳化剤の用途は#110-c。 ②乳化剤が分離されず、出荷重合体に含まれて出荷される場合は、重合体出荷先における重合体の用途における分散剤に該当。例えば、出荷重合体がプラスチックに使用される場合は#127-cに該当。また、出荷重合体が、その他の具体的な用途（例えば、ゴム（＃128）、塗料（＃115）、接着剤（＃123）、繊維処理剤（＃125）、紙・パルプ薬品（＃126）等）に使用されることが分かっている場合は、その具体的用途を選択します。重合体出荷先における用途が不明の場合は、#110-cを選択。

2

1

図表 Ⅳ-６３　用途分類解説資料（２１）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
				なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶剤添加剤（溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）もここに該当する。 沈降防止剤(エマルジョンなどの沈澱を防止するために用いられる薬剤)を含む。
		d	安定化剤（酸化防止剤等）	安定化剤は、熱、光、紫外線及び空気中の酸素などによる劣化現象等を防止し、安定度を増すために添加される薬剤で、酸化防止剤、耐熱安定剤、紫外線吸収剤、光安定剤、ハロゲン化水素捕捉剤及び重金属不活性化剤等が該当する。酸化防止剤、耐熱安定剤、紫外線吸収剤、光安定剤とは、#115-fの用語の定義を参照。
		e	充填剤、希釈剤、ポリマー分解促進剤	充填剤は、強さ、耐久性、作業特性又はその他の性能を改質又は増大させるためにプラスチックなどに加える比較的不活性な固体材料。 希釈剤は、基材の濃度や配合比等を調整するために添加される薬剤。 ポリマー分解促進剤は、プラスチックを微生物・光・熱等の関与で環境に悪影響を与えない低分子に分解させるのを促進するために用いられる薬剤。
		f	結晶核剤	結晶核剤は、ポリプロピレンやポリエステルなどの結晶性ポリマーに均一で微細な結晶を生成させ、剛性、熱変形温度などの機械的特性の向上や透明性の改善などの目的で使用される薬剤。
		g	内部滑剤、内部離型剤	内部滑剤は、成形品の加工を容易にし又は粘着を防ぐための薬剤で、成形材料にあらかじめ添加して使用するもの。 内部離型剤は、成形品の製造にあたりその離型を容易にするために用いられる薬剤で、成形材料にあらかじめ添加して使用するもの。
		h	防曇剤、流滴剤、撥水剤	防曇剤は、高分子フィルムの表面で水蒸気が凝縮して曇るのを防ぐために添加又は塗布して用いられる薬剤。 流滴剤は、プラスチック表面は多くの場合、疎水性のため急激な温度変化により表面に小さな水滴が形成されるが、この水滴を流し、フィルム等の透明性を保持するために用いられる薬剤。撥水剤の用語の定義は、#125-iを参照。
		i	難燃剤、帯電防止剤、波長変換剤	難燃剤の用語の定義は、#123-hを参照。 帯電防止剤の用語の定義は、#125-fを参照。 波長変換剤は、特定の光の波長を別の波長に変換して目的の効率を向上させる蛍光剤で、例えば、農業用グリーンハウスの作物成長促進フィルムや太陽光発電の効率を上げたり、光ファイバーの伝搬効率をあげるために使用される。ただし、近紫外光を青付近の波長に変換する蛍光増白剤は#111-bを選択する。 着色剤は#111-aを選択する。
		j	外部滑剤、外部離型剤	外部滑剤は、成形品の加工を容易にし又は粘着を防ぐために用いられる薬剤で、型わくに塗布若しくは焼き付けて使用するもの。 外部離型剤は、成形品の製造にあたりその離型を容易にするために用いられる薬剤で、型わくに塗布若しくは焼き付けて使用するもの。
		k	ラジカル発生剤	ラジカル発生剤は、ラジカルを発生させることにより溶融粘度を調整し、加工成形性を向上させるために用いられる薬剤。 ラジカル発生剤であっても、重合開始剤は#127-l,mを選択する。
		l	反応注型用・注型発泡用材料（モノマー・オリゴマー・プレポリマー等）	反応注型用・注型発泡用材料（反応成形原料）は、反応注型製品又は注型発泡製品を製造する際に用いられる樹脂のモノマー・オリゴマー・プレポリマー及び硬化剤（用語の定義は、#127-mを参照）等の材料。ただし、発泡剤は#108-b（物理発泡剤）,#121-c（化学発泡剤）を、また電気・電子部品等の封止材に用いられる注型材料は#138-eを選択する。
		m	硬化剤、架橋剤（FRP用モノマー・オリゴマー・プレポリマー等）、架橋助剤、増感剤、重合開始剤	注型用・注型発泡用以外の用途で用いられる硬化剤、架橋剤、架橋助剤、増感剤及び重合開始剤が該当する。 硬化剤は、その反応に加わることによって樹脂等の硬化反応を促進し、又は調節するために用いられる薬剤。 架橋剤は、重合体の主鎖間に分子間共有結合又はイオン結合を促進し又は調節する薬剤。また、反応性希釈剤はここに該当する。 架橋助剤は、架橋剤と共に用いられ、架橋速度や成形物の物性をコントロールするために添加する薬剤。 増感剤は、照射されたエネルギーを吸収し重合開始剤等への電子移動又はエネルギー移動により反応を開始させる薬剤。 重合開始剤は、光、紫外線、熱又は電子線等のエネルギーにより反応を起こし、その生成物が重合反応を開始させる機能を持つ薬剤。
	[#115-a,116-a,123-a,124-a,125-a,128-aを除く] [着色剤は#111、物理発泡剤は#108、化学発泡剤は#121]	n	硬化促進剤	硬化促進剤は、硬化反応を促進又は調節するために少量用いられる薬剤。
		y	その他の添加剤（改質剤等）	上記以外のプラスチック添加剤。ただし、上記以外のプラスチック加工助剤は#127-zを選択。
		z	その他	

2

1

図表 Ⅳ-６４　用途分類解説資料（２２）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
128	合成ゴム、ゴム用添加剤又はゴム用加工助剤			合成ゴムは、1種又はそれ以上の種類のモノマーを重合して得られるゴム。 ゴム用添加剤は、ゴムの機能や生産性、安定性等の特性を向上させるために添加される薬剤。 ゴム用加工助剤は、ゴム加工時に加工性や作業性を改善するために用いられる薬剤。 着色剤は#111、物理発泡剤は#108、化学発泡剤は#121を選択する。
		a	成形品基材(エラストマー（合成ゴム）)	成形品基材は、合成ゴム成形品の基本材料として使用される薬剤で、化審法上の高分子化合物に該当するもの。
		b	加硫促進剤、加硫促進剤助剤（加硫活性剤）	加硫促進剤は、加硫剤と共に少量用いられる配合剤で、加硫速度の増大や加硫物の物性向上のために用いられる薬剤。 加硫促進剤助剤は、加硫促進剤の機能が十分発揮できるように添加する助剤。
		c	加硫剤、架橋剤、架橋助剤	加硫剤は、狭義にはゴムにイオウ架橋を生じさせるため配合する薬剤。広義にはイオウ以外の加硫（架橋）剤も含む。ただし、化審法上の高分子化合物に該当する高分子多硫化剤等は#128-aを選択する。 架橋剤は、狭義にはイオウ以外でゴムに架橋する薬剤。広義には加硫剤と同義。 架橋助剤は、非硫黄加硫系において低濃度で架橋効果を増大したり、特性を変化させたりするために用いられる薬剤。例えば、過酸化物架橋の共架橋剤（メタクリル酸マグネシウム、フェニレンビスマレイミド等）がある。
		d	可塑剤、補強材（接着促進剤等）、充填剤、プロセス油の基油・添加剤	可塑剤は、特に低温時にゴム又はゴム製品に柔軟性を与えるために用いられる薬剤。ただし、加硫の際に生ゴム分子と架橋させて内部可塑化剤として用いられる薬剤（例えば液体ポリイソプレン等）のうち、化審法上の高分子化合物に該当するものは#128-aを選択する。 補強材は、材料の機械的強度を増加させるために用いられる薬剤又は材料で、ここでは合成ゴムの機械的強度を増強するために添加されるものが該当する。 充填剤は、物性の向上又は経済的な目的で、ゴムに比較的大量に加える固形の配合剤。 プロセス油は、ゴム材料を軟化させ加工しやすくする目的で使用されるゴム配合油（鉱油）やエキステンダ（伸展）油が該当する。 プロセス油添加剤は、ゴム配合油へ添加する薬剤。
		e	安定化剤（老化防止剤等）	安定化剤は、熱、光、紫外線及び空気中の酸素などによる劣化現象等を防止し、安定度を増すために添加される薬剤で、合成ゴムに用いられる老化防止剤、耐熱安定剤、光安定剤、紫外線吸収剤、オゾン劣化防止剤及び屈曲・亀裂防止剤等が該当する。 老化防止剤は、ゴム製品の老化（時間の経過と共に性能が低下する現象）を防止する薬剤で，酸化防止剤と同じ作用のものが多いので，酸化防止剤と類称される。 耐熱安定剤、光安定剤、紫外線吸収剤、酸化防止剤とは、#115-f用語の定義を参照。
		f	スコーチ防止剤、素練促進剤、内部滑剤、内部離型剤	スコーチ防止剤は、作業中や保管中に熱のため未加硫ゴムの加硫が一部進行することを防止する薬剤。 素練促進剤は、機械的剪断力及び空気中の酸素の作用、ときにはペプサイダーや熱の効果を加え、原料ゴム又は配合ゴムの分子量の不可逆的低下を促進するために用いられる薬剤。ただし、プロセス（加工）油及びエキステンダ（伸展）油は、#128-dを選択する。 内部滑剤、内部離型剤の用語の定義は、#127-gを参照。
		g	ラテックス凝固剤、乳化剤、分散剤、沈降防止剤	ラテックス凝固剤は、ラテックス中に分散している粒子を不可逆的に凝集、凝固させ、重合体の連続相と漿液の分散相に分離するために用いられる薬剤。 乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。 例えば、製造プロセス（乳化重合、分散重合等）に用いられる乳化剤、分散剤もここに該当するが、出荷する重合体に乳化剤が含まれるか否かによって用途分類が異なる。 ①出荷重合体がエマルジョンから凝固（乳化剤を分離）された形で出荷される場合は、乳化剤の用途は#110-c。 ②乳化剤が分離されず、出荷重合体に含まれて出荷される場合は、重合体出荷先における重合体の用途における分散剤に該当。例えば、出荷重合体がゴムに使用される場合は#128-gに該当。また、出荷重合体が、その他の具体的な用途（例えば、プラスチック(＃127)、塗料(＃115)、接着剤(＃123)、繊維処理剤(＃125)、紙・パルプ薬品(＃126)等）に使用されることが分かっている場合は、その具体的用途を選択します。重合体出荷先における用途が不明の場合は、#110-cを選択。 なお、乳化・分散などのような溶解・分散機能を有する溶剤添加剤（溶解補助剤、可溶化剤、酸、塩基など）もここに該当する。 沈降防止剤は、液体中の粒子が重力又は遠心力の作用により沈降していくのを防ぐために用いられる薬剤。

2

1

図表 Ⅳ-６５　用途分類解説資料（２３）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
	[着色剤は#111、物理発泡剤は#108、化学発泡剤は#121]	h	難燃剤、帯電防止剤、波長変換剤	難燃剤の用語の定義は、#123-hを参照。 帯電防止剤の用語の定義は、#125-fを参照。 波長変換剤の用語の定義は、#127-iを参照。
		i	外部滑剤、外部離型剤	用語の定義は、#127-jを参照。
		（廃止）	（廃止）	
		k	ゴム再生剤（脱硫剤等）	ゴム再生剤は、架橋ゴムの再生を容易にするために脱硫等の際に添加される薬剤。
		y	その他の添加剤（改質剤等）	上記以外のゴム用添加剤。
		z	その他	
129	皮革処理剤			皮革とは、動物の皮膚をそのまま剥ぎ取り製品とした皮と動物の皮膚の毛を除去しなめしを加えた革のことで、皮革処理剤は、皮革が固くなったり、腐敗したりするのを防ぎ、皮革の柔らかさや肌触りの良さ、耐久性、可塑性を付与するために用いられる薬剤。 但し、合成皮革、人造（人工）皮革は#127を、皮革用ワックスは#114を選択する。
		a	なめし剤	なめし剤は、皮が腐敗しないように皮のコラーゲン繊維、組織を固定、安定化させ、革としての基本的特性を付与するために用いられる薬剤。
		b	仕上げ加工薬剤（漂白剤、着色剤、着色助剤、撥水剤、撥油剤、油剤、脱脂剤、加脂剤等）	仕上げ加工薬剤は、なめし後の漂白、加脂、革漉き、染色・レタン等の仕上げ加工工程で使用される薬剤。 漂白剤の用語の定義は#112-b、着色剤、着色助剤の用語の定義は#111、撥水剤、撥油剤の用語の定義は#125-iを参照。 加脂剤は、皮製品の柔軟性等、繊維間潤滑作用とその表面への特殊機能付与並びに繊維間充填効果を目的とする液状油を主成分とする薬品。 レタン（再鞣し（retanning））とは、風合いや染色性を改善するためにクロム、タンニン、合成タンニン剤等で処理すること。
		c	準備工程（なめし前）薬剤（脱脂剤、脱灰剤等）	準備工程薬剤は、なめし前の脱毛、石灰漬け（脱脂）、フレッシング、脱灰・酵解等の準備工程で使用される薬剤。 石灰漬けとは、吸水軟化した原料皮を水酸化カルシウムを溶解度以上含む石灰乳に浸漬する工程。 フレッシングとは、原料皮の内面に残った付着物を除去して内面をきれいにする作業。 脱灰とは、裸皮を中和して膨潤状態を元に戻し、水酸化カルシウムを可溶性の塩に変えて溶出除去するために行う。 酵解（こうかい）とは、ベーチングともいい、石灰漬け、脱灰を終えた皮の表面を酵素剤で不要なタンパク質などの分解除去によってなめらかにすることで、柔軟性を与えることができる。
	[#114を除く]	z	その他	
130	ガラス、ほうろう又はセメント			ガラス、ほうろう、セメントは、ここではガラス、ほうろう、セメント製造用の調合・成形原材料を指す。ただし、これらの原材料を合成する原料は#101-aを、着色剤は#111を選択する。 ガラスは、高温で溶融状態にあったものが急速に冷却されて結晶化せずに固化したもの（一部結晶を析出させた結晶化ガラスも含む）又はその状態。無定形状態の一つで立体的な網目構造をとる。ただし、電気・電子材料用途（光導波路材料も含まれる）のガラスおよび添加剤は、#138を選択する。 ほうろうは、金属表面に強固にガラス層（膜）を被覆した複合材料。 セメントは、水と反応して硬化する鉱物質の微粉末、大別するとポルトランドセメント、混合セメント及び特殊セメントに分けられる。 ただし、ガラス、ほうろう及びセメントの原料及び添加剤のうち、天然物から化学反応を起こさせることなく（分離、精製等で）得た化合物の場合は、製造数量等の届出対象外である。
		a	ガラス調合・成形原材料	ガラス調合・成形原材料は、ガラス製造用の主たる調合・成形原材料を指し、ケイ素、アルミニウム、ホウ素、ナトリウム、鉛、リン等の酸化物および炭酸塩や金属フッ化物などが該当する。

2

1

図表 Ⅳ-６６　用途分類解説資料（２４）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		b	ガラス添加剤（強化剤、集束剤、防曇剤、紫外線カット剤等）	ガラス添加剤は、ガラス製品を製造する際に使用する添加物（主原料以外）のうち、製品中に含まれて又は製品に塗布されて出荷されるもの。例えば、結晶化剤、ガラス強化剤、防曇剤、紫外線カット剤、波長変換剤、鏡裏打ち材、ガラス繊維の集束剤、結合剤等が該当する。 ただし、#138で定義されている電気・電子機能を付与する添加剤は、#138を選択する。
		c	ガラス加工助剤（離型剤、pH調節剤等）	ガラス加工助剤は、ガラス製品の製造プロセスで使用される薬剤で出荷時に製品に含まれないもの。例えば、離型剤、pH調節剤、ガラス繊維製造時の酢ビエマルション、脂肪族アミン等が該当する。ただし、ガラスの切削・研削・研磨加工等に用いられる加工油は、#137を選択する。ガラスのエッチング薬剤は、#134-gを選択する。
		d	ほうろう調合・成形原材料	ほうろう調合・成形原材料は、主たる調合・成形原材料を指し、粘土、化学薬品等や、フリットの製造に用いられる、ケイ素、アルミニウム、ホウ素、ナトリウム等の酸化物、炭酸塩、リン酸塩、フッ化物の他にニッケル、鉛及びクロム化合物等（天然物を除く）が該当する。フリットとは、陶磁器またはホウロウ用ウワグスリ、焼付け用フラックスなどを製造する場合、その成分の一部または全部を溶融してガラス粉末としたもの。
		e	ほうろう添加剤（絵付け用転写剤、フリット配合薬剤等）	ほうろう添加剤は、ほうろう製品を製造する際に使用する添加物（フリット原料以外）のうち、製品中に含まれて又は製品に塗布されて出荷されるもの。例えば、絵付け用の転写剤、釉薬（下ぐすり、上ぐすり）を製造する際にフリットに配合する化学薬品等が該当する。 釉薬（ゆうやく）とは、じんあいの付着を軽減するとともにほうろうや陶磁器の機械的強度を増すためその表面に施されたガラス質の表面層。
		f	ほうろう加工助剤（中和剤、ニッケル処理剤等）	ほうろう加工助剤は、ほうろう製品の製造プロセスで使用される薬剤のうち、出荷時に製品に含まれないもの。例えば、準備工程（くすり掛け準備工程）で使用される中和剤やニッケル処理剤等が該当する。
		g	セメント調合原料	セメント調合原料は、セメントの主たる調合原料を指し、石膏や、クリンカの製造に用いられる石灰石、アルミニウム、ケイ素、鉄等の酸化物及び亜鉛、カルシウム等のリン酸塩等（天然物を除く）が該当する。
		h	セメント添加剤（混合材、膨張剤、固化剤等）	セメント添加剤は、セメントに各種特性を付与するために添加する薬剤で、混合セメントの混合材や特殊セメントの膨張剤、固化剤及び凝結制御剤等が該当する。 ただし、コンクリートやモルタルの性質を改善する目的で混和されるポリマー混和材は、#144-zを選択する。
		i	セメント加工助剤	セメント加工助剤は、セメントの製造プロセスで使用される薬剤で出荷時に製品に含まれないもの。例えば、調合（粉砕）工程で使用されるクリンカー補助剤（粉砕助剤）が該当する。
	[着色剤は#111]	z	その他	
131	陶磁器、耐火物又はファインセラミックス			陶磁器、耐火物、ファインセラミックスは、陶磁器、耐火物、ファインセラミックス製造用の調合・成形用の原材料を指す。ただし、これらの原材料を合成する原料は#101-aを、着色剤は#111を選択する。 陶磁器（セラミックス）は、土又は石などの天然原料や人工原料を成形、焼成したもの。 耐火物は、１５００℃以上の耐火度をもつ非金属物質又はその製品（ただし金属が一部使用されているものも含まれる）。 ファインセラミックスは、目的機能を発揮させるために、化学組成、微細組織、形状及び製造工程を精密に制御して製造した機能性セラミックスである。ただし、電気・電子材料用途のファインセラミックスは、#138、#139を選択する。 また、陶磁器、耐火物及びファインセラミックスの原料及び添加剤のうち、天然物から化学反応を起こさせることなく（分離、精製等で）得た化合物の場合は、製造数量等の届出の対象外である。
		a	陶磁器・耐火物・ファインセラミックスの調合・成形原材料	陶磁器調合・成形原材料は、陶磁器製造用の調合・成形原材料を指し、粘土質原料、非可塑性原料（ケイ石等）、融剤原料（長石など）等の天然物（化審法対象外）に分けられる。 耐火物調合・成形原材料は、耐火物製造用の調合・成形原材料を指し、天然物が主原料であるが、人工原料である珪素、アルミニウム、マグネシウム化合物の他にジルコニア、スピネルなどの特殊酸化物、炭素質、炭化物、窒化物なども用いられる。 ファインセラミックス調合・成形原材料は、ファインセラミックス製造用の調合・成形原材料を指し、高純度に精製した天然原料や化学合成された人工原料が該当する。

2

1

図表 Ⅳ-６７　用途分類解説資料（２５）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
	［着色剤は#111、電子用ファインセラミックスは#138、#139］	b	陶磁器添加剤、耐火物添加剤、ファインセラミックス添加剤（焼結助剤等）	添加剤は、焼結後も内部・表面に残る副原料をいう。 陶磁器添加剤は、釉薬、強度向上剤等に用いられる薬剤。なお、釉薬成分の着色剤は#111-aを選択する。 耐火物添加剤は、硬化促進剤、硬化遅延剤、鉱化剤（結晶化・焼結促進剤）等として用いられる薬剤。 ファインセラミックス添加剤は、ファインセラミックスの機能を発揮・向上させるために用いられる薬剤。例えば、焼結温度を下げて焼結を促進させる焼結助剤、ジルコニウム化合物などの熱安定性を向上させる安定化剤や電子セラミックスの圧電性能を向上させるものなど多くの添加剤がある。
		c	成形助剤（バインダー、増粘剤、可塑剤、潤滑剤、乳化剤、分散剤等）	成形助剤は、成形のために原料素材に添加されるが、脱脂又は焼結の段階で燃焼、分解して除去される加工助剤。 バインダー（結合剤）は、窯業品を焼成、成形する場合、主原料を結合して一体となすために使用する薬剤。 増粘剤は、材料の粘度増大と結合作用によって成形を容易にする薬剤。 可塑剤は、原料素材に成形可能な柔軟性を付与する薬剤。 潤滑剤（滑剤）は、素材粒子間の摩擦を軽減する薬剤（内部滑剤）。乳化剤、分散剤の言葉の定義は、#110-cを参照。 解こう剤とは、泥しょう中の粒子を分散させ泥しょうの粘度を低下させる薬剤であり、ここに該当する。 ただし、ファインセラミックス等の切削・研削・研磨加工等に用いられる加工油は、#137を選択する。
		d	滑剤、離型剤	用語の定義は、#127-jを参照。
		z	その他	
132	研削砥石、研磨剤、摩擦材又は固体潤滑剤			研削砥石、研磨剤、摩擦材、固体潤滑剤は、研削砥石、研磨剤、摩擦材、固体潤滑剤製造用の調合・成形原材料を指す。切削工具（超硬工具）、耐摩耗部材（超硬合金）もここに該当する。ただし、これらの原材料を合成する原料は、#101-aを選択する。 研削砥石は、人造研削材と結合材からなり、粗加工用（研削工具）として用いられる。 研磨剤は、砥粒（研磨材）を水や油に分散させた液状又はペースト状のもので、仕上加工用として用いられる。ただし、固体の研磨剤を使わない電解研磨や化学研磨で用いられる薬剤は#134-gを選択する。 摩擦材は、摩擦抵抗により、動力の伝達、運動の停止を行う材料で、金属摩擦材（焼結金属等）と有機質摩擦材（ウーブン系、モールド系、ペーパー系）がある。有機質摩擦材は、金属、無機物等の充填剤をフェノール樹脂等で固めたもので、金属摩擦材は、金属や合金のマトリックスの中に充填剤を添加し、圧粉成形体として焼結したもの（焼結金属）など。 固体潤滑剤は、相対運動する材料表面の損傷を防止したり、摩擦・摩耗を低減するために粉末又は薄膜で利用される固体で、直接樹脂材料などと複合化し乾性状態で用いられる方法と、オイルやグリースなどの液体潤滑剤又は半固体潤滑剤に分散させて用いられる方法がある。ただし、後者の用途（液体、半固体）は、それぞれ該当する用途番号（#136-e又は#137-d）を選択する。 着色剤は#111を選択する。
		a	研削砥石・研磨剤・摩擦材・固体潤滑剤の調合・成形原材料	研削砥石調合・成形原材料は、研削砥石製造用の調合・成形原材料（砥粒等）を指し、アルミニウム化合物、ジルコニウム化合物や炭化珪素等の内、人工原料が該当する。 研磨剤調合原料は、研磨剤製造用の調合原料（研磨材）を指し、窒化硼素、炭化珪素、コランダム等がある。ただし、これらを合成する原料は#101-aを選択する。 摩擦材調合・成形原材料は、摩擦材の調合・成形原材料を指し、焼結金属、アルミ複合材、セラミックス複合材、有機・無機繊維、無機物質等がある。ただし、これらを合成する原料は#101-aを選択する。 固体潤滑剤調合・成形原材料は、固体潤滑剤の調合・成形原材料を指し、二硫化モリブデン、ポリ四フッ化エチレン、フッ化黒鉛、窒化ホウ素等がある。ただし、これらを合成する原料は#101-aを選択する。
		b	研削砥石・研磨剤・摩擦材・固体潤滑剤の添加剤（バインダー、増粘剤、研磨助剤、乳化剤、分散剤、摩擦調整剤、潤滑剤等）	研削砥石添加剤は、研削砥石の３要素（砥粒、バインダー、気孔）の内のバインダーである。 バインダーは砥粒と砥粒とを結合・保持し、砥石としての形を保つための材料で、ビトリファイド、シリケート、メタルの高温焼成形、レジノイド、ゴム、シェラックの低温硬化型、マグネシアの常温硬化型の７種類がある。 研磨剤添加剤は、増粘剤、分散剤、研磨助剤（研磨布紙や研磨液組成物などに用いられる助剤）などの薬剤。 摩擦材添加剤は、潤滑物質、硬質物質、摩擦調整物質、pH調整物質、補強物質等の充填剤及び結合材などの薬剤。 固体潤滑剤添加剤は、乾性被膜潤滑剤等の調剤において固体潤滑剤に添加されるバインダー、防錆剤などの薬剤。 乳化剤、分散剤の用語の定義は、#110-cを参照。

2

1

図表 Ⅳ-６８　用途分類解説資料（２６）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		c	滑剤、離型剤	用語の定義は、#127-jを参照。
	［着色剤は#111］	z	その他	
133	金属製造加工用資材			金属製造加工用資材は、金属製造業の金属製錬後から金属加工までの製造工程の製錬・精錬（#146）以外で使用される金属添加剤と金属加工助剤をいう。なお、合金の製造加工も含まれる。ただし、金属製造業の分離・精製プロセス剤は＃146を選択する。 また、金属の合成原料は#101、着色剤は#111、表面処理は#134、溶接・ろう接は#135、金属加工油は#137を選択する。
		a	金属用添加剤（接種剤等）	金属用添加剤は、金属の特性改良のために加えられる薬剤。ただし、金属及び合金の原料について、反応して金属及び合金の成分になる原料は#101-aを選択する。 接種剤は、鋳造の溶湯へ少量添加されて結晶核になり、鋳物物性を改善する薬剤（チル化防止、強度改善、材質均一化、フェライト析出防止等）。
		b	加工助剤（フラックス等）	加工助剤は、金属の溶解、鋳造、熱処理、圧延などのプロセスに用いられる助剤（ステンレスの酸洗浄の薬剤を含む）で、金属内に取り込まれない薬剤。製錬と精錬に用いられる加工助剤は＃146を選択する。 フラックスは、融解金属への添加剤で、合金製造と鋳造では溶湯不純物除去と酸化防止の目的で使われる。 ただし、溶接・はんだ付けに使われるフラックスは#135、電解精錬で電解効率向上と酸化防止のために使われるフラックスは#146-zを選択する。 金属の熱処理に用いる加工助剤は、焼き入れガス、焼鈍（焼き鈍し）ガス、溶融塩（塩浴）、溶融金属などがある。ただし、熱入れに使用される水、ポリマー水溶液(ポリマー焼入剤など)、鉱油、などの水溶性及び不水溶性の熱処理油は、#137を選択する。
		c	鋳造用粘結剤、鋳造用硬化剤、鋳造用添加剤	鋳物砂への内部添加剤が該当する。 鋳造用粘結剤は、鋳物砂を鋳型に成形するために加える添加剤。 鋳造用硬化剤は、樹脂粘結剤の硬化剤。 鋳造用添加剤は、鋳物砂の調整成分として添加される薬剤。炭素質、でんぷん質、繊維質等の添加剤がある。
	［金属の合成原料は#101、着色剤は#111、表面処理は#134、溶接・ろう接は#135、金属加工油は#137］	d	鋳造用離型剤、鋳造用塗型剤	鋳造用離型剤は、砂型作製時に木型、樹脂型から容易に取り外すために使用される薬剤。 鋳造用塗型剤は、砂型、金型の表面を溶湯から保護し、鋳肌改善、焼付防止（離型等）のために鋳型表面に塗装して用いられる薬剤。塗型剤の微粉をそのまま用いられる場合と粘土水、糖蜜、アルコール等と混合して用いられる場合がある。
		z	その他	
134	表面処理剤			表面処理剤は、材料の表面の状態を変えることによって、表面の性質を変えたり、新しい機能を付加するために用いられる薬剤。 乾式及び湿式の表面処理技術は、表面処理によって材料の寸法が増大する技術としてめっき（電鋳法も含む）、化成処理及び溶射処理、寸法が変化しない技術として表面硬化処理と表面フッ化処理、及び寸法が減少する技術としてエッチング等の表面削除・清浄処理がある。表面処理剤の具体的詳細用途が別途設定されている場合には、#134とはせず、当該用途を優先して選択する。 他に設定されていない場合には、#134に該当する。 たとえば、金属洗浄剤(#104)、その他の洗浄溶剤(#106)、水系洗浄剤 (#112)、クリーニング洗浄用溶剤(#105)、水系洗浄剤(#113)、ワックス(#114)、塗料・コーティング剤(#115)、インキ、複写用薬剤 (#116)、船底塗料用・漁網用防汚剤(#117)、接着剤・粘着剤・シーリング材(#123)、レジスト材料・写真材料・印刷版材料(#124)、合成繊維、繊維処理剤（＃125）、紙・パルプ薬品（＃126）、プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤（＃127）、合成ゴム、ゴム用添加剤、ゴム用加工助剤（＃128）、皮革処理剤(#129)、ガラス、ほうろう、セメント（＃130）、陶磁器、耐火物、ファインセラミックス（＃131）、研削砥石、研磨剤、摩擦材、固体潤滑剤（＃132）、電気・電子材料[対象材料の製造用プロセス材料を含む]（＃138）、建設資材、建設資材添加物（＃144）は、それらが表面処理のために用いられる場合であっても、表面処理剤（#134）とはせず、それぞれ該当する用途番号を選択する。半導体製造プロセスのドーピングガス等は#138-bを選択する。 また、たとえ表面処理（#134）の前処理・後処理に用いられる脱脂・洗浄溶剤であっても、非水系、準水系洗浄剤は金属洗浄剤(#104)及びその他の洗浄溶剤(#106)を、水系洗浄剤は水系洗浄剤 (#112)を選択する。

2

1

図表 Ⅳ-６９　用途分類解説資料（２７）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		a	めっき薬剤（皮膜成分原料）	めっき薬剤は、湿式めっき及び溶融めっきの皮膜成分。ここで、湿式めっきとは電気めっき（金属塩の水溶液から電解によって金属皮膜を析出させる）及び無電解めっき（金属塩の水溶液から還元剤で金属皮膜を析出させる）、また、溶融めっきとは金属製品を溶融金属（亜鉛）に浸漬して、表面に金属又は合金皮膜を生成させる方法をいう。
		b	めっき浴添加剤（光沢付与剤、煙霧防止剤、無電解めっきの還元剤等）	めっき浴添加剤は、めっき槽内に入れられためっき液（めっき浴という）に添加される薬剤。 電気めっき浴への添加剤は、光沢（平滑性）、展性・延性、硬度、等の皮膜物性の改善、陰極における水素発生抑制（硼酸）、めっき浴からのミスト発生を防止する（煙霧防止剤）などの目的で添加される。 また、無電解めっき（還元剤、ピット防止・物性改善等）、溶融めっき（フラックスや膜付着性改善・表面華紋形成剤等）、複合(分散)めっき（耐摩耗性、潤滑性、耐食性等）においても種々の目的で添加剤が用いられる。
		c	化成処理薬剤	化成処理薬剤は、化学的及び電気化学的処理によって、材料表面に安定な化合物を生成させる処理に用いられる薬剤で、以下のような処理方法がある。 リン酸塩処理とは、リン酸塩を含む水溶液で化学的に皮膜を生成させる方法で、リン酸マンガン被膜処理、リン酸亜鉛皮膜処理、リン酸亜鉛カルシウム皮膜処理などがある。 クロメート処理とは、クロム酸又は重クロム酸塩を主成分とする溶液中に品物を浸漬し、化学的に防錆(不動態)皮膜を生成させる方法。 黒染処理とは、アルカリ浴で鉄表面に黒色の不動態膜（四三酸化鉄）を生成させる。その他の黒色皮膜（酸化物－硫化物、等）を生成させる処理もある。 陽極酸化処理とは、陽極酸化によって皮膜を生成させる処理。 拡散処理（拡散めっき）とは、めっき皮膜及び素地金属、又は二つ以上の皮膜間で合金化若しくは金属間化合物を形成させるための熱処理。
		d	真空めっき（蒸着等）薬剤、溶射処理薬剤	真空めっき薬剤は、空中でめっきしようとする金属を加熱蒸発させ、材料表面に凝集させる方法に用いられる薬剤。真空めっきには化学蒸着と物理蒸着がある。 化学蒸着とは、化学気相成長法といわれ、所望の構成元素を含む気体（蒸気）の化学反応によって膜を作る方法。塩化物、水素化物、有機金属等の原料ガスを基板上に導入し、反応生成物を堆積させるMOCVD、ハロゲン化物CVD、プラズマCVD、レーザCVDなどがある。 物理蒸着とは、物理気相成長法といわれ、高温加熱、スパッタリングなどの物理的方法で物質を蒸発させ、基板上に凝縮・薄膜形成を行う方法で、真空蒸着法、スパッタリング法、反応性スパッタリング、イオンプレーティング法などがある。 溶射処理薬剤は、溶融又はそれに近い状態の金属又は非金属溶射材料を母材表面に吹き付けて皮膜を形成する方法に用いられる薬剤。
		e	表面硬化処理（浸炭、窒化等）薬剤	表面硬化処理剤は、鋼の表面層のみを硬化させ、耐摩耗性と耐衝撃性を付与する処理に用いられる薬剤。処理方法には浸炭法、窒化法、浸炭窒化法（青化法）、Si拡散めっき、Cr拡散めっき、炎焼入法、高周波焼入法等がある。 浸炭法とは、低炭素鋼や合金鋼の表面層の炭素量を増加させるために、浸炭剤中で加熱し、炭素原子を表面に拡散させて、表面を高炭素鋼にし、次いで焼き入れ焼き戻しを行って表面を硬化させることをいう。ガス浸炭、真空浸炭、液体浸炭、滴注浸炭、固体浸炭などがある。 窒化法とは、窒化剤で鋼表面に窒素を添加する方法で、ガス窒化法、液体窒化法がある。 浸炭窒化法とは、鋼を浸炭と窒化が同時に起こる環境で加熱し、表面層の炭素と窒素の量を同時に高める方法。 Si及びCr拡散めっきは、#134-cを参照。
		f	表面フッ素化処理薬剤、表面シリル化処理薬剤	表面フッ素化処理薬剤は、樹脂、ゴム、金属、無機物、セラミックス等の表面をフッ素化して新たな表面特性を付与するために用いられる薬剤。処理方法には直接フッ素化及びプラズマ処理、化学処理、メカノケミカル（研磨）処理によるフッ素化法がある。 表面シリル化処理薬剤は、金属、無機物、ガラス等の表面をシリル化して表面を改質するために用いられる薬剤で、無機粉体等の表面処理に用いられるシランカップリング剤などがある。

2

1

図表 Ⅳ-７０　用途分類解説資料（２８）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
				ただし、塗料や接着剤等の配合若しくは前処理工程で使用するシリル化処理薬剤は、表面処理剤としては扱わず、それぞれ該当する用途番号（塗料の場合は#115-c、接着剤の場合は、#123-b等）を選択する。また、有機合成等で化合物の官能基を保護する目的で用いられるシリル化剤は、中間物（#101-a）又は化学プロセス調節剤（#110-d）を選択する。さらに、合成繊維及び紙製品に撥水性を付与するために用いられるフッ素化処理薬剤やシリル化処理薬剤は、別途詳細用途が設定されているので、#125-i及び＃126-fをそれぞれ選択する。
		g	エッチング処理薬剤、スパッタリング処理薬剤、ブラスト処理薬剤	エッチングとは、被処理材料の不要な全面または一部を化学的又は電気化学的に除去すること。 エッチング処理薬剤は、エッチングに用いられる薬剤で、ガスを用いるドライエッチングと薬液を用いるウェットエッチングがある。 エッチングの薬剤は、他の用途のために用いられる場合であっても、＃134-gに該当する。 化学研磨や電解研磨に用いられる薬剤もここに該当する。ただし、金属等の材料の電解洗浄、酸洗浄、酸浸せき、アルカリ洗浄、アルカリ浸せき洗浄、等の液体による洗浄に用いられる薬剤は#112-bまたは#110-z（#104～#106で用いられる酸やアルカリ等の添加剤の場合）を選択する。 洗浄とは、液体等を用い、表面の汚染物質（スケール、油脂、酸化膜、その他の汚れ等）を化学的に溶解し、又は機械的に除去すること。 スパッタリング処理薬剤は、ガスやイオンのエネルギー粒子を物質に衝突させて、材料表面の構成原子・分子を放出させる物理的エッチング方法に用いられる薬剤。また、反応性のガスやイオンを用いる方法もある。 ブラスト処理薬剤は、処理される材料表面に大きな運動エネルギーをもつ研削材を衝突させる表面処理法に用いられる薬剤。
	［#104-106,112-117,123-132,138,144を除く］	z	その他	
135	溶接材料、ろう接材料又は溶断材料			溶接材料は、溶接金属以外の溶接に用いられる材料。 ろう接材料は、ろう接金属及びはんだ金属以外のろう接に用いられる材料。 溶断材料は、溶断用ガスのこと。 なお、フラックス溶剤は#107-dを選択し、母材やフラックス槽などの洗浄用溶剤は#104又は#106を選択する。 溶接とは、２個以上の部材を、接合される部材間に連続性があるように、熱、圧力又はその両方によって一体にする操作。 ろう接とは、ろう（450℃以上の高い融点をもつ、ろう接溶加材、硬ろうともいう）又は、はんだを用いて、母材をできるだけ溶融しないでぬれ現象で接合する、ろう付及びはんだ付の総称。 溶断とは、金属素材を融点以上に加熱し切り離す技術。
		a	溶接フラックス	溶接フラックスは、溶接の際に母材及び溶加材の酸化物等の有害物を除去し、母材表面を保護し、又は溶接金属の精錬を行う目的で用いられる材料（粉状、粒状）。例えば、サブマージアーク溶接用のフラックスは、溶融フラックス、ボンドフラックス、焼結フラックスなどがある。
		b	ろう接フラックス（酸化防止剤等）	ろう接フラックスは、ろう接又ははんだ付けの際に、母材と溶融金属の表面酸化被膜の除去と加熱中の酸化防止の目的で用いられる材料。 酸化防止剤は、溶融はんだ槽の表面が空気酸化されて酸化鉛や酸化錫等が生成するのを防止する材料。また、溶融はんだ上の浮きかす（はんだドロス＝金属酸化物）を掃去・吸収して溶融はんだの純度・清浄度を維持する機能を併せ持つものもある。 はんだ合金用酸化防止剤とは、はんだ合金の内部又は表面に配合される酸化防止剤。
		c	溶接用ガス、溶断用ガス	溶接用ガスは、ガスの燃焼熱を利用して金属の接合を行う溶接に用いられる可燃性ガスと酸素ガス。 溶断用ガスは、ガス燃焼熱によって溶かした材料を酸素で吹き飛ばして切断する方法に用いられるアセチレンガスと酸素ガス。 ただし、酸素ガス等の単体は化審法対象外であるため製造数量等の届出は必要ない。
		z	その他	

2

1

図表 Ⅳ-７１　用途分類解説資料（２９）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
136	作動油、絶縁油又は潤滑油剤			作動油は、油圧機器又は油圧系統で動力伝達媒体として使用される油剤。 絶縁油は、電気絶縁性を持つ油剤。 潤滑油剤は、接触する固体間の相対運動を円滑にする油剤。 プロセス油、プロセス油添加剤は＃128を、金属加工油、防錆油は#137を選択する。 なお、石油精製等の製造プロセス調節剤は#110を選択する。
		a	作動油の基油、潤滑油剤の基油	作動油基油は、鉱油系（一般作動油、添加タービン油、特殊作動油等）、合成系（リン酸エステル系、脂肪酸エステル系、塩素化炭化水素系）、含水系（水・グリコール系、エマルション系）がある。 潤滑油剤基油は、パラフィン系、ナフテン系、合成油系があり、車両用（ガソリン・ディーゼルエンジン油、２サイクルエンジン油、ギヤー油）、工業用（軸受油、タービン油、圧縮機油、冷凍機油、ギヤー油）、グリース、その他（インキ用鉱油、流動パラフィン等）の用途がある。ただし、インキ用植物油は、#116-c、防錆油は、#137-b、離型剤は、該当する用途番号を選択する。
		b	絶縁油の基油	絶縁油の基油は、変圧器、ケーブル、コンデンサーなどの電気機器の絶縁および冷却の役割を果たすもので、JIS規格では以下の７分類（主成分）がある；１種（鉱油）、２種（アルキルベンゼン）、３種（ポリブテン）、４種（アルキルナフタレン）、５種（アルキルジフェニルアルカン）、６種（シリコーン）、７種（１種と2種の混合油）
		（廃止）	（廃止）	
		d	グリース増ちょう剤	グリース増ちょう剤は、グリースの構成成分（基油、増ちょう剤、添加剤）の1つで、基油（潤滑油）を半固体状にする薬剤であり、微細な粒子として基油の中に分散し、耐熱性、耐水性、機械的安定性など重要なグリース性能を付与する。石けん、非石けんの増ちょう剤がある。 ただし、増ちょう剤を製造する反応原料（脂肪酸やアルカリなど）は、#101-aを選択する。
		e	作動油添加剤、潤滑油剤添加剤	作動油添加剤及び潤滑油添加剤は、作動油や潤滑油の機能や安定性等の特性を向上させるために添加される薬剤。例えば酸化防止剤、清浄分散剤、耐荷重添加剤、粘度指数向上剤、流動点降下剤、さび止め剤（防錆剤）、腐食防止剤、泡消し剤、乳化剤、防腐剤、固体潤滑剤、増粘剤などが該当する。 酸化防止剤とは、連鎖反応停止剤、過酸化物分解剤などを指す。 清浄分散剤とは、エンジン内部での固形物の発生・沈着を抑え、清浄に保つために添加される薬剤で、金属系と無灰系がある。 耐荷重添加剤とは、摩耗防止剤（金属表面に反応膜を生成し摩擦を低減）、極圧剤（負荷が大きい極圧条件下の摩擦面における油膜切れ・焼き付きを防止する）として用いられる薬剤。 粘度指数向上剤とは、温度差による粘度変化を小さくするために添加される薬剤。 流動点降下剤とは、流動点を低下させて、低温における流動性を向上させるために用いられる薬剤。 さび止め剤（防錆剤）とは、金属表面に吸着膜を生成し、酸素との接触を防止するために用いられる薬剤。 腐食防止剤とは、主として非鉄金属の不活性化剤。 泡消し剤とは、ギヤー回転等の撹拌作用又は添加物によって潤滑油が発泡するのを防止するための薬剤。 乳化剤とは、鉱油基油に添加してエマルション系の難燃性作動液を形成させる薬剤。 防腐剤とは、難燃性作動液に用いられて、エマルション中の微生物による異臭、サビ、エマルション破壊等を防止するために用いられる薬剤。 固体潤滑剤とは、摩擦・摩耗を低減するために粉末で利用される固体薬剤。 増粘剤とは、難燃性作動液などの粘度を増大させるために添加される薬剤。
	［プロセス油の基油・添加剤は＃128］ ［#137を除く］	f	絶縁油添加剤	絶縁油添加剤は、絶縁油の特定の特性を改善する目的で、少量添加される薬剤。例えば、流動帯電抑制剤、流動点降下剤、酸化防止剤、粘度調節剤等が該当する。
		（廃止）	（廃止）	
		z	その他	

2

1

図表 Ⅳ-７２　用途分類解説資料（３０）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
137	金属等加工油又は防錆油			金属加工油は、切削油、研削油、圧延油、プレス油、熱処理油、鍛造油等の金属加工に用いられる油剤。なお、金属材料以外の無機材料やプラスチック材料の加工で用いられる加工油（切削油、研削油、研磨油）もここに含まれる。 切削油とは、切削加工で工具と被削材の表面を潤滑、冷却、洗浄、仕上げ面保護を行う油剤。JIS規格では不水溶性切削剤（鉱油に油脂類を添加した混合油と極圧剤を添加した極圧油がある）と水溶性切削油（「エマルション」、「ソリュブル」、「ソリューション」がある）に分類されている。なお、類似用途の研削油、研磨油もここに該当する。 圧延油とは、金属材料を圧延加工するときに潤滑性を向上させるために用いられる油剤。ソリュブル油（油脂類＋水、油脂＋鉱油＋水）と鉱油系油（鉱油＋油性剤）がある。 プレス油とは、プレスを用いて材料を変形加工するとき、工具と被加工材の界面に働く摩擦力の制御と表面損傷を防止する油剤。 熱処理油とは、鋼材の焼き入れや焼き戻しに際して冷却剤あるいは保温媒体として用いられる油剤。JIS規格では油剤の使用温度で3分類しており、1種はコールドクエンチ油で冷却性が高く硬化し難い処理物の処理に、2種及び3種はマルクエンチ油で冷却性が低く歪みを抑制したい処理に使用する。 また、JIS規格以外に水溶性焼き入れ油なども広く使われている。 焼き入れとは、金属製品を所定の高温状態から急冷する処理。 焼き戻しとは、焼き入れで生じた組織を変態（温度を上昇又は下降させた場合などに、ある結晶構造から他の結晶構造に変化する現象）又は析出させて、安定な状態に近づけ、所定の性質及び状態を得るために適切な温度に加熱、急冷する操作。 不水溶性切削油剤とは、水に希釈せずに使用する切削油剤。 防錆油は、腐食抑制剤を主として石油系基油に添加した防錆油（不水溶性型とエマルション型がある）と、水をベース成分として油分を含まない水溶性防錆剤（ソリューション型）があり、金属加工部品の一時的防錆を主目的としたものである。防錆油のJIS規格では、溶剤希釈型（油膜調整剤＋防錆添加剤＋石油系溶剤の乾燥型／屋内、屋外の錆止め）、ペトロラタム型（軟質ワックス＋潤滑油＋防錆添加剤の半固体・不乾燥型／軸受等の錆止め）、潤滑油型（潤滑油＋防錆添加剤の液膜・不乾燥型／金属材料や内燃機関の錆止め）、指紋除去型（溶剤希釈剤型+水溶性有機溶剤又は界面活性剤等）、気化性（常温で気化する防錆剤を含む錆止め／気相接触部分の錆止め）に分類されている。 なお、石油精製等の製造プロセス調節剤は#110を選択する。
		a	水溶性金属加工油の基油	水溶性金属加工油の基油は、切削・研削油剤、圧延油および熱処理油等に用いられる基油（基剤）であって、鉱物油、合成油及び水(基剤)がある。 切削・研削油剤基油とは、「エマルション」と「ソリュブル」に含まれる鉱油、合成油が該当し、「ソリューション」では水と共に基剤として用いられる水溶性合成高分子等が該当する。 圧延油基油とは、ソリュブル油の鉱油、油脂、合成エステル油などが該当する。 熱処理油基油とは、水溶性高分子等の合成油が該当する。
		b	不水溶性金属加工油の基油、防錆油の基油	不水溶性金属加工油の基油は、切削・研削油剤、圧延油、プレス油および熱処理油等に用いられる基油。 切削・研削油剤基油とは、混合油と極圧油の基油として鉱油、硫化鉱油が該当する。 圧延油基油とは、鉱油が該当する。 プレス油基油とは、パラフィン分、ナフテン分、芳香族分の鉱油混合物が該当する。 熱処理油基油とは、パラフィン基系、中間基系、ナフテン基系などの鉱油、オレフィンオリゴマー、アルキルベンゼン、アルキルナフタレン、ポリフェニル系炭化水素などの不水溶性の合成油が該当する。 防錆油基油は、ペトロラタム、ワックス、動植物油脂、合成・天然樹脂、潤滑油基油などが該当する。 ただし、動植物油脂、天然樹脂など、天然物から化学反応を起こさせることなく化合物を得た場合は、製造数量等の届出の対象外である。
		c	水溶性金属加工油添加剤	水溶性金属加工油添加剤は、加工油の機能や安定性等の特性を向上させるために添加される薬剤。例えば、油性剤、極圧添加剤、乳化剤、防錆剤添加剤、防腐剤等が該当する。なお、水溶性防錆剤（ソリューション型、エマルジョン型）の添加剤もここに含まれる。 油性剤とは、極薄い油膜では摩擦係数は油の粘度に無関係となり摩擦低下作用が低下する際に、ある種の界面活性物質の吸着によって摩擦低下作用を行うために用いられる薬剤。 極圧添加剤とは、負荷が大きい極圧条件下の摩擦面における油膜切れ・焼き付きを防止するために用いられる薬剤。

2

1

図表 Ⅳ-７３　用途分類解説資料（３１）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
				防錆剤添加剤とは、加工金属の錆止めに用いられる薬剤で、有機系、無機系の添加剤がある。 乳化剤（界面活性剤）とは、鉱油等の基油を水に乳化するために、切削油、研削油および火災予防が必要な圧延油、熱処理油に用いられる薬剤。 防腐剤とは、切削油、圧延油のエマルション中の微生物による異臭、さび、エマルジョン破壊等を防止するために用いられる薬剤。 水溶性防錆剤添加剤とは、金属表面に吸着膜を生成し、酸素等腐食物質との接触を防止するために添加される薬剤で、防錆添加剤（気化性も含まれる）、乳化剤、酸化防止剤、金属不活性化剤等が該当する。
		d	不水溶性金属加工油添加剤、防錆油添加剤	不水溶性金属加工油添加剤は、加工油の機能や安定性等の特性を向上させるために添加される薬剤。例えば、切削油添加剤、圧延油添加剤及びプレス油添加剤等が該当し、その中には油性剤、極圧添加剤、防錆剤添加剤、固体潤滑剤、酸化防止剤、防食（蝕）剤、ミスト防止剤等が該当する。 油性剤、極圧添加剤、防錆剤添加剤とは、#137-cの用語の定義を参照。 固体潤滑剤とは、摩擦・摩耗を低減するために粉末で利用される固体で、温度に左右されず、油剤とは独立して潤滑作用する薬剤。 酸化防止剤とは、油剤の酸化劣化防止を目的に添加される薬剤。例えば、連鎖反応停止剤、過酸化物分解剤などが該当する。 防食（蝕）剤とは、主として非鉄金属の腐食変色防止のために添加される薬剤。 ミスト防止剤とは、圧延時のミスト防止のために添加される薬剤。 その他の添加剤として、温度変化に伴う潤滑油の粘度変化を低減する粘度指数向上剤、添加することによって粘度を増大させる増粘剤等が該当する。 熱処理油添加剤としては、冷却性向上剤、対流段階開始温度低下剤、酸化防止剤等が該当する。 防錆油添加剤は、金属表面に吸着膜を生成し、酸素等腐食物質との接触を防止するために防錆油基油に添加される薬剤。防錆添加剤（気化性も含まれる）、酸化防止剤、金属不活性化剤、石油系溶剤及び水の可溶化剤（水溶性有機溶剤、界面活性剤）等が該当する。
		z	その他	
138	電気材料又は電子材料			電気材料又は電子材料は、ここでは、電気・電子用の部品・デバイス等の製造用の調合・成形原材料を指す。ただし、これらの原材料を合成する原料は#101-aを選択する。また、電池材料（一次電池、二次電池）は＃139を選択する。 電気・電子材料は、電気回路に用いられる材料（導電材料、抵抗材料、接点材料、ブラシ材料、絶縁材料等）と電子機器に用いられる材料（半導体材料、誘電材料、圧電材料、光電材料、熱電材料等）の総称。 ただし、１種類の元素からできている単体及び単体同士の混合物（例えば、金属、合金、グラファイト等）は、化審法対象外であるため製造数量等の届出は必要ない。 なお、対象材料の製造・加工プロセスで用いられる材料も該当し、対象材料に含まれる加工材料や添加剤は#138-a～fに、対象材料に含まれない加工助剤は#138-zに該当する。製造・加工プロセスで使用される洗浄剤は、下段参照。 したがって、例えば電気・電子材料に用いられる表面処理剤は#134ではなく、#138に該当する（例えば、めっき薬剤が配線等の導電材料として用いられれば#138-a、めっき浴添加剤は#138-z）。 一方、電気・電子製品の構造材料は#138ではなく、該当する用途分類を選択する（例えば、電子機器のハウジングが樹脂であれば#127、そのめっき薬剤は#134）。電子機能が主たる機能である導電性接着剤は#138-a、電線絶縁被覆材は#138-eに該当し、構造材機能が主たる接着剤は#123、電線保護被覆材は#127や#128を選択する。 また、電気・電子材料系の構成成分として電気・電子機能発現にかかわる溶剤（例えば、電解溶液の溶剤）は、#102～#109の溶剤（例えば、#102-eの電子デバイス用溶剤等）ではなく、#138に該当する。 ただし、電気・電子材料の製造・加工プロセスで使用される洗浄剤は、非水系及び準水系であれば#104(金属洗浄)、#106（その他の洗浄剤用溶剤）、水系であれば#112（水系）を選択する。また、エッチング薬剤は、#134-g（エッチング、スパッタリングなど）を選択する。レジスト関係は、＃124を、ただし、レジストの溶剤は、＃102-dまたは＃106-aを選択する。なお、エッチングとは、被処理材料の不要な全面または一部を化学的又は電気化学的に除去すること。洗浄とは、液体等を用い、表面の汚染物質（スケール、油脂、酸化膜、その他の汚れ等）を化学的に溶解し、又は機械的に除去すること。 絶縁油は#136を選択する。

2

1

図表 Ⅳ-７４　用途分類解説資料（３２）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		a	磁性材料[#138-fを除く]、導電材料、超電導材料、蛍光体材料	磁性材料は、強磁性、フェリ磁性を有する材料で、軟磁性材料（コイル、トランス磁心、磁気ヨーク、磁気シールド等に用いられる）、硬磁性材料（永久磁石として用いられる）、磁歪材料（磁界で変形する特性があり超音波発振機等に用いられる）、磁気抵抗材料（磁界で電気抵抗が変化する特性があり磁気ヘッド等に用いられる）がある。ただし、電子記憶媒体材料は#138-fを選択し、磁性体粉であるがトナーのキャリアは#116-hを選択する。 導電材料は、電気抵抗の低い材料で、例えば金属、合金、グラファイト、導電性金属ペースト、導電性インキ、導電性高分子、導電性ガラスなどがある。 超電導材料は、特定の金属や化合物などの物質を超低温に冷却した時に電気抵抗が急激にゼロになる材料。 蛍光体材料は、X線や紫外線、可視光線が照射されてそのエネルギーを吸収することで電子が励起し、それが基底状態に戻る際に余分なエネルギーを電磁波として放出する材料。
		b	半導体材料、有機半導体材料、液晶材料	半導体材料は、金属と絶縁体との中間の抵抗率を持ち、その電荷のキャリア密度がある温度範囲で温度とともに増加するような電子又はイオン伝導性の材料。ただし、電子記憶媒体材料は、#138-fを選択する。 有機半導体材料は、半導体性を有する有機化合物で、π電子がキャリアになるものとして多環芳香族炭化水類、フタロシアニン類および高分子があり、不対電子がキャリアになるものとして電荷移動錯体や遊離基を有する有機物がある。 なお、光導電性を有する有機光導電材料や、電子写真感光体などもここに含まれる。 電子写真感光体とは、電気現象を利用して可視画像を作る写真方式において、画像を静電潜像として記録するために用いられる薬剤。 液晶材料は、液体の流動性と結晶の異方性を併せ持つ材料で、その光学的異方性が電磁力・圧力・温度などに敏感に反応するので、表示装置に応用される。液晶の分子間相互作用によりネマチック、スメチック、コレステリックに分類される。
		c	誘電体材料、抵抗体材料、固体電解質材料、電解液材料、セパレータ材料	誘電体材料は、静電場により誘電分極を起こす材料で、常誘電体、圧電体、焦電体、強誘電体に分類される。圧電体とは、応力を加えることにより分極が生じる誘電体。 焦電体とは、圧電体のうち、外から電界を与えなくても自発的な分極を有しており、温度を変化させるだけでその表面に正負の電荷を発生する性質(焦電性)を持つ誘電体。 強誘電体とは、焦電体のうち、これを外部からの電界によって方向を反転させることのできる誘電体。 常誘電体とは、以上以外の全ての誘電体で、外部電界によって誘起される電気分極すなわち誘起分極だけを示す誘電体。 抵抗体材料は、電気回路に抵抗を与え、またその抵抗によって生ずるエネルギーをそのままの形、あるいは熱、光の形で利用するもので、金属材料と非金属材料に分けられる。 固体電解質材料は、高いイオン伝導性を持つ固体材料で、ここでは燃料電池、電解コンデンサ及び電気二重層コンデンサ等で用いられる無機固体電解質、有機固体電解質及び導電性高分子等が該当する。ただし、一次及び二次電池の電解質は、#139-aを選択する。 電解液材料は、溶液中でイオン解離する溶質（電解質）、添加剤及び溶媒からなる電解溶液の構成材料。電解溶液は、用いられる溶媒系によって水系電解液、有機系電解液及びイオン液体がある。 ここでは、燃料電池、電解コンデンサ及び電気二重層コンデンサ等で用いられる電解溶液が該当し、ここで用いられる溶剤（溶媒）は、構成成分として電気電子機能の発現にかかわるものであるので、#102～#109の溶剤（例えば、#102-eの電子デバイス用溶剤等）には該当しない。ただし、一次及び二次電池の電解質は、#139-aを選択する。 セパレータ材料は、燃料電池用セパレータとコンデンサ用セパレータに用いられる材料。 燃料電池用セパレータとは、積層セルの間に挟んで、燃料ガスや空気を遮断する板状の部品で、各セルをシールするほかに、ガスが流れる流路を作り込んで、燃料ガスや空気を送り込む機能を担う。他に電動性、耐食性、熱伝導性などが要求される。 コンデンサ用セパレータとは、正負の電極を分離し、電解液を維持する多孔質シート。

2

1

図表 Ⅳ-７５　用途分類解説資料（３３）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
	（添加剤とプロセス加工助剤を含む）［#139を除く][絶縁油は#136]	d	光導波路材料(光ファイバを含む)、光学フイルム材料、電子機器用光材料	光導波路材料は、光伝送路を作成する光学的特性を持つ材料で、光ファイバや薄膜導波路のようなシート状、板状に加工される。 光学フィルム材料は、光線を透過又は反射吸収し、様々な効果を与えることを目的としたフィルムの材料で、FPD用の配向フィルム、反射防止フィルム、偏光フィルム、位相差フィルム、拡散シート、プリズムシート、バックライトフィルム、輝度向上フィルム、視野角拡大フィルム、近赤外線吸収フィルムなどに加工される。 電子機器用光材料は、主たる光電子素子機能（発光ダイオード、光センサ）などを支える役割を担う材料で、例えば、液晶用基板材料（ガラス、プラスチック、セラミックス）などが該当する。
		e	封止材、絶縁材料、シールド材料	主たる電気・電子機能を保護する目的で用いられる材料。例えば、電子機器用実装材料においては、主たる電気・電子材料（#138-a～d、f）の機能を保護する封止材、絶縁材料、シールド材料、電子回路基板材料、などが該当する。ただし、保護・絶縁の目的で使用される材料であっても別途用途分類が設定されているものは該当する用途番号を選択する（例えば、構造材用接着剤は#123、レジストは＃124を選択する）。 封止材は、半導体素子や小型電子部品などを外部環境から保護する目的で封止するために用いられる材料で、樹脂と無機材料が組み合わせて使われる。 絶縁材料は、電気絶縁に用いられる材料で、天然材料、合成樹脂、無機材料がある。ただし、絶縁油は#136を選択する。 シールド材料は、外部からの影響を遮断（電気遮断、磁気遮断）する材料で、電気遮断や高周波遮断には導体板、金網など、磁気遮断には強磁性体が用いられる。
		f	電子記憶媒体材料（磁性材料、光吸収色素等）	電子記憶媒体材料は、映像機器や音響機器での映像や音楽の記録再生や、コンピュータでの情報処理に使用する記録媒体に用いられる材料で、磁性記録材料（磁気テープ、FD、HDD)、光記録材料（CD-rOM、DVD-rOM、BD-rOMなど）、光磁気記録材料（MOディスク）、半導体材料（フラッシュメモリー）などがある。
		z	その他	
139	電池材料（一次電池又は二次電池に用いられるものに限る。）			電池材料は、電池用の部品・部材等の調合・成形原材料を示す。ただし、これらの原材料を合成する原料は#101-aを選択する。 一次電池材料は、充電・繰り返し使用ができない化学電池（乾電池、ボタン電池）の材料。なお、一次電池には、乾電池、酸化銀電池、水銀電池、空気亜鉛電池、リチウム電池、海水電池、溶融塩電池等がある。 二次電池材料は、充電により繰り返し使用できる化学電池の材料。なお、二次電池には、鉛蓄電池、リチウムイオン二次電池、ニッケル・水素充電池、ニッケル・カドミウム蓄電池、ナトリウム・硫黄電池、ニッケル・亜鉛蓄電池、レドックス・フロー電池等がある。 なお、本用途の材料に用いられる添加剤は、#139-a又はbに、材料に含まれない加工助剤は、#139-zに該当する。製造・加工プロセスで使用される洗浄剤は、＃138を参照。 また、本用途に用いられる溶剤で、製品に含まれて電池機能の発現にかかわるもの（例：電解液用溶剤）は#139-a又はbに該当し、製品に含まれない溶剤は#102～#109の該当するものを選択する。
		a	電解質材料、電解液材料、絶縁材料、セパレータ材料	電解質材料は、高いイオン伝導性を持つ固体材料。例えば、無機固体電解質、有機固体電解質及び導電性高分子等がある。 電解液材料は、溶液中でイオン解離する溶質（電解質）、添加剤及び溶媒からなる電解溶液の構成材料。電解溶液には、用いられる溶媒系によって水系電解液、有機系電解液及びイオン液体がある。ただし、燃料電池、コンデンサで用いられる電解質材料、電解液材料は、#138-cを選択する。 絶縁材料は、セパレータと組み合わせて、正負電極の絶縁をする材料。 セパレータ材料は、正極板と負極板の間に介在して、両極活物質の接触に伴う短絡防止や電解液を保持して導電性を確保する材料。
		b	電極材料（活物質、集電体、導電剤、バインダー等）、減極剤	電極材料は、電極活物質、集電体、導電剤及びバインダーからなる電池材料。 活物質は、電池の正極及び負極に用いられる薬剤（酸化剤及び還元剤）。 集電体は、電池で電気をとりだす端子で、電池内部の活物質や導電助材に接触するもの。 導電剤は、電極の導電性を向上するために使用する薬剤。 バインダーは、活物質、集電体及び導電材の結着剤として用いられる薬剤。 減極剤（復極剤）は、電池を放電する際、電極に発生する水素によって生じる起電力低下の現象（分極）を抑制するために用いられる酸化剤。
		z	その他	

2

1

図表 Ⅳ-７６　用途分類解説資料（３４）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
140	水処理剤			水処理剤は、水を使用目的に合わせた水質にするため、又は周辺環境に影響を与えないよう排出するための処理に用いられる薬剤。 なお、水処理剤は、化学反応を伴うものであっても（例えば、#140-d）、生成物が廃棄物となり分離使用されない場合は化審法上反応が起こったとはみなされないが、この生成物を有価物とした場合は中間物（#101-a)を選択する。
		a	腐食防止剤、防錆剤、防食剤、防スケール剤、防藻剤	腐食防止剤、防食剤、防錆剤は、材料がそれをとり囲む環境物質によって化学的又は電気化学的に浸食、腐食、さび発生等で材質的に劣化するのを防止する薬剤で、冷却水などの防錆剤（酸化被膜型、沈殿被膜型、吸着被膜型）、ボイラー水の脱酸素剤、スラッジ分散剤等が該当する。 防スケール剤は、水系の無機スケールであるCaやMg等の炭酸塩、硫酸塩、リン酸塩等やシリカの沈着を防止、分散又は溶解する薬剤で、スケール付着防止剤、スケール溶解剤などが該当し、スケール等と微生物の混合したスライムの発生を防止するスライム防止剤も含まれる。 防藻剤は、水中の藻の発生を防止する薬剤。 水処理剤として用いられる防藻剤やスライム防止剤（≪工業用途≫に限る）は、ここに該当し、家庭用・業務用で使用する殺菌剤については、#120-dを選択する。
		b	金属イオン捕捉剤、金属イオン封鎖剤、硬水軟化剤	金属イオン捕捉剤は、金属イオンと水不溶性の塩又は錯塩を形成して、金属イオンを水から分離除去する薬剤。 金属イオン封鎖剤は、水溶液中で金属イオンと可溶性の塩又は錯塩を形成して、金属イオンの活性を抑制する薬剤（キレート剤等）。 硬水軟化剤は、水中の硬度成分（主にCa、Mgイオン）を除去又は封鎖する薬剤で、炭酸カルシウムとして沈殿させるアルカリ法（石灰軟化法、石灰ソーダ軟化法）、キレート剤で硬度成分を封鎖するイオン封鎖法、及びイオン交換樹脂やゼオライトで硬度成分をイオン交換除去するイオン交換法等がある。ただし、不均一（固体）の除去剤であるイオン交換体は、#140-cを選択する。
		c	イオン交換体（有機及び無機イオン交換体）、分離膜	イオン交換体は、イオン交換能を有する固体で、イオン交換樹脂、イオン交換膜（樹脂）及び無機イオン交換体があり、再生剤で処理することにより再使用可能なイオン除去材である。 分離膜は、物質が膜を透過する速度の差を利用して成分を分離する高分子膜（半透膜、逆浸透膜等）。 なお、イオン交換体及び分離膜に用いられる添加剤、加工助剤等もここに含まれる。 ただし、吸着剤は、#141-bを選択する。
		d	酸化剤、還元剤、pH調節剤	酸化剤は、水中の金属（鉄、マンガン、ヒ素など）を酸化して化学種を変え、沈殿除去、イオン交換除去しやすくする薬剤。また、水中の有機物（シアン、臭気物質、着色物質など）を酸化して、無害化、脱臭、脱色等を行う薬剤。 還元剤は、水中の金属（六価クロム等）や塩素などを還元して化学種を変え、無害化及び沈殿除去し易くする薬剤。 pH調節剤は、#126-hの用語の定義を参照。
		e	消泡剤、凝集剤、濾過助剤、脱水助剤、イオン交換樹脂再生剤	消泡剤は、水、水溶液、懸濁液などの表面張力を低下させ、安定した泡の形成を阻止又は抑制するために添加する薬剤。 凝集剤は、汚濁水中に分散している粒子を集合させ、沈降を促進するために用いられる薬剤。 濾過助剤は、原液のろ過性の改善や、濾材の目詰まり等を防止するために用いられる薬剤。 脱水助剤は、濾過ケーキの含水率を低下させ、ケーキ量を少なくする薬剤。 イオン交換樹脂再生剤は、使用後のイオン交換樹脂を再生する薬剤（酸、アルカリ）。
		z	その他	
141	乾燥剤又は吸着剤			気体や液体を吸着又は吸収して物質を分離や除去するために用いられる液体や固体の薬剤を吸着剤又は吸収剤という。 なお、吸着・吸収される物質が水の場合を乾燥剤という。

2

1

図表 Ⅳ-７７　用途分類解説資料（３５）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		a	乾燥剤、脱水剤	乾燥剤は、湿気を吸着・吸収する薬剤。化学的乾燥剤（生石灰、塩化カルシウムなど）と物理的乾燥剤（シリカゲル、ゼオライトなど）があり、密閉環境中の湿気を吸収して、金属製品、薬品、その他物品のさび、変質などから保護する目的で使用されたり、化学プロセスにおいて原料、中間体、製品等の乾燥操作に用いられる。 脱水剤は、ここでは乾燥剤の意味に限定する。ただし、脱水反応によって分子から水を脱離させる触媒等として使用されるものは、化学プロセス調節剤（#110-a）を選択する。また、スラッジ、汚泥の脱水剤は、#140-e、高吸水性高分子は、#127-bを選択する。
		b	吸着剤（脱臭剤、脱硝剤、ガス吸着剤等）	吸着剤は、混合気体又は混合溶液と固体物質を接触させたとき、界面のごく近くの物質の濃度が相の内部より大きくあるいは小さくなる現象を引き起こす作用のある薬剤。化学プロセスでは分離・精製操作や水処理操作などに使用され、一般用途では脱臭剤や浄水剤などに使用される。 脱臭剤は、臭気を物理的作用等で除去又は緩和するもの。ただし、芳香剤、消臭剤、防臭剤は、#122を選択する。 脱硝剤は、窒素酸化物（NOx）を吸着して除去する薬剤。また、硫黄化合物（H2S、CS2、COS、SOx等）を吸着して除去する脱硫剤もここに該当する。ただし、散布剤、埋立処分前処理薬剤の目的で使用される場合は、#145-zを選択する。 ガス吸着剤は、各種ガスを吸着して分離、除去する薬剤。
		c	吸収剤（脱酸素剤等）	吸収剤（吸収媒）は、気体又は蒸気を内部に取り込む固体又は液体、及び液体を内部に取り込む固体の薬剤。吸収には化学吸収と物理吸収があり、例えば、鉄粉及び鉄化合物（脱酸素剤）などが反応によって酸素を吸収する現象を化学吸収といい、パーフルオロカーボンが反応によらず酸素を吸収（溶解）する現象を物理吸収という。 脱硝剤は、窒素酸化物（NOx）を窒素に還元する薬剤（アンモニア、尿素、炭素など）やNOxを中和・吸収する薬剤（アルカリ性物質）、また、硫黄化合物（H2S、CS2、COS、SOx等）と反応して除去する脱硫剤もここに該当する。ただし、散布剤、埋立処分前処理薬剤の目的で使用される場合は、#145-zを選択する。 さらに、分離・精製プロセスに用いられる吸収溶剤および脱硝剤や脱硫剤の溶剤は、#107-cを選択する。一方、溶剤に加えて用いられる吸収剤（酸、アルカリなど）はここに該当する。
		z	その他	
142	熱媒体			熱媒体は、装置を一定の操作温度に維持するための加熱や冷却を行うために用いられる薬剤。一般的には物理的、化学的に安定な物質で、熱源と被加熱体間の伝熱の仲介に使われる。熱油、温水、有機熱媒体、溶融塩HTS、溶融金属などの液状熱媒体と加熱水蒸気、煙道ガス、空気などのガス状熱媒体とがある。
		a	冷媒、冷却剤	冷媒は、冷却システムの中で熱伝達用として使用する薬剤で、作動媒体と冷却媒体がある。 作動媒体とは、流体の相変化を利用して、低温で熱を吸収し、高温で熱を放出する媒体で、同一薬剤でもエアコンの作動媒体のように、熱吸収を利用する冷房用途では冷媒と呼ばれ、熱放出を利用する暖房用途では熱媒と呼ばれるが、ここでは併せて冷媒と呼ぶことにする。 冷却媒体とは、装置を冷却するために外部冷却源と装置の間にあって又は循環して、顕熱を利用して熱伝達する媒体。 冷却剤は、冷媒と被冷却体との間にあって、主として融解熱等の潜熱を利用して熱伝達する蓄冷剤・保冷剤などの薬剤。保冷剤、冷却ジェルシートの冷却ジェル及び添加剤も含む。 ただし、熱入れに使用される水、ポリマー水溶液(ポリマー焼入剤など)、鉱油、などの水溶性および不水溶性の熱処理油は、#137を選択し、焼き入れガス、焼鈍（焼き鈍し）ガス、溶融塩（塩浴）、溶融金属などの金属の熱処理に用いる加工助剤は、#133-bを選択する。
		b	熱媒、加熱剤	熱媒は、加熱システムの中で熱伝達用として使用する薬剤で、作動媒体と加熱媒体がある。 作動媒体とは、物質が化学変化を利用して、低温で熱を吸収し、高温で熱を放出するケミカルヒートポンプの媒体。ただし、流体の相変化を利用するヒートポンプの作動媒体（熱媒及び冷媒）は、#142-aを選択する。 加熱媒体とは、装置を加熱するために外部熱源と装置の間にあって又は循環して、顕熱を利用して熱伝達する媒体。 加熱剤は、物体を加熱する際に化学反応熱を利用する薬剤や熱媒と被加熱体との間にあって、主として潜熱（凝固熱等）を利用して熱伝達する蓄熱剤・保温剤などの薬剤。
		z	その他	

2

1

図表 Ⅳ-７８　用途分類解説資料（３６）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
143	不凍液			不凍液は、機関冷却水の凍結防止や集熱器、配管の凍結破損の防止のために冷却媒体（水）に添加される薬剤。冷却装置のさび止め・防食なども兼ねる場合が多い。不凍剤の慣用語である。
		a	不凍液（LLC等）	不凍液は、上記#143の用語の定義を参照。 LLCは、ロングライフクーラントの略称で、自動車のオーバーヒートの予防、凍結防止、防錆の目的で用いられる不凍液のこと。
		b	防錆剤、防食剤	防錆剤は、冷却装置、配管等の内部でさびが発生するのを防止するために用いられる薬剤。 防食剤は、金属表面に保護膜を形成し、金属が腐食性物質に侵されるのを防止するために用いられる薬剤。
		z	その他	
144	建設資材又は建設資材添加物			ここでいう「建設資材」は、土木建築に関する工事に使用する資材であって、他に用途分類が設定されていない資材に限定する。したがって、合成繊維（#125）、プラスチック（#127）、合成ゴム（#128）、ガラス・ほうろう・セメント（#130）、陶磁器・耐火物・ファインセラミックス（#131）、等は、それぞれの用途番号等を選択する。 ここでいう建設資材添加物は、建設資材へ添加される混和材料や木材改質剤等を指す。ただし、建設資材の添加物として用いられる着色剤（#111）、ワックス（#114）、塗料・コーティング剤（#115）、接着剤・粘着剤・シーリング剤（#123）、等は、それぞれの用途番号等を選択する。 混和材料とは、セメント、水、骨材以外の材料で、コンクリートやモルタルなどに特別の性質を与えるために、打ち込みを行う前までに必要に応じて加えられる材料。混和材料には、混和剤と混和材がある。 混和剤とは、混和材料の中で、使用量が少なく、それ自体の容積がコンクリートやモルタルなどの練上がり容積に算入されないもの。（例：＃144-b参照） 混和材とは、混和材料の中で、使用量が比較的多く、それ自体の容積がコンクリートやモルタルなどの練上がり容積に算入されるもの。（例：フライアッシュ、シリカフューム、高炉スラグ微粉末、膨張剤等） モルタルとは、セメント、水、細骨材及び必要に応じて加える混和材料を構成材料とし、これらを練混ぜその他の方法によって混合したもの、又は硬化させたもの。
		a	表面硬化剤	表面硬化剤は、種々のバインダーを用いたコンクリートやモルタルなどの内部に浸透し、その表面を硬化するために用いられる薬剤。コンクリート表面養生剤、ヘアークラック防止剤もここに該当する。 クラックとは、亀裂、ひび割れのこと。住宅の場合、建物の外壁や内壁、基礎などにできる亀裂やひび割れのことをさす。ごく小さく、深さのあまりないクラックを髪の毛に例えてヘアークラックと呼ぶ。
		b	コンクリート混和剤（強化剤、減水剤）	バインダーとしてセメント、アスファルト又はポリマーを用いたコンクリート用の混和剤は、練り混ぜの際に必要に応じてコンクリートなどに加えられる混和材料の中で、使用量が少なく、それ自体の容積がコンクリートなどの練り上がり容積に参入されないもの。なお、これらのバインダーを用いたモルタル用の混和剤も該当する。ただし、混和材は#144-zを選択する。 強化剤、減水剤は、コンクリートなどの単位水量を増やすことなく流動性をよくするか、流動性を変えることなく単位水量を減らすために用いられる混和剤。なお、その他に、AE剤、AE減水剤、高性能AE減水剤、高性能減水剤、硬化促進剤等の混和剤がある。 AE剤とは、コンクリートの中に多数の微細な独立した空気泡を一様に分布させ、ワーカビリティ及び耐凍害性を向上させるために用いられる混和剤。空気連行剤と同義。 AE減水剤とは、AE剤と減水剤との両方の性能を兼ね備えた混和剤。 高性能AE減水剤とは、空気連行性をもち、AE減水剤よりも高い減水性能及び良好なスランプ保持性能を持つ混和剤。 高性能減水剤とは、スランプを一定とした条件で単位水量を大幅に減少させるか、又は単位水量を一定とした条件でスランプを大幅に増加させる混和剤。 硬化促進剤とは、セメントの水和を早め、初期材齢の強度発現を大きくするために用いられる混和剤。 スランプとは、フレッシュコンクリートの軟らかさの程度を示す指標の一つで、スランプコーンを引き上げた直後に測った頂部からの下がりで表す。

2

1

図表 Ⅳ-７９　用途分類解説資料（３７）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		c	離型剤、消泡剤	離型剤は、種々のバインダーを用いたコンクリート、モルタル等の型離れを良くする薬剤で、型枠に塗布又は噴霧して用いられる。 消泡剤は、破泡剤、抑泡剤の総称。特殊な界面活性剤又はシリコーン油などで、コンクリート、モルタル等に混入して、その中の空気を減少させるために用いられる。 破泡剤とは、生成した泡まつを消す作用のある薬剤。 抑泡剤とは、起泡作用を抑止する薬剤。
		d	木材補強含浸剤、木質板添加剤	木材補強含浸剤は、木材に含浸させ、化学処理をすることで、木材に耐候性、耐久性、寸度安定性、可塑性などを付与することを目的に用いられる薬剤。ただし、木材防腐剤及び防蟻剤は、#118-aを選択する。 木質板添加剤は、木質材料から木質板等を製造する際に添加される薬剤。難燃剤、ホルムアルデヒド捕集剤、高分子化合物、酸化防止剤などがある。ただし、ワックス、塗料及び接着剤は、それぞれ#114、#115及び#123を選択する。
		e	防汚剤[#117-b,cを除く]、防水剤、撥水剤	「建設資材」への含浸、練り込み等の処理によって防汚、防水又は撥水等の表面機能を付与する薬剤が該当する。ただし、表面への塗布・コーティング処理やシーリング処理によるものは#115、#117や#123を選択する。 防汚剤は、建設資材に汚れが付着するのを防止する薬剤。なお、一度付いた汚れを落ちやすくする加工剤もここに含まれる。 防水剤は、コンクリート、木材・木質材料、せっこうボード等の水、湿分による強度劣化に抵抗性を持たせるために用いられる薬剤。 撥水剤は、建設資材の表面に水をはじく性質を与える薬剤。なお、建設資材の表面に油をはじく性質を与える撥油剤として有機フッ素化合物等があるが、それらは同時に撥水作用も示すことからここに該当する。
		f	建設資材	建設資材は、上記#144の用語の定義参照。コンクリートやモルタルのバインダー(結合材)として用いられるポリマー(分子量にかかわらず)やアスファルト、又は、混合物用骨材や路盤材として使用される鉄鋼スラグ、等が該当する。
		z	その他	その他の建設資材添加物が該当する。たとえば、モルタルやコンクリート(人造・人工大理石も含む)等に用いられる無機やポリマーの混和材、石綿飛散防止剤などが該当する。
145	散布剤又は埋立処分前処理薬剤			散布剤は、環境中(大気、水域、土壌)へ散布することによって機能を発揮する薬剤の総称。土壌改良剤、凍結防止剤など土木資材・農業資材・公園資材用などが該当する。 埋立処分前処理薬剤は、煤じん、飛灰などを廃棄物処分場に埋め立てる前に無害化したり、環境中に飛散しないために散布する薬剤の総称。
		a	凍結防止剤(融雪剤等)	凍結防止剤は、冬季の道路・滑走路・農地・ゴルフ場・校庭などの路面の氷雪を除去するため散布する薬剤。 融雪剤、融雪促進剤、滑り止め剤、融氷雪剤、融雪防滑剤、凍結遅延剤は、ここに該当する。スキー場で用いられる雪面硬化剤、融雪防止剤なども含む。
		b	土壌改良剤、地盤改良剤	地盤改良とは、地盤の支持力の増大や沈下の抑制を目的とした、土の締固め、脱水、団結、置換などの処置。 土壌改良とは、土壌を耕作等に適するように改良するため、地力を増進させることを目的として行われる。 これらの処置のために用いられる薬剤を土壌改良剤あるいは地盤改良剤と呼ぶ。 土壌浄化剤を含む。 土壌浄化剤とは、汚染土壌の改良剤で、土壌改良剤の一種。 重金属汚染の浄化剤には、キレート化剤、フェライト化剤が、有機物汚染(VOC,油等)の浄化剤には、酸化剤、微生物活性化剤(酸化剤等)が使用される。
		c	消火剤	消火剤は、火災の際に冷却効果、窒息効果(空気の遮断)を利用して火を消す薬剤。一般的には消火器に入っている薬剤を指す。
		d	人工降雨剤	人口降雨剤は、結晶格子の分子配列の形や間隔が雪の結晶に似ており、雲の中に小さな氷の粒が少ない際に投入される薬剤。あるいは、温度を下げ、雲粒を氷にするために投入される薬剤。雲のない所に雨を降らせるのではないので、事実上は人工増雨剤である。
		e	油処理剤	油処理剤は、流出油処理剤とも呼ばれ、海上や河川に流出した油類を乳化分散するための薬剤。

2

1

図表 Ⅳ-８０　用途分類解説資料（３８）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
		f	粉塵結合剤、粉塵防止剤、煤塵処理剤	粉塵結合剤は、大気への排出を減少させるために、粉状又は破砕物質の微細に分離された固体粒子を制御するために使用される薬剤。 粉塵防止剤は、土砂、石炭、鉱石などの微細な粉塵が風によって飛散するのを防止する薬剤で、界面活性剤や水溶性高分子などがある。 煤塵処理剤は、燃料やゴミ等の燃焼過程で生じるすす、灰などの燃焼ガス中に含まれる個体粒状物質の飛散防止、有害物質の固定化・無害化などの処理に用いられる薬剤で、重金属固定化剤、固化剤、安定化剤、キレート化剤、硬化剤、溶融補助剤などがある。
		z	その他	
146	分離又は精製プロセス剤			分離プロセス剤又は精製プロセス剤の内、鉱業や金属製造業の製錬・精錬で用いられて、鉱石や粗金属からこれらの不純物金属等を分離除去する工程で用いられる薬剤がここに該当する。金属以外（石炭・石油など）の分離・精製で用いられる薬剤は、#110を選択する。分離・精製用溶剤は#107を選択する。 鉱業は、地中から人間生活に役立つ鉱物（石油，石炭などの燃料鉱物、金，銀，鉄鉱などの金属鉱物，硫黄，リンなどの非金属鉱物等）を取出す産業で，探鉱，採鉱，選鉱の段階に分れる。 金属製造業は、鉱石（粗鉱，精鉱），金属くずなどを処理し，金属の製錬及び精製を行う工業，金属の合金製造，圧延，抽伸，押出しを行う工業及び金属の鋳造，鍛造，その他の基礎製品を製造する工業に3分類されるが、ここでは第１分類（製錬、精錬まで）だけが該当し、第２分類、第３分類は＃133を選択する。 粗鉱とは、採掘されたままの鉱石。 精鉱とは、選鉱の結果得られる高品位物の産物で、製錬原料または工業原料として直接使用できる程度に品位が高められた鉱石。 製錬とは、鉱石を還元することによって金属を取り出す過程のことである。製錬によって取り出された金属は純度が低い場合が多く、純度を高めるために精錬が必要な場合がある。 精錬とは、不純物の多い金属から純度の高い金属を取り出す過程のことである。
	（鉱業又は金属製造業に使用されるものに限る。） [分離・精製用溶剤は#107]	a	浮選剤（捕収剤、起泡剤、条件剤）、金属浸出剤	鉱業、金属製造業等で製錬前の金属の分離・精製に用いられる薬剤がここに該当する。なお、浮選(浮遊選鉱）とは、鉱石の細粉を水系サスペンションから気泡を用いて浮上させ、目的とする鉱石を他の鉱石と分離すること。 浮選剤は、浮選に使用する薬剤の総称。 捕収剤は、特定の種類の固体粒子の表面に選択的に疎水性を付与し、又はそれを助長するために用いられる薬剤。 起泡剤は、フロス浮選において、気泡の発生と分散を助けるとともに、フロスを安定させるために用いられる薬剤。 条件剤は、捕収剤と起泡剤を除く浮選剤の総称で、以下の活性剤、抑制剤、硫化剤、pH調整剤などがある。 活性剤（活剤）とは、活性化を行うために用いられる浮選剤。 抑制剤とは、特定の種類の固体粒子の浮遊を抑制するために用いられる薬剤。 硫化剤とは、浮選において、ある種の非硫化鉱物を活性化するために鉱物表面を硫化物に変化させる薬剤。 pH調節剤とは、浮選において水素イオン濃度を調節するために用いられる薬剤。 金属浸出剤は、鉱石から金属成分を溶出させる薬剤で、酸、塩基、ハロゲン、チオシアン酸塩、チオ硫酸塩及びその他の錯イオン形成剤などが該当する。
		b	凝集剤、乳化剤、分散剤、金属捕捉剤	凝集剤は、凝集現象を起こし、又は助けるために用いられる薬剤。 乳化剤、分散剤は、#110-cの用語の定義を参照。 金属捕捉剤は、捕集剤とも呼ばれ、粒子表面を疎水化して気泡に付着しやすくし、浮遊選鉱に用いて目的とする鉱石粒子を捕集するために用いられる薬剤。
		z	その他	
147	燃料又は燃料添加剤			燃料は、熱エネルギーを発生する薬剤で、石炭、石油などの化石燃料、生産活動により発生する副生燃料などが該当する。なお、燃料電池の燃料もここに該当する。

2

1

図表 Ⅳ-８１　用途分類解説資料（３９）

用途番号	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	定義、説明
147	燃料又は燃料添加剤			燃料は、熱エネルギーを発生する薬剤で、石炭、石油などの化石燃料、生産活動により発生する副生燃料などが該当する。なお、燃料電池の燃料もここに該当する。 詳細用途b～zの燃料添加剤等は、燃料に加えられる薬剤の総称である。なお、燃料及び燃料添加剤等のうち、「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律第２条第２項各号又は第３項各号のいずれにも該当しないと認められる化学物質その他の同条第５項に規定する評価を行うことが必要と認められないものとして厚生労働大臣、経済産業大臣及び環境大臣が指定する化学物質」に示される化学物質（届出不要の化学物質）以外は製造数量等の届出が必要である。 ウラン等の核燃料物質（放射性物質）は、化審法対象外である。 なお、石油精製等の燃料製造プロセス調節剤は#110に該当する。 固形燃料は#121を選択する。
		a	燃料	燃料は、上記#147の用語の定義を参照。
		b	燃料添加剤（清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等）	燃料添加剤は、以下の薬剤の総称で、燃料油添加剤ともいう。 清浄分散剤は、主に内燃機関用潤滑油に添加し、燃料の燃焼などによって副生する酸成分を中和したり、スラッジを分散させたりする薬剤。 酸化防止剤は、燃料成分の酸化で生じるラジカルの発生抑制、不活性化によって、過酸化物の生成を防止する薬剤。 粘度指数調整剤は、温度に伴う油の粘度変化を小さくし、粘度指数を改善する薬剤。 摩擦低減剤（潤滑性向上剤）は、燃料ポンプ等の摺動面の摩擦を低減する薬剤。 防錆剤は、燃焼機関等のさび止めのために用いられる薬剤。 燃料油貯蔵安定剤とは、重質燃料油中のスラッジの凝集や沈降を防止し、その貯蔵時の安定化を図るために用いられる薬剤。 流動点降下剤とは、潤滑油、燃料油などが流動し得る最低の温度を降下させる薬剤で、低温流動性向上剤ともいう。
		c	燃焼改良剤（燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等）	燃焼改良剤は、以下の薬剤の総称。 燃焼促進剤（助燃剤）は、燃料の燃焼を促進し、不完全燃焼による油煙の生成を少なくする薬剤。 セタン価向上剤は、ディーゼルエンジンのノッキングを軽減するために軽油に加えられる添加剤で、ディーゼル燃料油の着火性を向上させる薬剤。 アンチノック剤は、ガソリンのアンチノック性を向上させるために用いられる薬剤。 スラッジ分散剤とは、重質油のスラッジを分散させ、燃焼性向上や燃料タンク内堆積物を減少させるために用いられる薬剤。
		d	氷結防止剤、着臭剤	氷結防止剤は、吸入空気中の微量水分の気化器での氷結による障害を防止するために用いられる薬剤。 着臭剤は、ガス類が漏洩した場合に、人間の嗅覚で容易に感知し得るようにするために燃料用や燃料電池用に用いられるガスに添加する特有な臭気を有する薬剤。付臭剤ともいう。
	［固形燃料は#121］	z	その他	その他に以下の薬剤が該当する。 帯電防止剤とは、ガソリン、ジェット燃料に添加して急速燃料補給などにより発生する静電気の滞留による火災を防止する薬剤。 微生物抑制剤とは、油中に発生するバクテリア、カビによるスラッジ生成、フィルタ閉塞を防止し、殺菌効果も有する薬剤。ジェット燃料に添加される。 黒煙防止剤とは、ディーゼルエンジンからの排気ガス中の未燃カーボンによる黒煙の発生を防止する薬剤。 灰分改質剤とは、重油中のバナジウム、ナトリウムが燃焼時に低融点化合物を形成し、炉壁に付着して高温腐食を起こすことに対し、灰分の融点を高めることで堆積物の炉壁への付着を防止する薬剤。 エマルション破壊剤とは、重油中に乳化状態で混入した水分を分離させる薬剤。 標識剤とは、灯油及びA重油に添加し、軽油へ混合する脱税行為を確認するために添加する薬剤。紫外線を照射すると蛍光を発する。
	上記以外			
198	その他の原料、その他の添加剤	z	その他の原料、その他の添加剤	用途番号#101～147に該当しない用途。用途不明の場合が該当する。
199	輸出用のもの	a	輸出用のもの	

2

IV.7.4 「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」の設定方法

化審法における製造数量等の届出制度の対象となる化学物質に適用可能な排出量推計手法を確立するため、用途情報と排出係数を用いた推計手法が平成 18 年度から平成 22 年度にかけて検討された。

排出係数一覧表は、独立行政法人製品評価技術基盤機構（NITE）が案を検討し、その後、平成 23 年 7 月 22 日及び平成 23 年 9 月 15 日の化審法 3 省合同審議会を経て、正式に「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」として平成 23 年 10 月 3 日に経済産業省のウェブサイトから公表された[1]。また、平成 29 年 6 月 7 日の化審法改正に合わせ、一部の用途及び排出係数について見直しが行われた。本節では、今回の改正に関してではなく、平成 23 年当時の検討の経緯を説明しており、図表中の用途番号については、検討した時期の用途番号が記載されているため、旧用途番号（二桁）であることに注意が必要である。

なお、優先評価化学物質の排出量推計に用いる排出係数は、優先評価化学物質のリスク評価結果に影響を及ぼすだけでなく、スクリーニング評価用の排出係数の設定の基礎データにもなっている。

IV.7.4.1 排出係数の設定方法の全体フロー

「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」に掲載されている排出係数の設定方法の流れを図表 IV-８２に沿って説明する。

図表 IV-８２　排出係数の設定方法の全体フロー

排出係数の設定方法は、大きく 3 つの段階に分かれ、図表 IV-８２にて①～③で示して

[1] その後、平成 24 年 2 月 15 日、平成 25 年 11 月 1 日の 2 回改訂されている。化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表の公表について（平成 25 年 11 月 1 日付）_ https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/ra_emissionfactor.html

いる。次の IV.7.4.2 では、その順に(1)～(3)において説明する。

また、IV.7.3.1 (3)にて前述したように、排出係数の設定と「用途分類一覧表」の設定とは、環境への排出の実態に応じた分類を設定するという考え方で互いに関係している。このことについても折に触れて述べていく。

IV.7.4.2 設定作業とその考え方

(1) EU-TGD A-table の簡略化

「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」は、EU-TGD の A-table という排出係数の一覧表を土台としている。

EU-TGD A-table は、REACH 規則以前の EU の法体系（Regulation 793/93, Directive 92/32/EC）において、EU 加盟国自身がリスク評価をする際に用いられてきた排出係数の一覧表である。また、この一覧表は、産業分類を表す Industrial Category(IC)（16 分類）、用途分類を表す Use Category(UC)（55 分類）、工程が閉鎖系であるか開放系であるか等を表す Main Category(MC)（11 分類）、そして蒸気圧や水に対する溶解度などの物理化学的性状といった複数の因子から、5 つのライフサイクルステージ（Production, Formulation, Industrial use, Service/Private use and Recovery）、3 つの排出先環境媒体（大気、水域、土壌）ごとに排出係数を選択するように構成されている。

設定作業の第 1 段階として、EU-TGD A-table を土台として排出係数一覧表を作成するにあたり、旧化審法（平成 15 年度改正法）において、旧第二種又は旧第三種監視化学物質に関する製造数量等の届出制度の中で国への報告が要求されていた情報と照らし合わせ、A-table よりも少ない因子（ライフサイクルステージ、詳細用途、物理化学的性状（蒸気圧又は水に対する溶解度）、排出先環境媒体（大気、水域））で排出係数が選定されるように簡略化している。このことは、EU-TGD A-table の複数の因子のうち、IV.7.4 「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」の設定作業では IC、MC の部分を省略したことを意味している。

省略した項目のうち、産業分類を示す IC は、用途分類を示す UC に比べると、より EU-TGD A-table の基本骨格をなしていることから、A-table を土台にするにあたって IC は省略し難い項目である。一方で、化審法における製造数量等の届出制度では出荷先の用途の届出を必要としているものの、産業分類の届出を必要としていない[1]。そこで、用途分類と詳細用途分類からなる「用途分類一覧表」では、用途分類を出荷先での調剤の使用目的に該当するように設定し、それによって産業分類の意味合いを持たせるようにした。例えば、「27

[1] 産業分類を用いた排出量推計手法を提案しなかった理由は、製造・輸入者が出荷先の業種を特定し、届け出ることは難しいと考えたためである。その背景には、1 つは、化管法 PRTR 制度の FAQ に挙げられているように、我が国では会社全体の業種と工場の業種が異なる事例がみられたことがある。(NITE, PRTR 制度 FAQ, PRTR 届出の対象業種・事業所の範囲に関するもの https://www.nite.go.jp/chem/prtr/qanda/faq_prtr2.html) また、もう 1 つは、米国においても、化学物質を取り扱うサプライチェーンの川下の加工業者の業種に関する情報を、製造・輸入業者に対して要求することは、現実的でなく、有益でないかもしれないと議論されていたことである。(U.S. EPA(1993) CUI (Chemical Use Inventory) Multi-stakeholder meeting, Discussion Paper, pp.18)

プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤」という用途分類の届出でもって、出荷先の業種が「日本標準産業分類中分類 18 プラスチック製品製造業」であることを想定している。このように出荷先の調剤の使用目的を示す用途分類を IC と対応させるように用途分類の設定作業を行った。代表的な例を図表 Ⅳ-８３に示す。

図表 Ⅳ-８３　Industrial Category に対応する用途分類

IC No. ※	Industrial Category	用途分類番号
1	Agricultural industry	
2	Chemical industry: basic chemicals	
3	Chemical industry: chemicals used in synthesis	#01
4	Electrical/electronic industry	#38, 39
5	Personal/domestic	#13, 14, 20, 22
6	Public domain	#20
7	Leather processing industry	#29
8	Metal extraction, refining and processing industry	#04, 33, 34, 35, 37, 46
9	Mineral oil and fuel industry	#36, 37, 47
10	Photographic industry	#24
11	Polymers industry	#27, 28
12	Pulp, paper and board industry	#26
13	Textile processing industry	#25
14	Paints, lacquers and varnishes industry	#02, 03, 15, 17, 23
15	Engineering industry: civil and mechanical for NEW SUBSTANCES Others for EXISTING SUBSTANCES	
999	Others for NEW SUBSTANCES	

※　EU-TGD PartII Appendix I と EU TGD PartIII Chapter V とでは、IC No.が異なる。ここでは、後者に倣っている。

続いて、省略したもう一つの項目である MC について述べる。MC は、化学物質に係る操作、管理に対応した排出の程度をライフサイクルステージ別に示している。EU-TGD A-table では図表 Ⅳ-８４に示すように MC は大きく４つ（I, II, III, IV）に区分され、さらに 11 に分類されている。なお、MC I は “Use in closed systems”、MC II は、“Use resulting in inclusion into or onto a matrix”、MC III は、“Non-dispersive use”、MC IV は、“Wide dispersive use”と呼ばれている。

図表 Ⅳ-８４　EU-TGD A-table Main Category (MC) (EU(2003)[1]より)

No.	MC	Life cycle stage	Interpretation
1	Ia	Production	Non-isolated intermediates (IC 3 or 9 & UC 33)
2	Ib	Production	Isolated intermediates stored on-site, or substances other than intermediates produced in a continuous production process
3	Ib	Formulation	Dedicated equipment and (very) little cleaning operations
4	Ic	Production	Isolated intermediates stored off-site, or substances other than intermediates produced in dedicated equipment
5	Ic	Formulation	Dedicated equipment and frequent cleaning operations
6	II	Formulation	Inclusion into or onto a matrix
7	II	Processing 1)	Non-dispersive use (industrial point sources), or processing of intermediates in multi-purpose equipment
8	III	Production	Multi-purpose equipment
9	III	Formulation	Multi-purpose equipment
10	III	Processing 1)	Non-dispersive use (industrial point sources), or processing of intermediates in multi-purpose equipment
11	IV	Processing 1)	Wide dispersive use (many small point sources or diffuse releases; normally no emission reduction measures)

1) Processing refers to industrial / professional use

製造（Production）段階であれば、MC=Ia, Ib, Ic, III の 4 種類、調合（Formulation）段階であれば、MC= Ib, Ic, II, III の 4 種類、工業的使用段階又は（家庭用・）業務用での使用（Processing）段階であれば、MC=II, III, IV の 3 種類が設定されている。

EU-TGD A-table の簡略化作業では、ライフサイクルステージごと、詳細用途ごとに MC のいずれか 1 つに対応させる作業を行っている。この作業においては、MC によっては複数の選択肢があるため、その場合は NITE の専門家の判断によって一意に決めている。

その他にも「Condition」と呼ばれる要因（蒸気圧や沸点、水に対する溶解度の条件）や「Type of Chemicals」と呼ばれる要因等で EU-TGD A-table は構成されていることから、これらの該当箇所についても、NITE の専門家の判断によって一意に決めている。

さらに、これらの NITE の専門家による案の妥当性を担保するため、産業界ヒアリングを行っている。

EU-TGD A-table の簡易化作業の結果を、IV.7.4.4 (1)に示す。

[1] EU (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment, PartII, Appendix I, p.208, Table 1 Interpretation of main category (MC) for relevant stages of the life-cycle

⑵ PRTR データ等から算出した排出係数による補正

排出係数設定における第 2 段階目の作業として、すべての詳細用途の物理化学的性状区分に対応させた EU-TGD　A-table の排出係数を我が国の排出実態に近づけるために PRTR 届出データ及び PRTR 対象物質の取扱い等に関する調査結果データ（以下、「PRTR データ等」という。）を用いて算出した排出係数によって補正している（図表 Ⅳ-８２の②参照)。

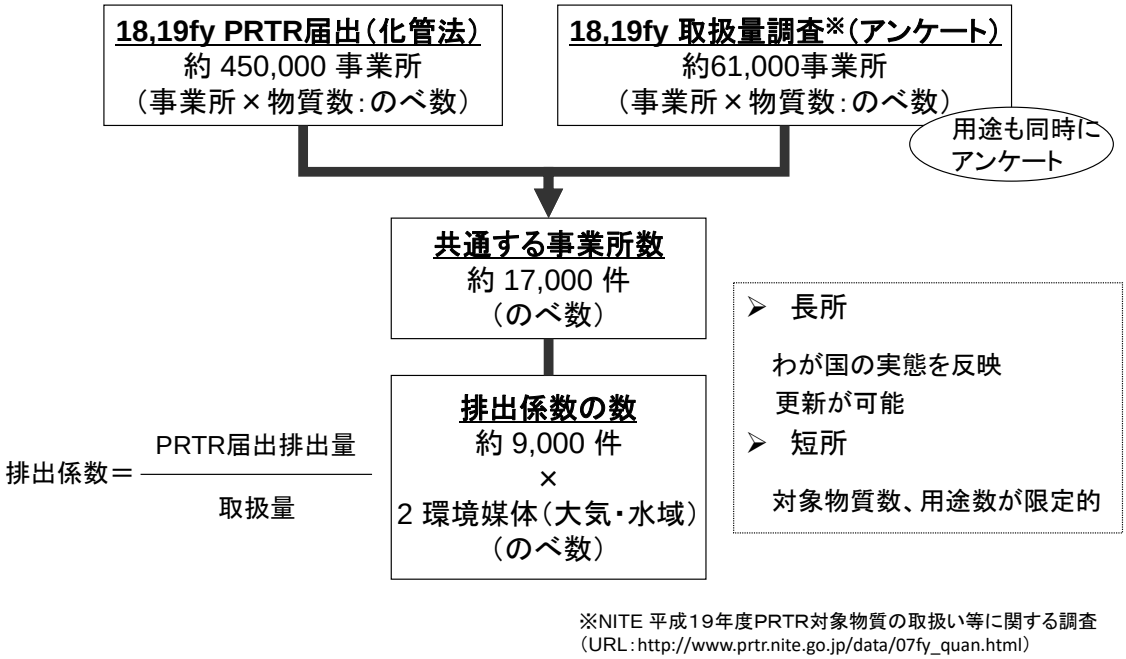
EU-TGD の A-table に収載されている排出係数の値は、専門家の判断を基にそのほとんどがワーストケースで設定されている。

日本版の排出係数一覧表を作成するにあたって、EU-TGD の A-table の排出係数をそのまま適用した場合、A-table に適切な産業分類がなく IC=0（その化学物質の物性値や操作方法が反映されない排出係数）を選択しなければならない場合や A-table の値が日本の実態に合わない場合等が散見された。これらの課題を解消するために、PRTR 届出データ等を用いて A-table の排出係数を補正している。

PRTR データ等から排出係数の値の算出フローを図表 Ⅳ-８５に示す。用いたデータは、平成 18 年度及び 19 年度のデータである。排出係数の算出には、環境中への排出量の他、取扱量の情報が必要である。環境中への排出量は化管法において公開されているため、その値を用い、取扱量については、PRTR 届出外推計のうち、対象業種届出外にあたるすそ切り推計に用いられている「PRTR 対象物質の取扱い等に関する調査（以下、「取扱量調査」という）」というアンケート調査結果を用いた。前者が法に基づく義務であるため、のべ 450,000 データであるのに対し、後者は任意の調査であるため、のべ 61,000 データとなり、両者についてデータが得られた事業所×物質数は約 17,000 件であった。そのうち、排出係数の値が 1 を超えるなどの異常値を排除し、補正に用いられる件数として、約 9,000 件を抽出した。

なお、PRTR 届出排出量の情報には、その事業所の業種などの情報が含まれるが、用途に関する情報はない。一方で、取扱量調査においては用途がアンケート項目に設定されている。取扱量調査の用途情報を用いることによって、化審法の詳細用途別に簡略された EU-TGD A-table の排出係数を補正するデータとして使用した。

また、平成 30 年度の改正にあたっては、新たに設定した用途や変更された用途について平成 18 年度及び 19 年度と同様の規模で平成 20 年度及び 21 年度に実施された取扱量調査と同年の PRTR 情報を補正するデータとして追加した。



図表 Ⅳ-８５　PRTR データ等からの排出係数の算出フロー

① 最大値と加重平均値

図表 Ⅳ-８５に示す方法で得られた PRTR データ等から算出した約 9,000 件の排出係数は、事業所ごと化学物質ごとの値である。これらの排出係数を化学物質の物理化学的性状と詳細用途から図表 Ⅳ-８６のように整理した。ここではイメージとして、１つの詳細用途を示している。各蒸気圧区分の欄の中に複数の事業所の複数の化学物質の排出係数が収まる。１つの欄に収まるこれらのデータから、最大値と加重平均値という２種類の代表値を整備した。最大値は、土台となっている EU-TGD A-table の排出係数の値がワーストケースの値であることから、それとレベルを合わせるために抽出した。加重平均値は、取扱いの大きな事業所の排出係数が考慮されるように算出した（図表 Ⅳ-８６参照）。これらの値は、産業界からの意見募集をホームページで行った際の排出係数一覧表（案）では併記している[1]。

設定した最大値と加重平均値の排出係数を用いた場合の排出量の妥当性検証や意見募集等をした結果、「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」では加重平均値法を採用している[2]。よって以降の説明は、加重平均値の排出係数について重点的に行う。

[1] 改正化審法に用いる「化学物質の排出係数一覧表（案）」に対する意見募集について https://search.e-gov.go.jp/servlet/Public?CLASSNAME=PCMMSTDETAIL&id=595210013&Mode=0

[2] 詳細は、平成 21 年度環境対応技術開発等(改正化審法における監視化学物質のリスク評価スキームに関する調査)報告書を参照されたい。
http://warp.da.ndl.go.jp/info:ndljp/pid/9482678/www.meti.go.jp/policy/chemical_management/other/files/21FY_Report.pdf

事業所毎の取扱い状況の違いは括られる

物質の違いは括られる

用途分類コード	詳細用途分類コード	Vp≦1Pa	1＜Vp＜10	10＜Vp＜100	100＜Vp＜1,000	1,000＜Vp＜10,000	10,000≦Vp
02	a	－	－	－	A社(物質a) 0.99 B社(物質b) 0.95 C社(物質a) 0.90 D社(物質b) 0.218	C社(物質f) 0.99 D社(物質f) 0.99 E社(物質f) 0.99	F社(物質h)1.00

情報がない欄はA-tableの値が用いられる

$$加重平均値＝\frac{事業所ごとの排出量の和（A～D社）}{事業所ごとの取扱量の和（A～D社）}$$

図表 Ⅳ-８６　PRTR データ等の排出係数一覧表への反映方法のイメージ

② PRTR データ等から算出した排出係数の傾向

PRTR データ等から算出した排出係数の全般的な傾向を把握するために、図表 Ⅳ-８６で示した詳細用途別・ライフサイクルステージ別・物理化学性状区分別の加重平均値の算出方法とは別に、ライフサイクルステージ別・物理化学的性状区分別に排出係数の加重平均値を算出し、図表 Ⅳ-８７に示した。なお、調合段階においては、＃43「不凍液」及び#147「燃料、燃料添加剤」のデータが他の用途に比べ取扱量が格段に大きいことからこの解析からは除いた。同様に、使用段階においては、排出係数が他の用途に比較して突出しているという理由で#31「陶磁器、耐火物、ファインセラミックス」のデータを除外した[1]。

その結果、大まかに以下の３つの傾向が得られた。

- 使用段階の排出係数の方が調合段階に比べて値が大きい。
- 大気への排出係数の方が水域に比べて１桁程度値が大きい。
- 大気、水域の調合段階、使用段階とも、ばらつきはあるものの物理化学的性状区分が大きくなるにしたがって排出係数の値が大きくなる。

[1] 用途番号#31 「陶磁器、耐火物、ファインセラミックス」の PRTR 届出排出量データについては、NITE のビスフェノール A リスク評価管理研究会の中間報告書(2003) 第 6 章において、窯業を営む届出企業に調査した結果を以下のように述べている。「…窯業で BPA を含んだ原料を高温で焼成し耐火物を製造しており、この際使用した樹脂に含まれる BPA は全て大気へ排出したとして計算を行っている。製造工程では、実際には焼成の際の排ガスはアフターバーナーで燃焼させていることから、殆ど大気中に排出されないものと思われる。」したがって、PRTR 届出データから導出した用途番号#31 の排出係数は、このような PRTR 届出における排出量の計算の影響を受けていると想定される。
https://www.nite.go.jp/data/000010065.pdf

図表 Ⅳ-８７　ライフサイクルステージ別・物理化学的性状区分別に加重平均した排出係数（用途番号#10～#47 のまとめ）

[大気]

ライフサイクルステージ	物理化学的性状区分（蒸気圧）					
	1Pa 未満	1-10Pa 未満	10-100Pa 未満	100-1,000Pa 未満	1,000-10,000Pa 未満	10,000Pa 以上
調合段階 1)	6E-05	4E-05	1E-03	4E-04	6E-04	1E-03
使用段階 2)	4E-04	4E-04	7E-03	1E-02	8E-03	3E-01

[水域]

ライフサイクルステージ	物理化学的性状区分（水に対する溶解度）				
	10mg/L 未満	10-100mg/L 未満	100-1,000mg/L 未満	1,000-10,000mg/L 未満	10,000mg/L 以上
調合段階 1)	6E-07	3E-06	2E-06	1E-04	2E-04
使用段階 2)	3E-05	6E-06	9E-04	2E-04	5E-03

1)　用途分類(#10～#47)の内、#43 及び#47 を除く。
2)　用途分類(#10～#47)の内、#31 を除く。

③ 準用と換算

調合段階と工業的使用段階の排出係数については、PRTR データ等に基づく排出係数（以下、すべて加重平均による排出係数の意味）の得られなかった詳細用途にも A-table 排出係数の値をそのまま用いるのではなく、詳細用途における化学物質に係る操作方法、管理の類似性に基づいた「用途内及び用途間の排出係数の準用」（以下、「準用」という。）及び PRTR データ等に基づいた換算係数による「A-table 排出係数から排出係数への換算」（以下、「換算」という。）という考え方を用いて排出係数を設定した。すなわち、この準用と換算の作業は、事業所からの排出について、できる限り EU のワーストケースであり、かつ年代の古い排出係数[1]から我が国の取扱量の大きい事業所の近年の化管法施行後の実態を表す排出係数へ補正することを意味する。

なお、検討の過程で、 EU の排出係数の中で値が大きいと考えられる調合段階と工業的

[1] EU-TGD A-table の排出係数の値が古いことに関しては、以下の状況からの推測である。EU-TGD A-table は 1996 年の EU-TGD 1st edition の公開から 2003 年の 2nd edition となった際も更新されていない。このことから少なくとも 1990 年前半までの欧州（欧州諸共同体（European Community）加盟国）内でのワーストケースの排出実態を反映した値とみなせると考えた。

使用段階の排出係数[1]について、産業界へ排出係数に関するヒアリング調査を実施し（後述）、その結果を PRTR データ等から算出した排出係数と比較して反映した。また、PRTR の排出量が 0 となっている場合には排出係数を 0 とせず、「下限値」（後述）を設定した。

④ OECD Emission Scenario Document 等での補足

PRTR 届出データは事業所からの排出に限ったものであるため、非点源からの排出係数である家庭用・業務用使用段階の排出係数及び長期使用製品の使用段階の排出係数（以下、「長期使用段階の排出係数」という）については、EU-TGD A-table の他に、OECD Emission Scenario Document（ESD）[2]や EU REACH 規則のガイダンス[3]等[4]で用いられている排出係数の値を参考にして設定した。特に、長期使用段階の排出係数の設定については、事業所からの排出と異なり、国ごとの管理の差が生じにくいと考え、国内と海外のデータを同様に採用した。また、長期使用製品中に取り込まれた化学物質の排出挙動は複雑で、化学物質そのものの物理化学的性状に一義的に対応させるには無理があると考え、むしろ簡略化して環境媒体と詳細用途だけに対応させた。

⑤ 下限値の設定とデータの無い分類への準用による補正

我が国の実態を表す PRTR データ等から算出した排出係数の情報が無い詳細用途分類については、EU-TGD A-table の値のままとなる。そのため、「下限値の設定」と「データの無い分類への準用」という考え方を用いて、EU-TGD A-table の値のままである部分を極力減らすことを試みた。

i) 下限値の設定[5]

PRTR 届出データや業界団体からの提供データの中には排出係数が最大値、加重平均値とも 0 との記載がある。しかし、ほとんどの場合において、その排出量は極めて小さな値であったとしても 0 ということではない。仮に、ある詳細用途分類のある蒸気圧区分の排出係数を 0 と設定した場合、同一の詳細用途分類で使用し、同一の蒸気圧区分に該当する化学物質すべてが大気への排出量が 0 と計算される。また、現行の PRTR 制度では、対象化

---

[1] 特に、水域への排出係数については、EU-TGD A-table の排出係数の大半が活性汚泥処理を伴う下水処理場を介す前の値であること、前述の PRTR データ等から算出した排出係数の傾向では大気への排出係数よりも 1 桁程度小さい傾向が見られたこと、また我が国では水質汚濁防止法によって全国一律の排水基準が設けられていることから、過大評価になる可能性があることを産業界に説明し、情報を求めた。

[2] OECD Emission Scenario Document http://www.oecd.org/env/ehs/risk-assessment/emissionscenariodocuments.htm

[3] ECHA(2010) Guidance on information requirements and chemical safety assessment, Chapter R.16: Environmental Exposure Estimation, Version 2.0 – May 2010(2014 年 4 月時点では Version2.1 が 2012 年 10 月に公開されている), Table R.16-23: Default parameters to derive the environmental release rate

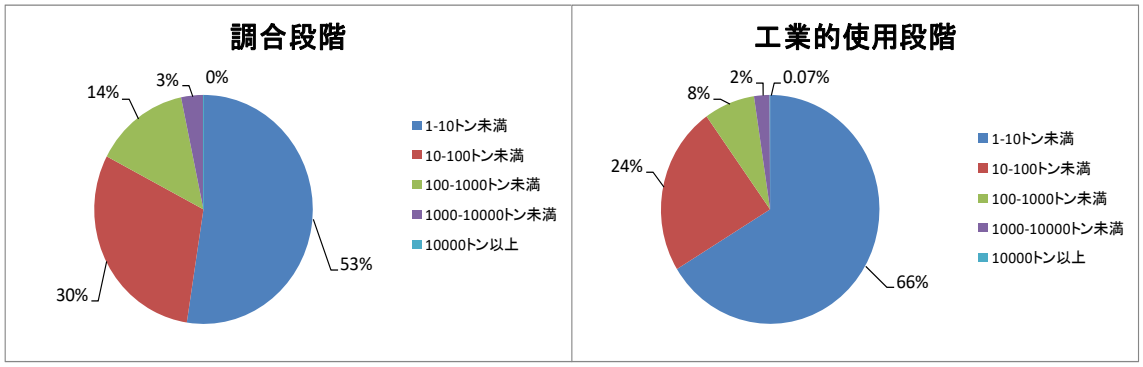
[4] 例えば、国による PRTR 届出外排出量推計手法（後述）や産業技術総合研究所による排出シナリオ文書（プラスチック添加剤：本手法検討時は公開されていない）を傍証とした。http://www.aist-riss.jp/main/modules/product/esd_downloadform.html

[5] 下限値の設定、特に「0」の扱いについては、我が国以外の EU REACH 規則の下で CEFIC を中心に開発している SPERC の排出係数作成においても課題があることが、ドイツ UBA のレポートで示されている。UBA(2011) Standardisation of Emission Factors for the Exposure Assessment under REACH, 4.6.4 Values of “0” を参照されたい。

学物質の年間の大気又は水域への排出量が 0.05kg 未満の場合は、排出量 0.0kg/年として届け出ることになっているため、排出係数を 0 とすることは排出量推計における過小評価につながるおそれがある。そこで過小評価を回避するため、本調査では大気及び水域の第①区分（物理化学的性状別の区分の最小のもの：大気<1Pa、水域<10mg/L）の排出係数にそれぞれ下限値を設定することとした。なお、溶剤については PRTR データが多くあり加重平均値を求めることができることから、下限値は溶剤以外の用途分類（#10～#47）に対して設定することとした。

前述のとおり、平成 21 年度に施行された PRTR 制度では、対象化学物質の年間の大気又は水域への排出量が 0.05kg 未満の場合は、排出量「0」として届け出ることになっている。したがって、届出排出量が「0」の場合でも排出量が 0.05kg に近い値の可能性がある。

溶剤用途以外の排出係数の算出に用いた取扱量について、調合段階：877 件（取扱量が格段に大きい用途分類#43 及び#47 を除いた）、工業的使用段階：2,828 件のデータを整理すると、取扱量の分布は、調合では 877 件中 460 件（53%）、使用では 2,828 件中 1,874 件（66%）が 1～10 トン未満の範囲に集中していた（図表 Ⅳ-８８参照）。



図表 Ⅳ-８８　ライフサイクルステージ別の取扱量の分布（取扱量調査結果から）

そのため、PRTR 対象物質の一般的な取扱量を 1～10 トンと仮定した場合、排出量 0 と届け出た事業所の排出係数は 0.05kg 未満÷1～10 トン=5×10^{-5} 未満と想定される。

これらの推算結果に、排出量推計における過小評価の回避という観点を加え、大気及び水域の第①区分（大気<1Pa、水域<10mg/L）の排出係数の下限値として、10^{-5} オーダーの値を用いることとした。原則として、大気又は水域への排出がほとんどないと考えられる化学物質が該当する詳細用途分類には 1×10^{-5}、その他の詳細用途分類には 5×10^{-5} をそれぞれ下限値として設定した。なお、例外的に、大気への排出係数（調合段階）等には、1×10^{-6} を下限値として設定している場合がある。

ii) データの無い用途分類、詳細用途分類への準用

調合段階においては、調合メーカーにおける化学物質の取り扱い方（操作方法）は類似性が大きく、いくつかのグループに分けられるとの考えからすべての用途分類を図表 Ⅳ-８９に示すように A～C の 3 種類の調合の仕方に分けて、データが無い用途については、同一

グループ内で操作の類似性の大きい用途分類の排出係数を準用することとした。

図表 Ⅳ-８９　調合段階での排出係数の準用の考え方

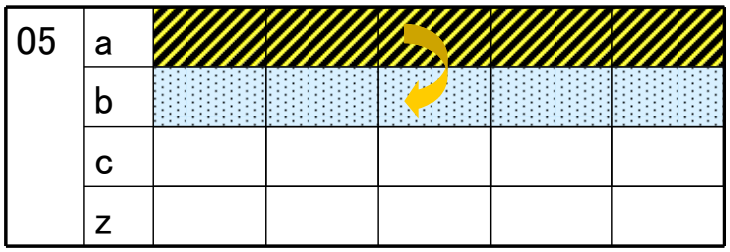
種類	考え方	用途分類/詳細用途分類コード
A	小分け、配合	01,02-09,10,11,24-26,28,29,33-35,38-40,42-44,46-47
B	配合（配合により機能が大幅に変わるもの）	12-23,27,30-32,36,37,41,45
C	高分子化合物（樹脂）	15a,16a,17a,23a,24a,25a,27a,b,28a,40c,
―	分類不可	98

工業的使用段階でも国内データが無く、EU-TGD A-table の値をそのまま用いなければならないケースも少なくないため、調合段階の準用の考え方を工業的使用段階にも拡大適用して、我が国の実態により近いデータで補正している。ただし、工業的使用段階は調合段階に比べて、用途ごとの操作の類似性が小さいので、排出係数の準用は慎重に行わなければならない。

ここでは準用の考え方の拡大適用を説明する。ただし、以下の例示の詳細用途はモデル表示であって、実際には準用が行われているわけではないことに留意されたい。

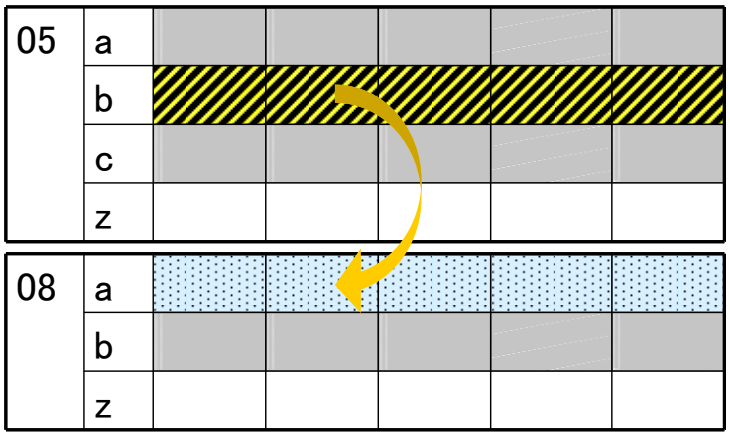
準用の方法の１つ目は、同一用途分類内における詳細用途分類間での準用で、図表 Ⅳ-９０に示した形である。この場合、用途番号#05 内で、詳細用途番号#05-a に PRTR 等から算出した排出係数のデータがあり、#05-b には無い場合に#05-a の値の準用が行われる。

図表 Ⅳ-９０ 同一用途分類内における詳細用途分類間での準用（#05-a→#05-b）



準用の方法の２つ目は、同一詳細用途分類名の間における準用で、図表 Ⅳ-９１に示した形である。この場合、詳細用途番号#05-b と#08-a が同じ詳細用途分類名であるような場合に準用が行われる（例えば、どちらも安定剤など）。ただし、この場合でも準用する用途分類間の操作の類似性を考慮した。

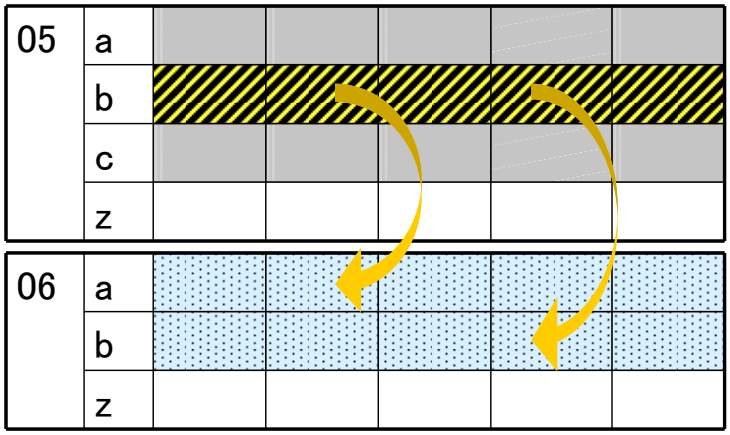
図表 Ⅳ-９１　同一詳細用途分類名の間における準用（#05-b→#08-a）



準用の方法の 3 つ目は、類似用途分類間における準用で、図表 Ⅳ-９２に示した形である。このような準用は例えば用途番号#06 において全くデータが無く、EU-TGD A-table を採用せざるを得ない場合には、類似の用途・詳細用途番号#05-b の準用が適用される。

ただし、以上の 3 つの方法において、用途分類間の操作が類似していない場合は準用を行っていない。

図表 Ⅳ-９２　類似用途分類間における準用（#05-b→#06-a, #06-b）

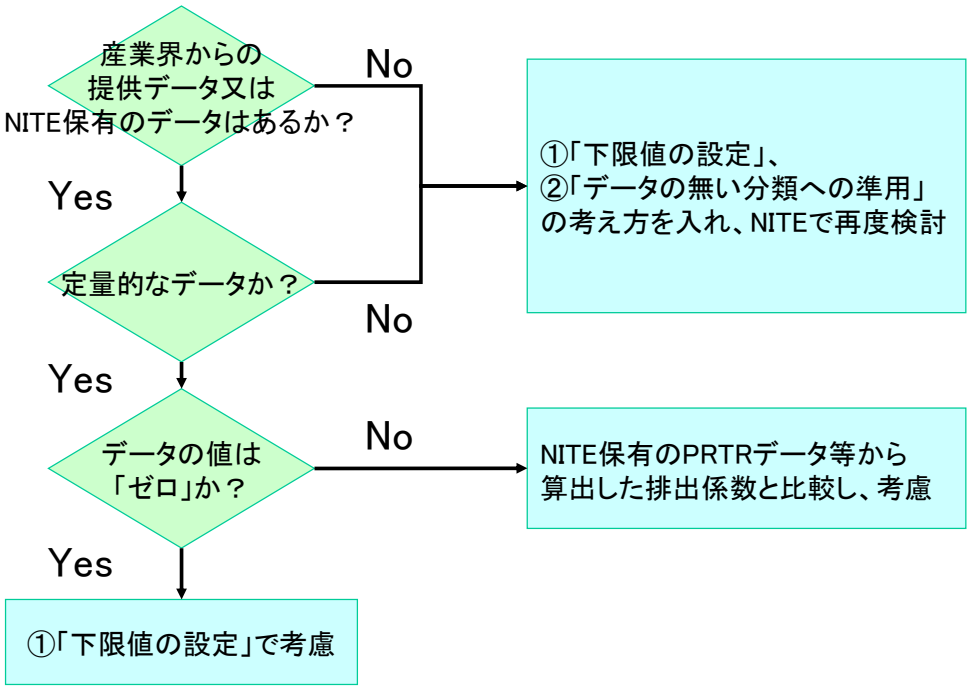


(3) 産業界からのデータ等による補正

さらに、第 3 段階として A-table 排出係数をできる限り我が国の排出係数に補正するため、産業界を対象に排出係数に関するヒアリング調査とウェブ上からの意見募集を実施し、その結果を A-table 排出係数 及び PRTR データ等から算出した排出係数と比較して反映させた（図表 Ⅳ-８２の③参照）。

産業界から提供頂いた排出係数の採用フローは図表 Ⅳ-９３のようになる。その際、産業界からの提供情報の扱いとして、まず「最大」「加重平均」の記載が無ければ、「加重平均」とみなした。また、「0 (ゼロ)」以外は、NITE 保有の PRTR データ等から算出した排出係数の値と同等とみなし、併せて考慮し、排出係数の値を更新した。「0 (ゼロ)」の場合は、基本的には、0 を採用せず、設定した下限値に置き換えた（前述）。さらに、複数の業界団体

から同じ詳細用途の分類に提供頂いた場合の優先度として、その分類、ライフサイクルステージを所管する業界団体の意見を中心に置き、他の業界団体の意見を傍証とした。



図表 Ⅳ-９３　産業界からの提供データの採用フロー

PRTR データ等から算出した排出係数（Ⅳ.7.4.2 (2)）及び産業界からの提供データ（Ⅳ.7.4.2 (3)）を用いた排出係数の補正は以下の考え方で行った。

(ア) PRTR データ等から算出した排出係数又は産業界からの提供データがある場合は、それらのデータを基に EU-TGD A-table を簡易化した表（Ⅳ.7.4.4 (1)参照）の右側に対応する A-table の排出係数（本表では記載を省略）を修正し、さらに値を丸めて最大値、加重平均値と分けて整理した。

(イ) PRTR データ等から算出した排出係数と産業界からの提供データに大きな乖離がある場合は、原則 PRTR データ等から算出した排出係数を優先した。

(ウ) 蒸気圧及び水溶解度の区分間の排出係数の傾きについては、PRTR データ等から算出した排出係数又は産業界からの提供データが複数ある場合は基本的にその傾きに従い、データが単独若しくは無い場合は EU-TGD A-table の傾きと準用が可能と判断できる他の詳細用途分類の傾きを参考に設定した。

(エ) 加重平均値については、PRTR データ等から算出した排出係数又は産業界からの提供データがある場合は、その最大値と加重平均値の比率を基に設定した。PRTR データ等から算出した排出係数及び産業界からの提供データが無い場合は、最大値と加重平均の排出係数を溶剤用途と溶剤以外の用途間について算術平均化した際の比率（図表Ⅳ-９４）を参考に、A-table を最大値として換算し、専門家判断を加味して設定した。

図表 Ⅳ-９４　溶剤用途と溶剤以外の用途間について算術平均化した際の最大値と加重平均値の排出係数の比率

	大気							
	調合段階				工業的使用段階			
	排出係数一覧表の中でPRTRデータで補正可能な排出係数の数	補正可能な排出係数の用途間の算術平均値		最大／加重平均	排出係数一覧表の中でPRTRデータで補正可能な排出係数の数	補正可能な排出係数の用途間の算術平均値		最大／加重平均
		最大	加重平均			最大	加重平均	
溶剤用途(#02～#09)	15	2.E-02	5.E-03	5	27	9.E-01	4.E-01	2
溶剤以外の用途(#10～#47)	53	4.E-03	1.E-04	30	89	1.E-01	1.E-02	10
用途全体(#02～#47)	68	9.E-03	1.E-03	8	116	3.E-01	1.E-01	3

	水域							
	調合段階				工業的使用段階			
	排出係数一覧表の中でPRTRデータで補正可能な排出係数の数	補正可能な排出係数の用途間の算術平均値		最大／加重平均	排出係数一覧表の中でPRTRデータで補正可能な排出係数の数	補正可能な排出係数の用途間の算術平均値		最大／加重平均
		最大	加重平均			最大	加重平均	
溶剤用途(#02～#09)	18	5.E-04	3.E-05	20	28	1.E-02	3.E-04	40
溶剤以外の用途(#10～#47)	48	2.E-03	1.E-04	10	92	1.E-01	2.E-02	6
用途全体(#02～#47)	66	1.E-03	1.E-04	10	120	1.E-01	2.E-02	6

日本版の排出係数一覧表を作成するにあたって、PRTR データ及び産業界からの提供データを基にEU-TGDのA-tableの排出係数を補正するという形をとったが、検討時のPRTR対象物質は354物質でそれらの用途も限られている。今回利用したPRTR等から算出した排出係数データは、合計で約9,000件、取扱量調査で得られるデータ（約61,000件）の約15%に過ぎない。また、業界団体へのヒアリング調査により、排出係数に係る貴重なデータが得られたが、排出係数0（ゼロ）の扱いなどの課題もあった。業界ヒアリングデータ等が集積される際には課題に対処しつつ、排出係数の見直しを実施する必要がある。

IV.7.4.3 ライフサイクルステージごとの排出係数の設定作業とその考え方

製造段階、調合段階、工業的使用段階、家庭用・業務用使用段階及び長期使用段階の排出係数の設定方法を以下に述べる。

(1) 製造段階の排出係数

化学物質の「製造段階」については、用途との関係が薄いことから、製造された化学物質の物理化学的性状区分（蒸気圧、水溶解度）だけに対応して排出係数を設定している。この排出係数の値については、EU-TGD A-tableの値を用いず、図表 Ⅳ-８２に沿ってPRTRデータ及び産業界へのヒアリング調査結果に基づいて我が国の実態を反映した排出係数を設定した。

⑵ 調合段階の排出係数

化学物質の「調合段階」については、調合された調剤の詳細用途と調合される化学物質の物理化学的性状区分（蒸気圧、水溶解度）に対応して排出係数を設定している。この排出係数の値については、原則として A-table 排出係数を用いず、図表 IV-８２に沿って PRTR データや産業界データ等の直接的データに基づいた補正と「下限値」、「準用」及び「換算」によって我が国の実態を反映した排出係数を設定した。

排出係数の「準用」は、直接的データが得られなかった詳細用途の排出係数を設定するにあたり、A-table 排出係数をそのまま用いるよりも、用途分類内及び用途分類間における化学物質に係る操作、管理の類似性に基づいて排出係数を準用した方が我が国の実態を反映しやすいとの考えに基づいている。具体的には、図表 IV-９５に示すように、調合段階の用途をその調合操作の類似性に基づいてＩからⅣにグループ化し、原則として同じグループの用途分類内及び用途分類間で準用を行った。各用途分類のグループは図表 IV-１２７から図表 IV-１３０の調合段階の右端「準用」の欄に記入し、準用元を 123abc のように数字で用途番号、アルファベットで詳細用途番号を示した。

なお、後述の工業的使用段階においては、用途分類間の操作の類似性が調合段階より低いと考えられるので、可能な限り用途分類内準用とした。

「下限値」の設定は、排出が全くない（排出係数=0）ということはあり得ないとの考え方から、図表 IV-９６に示す 1～3 の 3 種類の下限値を、詳細用途の物理化学的性状区分 1（大気、水域の最小物性値区分）に設定した。PRTR 排出量が 0 として届け出られる最大排出量（0.05kg 未満／年、即ち、四捨五入して 0.1kg 未満／年）と PRTR 届出事業者の届出物質の取扱量の幾何平均（約 10t／事業者／年）から算出される排出係数を「下限値 2」とし、取扱量が PRTR 届出すそ切り値（1t／年）の場合を「下限値 3」（下限値の最大値）とした。また、合成樹脂については調合段階における大気への排出に限定して「下限値 1」を設定した（例外設定 : #10-b 及び＃40-c はイオン交換樹脂の工業的使用段階における大気への排出にも設定した）。

直接的データが無く、適当な準用が困難な場合における排出係数の設定方法「A-table 排出係数から排出係数への換算」については、以下の IV.7.4.3 (3)工業的使用段階の項で述べる。

特定の用途においては 2 段階の調合段階が存在するものがある。例えば、詳細用途#22-a の香料（洗浄剤用）は、香料メーカーの調香（調合段階 1）と洗浄剤メーカーにおける洗浄剤への配合（調合段階 2）があるので、別々の排出係数を設定した。その他に、#130-h のセメント添加剤、#47-b,c,d の燃料添加剤、燃焼改良剤、氷結防止剤・着臭剤についても 2 段階の調合段階を設定した(図表 IV-１９、図表 IV-２０を参照)。

図表 Ⅳ-９５　調合段階における排出係数の準用範囲

用途のグループ	調合操作の内容
Ⅰ	単純混合や小分けの操作。
Ⅱ	薬剤（樹脂以外）の混合等によって機能が大幅に変わる配合操作で、例えば、塗料、インキ、洗浄剤、火薬、セメント等を製造する操作。
Ⅲ	合成樹脂に添加剤等を配合してマスターバッチ、塗料、インキ等を製造するときの合成樹脂の取り扱い操作。
Ⅳ	その他（未分類）の操作。

図表 Ⅳ-９６　下限値の設定

下限値の種類	下限値の設定（原則として蒸気圧及び水溶解度の区分１）
1	合成樹脂の調合段階における大気への排出は下限値 0.000001 とした。樹脂の蒸気圧は一般の化学物質に比べてさらに低いので A-table（3.11A）の排出係数／蒸気圧の傾向に沿わせて下限値２の 1/5 とした。
2	合成樹脂の使用段階における大気への排出、及び全詳細用途において、PRTR データ又は業界データからの排出係数が 0 の場合は下限値を 0.000005（=0.05kg/10t ； 10t は事業者取扱量幾何平均）とした。
3	全詳細用途において、下限値２の準用が困難と考えられる時は下限値を 0.00005（0.05kg/1ｔ ； 1t は PRTR 届出すそ切り取扱量）とした。

(3) 工業的使用段階の排出係数

化学物質の「工業的使用段階」については、図表 Ⅳ-８２に沿って A-table 排出係数を土台に PRTR データ等の直接的データに基づいた補正、「換算」及び「下限値」、さらに操作の類似性に基づく「準用」によって我が国の実態を反映した排出係数を設定した。なお、工業的使用段階の排出係数の値は、環境媒体別の合計が 1 を超える場合があるが、取扱量より排出量が大きくならないように正規化して 1 を超えない値になるように調整して排出量の推計に用いている。

環境媒体別排出係数の合計が 1 を超える場合の排出係数[/年]　　式 Ⅳ-15
＝大気（若しくは水域）排出係数[/年] / （大気排出係数[/年]+水域排出係数[/年]）

工業的使用段階（及び調合段階）において PRTR データや産業界データ等の直接的データが無く、適当な準用が困難な詳細用途の場合は、類似用途グループにおける PRTR データの最大値と加重平均値の比率の幾何平均値より設定した換算係数を用いて、A-table 排出係数を土台に排出係数を設定した。具体的には以下に示す手順で行った。

まずは、当該用途に関連する産業での化学物質の取扱いプロセス及び取扱い者の管理レベルの類似性に基づいて、用途を図表 IV-９７に示すように分類した。特に工業的使用段階においては①から④のグループに細分化した。次に、グループごとの PRTR データの最大値（突出したデータを削除した連続的なデータ群の最大値）と加重平均値の比率の幾何平均値から近似的に換算倍率(n)を設定した。その際に、A-table 排出係数の値はワーストケースの排出を想定しているので、PRTR データの最大値と同等とみなして、詳細用途の排出係数＝A-table 排出係数／n で算出した。

なお、図表 IV-１２７から図表 IV-１３０において、用途グループ①から④は工業的使用段階の右端「換算」の欄に記入し、換算によって排出係数を設定した用途には「A/n」で表示した。例えば「A/1」又は「A/10」は、A-table 排出係数の値をそのまま又は 1/10 倍して排出係数として用いたことを示す。

図表 IV-９７　A-table 排出係数から排出係数への換算倍率の設定

[調合]

用途グループ	大気			水域		
	データ数	最大値／加重平均値比率の範囲［幾何平均］	幾何平均値からの換算倍率(n)	データ数	最大値／加重平均値比率の範囲［幾何平均］	幾何平均値からの換算倍率(n)
溶剤（#02～#09）	16	1.58～22.4[5.12]	**5**	5	3.40～67.4[15.0]	**10**
溶剤以外（#10～#47）	32	1.22～150.4[13.9]	**10**	21	1.03～162.5[14.7]	**10**

[使用]

	溶剤（#02～#09）	39	1.09～38.0[2.97]	**5**	18	3.55～156.4[35.2]	**25**
	溶剤以外（#10～#47）	50	1.43～176.4[18.5]	用途グループをさらに細分	54	1.16～177.9[14.6]	用途グループをさらに細分
溶剤以外（#10～#47）	用途グループ①	5	4.20～19.3[9.7]	**10**	3	5.79～14.0[9.8]	**10**
	用途グループ②	22	1.43～176.9[16.2]	**10**	28	1.16～170.7[12.6]	**10**
	用途グループ③	23	1.83～168.7[24.7]	**20**	23	2.17～177.9[18.8]	**20**
	用途グループ④	0		**(1.0)**	0		**(1.0)**

(1) 幾何平均値算出にあたって最大値／加重平均値比率の値が突出しているデータ（200倍以上）は削除した。
(2) 用途グループ
①取り扱い又は使用環境が密閉系で、使用者の管理レベルの影響が小さい用途：#36, #42, #43, #47
②使用環境が半閉鎖系で、管理レベルの分布が比較的小さい用途：#10, #12, #18, #19, #22-a, #24, #25,#26, #27, #28, #37, #38, #39, #40
③使用環境が半開放系で、管理レベルの分布が比較的大きい用途：#11, #15, #16, #17, #23, #29, #30, #31, #32, #33, #34, #35, #41, #46
④機能発揮の過程でほぼ全量排出される薬剤が該当する用途
又は使用環境の違いによる影響を殆ど受けない用途：#13, #14, #20, #21, #22-b～d, #44, #45

(4) 家庭用・業務用での使用段階の排出係数及び下水処理場等での除去率

「家庭用・業務用での使用段階」としては、その主たる用途が工業的使用ではない５つの用途（#13, 14, 20, 22, 47）を設定した。なお、これら５つの用途以外の用途にも従たる用

途としての家庭用・業務用使用が存在するが、その場合については家庭用・業務用使用段階の排出係数は設定せず、その使用量だけを主たる用途である工業的使用に統合して取り扱うこととした。ただし、家庭用・業務用使用からの排出量が工業的使用からの排出量に対比して無視できないこともあり得る。そのような場合には評価Ⅱ又は評価Ⅲ以降で考慮することとした。

これらの内 4 つの用途は開放系での使用であり、その排出係数は用途と物理化学的性状データ（蒸気圧、水溶解度）に応じて、A-table の排出係数と PRTR 届出外排出量推計手法で用いられている排出係数[1]を参考にして設定した。

この排出係数のうち水域への排出係数の意味するところは下水処理場等[2]への排出係数であり、他のライフスサイクルステージで定義されている水域（すなわち河川）への排出係数と異なる[3]。したがって、排出量の推計にあたっては下水処理場等での除去率を加味して補正される。

この補正は、評価段階によって適用する手法が異なる。

評価Ⅰにおいては、優先評価化学物質の中で化審法の生分解性試験による良分解性判定結果が得られている物質については、一般化学物質等のスクリーニング評価と同様に、下水処理場等での除去率として 0.67 が加味される。一方、大気への排出後に関しては難分解性物質と良分解性物質とで取扱いに差はつけない。

家庭用・業務用使用であると考えられるこれらの用途分類に該当する一般化学物質すべての除去率をあらかじめ整備しておくことは困難であるため、EU のリスク評価で用いられている下水処理場モデル Simple Treat[4]で推測された値をデフォルトとして下水処理場での除去率として用いる。その際、良分解性かどうかでその値が異なる設計となっているため、化審法において良分解性判定を受けているかどうかで除去率を乗じるかどうかを区別する。

EU-TGD には、以下の 4 つのパターンに分かれて、除去率が示されている[5]。また、除去率は log Pow（TGD 上では logo と記載）と log H（ヘンリー係数の対数）で示されている。

(ア) No biodegradability
(イ) Inherent biodegradability
(ウ) Ready biodegradability , 10-day window criterion is not fulfilled
(エ) Ready biodegradability , 10-day window criterion is fulfilled

OECD TG301c の試験の結果と説明できるのは（ウ）であり[6]、（ウ）の除去率の範囲は最

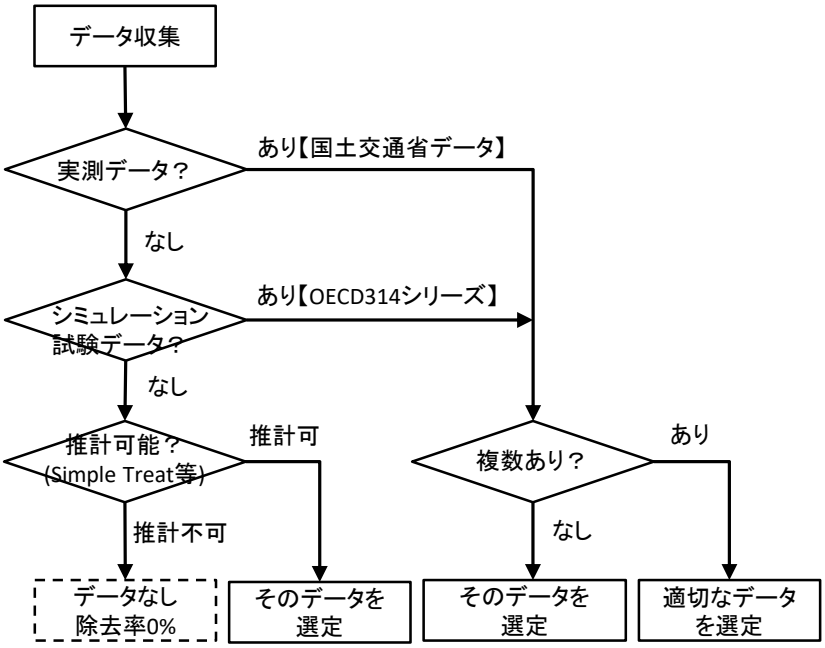
[1] 全量排出のため、排出係数の値は 1
[2] 合併浄化槽と下水処理場が普及している地域（平成 29 年度の汚水処理普及率の全国平均値は 90.9%）については、下水処理場への排出係数となり、残りは水域への排出係数と扱われる。https://www.mlit.go.jp/report/press/mizukokudo13_hh_000383.html
[3] 大気への排出係数については、他のライフサイクルステージ、他の用途分類と同じ扱いである。
[4] RIVM(1996) Simple Treat 3.0: a model to predict the distribution and elimination of chemicals by sewage treatment plants
[5] EU (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment Part II p.278-283 “Appendix II Fate of chemicals in a wastewater treatment plant based on the Simple Treat model”
[6] TG301c には 10-day window の概念は無く、28 日後の分解性を見ている。そのため、10 日後に 60%以

小値 67%、最大値 97%、中央値 82%である。この場合、スクリーニング評価においては logo とヘンリー係数は用いないため、この中の最小値 67%を用いることとしている[1]。なお、(ア) の難分解性判定の場合、除去率の最小値は 0%である。

評価 I においては、スクリーニング評価と同じ下水処理場等での除去率 67%を、良分解性判定を経た評価対象物質に対して用いる。難分解性判定又は未判定の評価対象物質については 0%を用いる。

評価 II 以降においては、詳細用途や物理化学的性状等の精査を経た上で、評価 I 同様の下水処理場等での除去率 67%又は 0%を用いてリスク推計 II を行う。

再度「リスク懸念」となるようであれば、別途下水道終末処理施設での除去率を精査する。精査は以下の順で検討する。また、図表 IV-９８に選定フローを示す。



図表 IV-９８　下水処理場等での除去率の選定フロー

① 下水道終末処理施設での実測データが得られるかどうか検討する。

② 実測データが得られる場合は、下水道終末処理施設ごとの数値を用いるのか、一律の数値を用いるのか、また、その数値は統計量として最大値を用いるのか、中央値を用いるのか、あるいは幾何平均値を用いるのか等を明記した上で用いる。なお、PRTR 対象物質でもある場合には、PRTR 届出外推計手法[2]において得られている国土交通

上の分解性が仮に無くても 28 日後にあれば「易分解」とされることから、10-day criterion を満たしていない場合があると想定されたため、安全側をとって（ウ）としている。

[1] 詳細は、平成 22 年度第 7 回薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会化学物質調査会 化学物質審議会安全対策部会第 2 回評価手法検討小委員会 第 104 回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会 「参考資料 3 スクリーニング評価手法の詳細（案）付属資料」の 3.5 良分解性物質の扱いを参照。

[2] 経済産業省・環境省（2013）平成 23 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法等の詳細２１．　下水処理施設に係る排出量

省のデータ[1]の利用を検討する。

③ 下水処理場での実測データが得られない場合は、シミュレーション試験データを用いることを検討する。具体的には、OECD テストガイドライン 314 シリーズ「廃水に排出される化学物質の生分解性を評価するシミュレーション試験」のデータの利用を検討する[2]。

④ ②、③のデータが得られない場合は、下水道終末処理施設での除去率を推計する手法が得られるかどうか検討する。得られれば、どのような条件で推定した値であるのか明記した上で用いる。なお、EU-TGD における Simple Treat の他、U.S.EPA の STPWIN™[3]、PRTR 届出外推計手法の利用も検討する[4]。

⑤ 推計値も得られない場合[5]は、除去率 0%での結果のままであることから、化審法第 10 条第一項を発出するか評価 III に進めるかを検討する。

下水処理除去率を用いる対象となる暴露シナリオは、図表 IV-９９に示した組み合わせが考えられる。

図表 IV-９９　下水処理除去率を用いる対象となる暴露シナリオ

暴露シナリオ	PRTR 対象物質ではない場合	PRTR 対象物質でもある場合
排出源ごとの暴露シナリオ	×	○
水系の非点源シナリオ[6]	○	○
様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ（広域的・長期的スケールの暴露状況の推計の場合）	○	○
様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ（環境中濃度等の空間的分布の推計の場合）	－	○
残留性の評価	○	○

http://www.env.go.jp/chemi/prtr/result/todokedegaiH23/syosai/21.pdf

[1] 国土交通省（2005）下水道における化学物質排出量の把握と化学物質管理計画の策定等に関するガイドライン（案）平成 17 年度版 資料編 4-2.排出係数（PRTR 届出外推計手法において引用されている文献）http://www.mlit.go.jp/crd/city/sewerage/info/prtr/guideline.html

[2] 平成 20 年度経済産業省委託研究「化学物質の試験方法開発等報告書」において、「優先評価化学物質について詳細なリスク評価を行う際に、TG314（主に TG314B 及び TG314D）が活用できる可能性が考えられる。」との記載がある。

[3] U.S.EPA のウェブサイト Estimation Program Interface (EPI) Suite http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuite.htm

[4] なお、PRTR 届出外推計手法で用いた推計値そのものは、評価 II で選定された物理化学的性状の数値と異なる値を用いて推計されている可能性があるため、精査せずにそのまま用いないよう留意されたい。生分解性データの利用についても同様である。

[5] 高分子化合物など化学物質の構造上や、解離性等の性質上、数理モデルの適用外となった場合が想定される。なお、RIVM(2013) Evaluation of the Simple Treat model において、Simple Treat model の適用対象となる物質の範囲について、医薬品、殺生物剤、界面活性剤といった用途に用いられる物質を例に検討がなされている。この結果については反映できていないため、適宜考慮することとする。

[6] 必要に応じて、AIST-SHANEL を用いる場合がある。その際、AIST-SHANEL は個々の下水処理場に下水処理除去率をユーザー入力できるため、導出した下水処理除去率に応じて、値を入力する。

(5) 長期使用製品の使用段階の排出係数及び使用期間

「長期使用製品の使用段階（以下、「長期使用段階」という）」については、IV.2.5.3 (3)に記載したとおり、長期使用製品（使用年数が１年超の製品）からの排出量がその他のライフサイクルステージからの排出量と拮抗すると考えられる用途について設定した。したがって、長期使用製品であっても当該化学物質が工業的使用段階で全量排出されたり、別の化学物質に変化して寿命が終わったりすることで製品中に含まれないと考えられる（詳細）用途や、製品が当該化学物質を含有していてもほとんど環境中に排出しないと考えられる製品が主たる（詳細）用途である場合には長期使用段階は設定していない。「IV.7.2 化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」において、数値又は＊印を付した詳細用途に設定した。さらに、OECD Emission Scenario Document（ESD）[1] 及び EU REACH 規則におけるガイダンス[2] において長期使用段階が設定されている詳細用途との整合を図った。

長期使用製品からの排出係数は、事業所からの排出と違い、国ごとの管理の差が生じにくいと考え、国内と海外のデータを同様に採用した。また、長期使用製品中に取り込まれた化学物質の排出挙動は複雑で、化学物質そのものの物理化学的性状に一義的に対応させるには無理があると考え、また OECD ESD 及び EU REACH 規則におけるガイダンスとの整合も考慮して、むしろ簡略化して環境媒体と詳細用途だけに対応させた。

OECD ESD 及び EU REACH 規則におけるガイダンスでは単年度の排出係数とともに、この排出係数を使用年数分足し合わせた $\sum_{n=1}^{\text{使用年数}}$ 単年度排出係数(n 年)に相当する部分を使用期間全体での排出係数（以下、ここでは「総排出係数」という）と定義して、排出量の算出に併用している[3]。

このことからわかるように、長期使用段階の総排出係数は他のライフサイクルステージの単年度の排出係数と直接比較することができる利点があるので、長期使用段階には総排出係数を採用することにした。

長期使用段階の排出係数は EU-TGD A-table に記載がなく、我が国の実態調査も不十分な段階にあることから、OECD ESD と業界ヒアリング（#17 船底塗料用防汚剤、漁網用防汚剤と#18 殺生物剤 1[成形品に含まれ出荷されるもの]に対するヒアリング）から得られた実態に基づいて総排出係数を採用した（IV.7.2 (4)）。例えば、#17 における水域への長期使用段階の排出係数は海域（内湾）への総排出係数であり、#18 の長期使用段階の総排出係数は無機系抗菌剤についての値である。

一方、デフォルト値である EU REACH 規則におけるガイダンスに記載された総排出係数は採用せず＊で示した。これらは長期使用段階において化学物質の排出が想定されるものの、現段階では長期使用段階の排出係数を設定していない詳細用途であって、今までの調

[1] OECD Publications on Chemicals Exposure Assessment (ESD No.1～29)
http://www.oecd.org/env/ehs/risk-assessment/emissionscenariodocuments.htm
[2] ECHA (2010)　Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment
Chapter R.16: Environmental Exposure Estimation
Chapter R.17: Estimation of exposure from articles
[3] OECD ESD　No.3　EMISSION SCENARIO DOCUMENT ON PLASTIC ADDITIVES
$F_{\text{service life}}$ ＝emission factor over service life (又は over lifetime)＝総排出係数としている。

査によって文献値及び業界公開データからの推算値が得られているものもあるが、データ数が不十分であるため調査を継続して、長期使用製品の使用に係るリスク評価を行う段階で排出係数の設定を行う。また、現段階で既に設定されている排出係数についても産業界等のデータによって我が国の実態を反映させる検討が必要である。さらに、詳細用途番号 y, z の排出係数は、y, z の具体的用途の記載内容に応じて、当該ライフサイクルステージからの排出が想定される用途かどうかを検討するとし、§と示した。排出が想定される場合は＊と同様の扱いとする。

使用期間は OECD ESD にも記載が少なく、EU REACH 規則におけるガイダンスではデフォルト値が設定されているだけであるので、業界団体からの提供データ、企業及び業界団体と地方公共団体等のウェブサイトや資料に公表されている製品寿命又は使用年数及び独立行政法人 国立環境研究所の「製品使用年数データベース LiVES (Lifespan database for Vehicles, Equipment, and Structures)」[1] の使用年数を調査した。さらに、必ずしも実際の使用期間とは言えないが「減価償却資産の耐用年数等に関する省令[2]」別表第一 機械及び装置以外の有形減価償却資産の耐用年数表からの法定耐用年数も参考として調査した。以上の調査結果を**図表 Ⅳ-１００**にまとめた。この一覧は旧用途番号（二桁）が記載されており、用途及び詳細用途も改訂前の名称になっていることに留意が必要である。

使用期間については、社会のライフスタイルの変化に影響を受けるため、我が国の実態調査を継続し、新たな情報が入手された場合は比較検討して見直しを行う必要がある。

[1] 国立環境研究所「製品使用年数データベース LiVES」(2011 年調べ)
http://www.nies.go.jp/lifespan/index.html

[2] 財務省 減価償却資産の耐用年数等に関する省令）(2011 年調べ)
https://elaws.e-gov.go.jp/search/elawsSearch/elaws_search/lsg0500/detail?lawId=340M50000040015

1

図表 Ⅳ-１００　長期使用製品の使用年数の対照

コード	用途	コード	詳細用途	(3)減価償却資産の耐用年数等に関する省令 別表第一　機械及び装置以外の有形減価償却資産の耐用年数表			耐用年数	(2)国環研・製品使用年数 データベースLIVES	使用年数	(1)業界等調査データ（業界、使用者基準、OECD） 耐用年数	対象	平均的年数
11	着色剤										プラスチックに準じる	20
15	塗料、コーティング剤	a～h	塗料用樹脂、コーティング剤用樹脂	*（構築物）（建物）*	*（合成樹脂造りのもの）*	*（コーティング樹脂を想定）*	*10　20*			60，30 10（3～30）	鋼構造物用塗膜（一般環境、塩害環境） 一般用塗膜	10
		i	*塗膜の機能性*							15， 5（2～10）	［無機］　抗菌、防カビ ［有機］	
		j	*塗膜の機能性*							10（3～20）	耐火・防火、防汚、遮熱、防水、帯電防止、等	
17	船底塗料	a b	樹脂、防汚剤							3	樹脂・防汚剤［日本塗料工業会］	3
18	殺生物剤1	a	防カビ、抗菌、防腐							15， 5（1～10）	［無機］　塗膜防カビ剤、木材防腐剤、抗菌住宅設備等 ［有機］	15 5
20	殺生物剤3	c	シロアリ駆除剤							5	駆除剤［日本しろあり対策協会］	5
22	消臭剤	c	消臭剤							5	消臭性塗膜、VOC吸着分解塗膜	5
23	接着剤、粘着剤、シーリング材	a	接着剤用樹脂、粘着剤用樹脂、シーリング材用樹脂	*（構築物）* *（建物）*	*（合成樹脂造りのもの）* *（合成樹脂造りのもの）*	*（接着剤樹脂、シーリング樹脂を想定）* *（接着剤樹脂、シーリング樹脂を想定）*	*10* *20*			20（5～70）	シーリング材（有機系、無機系） 外壁接着剤 建材［建築・設備維持保全推進協会の評価基準］	20
25	合成繊維、繊維処理剤	a	成形品基材（合成繊維、不織布）	器具及び備品	家具、電気機器、ガス機器及び家庭用品	カーテン、座ぶとん、寝具	3			1～10	OECD No7 ESD：衣料品、寝具、家庭用リンネル	10
						じゅうたんその他の床用敷物　その他	3　6	カーペット	11.9	5～30	OECD No7 ESD：カーペット、ブラインド、日よけ、テント	
					娯楽、スポーツ器具等	どんちょう及び幕　衣しょう	5　2	その他繊物	10.5	3～6	繊維製品のクリーニング事故賠償基準［ク業界］（短め?）	
		j								5（5～7）	抗菌・消臭繊維	
27	プラスチック、プラスチック添加剤	a（～z）	成形品基材（プラスチック、合成皮革、合成紙、発泡体）	建物	合成樹脂造のもの	飲食店用　店舗用　事務所用　その他	20 22 24 15			20（5～50） 30（10～50） 15(6～20?)	一般用途樹脂 硬質PVC 人工皮革（エクセーヌ、クラリーノ）	20
				構築物	合成樹脂造りのもの		10					
				船舶法第四条～第十九条の適用を受ける		強化プラスチック船（FRP）	7					
		c（a～z）								2～20，30	OECD No3 ESD	10
										3，5（3～20） 15（1～30） 2（1～2）	合成皮革（ポリウレタン、PVC）、事故賠償基準［クリーニング業界］ フィルム・シート（一般樹脂及び農ビ以外の軟質PVC） 農業用軟質PVCフィルム・シート	
28	合成ゴム、ゴム用添加剤、ゴム用加工助剤	a～z								5（5～10） 10 ＞60	タイヤ［日本自動車タイヤ協会］（タイヤ≧80%/ゴム） 機器備え付け基礎部材ゴム 免震ゴム	5
29	皮革処理剤									7（5）	皮革のクリーニング事故賠償基準（合成繊維と同じとする）	10
44	建設資材添加物（コンクリート混和剤木材補強含浸剤等）	a e	表面硬化剤 防水剤	建物	鉄骨鉄筋コンクリート造	飲食店用　住宅用　事務所用　その他	34 47 50 38	ビル	40−70	30（5～70）	表面強化剤（有機系～無機系＝コンクリート並）［建築業協会］	30
					れんが造,ブロック造		38 38 41 34	飲食店用	20	30（30～70）	防水剤（コンクリート並=酸性条件～普通条件）［建築業協会］	
				構築物	鉄骨鉄筋コンクリート造	ダム トンネル　橋　その他	80 75 60 60	住宅用	30−50			
					コンクリート造	用水池　岸壁　下水道　その他	40 30 15 40	事務所用	20−45		＊建築物のLC評価用データ集	
					れんが造,ブロック造	堤防・トンネル　煙突・焼却炉　その他	50　25　40	橋	30−100	65	鉄筋コンクリート［官庁営繕］	
					舗装道路及び舗装路面	コンクリート敷、ブロック敷、れんが敷	15	発電所	23.5	30～65	セメント＋大理石粉　［MELCA*］～［官庁営繕］	
30	ガラス、ほうろう、セメント	gh h		器具及び備品	家具、電気機器、ガス機器及び家庭用品	食事又はちゅう房用品（陶磁器製又はガラス製のもの）	2	舗装道路	21.5	25～30 20	便器・洗面器（陶器）［MELCA，官庁営繕］ 碍子(陶磁器、セラミックス)	
31	陶磁器、耐火物、ファインセラミックス											
33	金属製造加工用資材			建物	金属造のもの（薄い<3mm）	飲食店用　店舗用　事務所用　その他	19 19 22 17	建築用金属	10.9			20
				構築物	金属造のもの（薄い<3mm）	鋼鉄管、鋳鉄管	15　30	鉄管　鉄骨	18.6　11.4			
32	研削砥石、研磨剤、摩擦材、固体潤滑剤	a b	原料・添加剤（砥石、摩擦材、固体潤滑剤）	工具	切削工具	（砥石）	2			7 20 2	摩擦材（自動車ブレーキ） 固体潤滑剤（ドライフィルム） 砥石	10
36	絶縁油	b f	**別表第二**	建物附属設備	電気業用設備	*柱上変圧器（＝絶縁油の入れ物）*	*18*			7（5～20）	変圧器の絶縁油（劣化防止：なし～あり）	10
38	電気・電子材料	a c d e		器具及び備品	家具、電気機器、ガス機器及び家庭用品	ラジオ、テレビ、テープレコーダー、他の音響機器	5	ラジオ・テレビ	12.4	20（15～25）	汎用高圧機器（変圧器、電磁遮断器、等）	20 10 家電
						冷暖房用機器、電気冷蔵庫、電気洗濯機	6	冷蔵庫　エアコン	12	20（15～25）	コンデンサ　［CASBEE］	
					事務機器及び通信機器	電算機、複写機、ファックス	5	洗濯機	10.5	20（15～30）	光ファイバー	
				建物附属設備	冷房、暖房、通風	冷暖房設備（＜22KW）	13	計算機	6.5　8　8.7	20（15～30）	絶縁材料（ケーブル）［電線工・絶縁電線専門委員会］	
		e f b a−z						コピー機、ファックス機 ビデオカメラ ステレオ、オーディオ ディスプレイ プリンター 携帯電話 固定電話 DVDプレーヤー カセットプレーヤー 照明器具	8.2　10 7 12　12.3 7 6.5 2 7 4.2 10 12.5　14.4	10（6～≧10） 10（10～≧30） 10（10～　） 10（10～13）	封止材（LED用） 電子記憶媒体 半導体（有機～無機） 家電製品	
		d	光導波路材料（光ファイバ）	構築物	電気通信事業用のもの	通信ケーブル（光ファイバー製のもの）	10	光ファイバーケーブル	14.6	20（15～30）	光ファイバー	
39	電池材料（一次、二次電池）	ab		建物附属設備	電気設備	蓄電池電源設備 その他のもの	6 15	電池	10.9	3（2～3） 10（5～10） 10 20（15～25） 5（2～15）	Liイオン電池(高充電密度；PC用、携帯電話用) Liイオン電池(低充電密度；自転車～自動車用) ニッケル水素電池（ハイブリッド車プリウス用） アルカリ蓄電池（建物設備用） 鉛蓄電池（自動車・自転車用～無停電電源供給装置用）	10

2

IV.7.4.4 排出係数設定の考え方に基づいた結果

(1) EU-TGD A-table の簡略化結果

IV.7.4.2 (1)に示した排出係数の設定の流れにおける最初の作業である「EU-TGD A-table の簡略化」については、従前の結果[1]を利用しているため、、旧用途番号・用途分類についての化審法の各用途分類・詳細用途分類と EU-TGD A-table の関係を図表 IV-１０１～図表 IV-１２６に示す[2]。この一覧は旧用途番号（二桁）が記載されており、現在廃止した用途分類が含まれ、また、新たに追加された用途分類が含まれていないことに留意が必要である。

図表 IV-１０１　製造段階（大気）

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	EU-TGD A-table 該当箇所		
				Table	MC/Type	Conditions
	製造					
0	その物質自体の製造	※製造段階からの排出係数は、用途に依存しない		A1.1	1c	

[1] 平成 26 年 6 月 26 日に「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（Ver.1.0）」（厚生労働省・経済産業省・環境省）
第Ⅳ章 排出量推計　Ver.1.1
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/04_tech_guidance_iv_haisyutsuryou_v_1_1_141204.pdf

[2] これらの図表で示されている MC/Type の欄の MC は、EU-TGD A-table からそのまま引用している。一方で、図表 IV-８４も EU-TGD からの引用である。両者はそれぞれアラビア数字とローマ数字で表現が異なっているが同じ意味であることに留意されたい。

1 図表 Ⅳ-１０２　調合段階（大気）その１

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	EU-TGD A-table 該当箇所 Table	MC/Type	Conditions
中間物						
01	中間物	a	合成原料、重合原料、前駆重合体			
		b	重合開始剤	A2.1	3	
		z	その他			
溶剤						
02	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	a	塗料用溶剤、塗料希釈剤	A2.1	3	
		b	塗料剥離剤	A2.1	3	
		c	ワニス用溶剤	A2.1	3	
		d	コーティング剤用溶剤、レジスト塗布用溶剤	A2.1	3	
		e	印刷インキ用溶剤、電子デバイス用溶剤、インキ溶剤、インキ洗浄剤	A2.1	3	
		f	殺生物剤用溶剤	A2.1	3	
		z	その他			
03	接着剤用・粘着剤用・シーリング材用溶剤	a	接着剤用溶剤、粘着剤用溶剤	A2.1	3	
		b	接着剤剥離用溶剤、糊剥離用溶剤	A2.1	3	
		c	接着用溶剤	A2.1	3	
		d	シーリング材用溶剤	A2.1	3	
		z	その他			
04	金属洗浄用溶剤	a	金属洗浄用溶剤（塩素系）	A2.1	1b	
		z	その他			
05	クリーニング洗浄用溶剤《洗濯業での用途》	a	ドライクリーニング溶剤	A2.1	1b	
		b	染み抜き剤、ドライクリーニング溶剤抽出剤	A2.1	1b	
		z	その他			
06	その他の洗浄用溶剤 [#04,05を除く]	a	フォトレジスト現像用溶剤、レジスト剥離用溶剤	A2.1	1b	
		z	その他			
07	工業用溶剤 [#02-06の溶剤を除く]	a	合成反応用溶剤	A2.1	1b	
		b	紡糸用溶剤、製膜用溶剤	A2.1	1b	
		c	抽出溶剤、精製溶剤	A2.1	1b	
		d	希釈溶剤	A2.1	1b	
		z	その他			
08	エアゾール用溶剤	a	エアゾール噴射剤、希釈剤	A2.1	3	
		z	その他			
09	その他の溶剤	z	その他の溶剤			

2
3
4

1

図表 Ⅳ-１０３　調合段階（大気）その２

溶 剤 以 外						
10	化学プロセス調節剤	a	触媒、触媒担体	A2.1	3	
		b	イオン交換樹脂、イオン交換膜、分離膜、隔膜、濾過補助剤（脱蝋助剤等）	A3.11	ＩA	Vap.<1, Boiling point≧300
		c	乳化剤、分散剤	A2.1	3	
		d	重合調節（停止）剤、重合禁止剤、安定剤	A2.1	3	
		e	光学分割剤	A2.1	3	
		z	その他			
11	着色剤（染料、顔料、色素、色材）	a	着色剤（染料、顔料、色素、色材）	A2.1	3	
		b	蛍光増白剤	A2.1	3	
		c	発色剤、発色助剤	A2.1	3	
	[#12,13,15,16,25,26,29を除く]	z	その他			
12	水系洗浄剤1	a	石鹸、洗剤（界面活性剤）	A2.1	3	
	《工業用途》	b	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤	A2.1	3	
		c	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（消泡剤等）	A2.1	3	
		d	防錆剤	A2.1	3	
	[#25,26を除く]	z	その他			
13	水系洗浄剤2	a	石鹸、洗剤、ウインドウォシャー液（界面活性剤）	A2.1	3	
	《家庭用・業務用の用途》	b	柔軟剤（界面活性剤）	A2.1	3	
		c	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤	A2.1	3	
		d	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（酵素、蛍光増白剤、紫外線吸収剤等）	A2.1	3	
		z	その他			
14	ワックス（床用、自動車用、皮革用等）	a	ワックス	A2.1	3	
		b	乳化剤、分散剤	A2.1	3	
		z	その他			
15	塗料、コーティング剤	a	塗料用樹脂、コーティング剤用樹脂	A3.11	ＩA	Vap.<1, Boiling point≧300
	[プライマーを含む]	b	着色剤（染料、顔料、光輝剤）	A2.1	3	
		c	熱・光硬化塗料のモノマー・オリゴマー、バインダー成分	A2.1	3	
		d	架橋剤、硬化剤、増感剤、重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤	A2.1	3	
		e	可塑剤、充填剤	A2.1	3	
		f	安定化剤（酸化防止剤等）	A2.1	3	
		g	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤、導電性改良剤	A2.1	3	
		h	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、表面調整剤、造膜助剤	A2.1	3	
		i	腐食防止剤、防錆剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤	A2.1	3	
		j	乾燥促進剤、湿潤剤、難燃剤、撥水剤	A2.1	3	
		z	その他			
16	印刷インキ、複写用薬剤（トナー等）	a	インキ用樹脂、トナー用樹脂	A3.11	ＩA	Vap.<1, Boiling point≧300
	[筆記用具、レジストインキ用を含む]	b	着色剤（染料、顔料、色素）、感熱色素、感圧色素、蛍光増白剤、顕色剤	A2.1	3	
		c	紫外線・電子線硬化インキのモノマー・オリゴマー、増感剤、重合開始剤	A2.1	3	
		d	可塑剤、充填剤	A2.1	3	
		e	安定化剤（酸化防止剤等）	A2.1	3	
		f	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤	A2.1	3	
		g	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、造膜助剤	A2.1	3	
		h	電荷制御剤、流動性付与剤、研磨性付与剤、滑り性付与剤	A2.1	3	
		i	乾燥促進剤、湿潤剤	A2.1	3	
		z	その他			
17	船底塗料用防汚剤、漁網用防汚剤	a	防汚剤用樹脂[添加剤も含む]	A3.11	ＩA	Vap.<1, Boiling point≧300
		b	船底塗料用防汚剤	A2.1	1c	
		c	漁網用防汚剤	A2.1	1c	
		z	その他			
18	殺生物剤1	a	殺菌剤、殺虫剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤（細菌増殖抑制剤、木材の防腐剤、防蟻剤）	A2.1	1c	
	[成形品に含まれ出荷されるもの]	b	展着剤、乳化剤	A2.1	1c	
		z	その他			
19	殺生物剤2	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）	A2.1	1c	
	[工程内使用で成形品に含まれないもの]	b	ガス滅菌剤、薫蒸剤、燻煙剤	A2.1	1c	
	《工業用途》	c	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、抗菌剤	A2.1	1c	
		d	展着剤、乳化剤	A2.1	1c	
		z	その他			
20	殺生物剤3	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）	A2.1	1c	
	《家庭用・業務用の用途》	b	繊維用・紙用防虫剤	A2.1	1c	
		c	シロアリ駆除剤、防蟻剤	A2.1	1c	
		d	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤、除菌剤	A2.1	1c	
		e	非農耕地用除草剤	A2.1	1c	
		f	展着剤、乳化剤	A2.1	1c	
		z	その他			
21	火薬類	a	火薬、爆薬、火工品[#21-bを除く]、煙火	A2.1	3	
	[煙火を含む]	b	自動車安全部品用ガス発生剤	A2.1	3	
		z	その他			
22	芳香剤、消臭剤	a	香料（洗浄剤用）[#22-b,cを除く]	－ A2.1		【調合段階1】 【調合段階2】
		b	芳香剤	A2.1	1c	【調合段階2】
		c	消臭剤	A2.1	1c	【調合段階2】
		d	乳化剤、分散剤	A2.1	3	【調合段階2】
		z	その他			
23	接着剤、粘着剤、シーリング材	a	接着剤用樹脂、粘着剤用樹脂、シーリング材用樹脂	A3.11	ＩA	Vap.<1, Boiling point≧300
		b	バインダー成分（モノマー、プレポリマー、硬化剤、硬化促進剤、開始剤、カップリング剤）	A2.1	3	
		c	可塑剤、充填剤	A2.1	3	
		d	安定化剤（老化防止剤等）	A2.1	3	
		e	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤	A2.1	3	
		f	表面調整剤、分散剤	A2.1	3	
		g	防腐剤、防かび剤、抗菌剤	A2.1	3	
		h	難燃剤、導電剤	A2.1	3	
		z	その他			

2

図表 Ⅳ-１０４　調合段階（大気）その３

24	フォトレジスト材料、写真材料、印刷版材料	a	感光性・感電子性樹脂（フォトレジスト、印刷版等）	A3.11	ＩＡ	Vap.<1, Boiling point≧300
		b	感光性・感電子性樹脂のモノマー・オリゴマー	A2.1	3	
		c	感光剤、電子写真感光体、光重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤	A2.1	3	
		d	色素形成カプラー（カラー写真用）	A2.1	3	
		e	乳化剤、分散剤	A2.1	3	
		f	定着剤、安定化剤	A2.1	3	
		g	硬化剤、増感剤、減感剤、架橋密度向上剤、重合開始剤、レジスト添加剤	A2.1	3	
		h	現像剤、水溶性処理薬品、レジスト剥離剤	A2.1	3	
		z	その他			
25	合成繊維、繊維処理剤 [不織布処理を含む]	a	成形品基材（合成繊維、不織布）	A3.11	ＩＡ	Vap.<1, Boiling point≧300
		b	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	A2.1	3	
		c	集束剤	A2.1	3	
		d	防炎剤、難燃剤	A2.1	3	
		e	含浸補強剤、染料固着剤（フィックス剤）	A2.1	3	
		f	帯電防止剤、親水加工剤	A2.1	3	
		g	柔軟仕上げ剤	A2.1	3	
		h	形態安定加工剤	A2.1	3	
		i	撥水剤、撥油剤、防水加工剤、防汚加工剤	A2.1	3	
		j	抗菌剤、変色防止剤、紫外線吸収剤	A2.1	3	
		k	紡糸・紡績・織編油剤、紡糸・紡績・織編油助剤	A2.1	3	
		l	洗浄剤、精練洗浄剤（ソーピング剤）、潤滑剤	A2.1	3	
		m	キレート剤	A2.1	3	
		n	漂白剤、抜染剤	A2.1	3	
		o	均染剤、浸透剤、促染剤（染色助剤）、媒染剤、捺染用糊剤	A2.1	3	
		p	乳化剤、分散剤、消泡剤	A2.1	3	
		q	マーセル化助剤	A2.1	3	
		r	糊抜き剤	A2.1	3	
		z	その他			
26	紙・パルプ薬品	a	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	A2.1	3	
		b	サイズ剤、定着剤、填料	A2.1	3	
		c	コーティング剤	A2.1	3	
		d	防炎剤、難燃剤、帯電防止剤	A2.1	3	
		e	紙力増強剤、歩留向上剤、定着剤（フィックス剤）、防錆剤	A2.1	3	
		f	撥水剤、撥油剤、防水加工剤	A2.1	3	
		g	嵩高剤、柔軟剤	A2.1	3	
		h	蒸解薬液、pH調節剤	A2.1	3	
		i	スライムコントロール剤（防腐剤）、ピッチコントロール剤	A2.1	1c	
		j	漂白剤、漂白浴安定剤	A2.1	3	
		k	乳化剤、分散剤、消泡剤、脱墨剤、洗浄剤	A2.1	3	
		z	その他			
27	プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤	a	成形品基材（プラスチック、合成皮革、合成紙、発泡体）	A3.11	ＩＡ	Vap.<1, Boiling point≧300
		b	高吸水性材料	A3.11	ＩＡ	Vap.<1, Boiling point≧300
		c	可塑剤、分散剤	A2.1	3	
		d	安定化剤（酸化防止剤等）	A2.1	3	
		e	充填剤、希釈剤、ポリマー分解促進剤	A2.1	3	
		f	結晶核剤	A2.1	3	
		g	内部滑剤、内部離型剤	A2.1	3	
		h	防曇剤、流滴剤	A2.1	3	
		i	難燃剤、帯電防止剤、波長変換剤	A2.1	3	
		j	外部滑剤、外部離型剤	A2.1	3	
		k	発泡剤、ラジカル発生剤	A2.1	3	
		l	注型用・注型発泡用材料（モノマー、プレポリマー等）	A2.1	3	
		m	硬化剤、架橋剤（FRP用モノマー等）、架橋助剤、増感剤、重合開始剤	A2.1	3	
		n	硬化促進剤	A2.1	3	
	[#15,16,23,25,28を除く]	y	その他の添加剤（改質剤等）			
	[着色剤は#11]	z	その他			
28	合成ゴム、ゴム用添加剤、ゴム用加工助剤	a	成形品基材(エラストマー（合成ゴム）)	A3.11	ＩＡ	Vap.<1, Boiling point≧300
		b	加硫促進剤、加硫促進剤助剤（加硫活性剤）	A2.1	3	
		c	加硫剤、架橋剤、架橋助剤	A2.1	3	
		d	可塑剤、補強材（接着促進剤等）、充填剤	A2.1	3	
		e	安定化剤（老化防止剤等）	A2.1	3	
		f	スコーチ防止剤、素練促進剤、内部滑剤、内部離型剤	A2.1	3	
		g	ラテックス凝固剤、乳化剤、分散剤、沈降防止剤	A2.1	3	
		h	難燃剤、帯電防止剤	A2.1	3	
		i	外部滑剤、外部離型剤	A2.1	3	
		j	発泡剤	A2.1	3	
		k	ゴム再生剤（脱硫剤等）	A2.1	3	
		y	その他の添加剤（改質剤等）			
	[着色剤は#11]	z	その他			
29	皮革処理剤	a	なめし剤	A2.1	3	
		b	仕上げ加工薬剤（漂白剤、着色剤、着色助剤、撥水剤、撥油剤、油剤、脱脂剤、加脂剤等）	A2.1	3	
		c	準備工程（なめし前）薬剤（脱脂剤、脱灰剤等）	A2.1	3	
		z	その他			
30	ガラス、ほうろう、セメント	a	ガラス原料	A2.1	3	
		b	ガラス添加剤（強化剤、集束剤、防曇剤、紫外線カット剤等）	A2.1	3	
		c	ガラス加工助剤（離型剤、pH調節剤等）	A2.1	3	
		d	ほうろう原料	A2.1	3	
		e	ほうろう添加剤（絵付け用転写剤、フリット配合薬剤等）	A2.1	3	
		f	ほうろう加工助剤（中和剤、ニッケル処理剤等）	A2.1	3	
		g	セメント原料	A3.3	3	【調合段階2】
		h	セメント添加剤（混合材、膨張剤、固化剤等）	A2.1 A3.3	3 3	【調合段階1】 【調合段階2】
	[着色剤は#11]	z	その他			

1

図表 Ⅳ-１０５　調合段階（大気）その４

31	陶磁器、耐火物、ファインセラミックス	a	陶磁器原料、耐火物原料、ファインセラミックス原料	A2.1	3	
		b	陶磁器添加剤、耐火物添加剤、ファインセラミックス添加剤（焼結助剤等）	A2.1	3	
		c	成形助剤（バインダー、増粘剤、可塑剤、潤滑剤、分散剤等）	A2.1	3	
		d	滑剤、離型剤	A2.1	3	
	[着色剤は#11、電子用ファインセラミックスは#38]	z	その他			
32	研削砥石、研磨剤、摩擦材、固体潤滑剤	a	研削砥石原料、研磨剤原料、摩擦材原料、固体潤滑剤原料	A2.1	3	
		b	研削砥石・研磨剤・摩擦材・固体潤滑剤添加剤（バインダー、増粘剤、研磨助剤、分散剤、摩擦調整剤、潤滑剤等）	A2.1	3	
		c	滑剤、離型剤	A2.1	3	
	[着色剤は#11]	z	その他			
33	金属製造加工用資材	a	金属用添加剤（接種剤等）	A2.1	3	
		b	加工助剤（フラックス等）	A2.1	3	
		c	鋳造用粘結剤、鋳造用硬化剤、鋳造用添加剤	A2.1	3	
	[金属及び合金の原料は#1、着色剤は#11、表面処理は#34、溶接・ろう接は#35、金属加工油は#37]	d	鋳造用離型剤、鋳造用塗型剤	A2.1	3	
		z	その他			
34	表面処理剤	a	めっき薬剤（皮膜成分原料）	A2.1	3	
		b	めっき浴添加剤（光沢付与剤、煙霧防止剤、無電解めっきの還元剤等）	A2.1	3	
		c	化成処理薬剤	A2.1	3	
		d	真空めっき（蒸着等）薬剤、溶射処理薬剤	A2.1	3	
		e	表面硬化処理（浸炭、窒化等）薬剤	A2.1	3	
	[めっき前処理剤・後処理剤の脱脂・洗浄薬剤は#04金属洗浄剤、#12の水系洗浄	f	表面フッ素化処理薬剤、表面シリル化処理薬剤	A2.1	3	
		g	エッチング処理薬剤、スパッタリング処理薬剤、ブラスト処理薬剤	A2.1	3	
	[#4-6,12-15,17,25-27,30-32,38,44を除く]	z	その他			
35	溶接材料、ろう接材料、溶断用材料	a	溶接フラックス	A2.1	3	
		b	ろう接フラックス（酸化防止剤等）	A2.1	3	
		c	溶接用ガス、溶断用ガス	A2.1	3	
		z	その他			
36	作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤（エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等）	a	作動油の基油、潤滑油剤の基油	A2.2		UC=29&35
		b	絶縁油の基油	A2.2		UC=29&35
		c	プロセス油の基油	A2.2		UC=29&35
		d	グリース増ちょう剤	A2.2		UC=29&35
		e	作動油添加剤、潤滑油剤添加剤	A2.2		UC=29&35
		f	絶縁油添加剤	A2.2		UC=29&35
		g	プロセス油添加剤	A2.2		UC=29&35
	[#37を除く]	z	その他			
37	金属加工油（切削油、圧延油、プレス油、熱処理油等）、防錆油	a	水溶性金属加工油の基油	A2.2		UC=29&35
		b	不水溶性金属加工油の基油、防錆油の基油	A2.2		UC=29&35
		c	水溶性金属加工油添加剤	A2.2		UC=29&35
		d	不水溶性金属加工油添加剤、防錆油添加剤	A2.2		UC=29&35
		z	その他			
38	電気・電子材料	a	磁性材料[#38-fを除く]、導電材料、超電導材料、蛍光体材料	A2.1	3	
	[対象材料等の製造用プロセス材料を含む]	b	半導体材料、有機半導体材料、液晶材料	A2.1	1b	
		c	誘電体材料、抵抗体材料、固体電解質材料、電解液材料、セパレータ材料	A2.1	3	
		d	光導波路材料（光ファイバを含む）、光学フイルム材料、電子機器用光材料	A2.1 & A3.1	1b & ＩA	Vap.<1, Boiling point≧300
		e	封止材、絶縁材料、シールド材料	A2.1	3	
		f	電子記憶媒体材料（磁性材料、光吸収色素等）	A2.1	3	
	[絶縁油は#36]	z	その他			
39	電池材料（一次電池、二次電池）	a	電解質材料、電解液材料、絶縁材料、セパレータ材料	A2.1	3	
		b	電極材料（活物質、集電体、導電剤、バインダー等）、減極剤	A2.1	3	
		z	その他			
40	水処理剤	a	腐食防止剤、防錆剤、防食剤、防スケール剤、防藻剤	A2.1	3	
		b	金属イオン捕捉剤、金属イオン封鎖剤、硬水軟化剤	A2.1	3	
		c	イオン交換体（有機及び無機イオン交換体）、分離膜	A3.11	ＩA	Vap.<1, Boiling point≧300
		d	酸化剤、還元剤、pH調節剤	A2.1	3	
		e	消泡剤、凝集剤、濾過助剤、脱水助剤、イオン交換樹脂再生剤	A2.1	3	
		z	その他			
41	乾燥剤、吸着剤	a	乾燥剤、脱水剤	A2.1	3	
		b	吸着剤（脱臭剤、脱硝剤、ガス吸着剤等）	A2.1	3	
		c	吸収剤（脱酸素剤等）	A2.1	3	
		z	その他			
42	熱媒体	a	冷媒、冷却剤	A2.1	3	
		b	熱媒、加熱剤	A2.1	3	
		z	その他			
43	不凍液	a	不凍液（LLC等）	A2.1	3	
		b	防錆剤、防食剤	A2.1	3	
		z	その他			
44	建設資材添加物（コンクリート混和剤、木材補強含浸剤等）	a	表面硬化剤	A2.1	3	
		b	コンクリート混和剤（強化剤、減水剤）	A2.1	3	
		c	離型剤、消泡剤	A2.1	3	
		d	木材補強含浸剤、木質板添加剤	A2.1	3	
		e	防汚剤[#17-b,cを除く]、防水剤、撥水剤	A2.1	3	
		z	その他			
45	散布剤、埋立処分前処理薬剤（融雪剤、土壌改良剤、消火剤等）	a	凍結防止剤（融雪剤等）	A2.1	3	
		b	土壌改良剤、地盤改良剤	A2.1	3	
		c	消火剤	A2.1	3	
		d	人工降雨剤	A2.1	3	
		e	油処理剤	A2.1	3	
		f	粉塵結合剤、粉塵防止剤、煤塵処理剤	A2.1	3	
		z	その他			
46	分離・精製プロセス剤《鉱業、金属製造業での用途》	a	浮選剤（捕収剤、起ほう剤、条件剤）、金属浸出剤	A2.1	3	
		b	凝集剤、分散剤、金属捕捉剤	A2.1	3	
	[抽出・精製溶剤は#07]	z	その他			
47	燃料、燃料添加剤	a	燃料	A2.1	1b	
		b	燃料添加剤（清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等）	A2.1	1b	
		c	燃焼改良剤（燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等）	A2.1	1b	
		d	氷結防止剤、着臭剤	A2.1	1b	
		z	その他			
上記以外						
98	その他の原料、その他の添加剤	z	その他の原料、その他の添加剤			
99	輸出用	a	輸出用			

2

1　図表 Ⅳ-１０６　工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階（大気）その１

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	EU-TGD A-table 該当箇所		
				Table	MC/Type	Conditions
	中間物					
01	中間物	a	合成原料、重合原料、前駆重合体	A3.3	3	
		b	重合開始剤	A3.3	3	
		z	その他			
	溶剤					
02	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	a	塗料用溶剤、塗料希釈剤	A3.15		solvent based UC=48
		b	塗料剥離剤	A3.15		solvent based UC=48
		c	ワニス用溶剤	A3.15		solvent based UC=48
		d	コーティング剤用溶剤、レジスト塗布用溶剤	A3.15		solvent based UC=48
		e	印刷インキ用溶剤、電子デバイス用溶剤、インキ溶剤、インキ洗浄剤	A3.12	3	for printing and allied process UC=48
		f	殺生物剤用溶剤	A3.1		UC=48
		z	その他			
03	接着剤用・粘着剤用・シーリング材用溶剤	a	接着剤用溶剤、粘着剤用溶剤	A3.15		solvent based UC=48
		b	接着剤剥離用溶剤、糊剥離用溶剤	A3.15		solvent based UC=48
		c	接着用溶剤	A3.15		solvent based UC=48
		d	シーリング材用溶剤	A3.15		solvent based UC=48
		z	その他			
04	金属洗浄用溶剤	a	金属洗浄用溶剤(塩素系)	A3.16	4	Sol.<100
		z	その他			
05	クリーニング洗浄用溶剤《洗濯業での用途》	a	ドライクリーニング溶剤	A3.16	3	Sol.<100
		b	染み抜き剤、ドライクリーニング溶剤抽出剤	A3.16	3	Sol.<100
		z	その他			
06	その他の洗浄用溶剤 [#04,05を除く]	a	フォトレジスト現像用溶剤、レジスト剥離用溶剤	A3.16	4	Sol.<100
		z	その他			
07	工業用溶剤 [#02-06の溶剤を除く]	a	合成反応用溶剤	A3. 3	3	
		b	紡糸用溶剤、製膜用溶剤	A3.11	ⅢA	UC=48
		c	抽出溶剤、精製溶剤	A3.3	3	
		d	希釈溶剤	A3.3	3	
		z	その他			
08	エアゾール用溶剤	a	エアゾール噴射剤、希釈剤	A3.1		UC=3
		z	その他			
09	その他の溶剤	z	その他の溶剤			

2
3
4

図表 Ⅳ-１０７　工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階（大気）その２

溶剤以外						
10	化学プロセス調節剤	a	触媒、触媒担体	A3.10	Ⅱ	UC=43(Catalysts), Wet or Dry
		b	イオン交換樹脂、イオン交換膜、分離膜、隔膜、濾過補助剤（脱蝋助剤等）	A3.16	2	Sol.<100
		c	乳化剤、分散剤	A3.10	Ⅰ	UC=43(Monomers), Wet or Dry
		d	重合調節（停止）剤、重合禁止剤、安定剤	A3.10	Ⅲ	UC=43(Initiators etc), Wet or Dry
		e	光学分割剤	A3.16	2	Sol.<100
		z	その他			
11	着色剤（染料、顔料、色素、色材）	a	着色剤（染料、顔料、色素、色材）	A3.11	Ⅰ	UC=10(Pigments), Boiling point≧300
		b	蛍光増白剤	A3.11	Ⅰ	UC=10(Pigments), Boiling point≧300
		c	発色剤、発色助剤	A3.11	Ⅰ	UC=10(Pigments), Boiling point≧300
	[#12,13,15,16,25,26,29を除く]	z	その他			
12	水系洗浄剤1 《工業用途》	a	石鹸、洗剤（界面活性剤）	A3.16	3	Sol.>1000
		b	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤	A3.16	3	Sol.>1000
		c	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（消泡剤等）	A3.16	3	Sol.>1000
		d	防錆剤	A3.16	3	Sol.>1000
	[#25,26を除く]	z	その他			
13	水系洗浄剤2 《家庭用・業務用の用途》	a	石鹸、洗剤、ウインドウォシャー液（界面活性剤）	A4.1		UC=50
		b	柔軟剤（界面活性剤）	A4.1		UC=47
		c	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤	A4.1		UC=8
		d	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（酵素、蛍光増白剤、紫外線吸収剤等）	A4.1		UC=9,11
		z	その他			
14	ワックス（床用、自動車用、皮革用等）	a	ワックス	A4.1		UC=8, household products
		b	乳化剤、分散剤	A4.1		UC=50
		z	その他			
15	塗料、コーティング剤 [プライマーを含む]	a	塗料用樹脂、コーティング剤用樹脂	A3.15		UC=47,52,55 Solvent based
		b	着色剤（染料、顔料、光輝剤）	A3.15		UC=10
		c	熱・光硬化塗料のモノマー・オリゴマー、バインダー成分	A3.15		UC=47,52,55 Solvent based
		d	架橋剤、硬化剤、増感剤、重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤	A3.15		UC=47,52,55 Solvent based
		e	可塑剤、充填剤	A3.15		UC=47,52,55 Solvent based, UC=20
		f	安定化剤（酸化防止剤等）	A3.15		UC=47,52,55 Solvent based
		g	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤、導電性改良剤	A3.15		UC=52 Solvent based
		h	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、表面調整剤、造膜助剤	A3.15		UC=50 Water based
		i	腐食防止剤、防錆剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤	A3.15		UC=14
		j	乾燥促進剤、湿潤剤、難燃剤、撥水剤	A3.15		UC=47,52,55 Solvent based
		z	その他			
16	印刷インキ、複写用薬剤（トナー等） [筆記用具、レジストインキ用を含む]	a	インキ用樹脂、トナー用樹脂	A3.12	2	for printing and allied processes Default, Vap.<100
		b	着色剤（染料、顔料、色素）、感熱色素、感圧色素、蛍光増白剤、顕色剤	A3.12	2	for printing and allied processes UC=10&45
		c	紫外線・電子線硬化インキのモノマー・オリゴマー、増感剤、重合開始剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		d	可塑剤、充填剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		e	安定化剤（酸化防止剤等）	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		f	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		g	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、造膜助剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		h	電荷制御剤、流動性付与剤、研磨性付与剤、滑り性付与剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		i	乾燥促進剤、湿潤剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		z	その他			
17	船底塗料用防汚剤、漁網用防汚剤	a	防汚剤用樹脂[添加剤も含む]	A3.15		UC=47,52,55 Vap.<10
		b	船底塗料用防汚剤	A3.15		UC=14
		c	漁網用防汚剤	A3.15		UC=14
		z	その他			
18	殺生物剤1 [成形品に含まれ出荷されるもの]	a	殺菌剤、殺虫剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤（細菌増殖抑制剤、木材の防腐剤、防蟻剤）	ESD No.2		wood preservative, automated spraying scenario, Vap.0.5～1.25, Vap.>2.5 ＜300/unknown
		b	展着剤、乳化剤	ESD No.2		wood preservative, automated spraying scenario, Vap.0.5～1.25, Vap.>2.5 ＜300/unknown
		z	その他			
19	殺生物剤2 [工程内使用で成形品に含まれないもの] 《工業用途》	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）	A3.16	3	Sol.<100
		b	ガス滅菌剤、薫蒸剤、燻煙剤	A3.1		UC=3
		c	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、抗菌剤	A3.16	3	Sol.<100
		d	展着剤、乳化剤	A3.16	3	Sol.<100
		z	その他			
20	殺生物剤3 《家庭用・業務用の用途》	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）	A4.1		UC=38(pesticide, pets)
		b	繊維用・紙用防虫剤	A4.1		UC=3
		c	シロアリ駆除剤、防蟻剤	A3.5		UC=39
		d	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤、除菌剤	A4.1		UC=38(pesticide, pets)
		e	非農耕地用除草剤	A3.5		UC=39
		f	展着剤、乳化剤	A4.1		UC=50
		z	その他			
21	火薬類 [煙火を含む]	a	火薬、爆薬、火工品[#21-bを除く]、煙火	A3.8		
		b	自動車安全部品用ガス発生剤	A3.8		
		z	その他			
22	芳香剤、消臭剤	a	香料（洗浄剤用）[#22-b,cを除く]	A3.16	4	Sol.<100
		b	芳香剤	A4.1		UC=36
		c	消臭剤	A4.1		UC=36
		d	乳化剤、分散剤	A4.1		UC=50
		z	その他			

1　図表 Ⅳ-１０８　工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階（大気）その３

23	接着剤、粘着剤、シーリング材	a	接着剤用樹脂、粘着剤用樹脂、シーリング材用樹脂	A3.15		UC=55 Vap.<10
		b	バインダー成分（モノマー、プレポリマー、硬化剤、硬化促進剤、開始剤、カップリング剤）	A3.15		UC=47,52,55
		c	可塑剤、充填剤	A3.15		UC=47,52,55,Solvent based, UC=20
		d	安定化剤（老化防止剤等）	A3.15		UC=47,52,55,Solvent based
		e	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤	A3.15		UC=52, Solvent based
		f	表面調整剤、分散剤	A3.15		UC=50, Solvent based
		g	防腐剤、防かび剤、抗菌剤	A3.15		UC=14, Solvent based
		h	難燃剤、導電剤	A3.15		UC=47,52,55,Solvent based
		z	その他			
24	フォトレジスト材料、写真材料、印刷版材料	a	感光性・感電子性樹脂（フォトレジスト、印刷版等）	A3.9 & A5.1	3	Else
		b	感光性・感電子性樹脂のモノマー・オリゴマー	A3.9 & A5.1	3	Else
		c	感光剤、電子写真感光体、光重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤	A3.9 & A5.1	3	Else
		d	色素形成カプラー（カラー写真用）	A3.9 & A5.1	3	Else
		e	乳化剤、分散剤	A3.9 & A5.1	3	Else
		f	定着剤、安定化剤	A3.9 & A5.1	3	Else
		g	硬化剤、増感剤、減感剤、架橋密度向上剤、重合開始剤、レジスト添加剤	A3.9 & A5.1	3	Else
		h	現像剤、水溶性処理薬品、レジスト剥離剤	A3.9 & A5.1	3	Else
		z	その他			
25	合成繊維、繊維処理剤 [不織布処理を含む]	a	成形品基材（合成繊維、不織布）	A3.11	ⅠA	Vap.<1, Boiling point≧300
		b	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	A3.14		UC=10, Continuous dyeing-other
		c	集束剤	A3.14		UC≠10 Sol<100
		d	防炎剤、難燃剤	A3.14		UC≠10 Sol<100
		e	含浸補強剤、染料固着剤（フィックス剤）	A3.14		UC≠10 Sol<100
		f	帯電防止剤、親水加工剤	A3.14		UC≠10 Sol<100
		g	柔軟仕上げ剤	A3.14		UC≠10 Sol>10,000
		h	形態安定加工剤	A3.14		UC≠10 Sol<100
		i	撥水剤、撥油剤、防水加工剤、防汚加工剤	A3.14		UC≠10 Sol<100
		j	抗菌剤、変色防止剤、紫外線吸収剤	A3.14		UC≠10 Sol<100
		k	紡糸・紡績・織編油剤、紡糸・紡績・織編油助剤	A3.14		UC≠10 Sol<100
		l	洗浄剤、精練洗浄剤（ソーピング剤）、潤滑剤	A3.14		UC≠10 Sol>10,000
		m	キレート剤	A3.14		UC≠10 Sol>10,000
		n	漂白剤、抜染剤	A3.14		UC≠10 Sol>10,000
		o	均染剤、浸透剤、促染剤（染色助剤）、媒染剤、捺染用糊剤	A3.14		UC≠10 Sol>10,000
		p	乳化剤、分散剤、消泡剤	A3.14		UC≠10 Sol>10,000
		q	マーセル化助剤	A3.14		UC≠10 Sol>10,000
		r	糊抜き剤	A3.14		UC≠10 Sol>10,000
		z	その他			
26	紙・パルプ薬品	a	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	A3.12	3	for pulp,paper and board production, All, Sol<100
		b	サイズ剤、定着剤、填料	A3.12	3	for pulp,paper and board production, All, Sol<100
		c	コーティング剤	A3.12	3	for pulp,paper and board production, All, Sol<100
		d	防炎剤、難燃剤、帯電防止剤	A3.12	3	for pulp,paper and board production, All, Sol<100
		e	紙力増強剤、歩留向上剤、定着剤（フィックス剤）、防錆剤	A3.12	3	for pulp,paper and board production, All, Sol<100
		f	撥水剤、撥油剤、防水加工剤	A3.12	3	for pulp,paper and board production, All, Sol<100
		g	嵩高剤、柔軟剤	A3.12	3	for pulp,paper and board production, All, Sol<100
		h	蒸解薬液、pH調節剤	A3.12	3	for pulp,paper and board production, All, Sol<100
		i	スライムコントロール剤（防腐剤）、ピッチコントロール剤	A3.12	3	for pulp,paper and board production, All, Sol<100
		j	漂白剤、漂白浴安定剤	A3.12	3	for pulp,paper and board production, All, Sol<100
		k	乳化剤、分散剤、消泡剤、脱墨剤、洗浄剤	A3.12	3	for pulp,paper and board production, All, Sol<100
		z	その他			
27	プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤	a	成形品基材（プラスチック、合成皮革、合成紙、発泡体）	A3.11	ⅠA	Vap.<1, Boiling point≧300
		b	高吸水性材料	A3.11	ⅠA	Vap.<1, Boiling point≧300
		c	可塑剤、分散剤	A3.11	ⅡA	UC=47, Boiling point≧400,<400/unknown
		d	安定化剤（酸化防止剤等）	A3.11	ⅠA	UC=49, Boiling point<300/unknown
		e	充填剤、希釈剤、ポリマー分解促進剤	A3.11	ⅠA	UC=20, Boiling point<300/unknown
		f	結晶核剤	A3.11	ⅠA	Additives, , Boiling point<300/unknown
		g	内部滑剤、内部離型剤	A3.11	ⅠA	Additives, , Boiling point<300/unknown
		h	防曇剤、流滴剤	A3.11	ⅠA	Additives,Boiling point<300/unknown
		i	難燃剤、帯電防止剤、波長変換剤	A3.11	ⅠA	UC=22,7,Boiling point<300/unknown
		j	外部滑剤、外部離型剤	A3.11	ⅣA	UC=6,Boiling point<300/unknown
		k	発泡剤、ラジカル発生剤	A3.11	ⅠA	Additives, , Boiling point<300/unknown
		l	注型用・注型発泡用材料（モノマー、プレポリマー等）	A3.11	ⅤB	UC=43
		m	硬化剤、架橋剤（FRP用モノマー等）、架橋助剤、増感剤、重合開始剤	A3.11	ⅤB	UC=43
		n	硬化促進剤	A3.11	ⅤB	UC=43
	[#15,16,23,25,28を除く]	y	その他の添加剤（改質剤等）	A3.11	ⅠA	Additives, , Boiling point<300/unknown
	[着色剤は#11]	z	その他	A3.11	ⅤB	UC=43

2

3

図表 Ⅳ-１０９　工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階（大気）その４

28	合成ゴム、ゴム用添加剤、ゴム用加工助剤	a	成形品基材(エラストマー(合成ゴム))	A3.11	ⅠA	Vap.<1, Boiling point≧300
		b	加硫促進剤、加硫促進剤助剤(加硫活性剤)	A3.10	Ⅲ	UC=53, Wet or Dry
		c	加硫剤、架橋剤、架橋助剤	A3.10	Ⅲ	UC=53, Wet or Dry
		d	可塑剤、補強材(接着促進剤等)、充填剤	A3.11	ⅡA	UC=47, Boiling point≧400, <400/unknown
		e	安定化剤(老化防止剤等)	A3.11	ⅠA	UC=49, Boiling point<300/unknown
		f	スコーチ防止剤、素練促進剤、内部滑剤、内部離型剤	A3.11	ⅠA	Additives, , Boiling point<300/unknown
		g	ラテックス凝固剤、乳化剤、分散剤、沈降防止剤	A3.11	ⅠA	Additives, , Boiling point<300/unknown
		h	難燃剤、帯電防止剤	A3.11	ⅠA	UC=22.7, Boiling point<300/unknown
		i	外部滑剤、外部離型剤	A3.11	ⅣA	UC=6,Boiling point<300/unknown
		j	発泡剤	A3.11	ⅠA	Additives, , Boiling point<300/unknown
		k	ゴム再生剤(脱硫剤等)	A3.11	ⅠA	Additives, , Boiling point<300/unknown
		y	その他の添加剤(改質剤等)	A3.11	ⅠA	Additives, , Boiling point<300/unknown
	[着色剤は#11]	z	その他	A3.11	ⅤB	UC=43
29	皮革処理剤	a	なめし剤	A3.6	All MC's	Sol.<100
		b	仕上げ加工薬剤(漂白剤、着色剤、着色助剤、撥水剤、撥油剤、油剤、脱脂剤、加脂剤等)	A3.6	All MC's	Sol.<100
		c	準備工程(なめし前)薬剤(脱脂剤、脱灰剤等)	A3.6	All MC's	Sol.<100
		z	その他			
30	ガラス、ほうろう、セメント	a	ガラス原料	A3.3	3	
		b	ガラス添加剤(強化剤、集束剤、防曇剤、紫外線カット剤等)	A3.3	3	
		c	ガラス加工助剤(離型剤、pH調節剤等)	A3.3	3	
		d	ほうろう原料	A3.3	3	
		e	ほうろう添加剤(絵付け用転写剤、フリット配合薬剤等)	A3.3	3	
		f	ほうろう加工助剤(中和剤、ニッケル処理剤等)	A3.3	3	
		g	セメント原料	A3.16	3	Sol.<100
		h	セメント添加剤(混合材、膨張剤、固化剤等)	A3.16	3	Sol.<100
	[着色剤は#11]	z	その他			
31	陶磁器、耐火物、ファインセラミックス	a	陶磁器原料、耐火物原料、ファインセラミックス原料	A3.16	3	Sol.<100
		b	陶磁器添加剤、耐火物添加剤、ファインセラミックス添加剤(焼結助剤等)	A3.16	3	Sol.<100
		c	成形助剤(バインダー、増粘剤、可塑剤、潤滑剤、分散剤等)	A3.16	3	Sol.<100
	[着色剤は#11、電子用ファインセラミックスは#38]	d	滑剤、離型剤	A3.16	3	Sol.<100
		z	その他			
32	研削砥石、研磨剤、摩擦材、固体潤滑剤	a	研削砥石原料、研磨剤原料、摩擦材原料、固体潤滑剤原料	A3.16	3	Sol.<100
		b	研削砥石・研磨剤・摩擦材・固体潤滑剤添加剤(バインダー、増粘剤、研磨助剤、分散剤、摩擦調整剤、潤滑剤等)	A3.16	3	Sol.<100
		c	滑剤、離型剤	A3.16	3	Sol.<100
	[着色剤は#11]	z	その他			
33	金属製造加工用資材	a	金属用添加剤(接種剤等)	A3.16	3	Sol.<100
		b	加工助剤(フラックス等)	A3.16	3	Sol.<100
		c	鋳造用粘結剤、鋳造用硬化剤、鋳造用添加剤	A3.16	3	Sol.<100
	[金属及び合金の原料は#1、着色剤は#11、表面処理は#34、溶接・ろう接は#35、金属加工油は#37]	d	鋳造用離型剤、鋳造用塗型剤	A3.16	3	Sol.<100
		z	その他			
34	表面処理剤	a	めっき薬剤(皮膜成分原料)	A3.7	3	UC≠29&35
		b	めっき浴添加剤(光沢付与剤、煙霧防止剤、無電解めっきの還元剤等)	A3.7	3	UC≠29&35
		c	化成処理薬剤	A3.7	3	UC≠29&35
		d	真空めっき(蒸着等)薬剤、溶射処理薬剤	A3.7	3	UC≠29&35
	[めっき前処理剤・後処理剤の脱脂・洗浄薬剤は#04金属洗浄剤、#12の水系洗浄剤1]	e	表面硬化処理(浸炭、窒化等)薬剤	A3.7	3	UC≠29&35
		f	表面フッ素化処理薬剤、表面シリル化処理薬剤	A3.7	3	UC≠29&35
	[#4-6,12-15,17,25-27,30-32,38,44を除く]	g	エッチング処理薬剤、スパッタリング処理薬剤、ブラスト処理薬剤	A3.7	3	UC≠29&35
		z	その他			
35	溶接材料、ろう接材料、溶断用材料	a	溶接フラックス	A3.7	3	UC≠29&35
		b	ろう接フラックス(酸化防止剤等)	A3.7	3	UC≠29&35
		c	溶接用ガス、溶断用ガス	A3.8		
		z	その他			
36	作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤(エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等)	a	作動油の基油、潤滑油剤の基油	A3.16	2	Sol.<100
		b	絶縁油の基油	A3.16	2	Sol.<100
		c	プロセス油の基油	A3.11	ⅠA	Additives, Boiling point≧300
		d	グリース増ちょう剤	A3.16	2	Sol.<100
		e	作動油添加剤、潤滑油剤添加剤	A3.16	2	Sol.<100
		f	絶縁油添加剤	A3.16	2	Sol.<100
		g	プロセス油添加剤	A3.11	ⅠA	Additives, Boiling point<300
	[#37を除く]	z	その他			

図表 Ⅳ-１１０工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階（大気）その５

37	金属加工油（切削油、圧延油、プレス油、熱処理油等）、防錆油	a	水溶性金属加工油の基油	A3.7		UC=29&35 logHe≧2　0.002 logHe＜2　0.0002
		b	不水溶性金属加工油の基油、防錆油の基油	A3.7		UC=29&35 logHe≧2　0.002 logHe＜2　0.0002
		c	水溶性金属加工油添加剤	A3.7		UC=29&35 logHe≧2　0.002 logHe＜2　0.0002
		d	不水溶性金属加工油添加剤、防錆油添加剤	A3.7		UC=29&35 logHe≧2　0.002 logHe＜2　0.0002
		z	その他			
38	電気・電子材料 [対象材料等の製造用プロセス材料を含む] [絶縁油は#36]	a	磁性材料[#38-fを除く]、導電材料、超電導材料、蛍光体材料	A3.4	3	
		b	半導体材料、有機半導体材料、液晶材料	A3.4	3	
		c	誘電体材料、抵抗体材料、固体電解質材料、電解液材料、セパレータ材料	A3.4	3	
		d	光導波路材料(光ファイバを含む)、光学フイルム材料、電子機器用光材料	A3.4	3	
		e	封止材、絶縁材料、シールド材料	A3.4	3	
		f	電子記憶媒体材料(磁性材料、光吸収色素等)	A3.4	3	
		z	その他			
39	電池材料(一次電池、二次電池)	a	電解質材料、電解液材料、絶縁材料、セパレータ材料	A3.4	3	
		b	電極材料(活物質、集電体、導電剤、バインダー等)、減極剤	A3.4	3	
		z	その他			
40	水処理剤	a	腐食防止剤、防錆剤、防食剤、防スケール剤、防藻剤	A3.16	3	Sol.>1000
		b	金属イオン捕捉剤、金属イオン封鎖剤、硬水軟化剤	A3.16	3	Sol.>1000
		c	イオン交換体(有機及び無機イオン交換体)、分離膜	A3.16	2	Sol.<100
		d	酸化剤、還元剤、pH調節剤	A3.16	3	Sol.>1000
		e	消泡剤、凝集剤、濾過助剤、脱水助剤、イオン交換樹脂再生剤	A3.16	3	Sol.>1000
		z	その他			
41	乾燥剤、吸着剤	a	乾燥剤、脱水剤	A3.16	3	Sol.<100
		b	吸着剤(脱臭剤、脱硝剤、ガス吸着剤等)	A3.16	3	Sol.<100
		c	吸収剤(脱酸素剤等)	A3.16	3	Sol.<100
		z	その他			
42	熱媒体	a	冷媒、冷却剤	A3.16	2	Sol.<100
		b	熱媒、加熱剤	A3.16	2	Sol.<100
		z	その他			
43	不凍液	a	不凍液(LLC等)	A4.1		UC=5
		b	防錆剤、防食剤	A4.1		UC=5
		z	その他			
44	建設資材添加物(コンクリート混和剤、木材補強含浸剤等)	a	表面硬化剤	A3.16	3	Sol.<100
		b	コンクリート混和剤(強化剤、減水剤)	A3.16	3	Sol.<100
		c	離型剤、消泡剤	A3.16	3	Sol.<100
		d	木材補強含浸剤、木質板添加剤	A3.16	3	Sol.<100
		e	防汚剤[#17-b,cを除く]、防水剤、撥水剤	A3.16	3	Sol.<100
		z	その他			
45	散布剤、埋立処分前処理薬剤(融雪剤、土壌改良剤、消火剤等)	a	凍結防止剤(融雪剤等)	A3.16	4	Sol.<100
		b	土壌改良剤、地盤改良剤	A3.16	4	Sol.<100
		c	消火剤	A3.16	4	Sol.<100
		d	人工降雨剤	A3.16	4	Sol.<100
		e	油処理剤	A3.16	4	Sol.<100
		f	粉塵結合剤、粉塵防止剤、煤塵処理剤	A3.16	4	Sol.<100
		z	その他			
46	分離・精製プロセス剤 《鉱業、金属製造業での用途》 [抽出・精製溶剤は#07]	a	浮選剤(捕収剤、起ほう剤、条件剤)、金属浸出剤	A3.16	3	Sol.<100
		b	凝集剤、分散剤、金属捕捉剤	A3.16	3	Sol.<100
		z	その他			
47	燃料、燃料添加剤	a	燃料	A3.8		
		b	燃料添加剤(清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等)	A3.8		
		c	燃焼改良剤(燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等)	A3.8		
		d	氷結防止剤、着臭剤	A3.8		
		z	その他			
上記以外						
98	その他の原料、その他の添加剤	z	その他の原料、その他の添加剤			
99	輸出用	a	輸出用			

図表 Ⅳ-１１１　製造段階（水域）

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	EU-TGD A-table 該当箇所		
				Table	MC/Type	Conditions
	製　造					
0	その物質自体の製造	※製造段階からの排出係数は、用途に依存しない		A1.1	1c	

1 図表 Ⅳ-１１２　調合段階（水域）その１

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	EU-TGD A-table 該当箇所 Table	MC/Type	Conditions
	中間物					
01	中間物	a	合成原料、重合原料、前駆重合体			
		b	重合開始剤	A2.1		
		z	その他			
	溶剤					
02	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	a	塗料用溶剤、塗料希釈剤	A2.1		
		b	塗料剥離剤	A2.1		
		c	ワニス用溶剤	A2.1		
		d	コーティング剤用溶剤、レジスト塗布用溶剤	A2.1		
		e	印刷インキ用溶剤、電子デバイス用溶剤、インキ溶剤、インキ洗浄剤	A2.1		
		f	殺生物剤用溶剤	A2.1		
		z	その他			
03	接着剤用・粘着剤用・シーリング材用溶剤	a	接着剤用溶剤、粘着剤用溶剤	A2.1		
		b	接着剤剥離用溶剤、糊剥離用溶剤	A2.1		
		c	接着用溶剤	A2.1		
		d	シーリング材用溶剤	A2.1		
		z	その他			
04	金属洗浄用溶剤	a	金属洗浄用溶剤（塩素系）	A2.1		
		z	その他			
05	クリーニング洗浄用溶剤《洗濯業での用途》	a	ドライクリーニング溶剤	A2.1		
		b	染み抜き剤、ドライクリーニング溶剤抽出剤	A2.1		
		z	その他			
06	その他の洗浄用溶剤 [#04,05を除く]	a	フォトレジスト現像用溶剤、レジスト剥離用溶剤	A2.1		
		z	その他			
07	工業用溶剤 [#02-06の溶剤を除く]	a	合成反応用溶剤	A2.1		
		b	紡糸用溶剤、製膜用溶剤	A2.1		
		c	抽出溶剤、精製溶剤	A2.1		
		d	希釈溶剤	A2.1		
		z	その他			
08	エアゾール用溶剤	a	エアゾール噴射剤、希釈剤	A2.1		
		z	その他			
09	その他の溶剤	z	その他の溶剤			

2
3
4

図表 Ⅳ-１１３　調合段階（水域）その２

溶　剤　以　外						
10	化学プロセス調節剤	a	触媒、触媒担体	A2.1		
		b	イオン交換樹脂、イオン交換膜、分離膜、隔膜、濾過補助剤（脱蝋助剤等）	A3.11	ＩA	
		c	乳化剤、分散剤	A2.1		
		d	重合調節（停止）剤、重合禁止剤、安定剤	A2.1		
		e	光学分割剤	A2.1		
		z	その他			
11	着色剤（染料、顔料、色素、色材）[#12,13,15,16,25,26,29を除く]	a	着色剤（染料、顔料、色素、色材）	A2.1		
		b	蛍光増白剤	A2.1		
		c	発色剤、発色助剤	A2.1		
		z	その他			
12	水系洗浄剤1《工業用途》[#25,26を除く]	a	石鹸、洗剤（界面活性剤）	A2.1		
		b	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤	A2.1		
		c	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（消泡剤等）	A2.1		
		d	防錆剤	A2.1		
		z	その他			
13	水系洗浄剤2《家庭用・業務用の用途》	a	石鹸、洗剤、ウインドウォシャー液（界面活性剤）	A2.1		
		b	柔軟剤（界面活性剤）	A2.1		
		c	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤	A2.1		
		d	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（酵素、蛍光増白剤、紫外線吸収剤等）	A2.1		
		z	その他			
14	ワックス（床用、自動車用、皮革用等）	a	ワックス	A2.1		
		b	乳化剤、分散剤	A2.1		
		z	その他			
15	塗料、コーティング剤[プライマーを含む]	a	塗料用樹脂、コーティング剤用樹脂	A3.11	ＩA	
		b	着色剤（染料、顔料、光輝剤）	A2.1		
		c	熱・光硬化塗料のモノマー・オリゴマー、バインダー成分	A2.1		
		d	架橋剤、硬化剤、増感剤、重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤	A2.1		
		e	可塑剤、充填剤	A2.1		
		f	安定化剤（酸化防止剤等）	A2.1		
		g	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤、導電性改良剤	A2.1		
		h	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、表面調整剤、造膜助剤	A2.1		
		i	腐食防止剤、防錆剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤	A2.1		
		j	乾燥促進剤、湿潤剤、難燃剤、撥水剤	A2.1		
		z	その他			
16	印刷インキ、複写用薬剤（トナー等）[筆記用具、レジストインキ用を含む]	a	インキ用樹脂、トナー用樹脂	A3.11	ＩA	
		b	着色剤（染料、顔料、色素）、感熱色素、感圧色素、蛍光増白剤、顕色剤	A2.1		
		c	紫外線・電子線硬化インキのモノマー・オリゴマー、増感剤、重合開始剤	A2.1		
		d	可塑剤、充填剤	A2.1		
		e	安定化剤（酸化防止剤等）	A2.1		
		f	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤	A2.1		
		g	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、造膜助剤	A2.1		
		h	電荷制御剤、流動性付与剤、研磨性付与剤、滑り性付与剤	A2.1		
		i	乾燥促進剤、湿潤剤	A2.1		
		z	その他			
17	船底塗料用防汚剤、漁網用防汚剤	a	防汚剤用樹脂[添加剤も含む]	A3.11	ＩA	
		b	船底塗料用防汚剤	A2.1		
		c	漁網用防汚剤	A2.1		
		z	その他			
18	殺生物剤1[成形品に含まれ出荷されるもの]	a	殺菌剤、殺虫剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤（細菌増殖抑制剤、木材の防腐剤、防蟻剤）	A2.1		
		b	展着剤、乳化剤	A2.1		
		z	その他			
19	殺生物剤2[工程内使用で成形品に含まれないもの]	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）	A2.1		
		b	ガス滅菌剤、薫蒸剤、燻煙剤	A2.1		
		c	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、抗菌剤	A2.1		
		d	展着剤、乳化剤	A2.1		
		z	その他			
20	殺生物剤3《家庭用・業務用の用途》	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）	A2.1		
		b	繊維用・紙用防虫剤	A2.1		
		c	シロアリ駆除剤、防蟻剤	A2.1		
		d	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤、除菌剤	A2.1		
		e	非農耕地用除草剤	A2.1		
		f	展着剤、乳化剤	A2.1		
		z	その他			
21	火薬類[煙火を含む]	a	火薬、爆薬、火工品[#21-bを除く]、煙火	A2.1		
		b	自動車安全部品用ガス発生剤	A2.1		
		z	その他			
22	芳香剤、消臭剤	a	香料（洗浄剤用）[#22-b,cを除く]	IFRA A2.1		【調合段階1】 【調合段階2】
		b	芳香剤	A2.1		【調合段階2】
		c	消臭剤	A2.1		【調合段階2】
		d	乳化剤、分散剤	A2.1		【調合段階2】
		z	その他			

1

図表 Ⅳ-１１４　調合段階（水域）その３

23	接着剤、粘着剤、シーリング材	a	接着剤用樹脂、粘着剤用樹脂、シーリング材用樹脂	A3.11	ＩA	
		b	バインダー成分（モノマー、プレポリマー、硬化剤、硬化促進剤、開始剤、カップリング剤）	A2.1		
		c	可塑剤、充填剤	A2.1		
		d	安定化剤（老化防止剤等）	A2.1		
		e	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤	A2.1		
		f	表面調整剤、分散剤	A2.1		
		g	防腐剤、防かび剤、抗菌剤	A2.1		
		h	難燃剤、導電剤	A2.1		
		z	その他			
24	フォトレジスト材料、写真材料、印刷版材料	a	感光性・感電子性樹脂（フォトレジスト、印刷版等）	A3.11	ＩA	
		b	感光性・感電子性樹脂のモノマー・オリゴマー	A2.1		
		c	感光剤、電子写真感光体、光重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤	A2.1		
		d	色素形成カプラー（カラー写真用）	A2.1		
		e	乳化剤、分散剤	A2.1		
		f	定着剤、安定化剤	A2.1		
		g	硬化剤、増感剤、減感剤、架橋密度向上剤、重合開始剤、レジスト添加剤	A2.1		
		h	現像剤、水溶性処理薬品、レジスト剥離剤	A2.1		
		z	その他			
25	合成繊維、繊維処理剤 [不織布処理を含む]	a	成形品基材（合成繊維、不織布）	A3.11	ＩA	
		b	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	A2.1		
		c	集束剤	A2.1		
		d	防炎剤、難燃剤	A2.1		
		e	含浸補強剤、染料固着剤（フィックス剤）	A2.1		
		f	帯電防止剤、親水加工剤	A2.1		
		g	柔軟仕上げ剤	A2.1		
		h	形態安定加工剤	A2.1		
		i	撥水剤、撥油剤、防水加工剤、防汚加工剤	A2.1		
		j	抗菌剤、変色防止剤、紫外線吸収剤	A2.1		
		k	紡糸・紡績・織編油剤、紡糸・紡績・織編油助剤	A2.1		
		l	洗浄剤、精練洗浄剤（ソーピング剤）、潤滑剤	A2.1		
		m	キレート剤	A2.1		
		n	漂白剤、抜染剤	A2.1		
		o	均染剤、浸透剤、促染剤（染色助剤）、媒染剤、捺染用糊剤	A2.1		
		p	乳化剤、分散剤、消泡剤	A2.1		
		q	マーセル化助剤	A2.1		
		r	糊抜き剤	A2.1		
		z	その他			
26	紙・パルプ薬品	a	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	A2.1		
		b	サイズ剤、定着剤、填料	A2.1		
		c	コーティング剤	A2.1		
		d	防炎剤、難燃剤、帯電防止剤	A2.1		
		e	紙力増強剤、歩留向上剤、定着剤（フィックス剤）、防錆剤	A2.1		
		f	撥水剤、撥油剤、防水加工剤	A2.1		
		g	嵩高剤、柔軟剤	A2.1		
		h	蒸解薬液、pH調節剤	A2.1		
		i	スライムコントロール剤（防腐剤）、ピッチコントロール剤	A2.1		
		j	漂白剤、漂白浴安定剤	A2.1		
		k	乳化剤、分散剤、消泡剤、脱墨剤、洗浄剤	A2.1		
		z	その他			
27	プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤	a	成形品基材（プラスチック、合成皮革、合成紙、発泡体）	A3.11	ＩA	
		b	高吸水性材料	A3.11	ＩA	
		c	可塑剤、分散剤	A2.1		
		d	安定化剤（酸化防止剤等）	A2.1		
		e	充填剤、希釈剤、ポリマー分解促進剤	A2.1		
		f	結晶核剤	A2.1		
		g	内部滑剤、内部離型剤	A2.1		
		h	防曇剤、流滴剤	A2.1		
		i	難燃剤、帯電防止剤、波長変換剤	A2.1		
		j	外部滑剤、外部離型剤	A2.1		
		k	発泡剤、ラジカル発生剤	A2.1		
		l	注型用・注型発泡用材料（モノマー、プレポリマー等）	A2.1		
		m	硬化剤、架橋剤（FRP用モノマー等）、架橋助剤、増感剤、重合開始剤	A2.1		
		n	硬化促進剤	A2.1		
	[#15,16,23,25,28を除く]	y	その他の添加剤（改質剤等）			
	[着色剤は#11]	z	その他			
28	合成ゴム、ゴム用添加剤、ゴム用加工助剤	a	成形品基材(エラストマー（合成ゴム）)	A3.11	ＩA	
		b	加硫促進剤、加硫促進剤助剤（加硫活性剤）	A2.1		
		c	加硫剤、架橋剤、架橋助剤	A2.1		
		d	可塑剤、補強材（接着促進剤等）、充填剤	A2.1		
		e	安定化剤（老化防止剤等）	A2.1		
		f	スコーチ防止剤、素練促進剤、内部滑剤、内部離型剤	A2.1		
		g	ラテックス凝固剤、乳化剤、分散剤、沈降防止剤	A2.1		
		h	難燃剤、帯電防止剤	A2.1		
		i	外部滑剤、外部離型剤	A2.1		
		j	発泡剤	A2.1		
		k	ゴム再生剤（脱硫剤等）	A2.1		
		y	その他の添加剤（改質剤等）			
	[着色剤は#11]	z	その他			
29	皮革処理剤	a	なめし剤	A2.1		
		b	仕上げ加工薬剤（漂白剤、着色剤、着色助剤、撥水剤、撥油剤、油剤、脱脂剤、加脂剤等）	A2.1		
		c	準備工程（なめし前）薬剤（脱脂剤、脱灰剤等）	A2.1		
		z	その他			

2

3

図表 Ⅳ-１１５　調合段階（水域）その４

30	ガラス、ほうろう、セメント	a	ガラス原料	A2.1		
		b	ガラス添加剤（強化剤、集束剤、防曇剤、紫外線カット剤等）	A2.1		
		c	ガラス加工助剤（離型剤、pH調節剤等）	A2.1		
		d	ほうろう原料	A2.1		
		e	ほうろう添加剤（絵付け用転写剤、フリット配合薬剤等）	A2.1		
		f	ほうろう加工助剤（中和剤、ニッケル処理剤等）	A2.1		
		g	セメント原料	A3.3	All MC's	【調合段階2】 Wet ≧1000t/y, <1000t/y
		h	セメント添加剤（混合材、膨張剤、固化剤等）	A2.1 A3.3	All MC's	【調合段階1】 【調合段階2】 Wet <1000t/y,≧1000t/y,
	[着色剤は#11]	z	その他			
31	陶磁器、耐火物、ファインセラミックス	a	陶磁器原料、耐火物原料、ファインセラミックス原料	A2.1		
		b	陶磁器添加剤、耐火物添加剤、ファインセラミックス添加剤（焼結助剤等）	A2.1		
		c	成形助剤（バインダー、増粘剤、可塑剤、潤滑剤、分散剤等）	A2.1		
	[着色剤は#11、電子用ファインセラミックスは#38]	d	滑剤、離型剤	A2.1		
		z	その他			
32	研削砥石、研磨剤、摩擦材、固体潤滑剤	a	研削砥石原料、研磨剤原料、摩擦材原料、固体潤滑剤原料	A2.1		
		b	研削砥石・研磨剤・摩擦材・固体潤滑剤添加剤（バインダー、増粘剤、研磨助剤、分散剤、摩擦調整剤、潤滑剤等）	A2.1		
		c	滑剤、離型剤	A2.1		
	[着色剤は#11]	z	その他			
33	金属製造加工用資材	a	金属用添加剤（接種剤等）	A2.1		
		b	加工助剤（フラックス等）	A2.1		
		c	鋳造用粘結剤、鋳造用硬化剤、鋳造用添加剤	A2.1		
	[金属及び合金の原料は#1、着色剤は#11、表面処理は#34、溶接・ろう接は#35、金属加工油は#37]	d	鋳造用離型剤、鋳造用塗型剤	A2.1		
		z	その他			
34	表面処理剤	a	めっき薬剤（皮膜成分原料）	A2.1		
		b	めっき浴添加剤（光沢付与剤、煙霧防止剤、無電解めっきの還元剤等）	A2.1		
		c	化成処理薬剤	A2.1		
		d	真空めっき（蒸着等）薬剤、溶射処理薬剤	A2.1		
	[めっき前処理剤・後処理剤の脱脂・洗浄薬剤は#04金属洗浄剤、#12の水系洗浄剤1]	e	表面硬化処理（浸炭、窒化等）薬剤	A2.1		
		f	表面フッ素化処理薬剤、表面シリル化処理薬剤	A2.1		
	[#4-6,12-15,17,25-27,30-32,38,44を除く]	g	エッチング処理薬剤、スパッタリング処理薬剤、ブラスト処理薬剤	A2.1		
		z	その他			
35	溶接材料、ろう接材料、溶断用材料	a	溶接フラックス	A2.1		
		b	ろう接フラックス（酸化防止剤等）	A2.1		
		c	溶接用ガス、溶断用ガス	A2.1		
		z	その他			
36	作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤（エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等）	a	作動油の基油、潤滑油剤の基油	A2.2		UC=29&35
		b	絶縁油の基油	A2.2		UC=29&35
		c	プロセス油の基油	A2.2		UC=29&35
		d	グリース増ちょう剤	A2.2		UC=29&35
		e	作動油添加剤、潤滑油剤添加剤	A2.2		UC=29&35
		f	絶縁油添加剤	A2.2		UC=29&35
		g	プロセス油添加剤	A2.2		UC=29&35
	[#37を除く]	z	その他			
37	金属加工油（切削油、圧延油、プレス油、熱処理油等）、防錆油	a	水溶性金属加工油の基油	A2.2		UC=29&35
		b	不水溶性金属加工油の基油、防錆油の基油	A2.2		UC=29&35
		c	水溶性金属加工油添加剤	A2.2		UC=29&35
		d	不水溶性金属加工油添加剤、防錆油添加剤	A2.2		UC=29&35
		z	その他			
38	電気・電子材料 [対象材料等の製造用プロセス材料を含む]	a	磁性材料[#38-fを除く]、導電材料、超電導材料、蛍光体材料	A2.1		
		b	半導体材料、有機半導体材料、液晶材料	A2.1		
		c	誘電体材料、抵抗体材料、固体電解質材料、電解液材料、セパレータ材料	A2.1		
		d	光導波路材料(光ファイバを含む)、光学フイルム材料、電子機器用光材料	A2.1 & A3.1	ＩA	
		e	封止材、絶縁材料、シールド材料	A2.1		
		f	電子記憶媒体材料（磁性材料、光吸収色素等）	A2.1		
	[絶縁油は#36]	z	その他			
39	電池材料（一次電池、二次電池）	a	電解質材料、電解液材料、絶縁材料、セパレータ材料	A2.1		
		b	電極材料（活物質、集電体、導電剤、バインダー等）、減極剤	A2.1		
		z	その他			

図表 Ⅳ-１１６調合段階（水域）その５

40	水処理剤	a	腐食防止剤、防錆剤、防食剤、防スケール剤、防藻剤	A2.1		
		b	金属イオン捕捉剤、金属イオン封鎖剤、硬水軟化剤	A2.1		
		c	イオン交換体（有機及び無機イオン交換体）、分離膜	A3.11	ＩＡ	
		d	酸化剤、還元剤、pH調節剤	A2.1		
		e	消泡剤、凝集剤、濾過助剤、脱水助剤、イオン交換樹脂再生剤	A2.1		
		z	その他			
41	乾燥剤、吸着剤	a	乾燥剤、脱水剤	A2.1		
		b	吸着剤（脱臭剤、脱硝剤、ガス吸着剤等）	A2.1		
		c	吸収剤（脱酸素剤等）	A2.1		
		z	その他			
42	熱媒体	a	冷媒、冷却剤	A2.1		
		b	熱媒、加熱剤	A2.1		
		z	その他			
43	不凍液	a	不凍液（LLC等）	A2.1		
		b	防錆剤、防食剤	A2.1		
		z	その他			
44	建設資材添加物（コンクリート混和剤、木材補強含浸剤等）	a	表面硬化剤	A2.1		
		b	コンクリート混和剤（強化剤、減水剤）	A2.1		
		c	離型剤、消泡剤	A2.1		
		d	木材補強含浸剤、木質板添加剤	A2.1		
		e	防汚剤[#17-b,cを除く]、防水剤、撥水剤	A2.1		
		z	その他			
45	散布剤、埋立処分前処理薬剤（融雪剤、土壌改良剤、消火剤等）	a	凍結防止剤（融雪剤等）	A2.1		
		b	土壌改良剤、地盤改良剤	A2.1		
		c	消火剤	A2.1		
		d	人工降雨剤	A2.1		
		e	油処理剤	A2.1		
		f	粉塵結合剤、粉塵防止剤、煤塵処理剤	A2.1		
		z	その他			
46	分離・精製プロセス剤《鉱業、金属製造業での用途》［抽出・精製溶剤は#07］	a	浮選剤（捕収剤、起ほう剤、条件剤）、金属浸出剤	A2.1		
		b	凝集剤、分散剤、金属捕捉剤	A2.1		
		z	その他			
47	燃料、燃料添加剤	a	燃料	A2.1		
		b	燃料添加剤（清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等）	A2.1		
		c	燃焼改良剤（燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等）	A2.1		
		d	氷結防止剤、着臭剤	A2.1		
		z	その他			
上記以外						
98	その他の原料、その他の添加剤	z	その他の原料、その他の添加剤			
99	輸出用	a	輸出用			

1　図表 Ⅳ-１１７　工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階（水域）その１

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	EU-TGD A-table 該当箇所		
				Table	MC/Type	Conditions
中間物						
01	中間物	a	合成原料、重合原料、前駆重合体	A3.3		Wet <1000t/y, ≧1000t/y
		b	重合開始剤	A3.3		Wet <1000t/y, ≧1000t/y
		z	その他			
溶剤						
02	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	a	塗料用溶剤、塗料希釈剤	A3.15		solvent based UC=48
		b	塗料剥離剤	A3.15		solvent based UC=48
		c	ワニス用溶剤	A3.15		solvent based UC=48
		d	コーティング剤用溶剤、レジスト塗布用溶剤	A3.15		solvent based UC=48
		e	印刷インキ用溶剤、電子デバイス用溶剤、インキ溶剤、インキ洗浄剤	A3.12	3	for printing and allied process UC=48
		f	殺生物剤用溶剤	A3.1		UC=48
		z	その他			
03	接着剤用・粘着剤用・シーリング材用溶剤	a	接着剤用溶剤、粘着剤用溶剤	A3.15		Water based UC=48
		b	接着剤剥離用溶剤、糊剥離用溶剤	A3.15		Water based UC=48
		c	接着用溶剤	A3.15		Water based UC=48
		d	シーリング材用溶剤	A3.15		Water based UC=48
		z	その他			
04	金属洗浄用溶剤	a	金属洗浄用溶剤（塩素系）	A3.16	4	Vap.100-1000
		z	その他			
05	クリーニング洗浄用溶剤《洗濯業での用途》	a	ドライクリーニング溶剤	A3.16	3	Vap.1000-10000
		b	染み抜き剤、ドライクリーニング溶剤抽出剤	A3.16	3	Vap.1000-10000
		z	その他			
06	その他の洗浄用溶剤 [#04,05を除く]	a	フォトレジスト現像用溶剤、レジスト剥離用溶剤	A3.16	4	Vap.1000-10000
		z	その他			
07	工業用溶剤 [#02-06の溶剤を除く]	a	合成反応用溶剤	A3.3	All	<1,000t/y
		b	紡糸用溶剤、製膜用溶剤	A3.11	ⅢA	UC=48
		c	抽出溶剤、精製溶剤	A3.3	All	<1,000t/y
		d	希釈溶剤	A3.3	All	<1,000t/y
		z	その他			
08	エアゾール用溶剤	a	エアゾール噴射剤、希釈剤	A3.1		UC=3,surface water
		z	その他			
09	その他の溶剤	z	その他の溶剤			

2

3

4

1　図表 Ⅳ-１１８　工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階（水域）その２

	溶　剤　以　外					
10	化学プロセス調節剤	a	触媒、触媒担体	A3.10	Ⅱ	UC=43(Catalysts), Wet
		b	イオン交換樹脂、イオン交換膜、分離膜、隔膜、濾過補助剤（脱蝋助剤等）	A3.11& A3.1	ＩＡ＆２	
		c	乳化剤、分散剤	A3.10	Ⅰ	UC=43(Monomers), Wet
		d	重合調節（停止）剤、重合禁止剤、安定剤	A3.10	Ⅲ	UC=43(Catalysts), Wet
		e	光学分割剤	A3.16	2	Vap.10-100
		z	その他			
11	着色剤（染料、顔料、色素、色材）	a	着色剤（染料、顔料、色素、色材）	A3.11	Ⅰ	UC=10(Pigments), Boiling point≧300
		b	蛍光増白剤	A3.11	Ⅰ	UC=10(Pigments), Boiling point≧300
		c	発色剤、発色助剤	A3.11	Ⅰ	UC=10(Pigments), Boiling point≧300
	[#12,13,15,16,25,26,29を除く]	z	その他			
12	水系洗浄剤1 《工業用途》	a	石鹸、洗剤（界面活性剤）	A3.16	3	Vap.＜10
		b	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤	A3.16	3	Vap.＜10
		c	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（消泡剤等）	A3.16	3	Vap.＜10
		d	防錆剤	A3.16	3	Vap.＜10
	[#25,26を除く]	z	その他			
13	水系洗浄剤2 《家庭用・業務用の用途》	a	石鹸、洗剤、ウインドウォシャー液（界面活性剤）	A4.1		UC=50
		b	柔軟剤（界面活性剤）	A4.1		UC=47
		c	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤	A4.1		UC=8
		d	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（酵素、蛍光増白剤、紫外線吸収剤等）	A4.1		UC=9 UC=11
		z	その他			
14	ワックス（床用、自動車用、皮革用等）	a	ワックス	A4.1		UC=8, household products
		b	乳化剤、分散剤	A4.1		UC=50
		z	その他			
15	塗料、コーティング剤 [プライマーを含む]	a	塗料用樹脂、コーティング剤用樹脂	A3.15		UC=47,52,55 Water based
		b	着色剤（染料、顔料、光輝剤）	A3.15		UC=10 Water based
		c	熱・光硬化塗料のモノマー・オリゴマー、バインダー成分	A3.15		UC=47,52,55 Water based
		d	架橋剤、硬化剤、増感剤、重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤	A3.15		UC=47,52,55 Water based
		e	可塑剤、充填剤	A3.15		UC=47,52,55 Water based UC=20 Water based
		f	安定化剤（酸化防止剤等）	A3.15		UC=47,52,55 Water based
		g	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤、導電性改良剤	A3.15		UC=52 Water based
		h	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、表面調整剤、造膜助剤	A3.15		UC=50 Water based
		i	腐食防止剤、防錆剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤	A3.15		UC=14 Water based
		j	乾燥促進剤、湿潤剤、難燃剤、撥水剤	A3.15		UC=47,52,55 Water based
		z	その他			
16	印刷インキ、複写用薬剤（トナー等） [筆記用具、レジストインキ用を含む]	a	インキ用樹脂、トナー用樹脂	A3.12	2	for printing and allied processes Default, Vap.<100
		b	着色剤（染料、顔料、色素）、感熱色素、感圧色素、蛍光増白剤、顕色剤	A3.12	2	for printing and allied processes UC=10&45
		c	紫外線・電子線硬化インキのモノマー・オリゴマー、増感剤、重合開始剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		d	可塑剤、充填剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		e	安定化剤（酸化防止剤等）	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		f	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		g	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、造膜助剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		h	電荷制御剤、流動性付与剤、研磨性付与剤、滑り性付与剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		i	乾燥促進剤、湿潤剤	A3.12	2	for printing and allied processes Default
		z	その他			
17	船底塗料用防汚剤、漁網用防汚剤	a	防汚剤用樹脂[添加剤も含む]	A3.15		UC=47,52,55 Water based
		b	船底塗料用防汚剤	A3.15		UC=47,52,55 Water based
		c	漁網用防汚剤	A3.15		UC=47,52,55 Water based
		z	その他			

2

3

1　図表 Ⅳ-１１９　工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階（水域）その３

18	殺生物剤1 [成形品に含まれ出荷されるもの]	a	殺菌剤、殺虫剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤(細菌増殖抑制剤、木材の防腐剤、防蟻剤)	ESD No.2		wood preservative, automated spraying scenario, Sol.<0.05～<0.1, Sol.≧0.1
		b	展着剤、乳化剤	ESD No.2		wood preservative, automated spraying scenario, Sol.<0.05～<0.1, Sol.≧0.1
		z	その他			
19	殺生物剤2 [工程内使用で成形品に含まれないもの]	a	不快害虫用殺虫剤(害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤)	A3.16	3	Vap.<10
		b	ガス滅菌剤、薫蒸剤、燻煙剤	A3.1		UC=3
		c	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、抗菌剤	A3.16	3	Vap.<10
		d	展着剤、乳化剤	A3.16	3	Vap.<10
		z	その他			
20	殺生物剤3 《家庭用・業務用の用途》	a	不快害虫用殺虫剤(害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤)	A4.1		UC=38(pesticide, pets)
		b	繊維用・紙用防虫剤	A4.1		UC=3
		c	シロアリ駆除剤、防蟻剤	A3.5		UC=39
		d	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤、除菌剤	A4.1		UC=38(pesticide, pets)
		e	非農耕地用除草剤	A3.5		UC=39
		f	展着剤、乳化剤	A4.1		UC=50
		z	その他			
21	火薬類 [煙火を含む]	a	火薬、爆薬、火工品[#21-bを除く]、煙火	A3.8		
		b	自動車安全部品用ガス発生剤	A3.8		
		z	その他			
22	芳香剤、消臭剤	a	香料(洗浄剤用)[#22-b,cを除く]	A3.16	4	Vap.=1000-10000
		b	芳香剤	A4.1		UC=36(else),Vap.=2500-10000
		c	消臭剤	A4.1		UC=36(else),Vap.=2500-10000
		d	乳化剤、分散剤	A4.1		UC=50
		z	その他			
23	接着剤、粘着剤、シーリング材	a	接着剤用樹脂、粘着剤用樹脂、シーリング材用樹脂	A3.15		UC=47,52,55 Water based
		b	バインダー成分(モノマー、プレポリマー、硬化剤、硬化促進剤、開始剤、カップリング剤)	A3.15		UC=47,52,55 , Water based
		c	可塑剤、充填剤	A3.15		UC=47,52,55,Water based (UC=20)
		d	安定化剤(老化防止剤等)	A3.15		UC=47,52,55,Water based
		e	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤	A3.15		UC=52 Water based
		f	表面調整剤、分散剤	A3.15		UC=50 Water based
		g	防腐剤、防かび剤、抗菌剤	A3.15		UC=14 Water based
		h	難燃剤、導電剤	A3.15		UC=47,52,55,Water based
		z	その他			
24	フォトレジスト材料、写真材料、印刷版材料	a	感光性・感電子性樹脂(フォトレジスト、印刷版等)	A3.9 & A5.1	3	Else
		b	感光性・感電子性樹脂のモノマー・オリゴマー	A3.9 & A5.1	3	Else
		c	感光剤、電子写真感光体、光重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤	A3.9 & A5.1	3	Else
		d	色素形成カプラー(カラー写真用)	A3.9 & A5.1	3	coupler of dye
		e	乳化剤、分散剤	A3.9 & A5.1	3	Else
		f	定着剤、安定化剤	A3.9 & A5.1	3	Else
		g	硬化剤、増感剤、減感剤、架橋密度向上剤、重合開始剤、レジスト添加剤	A3.9 & A5.1	3	Else
		h	現像剤、水溶性処理薬品、レジスト剥離剤	A3.9 & A5.1	3	Else
		z	その他			
25	合成繊維、繊維処理剤 [不織布処理を含む]	a	成形品基材（合成繊維、不織布）	A3.11	ＩA	
		b	着色剤(染料、顔料)、蛍光増白剤	A3.14		UC=10, Batch, Reactive-cotton,E1=0.303,E2=0.01
		c	集束剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		d	防炎剤、難燃剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		e	含浸補強剤、染料固着剤(フィックス剤)	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		f	帯電防止剤、親水加工剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		g	柔軟仕上げ剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		h	形態安定加工剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		i	撥水剤、撥油剤、防水加工剤、防汚加工剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		j	抗菌剤、変色防止剤、紫外線吸収剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		k	紡糸・紡績・織編油剤、紡糸・紡績・織編油助剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		l	洗浄剤、精練洗浄剤(ソーピング剤)、潤滑剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		m	キレート剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		n	漂白剤、抜染剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		o	均染剤、浸透剤、促染剤(染色助剤)、媒染剤、捺染用糊剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		p	乳化剤、分散剤、消泡剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		q	マーセル化助剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		r	糊抜き剤	A3.14		UC≠10, Vap.<100
		z	その他			

2

3

4

図表 Ⅳ-１２０　工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階（水域）その４

26	紙・パルプ薬品	a	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	A3.12	2	for pulp,paper and board production, UC=10, Acid dye, Kation/unknown
		b	サイズ剤、定着剤、填料	A3.12	2	for pulp,paper and board production, UC=20
		c	コーティング剤	A3.12	2	for pulp,paper and board production, UC=20&31
		d	防炎剤、難燃剤、帯電防止剤	A3.12	2	for pulp,paper and board production, UC=20&31
		e	紙力増強剤、歩留向上剤、定着剤（フィックス剤）、防錆剤	A3.12	2	for pulp,paper and board production, UC=31
		f	撥水剤、撥油剤、防水加工剤	A3.12	2	for pulp,paper and board production, UC=20&31
		g	嵩高剤、柔軟剤	A3.12	2	for pulp,paper and board production, UC=20&31
		h	蒸解薬液、pH調節剤	A3.12	2	for pulp,paper and board production, UC=20&30
		i	スライムコントロール剤（防腐剤）、ピッチコントロール剤	A3.12	2	for pulp,paper and board production, Default, Vap.<100
		j	漂白剤、漂白浴安定剤	A3.12	2	for pulp,paper and board production, UC=20&30
		k	乳化剤、分散剤、消泡剤、脱墨剤、洗浄剤	A3.12	2	for pulp,paper and board production, Default, Vap.<100
		z	その他			
27	プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤	a	成形品基材（プラスチック、合成皮革、合成紙、発泡体）	A3.11	Ⅰ A	
		b	高吸水性材料	A3.11	Ⅰ A	
		c	可塑剤、分散剤	A3.11	Ⅱ A	UC=47
		d	安定化剤（酸化防止剤等）	A3.11	Ⅰ A	UC=49
		e	充填剤、希釈剤、ポリマー分解促進剤	A3.11	Ⅰ A	UC=20
		f	結晶核剤	A3.11	Ⅰ A	Additives
		g	内部滑剤、内部離型剤	A3.11	Ⅰ A	Additives
		h	防曇剤、流滴剤	A3.11	Ⅰ A	Additives
		i	難燃剤、帯電防止剤、波長変換剤	A3.11	Ⅰ A	UC=22,7
		j	外部滑剤、外部離型剤	A3.11	Ⅳ A	UC=6
		k	発泡剤、ラジカル発生剤	A3.11	Ⅰ A	Additives
		l	注型用・注型発泡用材料（モノマー、プレポリマー等）	A3.11	Ⅴ B	UC=43
		m	硬化剤、架橋剤（FRP用モノマー等）、架橋助剤、増感剤、重合開始剤	A3.11	Ⅴ B	UC=43
		n	硬化促進剤	A3.11	Ⅴ B	UC=43
	[#15,16,23,25,28を除く]	y	その他の添加剤（改質剤等）			
	[着色剤は#11]	z	その他			
28	合成ゴム、ゴム用添加剤、ゴム用加工助剤	a	成形品基材（エラストマー（合成ゴム））	A3.11	Ⅰ A	
		b	加硫促進剤、加硫促進剤助剤（加硫活性剤）	A3.10	Ⅲ	UC=53, Wet
		c	加硫剤、架橋剤、架橋助剤	A3.10	Ⅲ	UC=53, Wet
		d	可塑剤、補強材（接着促進剤等）、充填剤	A3.11	Ⅱ A	UC=47
		e	安定化剤（老化防止剤等）	A3.11	Ⅰ A	UC=49
		f	スコーチ防止剤、素練促進剤、内部滑剤、内部離型剤	A3.11	Ⅰ A	Additives
		g	ラテックス凝固剤、乳化剤、分散剤、沈降防止剤	A3.11	Ⅰ A	Additives
		h	難燃剤、帯電防止剤	A3.11	Ⅰ A	UC=22,7
		i	外部滑剤、外部離型剤	A3.11	Ⅳ A	UC=6
		j	発泡剤	A3.11	Ⅰ A	Additives
		k	ゴム再生剤（脱硫剤等）	A3.11	Ⅰ A	Additives
		y	その他の添加剤（改質剤等）	A3.11	Ⅰ A	Additives
	[着色剤は#11]	z	その他	A3.11	Ⅴ B	UC=43
29	皮革処理剤	a	なめし剤	A3.6	2	
		b	仕上げ加工薬剤（漂白剤、着色剤、着色助剤、撥水剤、撥油剤、油剤、脱脂剤、加脂剤等）	A3.6	2	
		c	準備工程（なめし前）薬剤（脱脂剤、脱灰剤等）	A3.6	2	
		z	その他			

1　図表 Ⅳ-１２１　工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階（水域）その５

30	ガラス、ほうろう、セメント	a	ガラス原料	A3.3		Wet ≧1000t/y, <1000t/y
		b	ガラス添加剤（強化剤、集束剤、防曇剤、紫外線カット剤等）	A3.3		Wet ≧1000t/y, <1000t/y
		c	ガラス加工助剤（離型剤、pH調節剤等）	A3.3		Wet ≧1000t/y, <1000t/y
		d	ほうろう原料	A3.3		Wet ≧1000t/y, <1000t/y
		e	ほうろう添加剤（絵付け用転写剤、フリット配合薬剤等）	A3.3		Wet ≧1000t/y, <1000t/y
		f	ほうろう加工助剤（中和剤、ニッケル処理剤等）	A3.3		Wet ≧1000t/y, <1000t/y
		g	セメント原料	A3.16	3	Vap.10-100
		h	セメント添加剤（混合材、膨張剤、固化剤等）	A3.16	3	Vap.10-100
	[着色剤は#11]	z	その他			
31	陶磁器、耐火物、ファインセラミックス	a	陶磁器原料、耐火物原料、ファインセラミックス原料	A3.16	3	Vap.100-1000
		b	陶磁器添加剤、耐火物添加剤、ファインセラミックス添加剤（焼結助剤等）	A3.16	3	Vap.100-1000
		c	成形助剤（バインダー、増粘剤、可塑剤、潤滑剤、分散剤等）	A3.16	3	Vap.100-1000
	[着色剤は#11、電子用ファインセラミックスは#38]	d	滑剤、離型剤	A3.16	3	Vap.100-1000
		z	その他			
32	研削砥石、研磨剤、摩擦材、固体潤滑剤	a	研削砥石原料、研磨剤原料、摩擦材原料、固体潤滑剤原料	A3.16	3	Vap.100-1000
		b	研削砥石・研磨剤・摩擦材・固体潤滑剤添加剤（バインダー、増粘剤、研磨助剤、分散剤、摩擦調整剤、潤滑剤等）	A3.16	3	Vap.100-1000
		c	滑剤、離型剤	A3.16	3	Vap.100-1000
	[着色剤は#11]	z	その他			
33	金属製造加工用資材	a	金属用添加剤（接種剤等）	A3.16	3	Vap.100-1000
		b	加工助剤（フラックス等）	A3.16	3	Vap.100-1000
		c	鋳造用粘結剤、鋳造用硬化剤、鋳造用添加剤	A3.16	3	Vap.100-1000
	[金属及び合金の原料は#1、着色剤は#11、表面処理は#34、溶接・ろう接は#35、金属加工油は#37]	d	鋳造用離型剤、鋳造用塗型剤	A3.16	3	Vap.100-1000
		z	その他			
34	表面処理剤	a	めっき薬剤（皮膜成分原料）	A3.7	3	UC≠29&35
		b	めっき浴添加剤（光沢付与剤、煙霧防止剤、無電解めっきの還元剤等）	A3.7	3	UC≠29&35
		c	化成処理薬剤	A3.7	3	UC≠29&35
		d	真空めっき（蒸着等）薬剤、溶射処理薬剤	A3.7	3	UC≠29&35
	[めっき前処理剤・後処理剤の脱脂・洗浄薬剤は#04金属洗浄剤、#12の水系洗浄剤1]	e	表面硬化処理（浸炭、窒化等）薬剤	A3.7	3	UC≠29&35
		f	表面フッ素化処理薬剤、表面シリル化処理薬剤	A3.7	3	UC≠29&35
	[#4-6,12-15,17,25-27,30-32,38,44を除く]	g	エッチング処理薬剤、スパッタリング処理薬剤、ブラスト処理薬剤	A3.7	3	UC≠29&35
		z	その他			
35	溶接材料、ろう接材料、溶断用材料	a	溶接フラックス	A3.7	3	UC≠29&35
		b	ろう接フラックス（酸化防止剤等）	A3.7	3	UC≠29&35
		c	溶接用ガス、溶断用ガス	A3.8		
		z	その他			
36	作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤（エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等）	a	作動油の基油、潤滑油剤の基油	A3.16	2	Vap.<10
		b	絶縁油の基油	A3.16	2	Vap.<10
		c	プロセス油の基油	A3.11	ＩA	Additives,
		d	グリース増ちょう剤	A3.16	2	Vap.<10
		e	作動油添加剤、潤滑油剤添加剤	A3.16	2	Vap.<10
		f	絶縁油添加剤	A3.16	2	Vap.<10
		g	プロセス油添加剤	A3.11	ＩA	Additives,
	[#37を除く]	z	その他			
37	金属加工油（切削油、圧延油、プレス油、熱処理油等）、防錆油	a	水溶性金属加工油の基油	A3.7		UC=29&35 Water based +unknown
		b	不水溶性金属加工油の基油、防錆油の基油	A3.7		UC=29&35 Pure oils
		c	水溶性金属加工油添加剤	A3.7		UC=29&35 Water based +unknown
		d	不水溶性金属加工油添加剤、防錆油添加剤	A3.7		UC=29&35 Pure oils
		z	その他			
38	電気・電子材料 [対象材料等の製造用プロセス材料を含む]	a	磁性材料[#38-fを除く]、導電材料、超電導材料、蛍光体材料	A3.4	3	
		b	半導体材料、有機半導体材料、液晶材料	A3.4	3	
		c	誘電体材料、抵抗体材料、固体電解質材料、電解液材料、セパレータ材料	A3.4	3	
		d	光導波路材料(光ファイバを含む)、光学フイルム材料、電子機器用光材料	A3.4	3	
		e	封止材、絶縁材料、シールド材料	A3.4	3	
		f	電子記憶媒体材料（磁性材料、光吸収色素等）	A3.4	3	
	[絶縁油は#36]	z	その他			

2

図表 Ⅳ-１２２　工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階（水域）その６

39	電池材料（一次電池、二次電池）	a	電解質材料、電解液材料、絶縁材料、セパレータ材料	A3.4	3	
		b	電極材料（活物質、集電体、導電剤、バインダー等）、減極剤	A3.4	3	
		z	その他			
40	水処理剤	a	腐食防止剤、防錆剤、防食剤、防スケール剤、防藻剤	A3.16	3	Vap.<10
		b	金属イオン捕捉剤、金属イオン封鎖剤、硬水軟化剤	A3.16	3	Vap.<10
		c	イオン交換体（有機及び無機イオン交換体）、分離膜	A3.16	2	Vap.<10
		d	酸化剤、還元剤、pH調節剤	A3.16	3	Vap.<10
		e	消泡剤、凝集剤、濾過助剤、脱水助剤、イオン交換樹脂再生剤	A3.16	3	Vap.<10
		z	その他			
41	乾燥剤、吸着剤	a	乾燥剤、脱水剤	A3.16	3	Vap.<10
		b	吸着剤（脱臭剤、脱硝剤、ガス吸着剤等）	A3.16	3	Vap.<10
		c	吸収剤（脱酸素剤等）	A3.16	3	Vap.<10
		z	その他			
42	熱媒体	a	冷媒、冷却剤	A3.16	2	Vap.=1000-10000
		b	熱媒、加熱剤	A3.16	2	Vap.<10
		z	その他			
43	不凍液	a	不凍液（LLC等）	A4.1		Surface water,UC=5,35(Car products)
		b	防錆剤、防食剤	A4.1		Surface water,UC=5,35(Car products)
		z	その他			
44	建設資材添加物（コンクリート混和剤、木材補強含浸剤等）	a	表面硬化剤	A3.16	3	Vap. 10-100
		b	コンクリート混和剤（強化剤、減水剤）	A3.16	3	Vap. 10-100
		c	離型剤、消泡剤	A3.16	3	Vap. 10-100
		d	木材補強含浸剤、木質板添加剤	A3.16	3	Vap. 10-100
		e	防汚剤[#17-b,cを除く]、防水剤、撥水剤	A3.16	3	Vap. 10-100
		z	その他			
45	散布剤、埋立処分前処理薬剤（融雪剤、土壌改良剤、消火剤等）	a	凍結防止剤（融雪剤等）	A3.16	4	Vap.<10
		b	土壌改良剤、地盤改良剤	A3.16	4	Vap.<10
		c	消火剤	A3.16	4	Vap.<10
		d	人工降雨剤	A3.16	4	Vap.<10
		e	油処理剤	A3.16	4	Vap.<10
		f	粉塵結合剤、粉塵防止剤、煤塵処理剤	A3.16	4	Vap.<10
		z	その他			
46	分離・精製プロセス剤《鉱業、金属製造業での用途》［抽出・精製溶剤は#07］	a	浮選剤（捕収剤、起ほう剤、条件剤）、金属浸出剤	A3.16	3	Vap.<10
		b	凝集剤、分散剤、金属捕捉剤	A3.16	3	Vap.<10
		z	その他			
47	燃料、燃料添加剤	a	燃料	A3.8		
		b	燃料添加剤（清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等）	A3.8		
		c	燃焼改良剤（燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等）	A3.8		
		d	水結防止剤、着臭剤	A3.8		
		z	その他			
上記以外						
98	その他の原料、その他の添加剤	z	その他の原料、その他の添加剤			
99	輸出用	a	輸出用			

1

図表 Ⅳ-１２３　長期使用製品の使用段階（大気・水域）その１

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類	OECD ESD 該当箇所等	
	中間物				
01	中間物	a	合成原料、重合原料、前駆重合体		
		b	重合開始剤		
		z	その他		
	溶剤				
02	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	a	塗料用溶剤、塗料希釈剤		
		b	塗料剥離剤		
		c	ワニス用溶剤		
		d	コーティング剤用溶剤、レジスト塗布用溶剤		
		e	印刷インキ用溶剤、電子デバイス用溶剤、インキ溶剤、インキ洗浄剤		
		f	殺生物剤用溶剤		
		z	その他		
03	接着剤用・粘着剤用・シーリング材用溶剤	a	接着剤用溶剤、粘着剤用溶剤		
		b	接着剤剥離用溶剤、糊剥離用溶剤		
		c	接着用溶剤		
		d	シーリング材用溶剤		
		z	その他		
04	金属洗浄用溶剤	a	金属洗浄用溶剤（塩素系）		
		z	その他		
05	クリーニング洗浄用溶剤《洗濯業での用途》	a	ドライクリーニング溶剤		
		b	染み抜き剤、ドライクリーニング溶剤抽出剤		
		z	その他		
06	その他の洗浄用溶剤 [#04,05を除く]	a	フォトレジスト現像用溶剤、レジスト剥離用溶剤		
		z	その他		
07	工業用溶剤 [#02-06の溶剤を除く]	a	合成反応用溶剤		
		b	紡糸用溶剤、製膜用溶剤		
		c	抽出溶剤、精製溶剤		
		d	希釈溶剤		
		z	その他		
08	エアゾール用溶剤	a	エアゾール噴射剤、希釈剤		
		z	その他		
09	その他の溶剤	z	その他の溶剤		
	溶剤以外				
10	化学プロセス調節剤	a	触媒、触媒担体		
		b	イオン交換樹脂、イオン交換膜、分離膜、隔膜、濾過補助剤（脱蝋助剤等）		
		c	乳化剤、分散剤		
		d	重合調節（停止）剤、重合禁止剤、安定剤		
		e	光学分割剤		
		z	その他		
11	着色剤（染料、顔料、色素、色材） [#12,13,15,16,25,26,29を除く]	a	着色剤（染料、顔料、色素、色材）	No.3	Colorants Pigments
		b	蛍光増白剤	–	D
		c	発色剤、発色助剤		
		z	その他		
12	水系洗浄剤1《工業用途》 [#25,26を除く]	a	石鹸、洗剤（界面活性剤）		
		b	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤		
		c	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（消泡剤等）		
		d	防錆剤		
		z	その他		
13	水系洗浄剤2《家庭用・業務用の用途》	a	石鹸、洗剤、ウインドウォシャー液（界面活性剤）		
		b	柔軟剤（界面活性剤）		
		c	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤		
		d	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（酵素、蛍光増白剤、紫外線吸収剤等）		
		z	その他		
14	ワックス（床用、自動車用、皮革用等）	a	ワックス		
		b	乳化剤、分散剤		
		z	その他		
15	塗料、コーティング剤［プライマーを含む］	a	塗料用樹脂、コーティング剤用樹脂		
		b	着色剤（染料、顔料、光輝剤）	–	D
		c	熱・光硬化塗料のモノマー・オリゴマー、バインダー成分		
		d	架橋剤、硬化剤、増感剤、重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤		
		e	可塑剤、充填剤	–	D
		f	安定化剤（酸化防止剤等）	–	D
		g	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤、導電性改良剤	–	D
		h	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、表面調整剤、造膜助剤	–	D
		i	腐食防止剤、防錆剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤	–	D
		j	乾燥促進剤、湿潤剤、難燃剤、撥水剤	–	D
		z	その他		
16	印刷インキ、複写用薬剤（トナー等）［筆記用具、レジストインキ用を含む］	a	インキ用樹脂、トナー用樹脂		
		b	着色剤（染料、顔料、色素）、感熱色素、感圧色素、蛍光増白剤、顕色剤		
		c	紫外線・電子線硬化インキのモノマー・オリゴマー、増感剤、重合開始剤		
		d	可塑剤、充填剤		
		e	安定化剤（酸化防止剤等）		
		f	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤		
		g	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、造膜助剤		
		h	電荷制御剤、流動性付与剤、研磨性付与剤、滑り性付与剤		
		i	乾燥促進剤、湿潤剤		
		z	その他		
17	船底塗料用防汚剤、漁網用防汚剤	a	防汚剤用樹脂［添加剤も含む］		
		b	船底塗料用防汚剤	No.13	n.a
		c	漁網用防汚剤		
		z	その他		
18	殺生物剤1［成形品に含まれ出荷されるもの］	a	殺菌剤、殺虫剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤（細菌増殖抑制剤、木材の防腐剤、防蟻剤）	No.3	Preservatives (Organic/outdoor) (Biocides)
		b	展着剤、乳化剤		
		z	その他		
19	殺生物剤2［工程内使用で成形品に含まれないもの］《工業用途》	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）		
		b	ガス滅菌剤、薫蒸剤、燻煙剤		
		c	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、抗菌剤		
		d	展着剤、乳化剤		
		z	その他		

D:ﾃﾞﾌｫﾙﾄ値：EU REACH規則におけるガイダンスのOutdoorでのﾃﾞﾌｫﾙﾄ排出係数の値
n.a：not applicable（適用できず）

2

図表 Ⅳ-１２４　長期使用製品の使用段階（大気・水域）その２

20	殺生物剤3 《家庭用・業務用の用途》	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）		
		b	繊維用・紙用防虫剤		
		c	シロアリ駆除剤、防蟻剤		
		d	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤、除菌剤		
		e	非農耕地用除草剤		
		f	展着剤、乳化剤		
		z	その他		
21	火薬類 [煙火を含む]	a	火薬、爆薬、火工品[#21-bを除く]、煙火		
		b	自動車安全部品用ガス発生剤		
		z	その他		
22	芳香剤、消臭剤	a	香料（洗浄剤用）[#22-b,cを除く]	-	D
		b	芳香剤		
		c	消臭剤		
		d	乳化剤、分散剤		
		z	その他		
23	接着剤、粘着剤、シーリング材	a	接着剤用樹脂、粘着剤用樹脂、シーリング材用樹脂		
		b	バインダー成分（モノマー、プレポリマー、硬化剤、硬化促進剤、開始剤、カップリング剤）		
		c	可塑剤、充填剤	-	D
		d	安定化剤（老化防止剤等）	-	D
		e	皮張り防止剤、増粘剤、消泡剤、ブロッキング防止剤、平滑剤		
		f	表面調整剤、分散剤		
		g	防腐剤、防かび剤、抗菌剤	-	D
		h	難燃剤、導電剤	-	D
		z	その他		
24	フォトレジスト材料、写真材料、印刷版材料	a	感光性・感電子性樹脂（フォトレジスト、印刷版等）		
		b	感光性・感電子性樹脂のモノマー・オリゴマー		
		c	感光剤、電子写真感光体、光重合開始剤、光酸発生剤、光塩基発生剤		
		d	色素形成カプラー（カラー写真用）		
		e	乳化剤、分散剤		
		f	定着剤、安定化剤		
		g	硬化剤、増感剤、減感剤、架橋密度向上剤、重合開始剤、レジスト添加剤		
		h	現像剤、水溶性処理薬品、レジスト剥離剤		
		z	その他		
25	合成繊維、繊維処理剤 [不織布処理を含む]	a	成形品基材（合成繊維、不織布）		
		b	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤	No.7	No.7のﾃﾞﾌｫﾙﾄ
		c	集束剤		
		d	防炎剤、難燃剤	No.7	No.7のﾃﾞﾌｫﾙﾄ
		e	含浸補強剤、染料固着剤（フィックス剤）		
		f	帯電防止剤、親水加工剤	No.7	No.7のﾃﾞﾌｫﾙﾄ
		g	柔軟仕上げ剤		
		h	形態安定加工剤		
		i	撥水剤、撥油剤、防水加工剤、防汚加工剤	No.7	No.7のﾃﾞﾌｫﾙﾄ
		j	抗菌剤、変色防止剤、紫外線吸収剤	No.7	No.7のﾃﾞﾌｫﾙﾄ
		k	紡糸・紡績・織編油剤、紡糸・紡績・織編油助剤		
		l	洗浄剤、精練洗浄剤（ソーピング剤）、潤滑剤		
		m	キレート剤		
		n	漂白剤、抜染剤		
		o	均染剤、浸透剤、促染剤（染色助剤）、媒染剤、捺染用糊剤		
		p	乳化剤、分散剤、消泡剤		
		q	マーセル化助剤		
		r	糊抜き剤		
		z	その他		
26	紙・パルプ薬品	a	着色剤（染料、顔料）、蛍光増白剤		
		b	サイズ剤、定着剤、填料		
		c	コーティング剤		
		d	防炎剤、難燃剤、帯電防止剤		
		e	紙力増強剤、歩留向上剤、定着剤（フィックス剤）、防錆剤		
		f	撥水剤、撥油剤、防水加工剤		
		g	嵩高剤、柔軟剤		
		h	蒸解薬液、pH調節剤		
		i	スライムコントロール剤（防腐剤）、ピッチコントロール剤		
		j	漂白剤、漂白浴安定剤		
		k	乳化剤、分散剤、消泡剤、脱墨剤、洗浄剤		
		z	その他		
27	プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤	a	成形品基材（プラスチック、合成皮革、合成紙、発泡体）		
		b	高吸水性材料		
		c	可塑剤、分散剤	No.3	Plasticisers
		d	安定化剤（酸化防止剤等）	No.3	Antioxidants
		e	充填剤、希釈剤、ポリマー分解促進剤	No.3	Fillers
		f	結晶核剤		
		g	内部滑剤、内部離型剤	No.3	D
		h	防曇剤、流滴剤	No.3	D
		i	難燃剤、帯電防止剤、波長変換剤	No.3 No.3	Flame Retardants Anti-Static Agents（Inoraganic）
		j	外部滑剤、外部離型剤		
		k	発泡剤、ラジカル発生剤	No.3	Blowing Agents
		l	注型用・注型発泡用材料（モノマー、プレポリマー等）		
		m	硬化剤、架橋剤（FRP用モノマー等）、架橋助剤、増感剤、重合開始剤		
		n	硬化促進剤		
	[#15,16,23,25,28を除く]	y	その他の添加剤（改質剤等）	No.3	D
	[着色剤は#11]	z	その他		

D：ﾃﾞﾌｫﾙﾄ値：EU REACH規則におけるガイダンスのOutdoorでのﾃﾞﾌｫﾙﾄ排出係数の値
n.a：not applicable（適用できず）

図表 Ⅳ-１２５　長期使用製品の使用段階（大気・水域）その３

28	合成ゴム、ゴム用添加剤、ゴム用加工助剤	a	成形品基材(エラストマー(合成ゴム))		
		b	加硫促進剤、加硫促進剤助剤(加硫活性剤)	No.6	ﾀｲﾔ摩耗12%
		c	加硫剤、架橋剤、架橋助剤		
		d	可塑剤、補強材(接着促進剤等)、充填剤	No.6	ﾀｲﾔ摩耗12%
		e	安定化剤(老化防止剤等)	No.6	ﾀｲﾔ摩耗12%
		f	スコーチ防止剤、素練促進剤、内部滑剤、内部離型剤	No.6	ﾀｲﾔ摩耗12%
		g	ラテックス凝固剤、乳化剤、分散剤、沈降防止剤	No.6	ﾀｲﾔ摩耗12%
		h	難燃剤、帯電防止剤	No.6	ﾀｲﾔ摩耗12%
		i	外部滑剤、外部離型剤		
		j	発泡剤	No.6	ﾀｲﾔ摩耗12%
		k	ゴム再生剤(脱硫剤等)		
		y	その他の添加剤(改質剤等)	No.6	ﾀｲﾔ摩耗12%
	[着色剤は#11]	z	その他		
29	皮革処理剤	a	なめし剤	No.8	n.a
		b	仕上げ加工薬剤(漂白剤、着色剤、着色助剤、撥水剤、撥油剤、油剤、脱脂剤、加脂剤等)	No.8	n.a
		c	準備工程(なめし前)薬剤(脱脂剤、脱灰剤等)		
		z	その他		
30	ガラス、ほうろう、セメント	a	ガラス原料	–	D
		b	ガラス添加剤(強化剤、集束剤、防曇剤、紫外線カット剤等)	–	D
		c	ガラス加工助剤(離型剤、pH調節剤等)		
		d	ほうろう原料	–	D
		e	ほうろう添加剤(絵付け用転写剤、フリット配合薬剤等)	–	D
		f	ほうろう加工助剤(中和剤、ニッケル処理剤等)		
		g	セメント原料	–	D
		h	セメント添加剤(混合材、膨張剤、固化剤等)	–	D
	[着色剤は#11]	z	その他		
31	陶磁器、耐火物、ファインセラミックス	a	陶磁器原料、耐火物原料、ファインセラミックス原料	–	D
		b	陶磁器添加剤、耐火物添加剤、ファインセラミックス添加剤(焼結助剤等)	–	D
		c	成形助剤(バインダー、増粘剤、可塑剤、潤滑剤、分散剤等)		
		d	滑剤、離型剤		
	[着色剤は#11、電子用ファインセラミックスは#38]	z	その他		
32	研削砥石、研磨剤、摩擦材、固体潤滑剤	a	研削砥石原料、研磨剤原料、摩擦材原料、固体潤滑剤原料	–	D
		b	研削砥石・研磨剤・摩擦材・固体潤滑剤添加剤(バインダー、増粘剤、研磨助剤、分散剤、摩擦調整剤、潤滑剤等)	–	D
		c	滑剤、離型剤		
	[着色剤は#11]	z	その他		
33	金属製造加工用資材	a	金属用添加剤(接種剤等)		
		b	加工助剤(フラックス等)		
		c	鋳造用粘結剤、鋳造用硬化剤、鋳造用添加剤		
	[金属及び合金の原料は#1、着色剤は#11、表面処理は#34、溶接・ろう接は#35、金属加工油は#37]	d	鋳造用離型剤、鋳造用塗型剤		
		z	その他		
34	表面処理剤	a	めっき薬剤(皮膜成分原料)		
		b	めっき浴添加剤(光沢付与剤、煙霧防止剤、無電解めっきの還元剤等)		
		c	化成処理薬剤		
		d	真空めっき(蒸着等)薬剤、溶射処理薬剤		
		e	表面硬化処理(浸炭、窒化等)薬剤		
	[めっき前処理剤・後処理剤の脱脂・洗浄薬剤は#04金属洗浄剤、#12の水系洗浄剤1]	f	表面フッ素化処理薬剤、表面シリル化処理薬剤		
		g	エッチング処理薬剤、スパッタリング処理薬剤、ブラスト処理薬剤		
	[#4-6,12-15,17,25-27,30-32,38,44を除く]	z	その他		
35	溶接材料、ろう接材料、溶断用材料	a	溶接フラックス		
		b	ろう接フラックス(酸化防止剤等)		
		c	溶接用ガス、溶断用ガス		
		z	その他		
36	作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤(エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等)	a	作動油の基油、潤滑油剤の基油		
		b	絶縁油の基油		
		c	プロセス油の基油		
		d	グリース増ちょう剤		
		e	作動油添加剤、潤滑油剤添加剤		
		f	絶縁油添加剤		
		g	プロセス油添加剤		
	[#37を除く]	z	その他		
37	金属加工油(切削油、圧延油、プレス油、熱処理油等)、防錆油	a	水溶性金属加工油の基油		
		b	不水溶性金属加工油の基油、防錆油の基油		
		c	水溶性金属加工油添加剤		
		d	不水溶性金属加工油添加剤、防錆油添加剤		
		z	その他		
38	電気・電子材料 [対象材料等の製造用プロセス材料を含む]	a	磁性材料[#38-fを除く]、導電材料、超電導材料、蛍光体材料	–	D
		b	半導体材料、有機半導体材料、液晶材料	–	D
		c	誘電体材料、抵抗体材料、固体電解質材料、電解液材料、セパレータ材料	–	D
		d	光導波路材料(光ファイバを含む)、光学フイルム材料、電子機器用光材料		
		e	封止材、絶縁材料、シールド材料	–	D
		f	電子記憶媒体材料(磁性材料、光吸収色素等)	–	D
	[絶縁油は#36]	z	その他		
39	電池材料(一次電池、二次電池)	a	電解質材料、電解液材料、絶縁材料、セパレータ材料		
		b	電極材料(活物質、集電体、導電剤、バインダー等)、減極剤		
		z	その他		

D:ﾃﾞﾌｫﾙﾄ値:EU REACH規則におけるガイダンスのOutdoorでのﾃﾞﾌｫﾙﾄ排出係数の値
n.a:not applicable (適用できず)

図表 Ⅳ-１２６　長期使用製品の使用段階（大気・水域）その４

40	水処理剤	a	腐食防止剤、防錆剤、防食剤、防スケール剤、防藻剤			
		b	金属イオン捕捉剤、金属イオン封鎖剤、硬水軟化剤			
		c	イオン交換体（有機及び無機イオン交換体）、分離膜			
		d	酸化剤、還元剤、pH調節剤			
		e	消泡剤、凝集剤、濾過助剤、脱水助剤、イオン交換樹脂再生剤			
		z	その他			
41	乾燥剤、吸着剤	a	乾燥剤、脱水剤			
		b	吸着剤（脱臭剤、脱硝剤、ガス吸着剤等）			
		c	吸収剤（脱酸素剤等）			
		z	その他			
42	熱媒体	a	冷媒、冷却剤			
		b	熱媒、加熱剤			
		z	その他			
43	不凍液	a	不凍液（LLC等）			
		b	防錆剤、防食剤			
		z	その他			
44	建設資材添加物（コンクリート混和剤、木材補強含浸剤等）	a	表面硬化剤		–	D
		b	コンクリート混和剤（強化剤、減水剤）		–	D
		c	離型剤、消泡剤		–	D
		d	木材補強含浸剤、木質板添加剤		–	D
		e	防汚剤[#17-b,cを除く]、防水剤、撥水剤		–	D
		z	その他			
45	散布剤、埋立処分前処理薬剤（融雪剤、土壌改良剤、消火剤等）	a	凍結防止剤（融雪剤等）			
		b	土壌改良剤、地盤改良剤			
		c	消火剤			
		d	人工降雨剤			
		e	油処理剤			
		f	粉塵結合剤、粉塵防止剤、煤塵処理剤			
		z	その他			
46	分離・精製プロセス剤 《鉱業、金属製造業での用途》 [抽出・精製溶剤は#07]	a	浮選剤（捕収剤、起ほう剤、条件剤）、金属浸出剤			
		b	凝集剤、分散剤、金属捕捉剤			
		z	その他			
47	燃料、燃料添加剤	a	燃料			
		b	燃料添加剤（清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等）			
		c	燃焼改良剤（燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等）			
		d	氷結防止剤、着臭剤			
		z	その他			
	上記以外					
98	その他の原料、その他の添加剤	z	その他の原料、その他の添加剤			
99	輸出用	a	輸出用			

D：ﾃﾞﾌｫﾙﾄ値：EU REACH規則におけるガイダンスのOutdoorでのﾃﾞﾌｫﾙﾄ排出係数の値
n.a：not applicable（適用できず）

⑵ 準用・換算・下限値の適用結果

IV.7.4.2 ⑵③～④で説明した「準用」、「換算」、「下限値」の考え方が排出係数一覧表（IV.7.2 に掲載）においてどのように適用されているかについて、平成 26 年の Ver1 以降に新たに得られた情報を用いて整理し直し、図表 IV-１２７から図表 IV-１３０ に示す。

なお、「図表 IV-８２　排出係数の設定方法の全体フロー」の②から③における排出係数の補正作業に当たっては、排出量が過小評価にならないように、加重平均値の取扱いは以下のようにした。

(ア) PRTR データの加重平均値による補正においては、数値の有効数字を一桁とし、多くの場合、例えば１と 5 に切り上げた。即ち、0.025 は 0.05 に、0.06 は 0.1 にした。

(イ) 換算係数による補正においては、図表 IV-９７に示すように、幾何平均値から近似的に換算倍率（n）を設定する場合はｎが小さく（換算で得られた排出係数が大きく）なるようにした。

また、産業界等のデータが得られていない場合には、国などの公的な資料や専門家の判断に基づいて補正を行った。

図表 Ⅳ-１２７　下限値と準用の適用箇所　その１

排出係数の設定根拠

パターンの説明

パターン	設定根拠
	PRTRデータ又は業界のデータに基づいて排出係数を設定。（取扱量が大きい作動油#136と燃料#147では下限値以下のデータも採用）。
123abc	同一用途内の他の詳細用途の排出係数を準用。数字は準用元の用途、アルファベットは準用元の詳細用途。詳細は本文参照。
123abc	同一用途内にPRTRデータや産業界データ等のデータがなく、他の用途の排出係数を準用。数字、アルファベットは同上。詳細は本文参照。
A/n	PRTRデータや産業界データ等のデータがなく、適当な準用も困難なため、EU-TGDのA-tableから換算した排出係数。詳細は本文参照。
	国 *(NITE)* の判断
	排出係数の設定無し

表中の記号等の説明

記号等	記号等の説明
準用	準用可能な用途グループ（Ⅰ～Ⅳ）。詳細は本文参照。
123abc	準用元（数字は準用元の用途、アルファベットは準用元の詳細用途。'abcとあれば詳細用途a、b、cのデータを組合せて排出係数を設定。
換算	EU-TGD A-tableから排出係数を算出する場合の換算倍率を共有する用途グループ（①～④）。詳細は本文参照。
A/n	EU-TGD A-tableから換算倍率（ｎ）を用いて換算した排出係数。排出係数＝A-table/ｎ； 詳細は本文参照。
A; *f 12a*	***A***はEU-TGD A-tableの傾斜（物性に対する排出係数の傾斜）を、***f 12a***は詳細用途#112aの傾斜を、参考にした。
資	公的資料等を参考にした（OECDのESD、国等の報告書、等）
下１	下限値１（区分１）。樹脂・大気・調合は全て0.000001とした。ただし、イオン交換樹脂の使用段階にも例外的に適用。
下２	下限値２（区分１）。樹脂・大気・使用及びPRTR又は業界データからの排出係数が0の時は0.000005（=0.05kg/10t；取扱量幾何平均）とした
下３	下限値３（区分１）。下限値2の準用が困難と考えられる時は0.00005（=0.05kg/1t ； PRTR届出裾切り値）とした。
シナリオ	国 *(NITE)* が業界との協議等によって設定したシナリオに基づいた排出係数。例えば； 詳細用途zは用途内最大値。 #108-aエアゾール溶媒の大気/水域の分配は1/0。（平）は物性区分に関わらず一定値にした場合で、物性より操作が支配的になるような場合に設定。
※	用途#113、#114、#120、#122、#147-b,c,dは工業的使用段階が無いので、家庭用・業務用使用段階の排出係数である。
*	長期使用段階で排出が想定される用途であるが、排出係数の設定はリスク評価で長期使用製品の使用に係る評価を行う段階で、検討する。

1．製造段階の排出係数の設定根拠

大気への 排出係数（製造段階）			水域への 排出係数（製造段階）		
用途番号	（1）		用途番号	（4）	
製造			製造		

2．調合段階、工業的使用段階、家庭用・業務用使用段階および長期使用段階の排出係数の排出係数の設定根拠

大気への 排出係数（調合段階）				大気への 排出係数（工業的使用段階）※				水域への 排出係数（調合段階）				水域への 排出係数（工業的使用段階）※				長期使用段階の排出係数			
用途番号		（2）	準用	用途番号		（3）	換算	用途番号		（5）	準用	用途番号		（6）	換算	用途番号		（7） 大気	（7） 水域
101	a			101	a			101	a			101	a			101	a		
	b	A/10	Ⅰ		b	+A	prtr		b	A/20	Ⅰ		b	下2+*f 01a*	prtr		b		
	z				z				z				z				z		
102	a			102	a	+A/5		102	a	102ae+A		102	a	102b		102	a		
	b	+*f 02a*			b	+A/5			b	102a			b	102bd			b		
	c				c	+A/5			c	102a			c	102b			c		
	d		Ⅱ		d	+A/5	A/5		d	102a	Ⅱ		d	102bd	A/25		d		
	e				e	+A			e	102ae+A			e	102b			e		
	f	102a			f	102a			f	102a			f	シナリオ			f		
	z				z				z				z				z		
103	a	+A		103	a	+A/5		103	a	+A		103	a	103ab+A		103	a		
	b	+103a			b	+A/5			b	103a			b	103ab+A			b		
	c	103a	Ⅱ		c	+A/5	A/5		c	103a	Ⅱ		c	103ab	A/25		c		
	d	103a			d	103abc			d	103a			d	103ab			d		
	z				z				z				z				z		
104	a	+A	Ⅰ	104	a	+資+A	A/5	104	a	103a	Ⅰ	104	a	+A	A/25	104	a		
	z	104a		変更	z	104a			z	103a			z	104a			z		
105	a	104a	Ⅰ	105	a	+資+A	A/5	105	a	103a	Ⅰ	105	a	+A	A/25	105	a		
	b	104a			b	105a			b	103a			b	105a			b		
	z				z				z				z				z		
106	a	107d	Ⅰ	106	a	106ab+A	A/5	106	a	106z	Ⅰ	106	a		A/25	106	a		
	z	107d			z	106ab+A			z	下3+A			z	106a			z		
107	a	107d		107	a	+A		107	a	106z		107	a	+A		107	a		
	b	107d			b	107a			b	106z			b	+*f 07a*			b		
	c	107d	Ⅰ		c	+A	A/5		c	106z	Ⅰ		c	+A	A/25		c		
	d	+A			d	+A			d	106z			d	107c			d		
	z				z				z				z				z		
108	a	103a+資		108	a	シナリオ		108	a	シナリオ		108	a	シナリオ		108	a		
新設	b	108a	Ⅰ	新設	b	108a	A/5	新設	b	108a	Ⅰ	新設	b	108a	A/25	新設	b		
	z				z				z				z				z		
109	z	シナリオ	Ⅰ	109	z	シナリオ		109	z	シナリオ	Ⅰ	109	z	シナリオ		109	z		
110	a	+A/10	Ⅱ	110	a	+A		110	a	+A	Ⅱ	110	a	下2		110	a		
	b	下1	Ⅲ		b	下1			b	115a	Ⅲ		b	110a			b		
	c	110a			c	下2+A/10			c	下3+A			c	下3+110a			c		
	d	110a	Ⅱ		d	下2+A/10	②		d	110c	Ⅱ		d	下3+110a	②		d		
	e	110a			e	A/10			e	110c			e	110a（下2なし）			e		
	z				z				z				z				z		
111	a	下2＋A		111	a	下2＋A		111	a	+A（+124+125+126）		111	a	127c		111	a	資	資
	b	111a+A	Ⅰ		b	127d	③		b	111a	Ⅰ		b	127c	③		b	*	*
	c	111a+A			c	127d			c	111a			c	127c			c		
	z				z				z				z				z		

1

図表 Ⅳ-１２８　下限値と準用の適用箇所　その２

112	a	下2+A		112	a	下2+A		112	a	+A		112	a	+A		112	a												
	b	下2+112a			b	下3+112a			b	+112a			b	+A			b												
	c	下2+A	Ⅱ		c	下3+112a	②		c	+A	Ⅱ		c	+A	②		c												
	d	112a(下2なし)			d	下3+112a			d	110c			d	112a			d												
	z				z				z				z				z												
113	a	112a		113	a	シナリオ		113	a	112a		113	a	シナリオ		113	a												
	b	112a(下2なし)		※	b	シナリオ			b	112a		※	b	シナリオ			b												
	c	112a			c	シナリオ			c	112b			c	シナリオ			c												
	d	112a			d	シナリオ			d	112c			d	シナリオ			d												
新設	e(1)	下2+112a (113d)	Ⅱ	新設	e	シナリオ(113d)	④	新設	e(1)	シナリオ	Ⅱ	新設	e	シナリオ(113d)	④	新設	e												
新設	e(2)	下2+112a (113d)						新設	e(2)	112c(113d)																			
	z				z				z				z				z												
114	a	110c+115h		114	a	シナリオ		114	a	114b		114	a	シナリオ		114	a												
	b	110c+115h	Ⅱ	※	b	シナリオ	③		b	+A	Ⅱ	※	b	シナリオ	③		b												
	z				z				z				z				z												
115	a	下1	Ⅲ	115	a	下2		115	a	下2+115b-e	Ⅲ	115	a	115b		115	a												
	b	+A/10			b	下2+115c			b	下2+A(115b-e)			b	下2+115i			b		*	*									
	c				c	下2			c	下2+A(115b-e)			c	下2+115i			c		*	*									
	d	下2+A/10			d	下3+115c			d	下2+A(115b-e)			d	115i			d												
	e	+A/10			e	下3+115c			e	下2+A(115b-e)			e	115i			e		*	*									
	f	115e	Ⅱ		f	下3+115c	③		f	115b	Ⅱ		f	115i	③		f		*	*									
	g	115e			g	下3+115c			g	115b			g	115i			g		*	*									
	h	115e			h	下3+115c			h	115b			h	115i			h		*	*									
	i	115e			i	下2+115c			i	115b			i	+A			i		*	*									
	j	115e			j	下3+115c			j	115b			j	115i			j		*	*									
	z				z				z				z				z												
116	a	下1	Ⅲ	116	a	下2		116	a	115a	Ⅲ	116	a	116g		116	a												
	b	115b			b	A/20+115c			b	115b			b	116g			b												
	c	115e			c	下3+115c			c	115b			c	116g			c												
	d	115e			d	下3+115c			d	115b			d	116g			d												
	e	115e			e	下3+115c			e	115b			e	116g			e												
	f	115e	Ⅱ		f	下3+115c	③		f	115b	Ⅱ		f	116g	③		f												
	g	115e			g	下3+115c			g	115b			g	+A			g												
	h	115e			h	下3+115c			h	115b			h	116g			h												
	i	115e			i	下3+115c			i	115b			i	116g			i												
	z				z				z				z				z												
117	a	115a+115e	Ⅲ	117	a	下2+117c+115c		117	a	115a	Ⅲ	117	a	115b(via 115a)		117	a												
	b	下2+A/10			b	117c	③		b	下2+A(117bc)			b	115i	③		b												
	c	下2+A/10	Ⅱ		c	下2			c	下2+A(117bc)	Ⅱ		c	115i			c												
	z				z				z				z				z												
118	a	+A/10		118	a	A/10		118	a	118a+119c		118	a	A/10		118	a												
	b	118a	Ⅱ		b	A/10	②		b	118a	Ⅱ		b	A/10	②		b												
	z				z				z				z				z												
119	a	118a		119	a	A/10		119	a	119c		119	a	A/10		119	a												
	b	118a			b	シナリオ(A/2)			b	119c			b	シナリオ			b												
	c	118a	Ⅱ		c	A/10	②		c	118a+119c	Ⅱ		c	A/10	②		c												
	d	118a			d	A/10			d	119c			d	A/10			d												
	z				z				z				z				z												
120	a	118a		120	a	A/1		120	a	118a+119c		120	a	A/1		120	a												
	b	118a		※	b	A/1			b	118a+119c		※	b	A/1			b												
	c	118a			c	A/1			c	118a+119c			c	A/1			c												
	d	118a	Ⅱ		d	A/1	④		d	118a+119c	Ⅱ		d	A/1	④		d												
	e	118a			e	A/1			e	118a+119c			e	A/1			e												
	f	118a			f	120d			f	118a+119c			f	120d			f												
	z				z				z				z				z												
121	a	下3+A/10		121	a	A/1		121	a	下3+A/10		121	a	A/1		121	a												
	b	下3+A/10			b	A/1			b	下3+A/10			b	A/1			b												
新設	c	121ab	Ⅱ	新設	c	121ab	④	新設	c	121ab	Ⅱ	新設	c	121ab	④	新設	c												
新設	d	121ab		新設	d	121ab		新設	d	121ab		新設	d	121ab		新設	d												
	z				z				z				z				z												
122	(廃止)	(廃止)		122	(廃止)	(廃止)	②	122	(廃止)	(廃止)		122	(廃止)	(廃止)	②	22	(廃止)	(廃止)	(廃止)										
	(廃止)	(廃止)		※					(廃止)	(廃止)		※																	
	b	118a(120b)	Ⅱ		b	シナリオ			b	118a(120a)	Ⅱ		b	シナリオ			b												
	c	118a(120b)			c	シナリオ			c	118a(120a)			c	シナリオ			c												
	d	118a(120b)			d	シナリオ	④		d	118a(120a)			d	シナリオ	④		d												
新設	e	122bcd		新設	e	122bcd		新設	e	122bcd		新設	e	122bcd		新設	e												
	z				z				z				z				z												
123	a	下1	Ⅲ	123	a	下2		123	a	115a	Ⅲ	123	a	123cdh		123	a												
	b	下2			b				b	下2(123bcf)			b	下2+A			b												
	c	+123b			c	+A			c	下2(123bcf)			c	123cdh			c		*	*									
	d	123c			d	123c			d	123c			d	123cdh			d		*	*									
	e	123c	Ⅱ		e	123c	③		e	123c	Ⅱ		e	123cdh	③		e												
	f	下2+123c			f	下2+123c			f	下2(123bcf)			f	123cdh			f												
	g	123c			g	下2+123c			g	123c			g	123cdh			g		*	*									
	h	123c			h	下2+123c			h	123c			h	123cdh			h		*	*									
	z				z				z				z				z												
124	a	下1	Ⅲ	124	a	下2		124	a	下2+A/10	Ⅲ	124	a	124h+115a		124	a												
	b	下3+A/10			b	A/10+下2(反応)			b	124h			b	シナリオ(反応124h/10)			b												
	c	下3+A/10			c	A/10+下2(反応)			c	124h			c	シナリオ(反応124h/10)			c												
	d	下3+A/10			d	124h			d	124h			d	124h			d												
	e	下2+A/10	Ⅰ		e	124h	②		e	124h	Ⅰ		e	124h	②		e												
	f	下3+A/10			f	124h			f	124h			f	124h			f												
	g	下3+A/10			g	124h			g	124h			g	124h			g												
	h	下2+A/10			h				h	+A(+111+125+126)			h	+A			h												
	z				z				z				z				z												

2

1

図表 Ⅳ-１２９　下限値と準用の適用箇所　その３

125	a	下1	Ⅲ	125	a	下2		125	a	下2+A/10	Ⅲ	125	a	A/10		125	a		
	b	111a+A			b	下2+A			b	↑25k			b	A/10			b	資	資
	c	↑25fklp			c	A/5(↑25opの比)			c	↑25k			c	↑25h			c		
	d	↑25fklp			d	下2+↑25op			d	↑25k			d	+A			d	資	資
	e	↑25fklp			e	A/5(↑25opの比)			e	下2(↑25dehklp)			e	↑25d			e		
	f	下2+A/10			f	A/5(↑25opの比)			f	↑25k			f	↑25d			f	資	資
	g	↑25fklp			g	↑25op			g	↑25k			g	↑25h			g		
	h	↑25fklp			h	A/5(↑25opの比)			h	下2(↑25dehklp)			h	+A(↑25hlop)			h		
	i	↑25fklp			i	A/5(↑25opの比)			i	↑25k			i	↑25d			i	資	資
	j	↑25fklp	Ⅰ		j	A/5(↑25opの比)	②		j	↑25k	Ⅰ		j	↑25d	②		j	資	資
	k	下2+A/10			k	A/5(↑25opの比)			k	下2(↑25dehklp)			k	+↑25d			k		
	l	下2+A/10			l	下2+↑25op			l	下2(↑25dehklp)			l	+A(↑25hlop)			l		
	m	↑25fklp			m	↑25op			m	↑25k			m	↑25h			m		
	n	↑25fklp			n	↑25op			n	↑25k			n	↑25h			n		
	o	↑25fklp			o	↑25op(A/5)			o	↑25k			o	+A(↑25hlop)			o		
	p	下2+A/10			p	↑25op(A/5)			p	下2(↑25dehklp)			p	+A(↑25hlop)			p		
	q	↑25fklp			q	↑25op			q	↑25k			q	↑25h			q		
	r	↑25fklp			r	↑25op			r	↑25k			r	↑25h			r		
	z				z				z				z				z		
126	a	111a		126	a	↑25b		126	a	↑26d		126	a	A/10+資		126	a		
	b	↑26k			b	A/10			b	↑26d			b	A/10+資			b		
	c	↑26k			c	A/10			c	↑26d			c	A/10+資			c		
	d	↑26k			d	A/10			d	下2+A(+111+124+125)			d	A/10+資			d		
	e	↑26k			e	A/10			e	↑26d			e	A+資			e		
	f	↑26k	Ⅰ		f	A/10	②		f	↑26d	Ⅰ		f	A/10+資	②		f		
	g	↑26k			g	A/10			g	↑26d			g	A/10+資			g		
	h	↑26k			h	↑26k			h	↑26d			h	A/10+資			h		
	i	↑26k			i	A/10			i	↑26d			i	A+資			i		
	j	↑26k			j	A/10			j	↑26d			j	A/10+資			j		
	k	下2+A/10			k	下2+A/10			k	↑26d			k	A+資			k		
	z				z				z				z				z		
127	a	下1	Ⅲ	127	a	下2		127	a	下2+A/10	Ⅲ	127	a	A/10＋業界値		127	a		
	b	下1			b	下2			b	下2			b	↑27a			b		
	c	下2+A/10			c	+A			c	下2(127cm)			c	+A			c	資	資
	d	↑27cgi			d	下2+A			d	↑27c			d	↑27c			d	資	資
	e	↑27cgi			e	下3+↑27d			e	↑27c			e	↑27c			e	資	資
	f	↑27cgi			f	下3+↑27d			f	↑27c			f	↑27c			f		
	g	下2+A/10			g	下3+↑27d			g	↑27c			g	↑27c			g	*	*
	h	↑27cgi			h	下3+↑27d			h	↑27c			h	↑27c			h	*	*
	i	下2+A/10			i	+A			i	↑27c			i	下2+↑27c			i	資	資
	j	↑27cgi	Ⅱ		j	シナリオ(127gX10)	②		j	↑27c	Ⅱ		j	↑27k	②		j		
	k	↑27cgi		変更	k	↑28e+↑27lmn			k	↑27c			k	A/10＋業界値			k	資	資
	l	↑27cgi			l				l	↑27c			l	A			l		
	m	↑27cgi			m	↑27l			m	下2(127cm)			m	下2+A			m		
	n	↑27cgi			n	↑27l			n	↑27c			n	↑27k			n		
	y	シナリオ(↑27c～i)			y	シナリオ(↑27c～i)			y	シナリオ(↑27c～i)			y	シナリオ(↑27c～i)			y	*	*
	z				z				z				z				z		
128	a	下1	Ⅲ	128	a	下2		128	a	下2+A/10	Ⅲ	128	a	↑28e		128	a		
	b	下2+A/10			b	下2+A(平)			b	↑26d			b	下2+A			b	資	資
	c	↑28bh			c	下2+A(平)			c	↑26d			c	下2+A			c		
	d	↑28bh			d	+A			d	↑26d			d	A/10			d	資	資
	e	↑28bh			e	下2+A			e	↑26d			e	+A			e	資	資
	f	↑28bh			f	下3+↑28e			f	↑26d			f	↑28e			f	資	資
	g	↑28bh	Ⅰ		g	下3+↑28e	②		g	↑26d	Ⅰ		g	A/10	②		g	資	資
	h	下2+A/10			h	下2+A			h	↑26d			h	↑28e			h	資	資
	i	↑28bh			i	↑27j			i	↑26d			i	A/10			i		
	(廃止)	(廃止)			(廃止)	(廃止)			(廃止)	(廃止)			(廃止)	(廃止)		(廃止)	(廃止)	(廃止)	(廃止)
	k	↑28bh			k	↑28f+A/10			k	↑26d			k	A/10			k		
	y	シナリオ(↑28b～h)			y	シナリオ(↑28b～h)			y	シナリオ(↑28b～h)			y	シナリオ(↑28b～h)			y	資	資
	z				z				z				z				z		
129	a	下3+A/10		129	a	下2+A/20		129	a	↑06z		129	a	+A		129	a	*	*
	b	下3+A/10	Ⅰ		b	↑29a	③		b	↑06z	Ⅰ		b	↑29a	③		b	*	*
	c	下3+A/10			c	↑29a			c	↑06z			c	A/20			c		
	z				z				z				z				z		
130	a	↑30b		130	a	+シナリオ(平)		130	a	↑10c		130	a	130ab		130	a	*	*
	b	下2+A/10			b	+シナリオ(平)			b	↑10c			b	130ab			b	*	*
	c	↑30b			c	+A	③		c	↑10c			c	+A	③		c		
	d	↑30b			d	↑30ab			d	↑10c			d	↑30a+A			d	*	*
	e	↑30b			e	↑30ab			e	↑10c			e	↑30a+A			e	*	*
	f	↑30b			f	↑30c			f	↑10c			f	↑30c			f		
変更	g(1)	使用段階の130d	Ⅱ		g	↑44b	④	変更	g(1)	使用段階の130d	Ⅱ		g	↑44b	④		g	*	*
変更	g(2)	130g(1)						変更	g(2)	130g(1)									
変更	h(1)	使用段階の130d			h	↑44b		変更	h(1)	使用段階の130d			h	↑44b			h	*	*
変更	h(2)	130h(1)						変更	h(2)	130h(1)									
新設	i	130cf		新設	i	130cf		新設	i	130cf		新設	i	130cf		新設	i		
	z				z				z				z				z		
131	a	下3+↑31b		131	a	下2+シナリオ(平)		131	a	↑10c		131	a	+A		131	a	*	*
	b	下2+A/10			b	+シナリオ(平)			b	↑10c			b	+A			b	*	*
	c	下3+↑31b	Ⅱ		c	↑32b	③		c	↑10c	Ⅱ		c	+A	③		c		
	d	下3+↑31b			d	↑32b			d	↑10c			d	↑31c			d		
	z				z				z				z				z		
132	a	下3+↑31b		132	a	下2+シナリオ(平)		132	a	↑10c		132	a	↑31a		132	a	*	*
	b	下3+↑31b	Ⅱ		b	+A	③		b	↑10c	Ⅱ		b	+A	③		b	*	*
	c	下3+↑31b			c	↑32b			c	↑10c			c	↑31d			c		
	z				z				z				z				z		

2

1

図表 Ⅳ-１３０　下限値と準用の適用箇所　その４

133	a	134c	I	133	a	下3+シナリオ(平)	③	133	a	106z	I	133	a	A/20	③	133	a		
	b	134c			b	+A			b	106z			b	133c			b		
	c	134c			c	+A			c	106z			c	+A			c		
	d	134c			d	132b			d	106z			d	133c			d		
	z				z				z				z				z		
134	a	下2	I	134	a	134abc	③	134	a		I	134	a		③	134	a		
	b	下2			b	134abc			b				b				b		
	c	下3 (=134d～g)			c	134abc			c				c				c		
	d	下3			d				d				d	134g+A			d		
	e	下3			e	134cd			e				e	134g+A			e		
	f	下3			f	134d+シナリオ(平)			f				f	134g+A			f		
	g	下3			g				g				g				g		
	z				z				z				z				z		
135	a	134c	I	135	a	A/20	③	135	a	106z	I	135	a	A/20	③	135	a		
	b	134c			b	A/20			b	106z			b	A/20			b		
	c	134c			c	147a			c	106z			c	147a			c		
	z				z				z				z				z		
136	a	136ef	II	136	a	136e	①	136	a	+112a	II	136	a	136e	①	136	a		
変更	b	136ef		変更	b	136e		変更	b	136f		変更	b	136f			b		
	(廃止)	(廃止)			(廃止)	(廃止)			(廃止)	(廃止)			(廃止)	(廃止)		(廃止)	(廃止)	(廃止)	(廃止)
変更	d	136ef		変更	d	136e		変更	d	136e		変更	d	136e			d		
	e	+A/10			e	下2+A			e	+112a			e	下2+A			e		
	f	+A/10			f	136e			f	シナリオ(平)			f	136e+シナリオ(平)			f		
	(廃止)	(廃止)			(廃止)	(廃止)			(廃止)	(廃止)			(廃止)	(廃止)		(廃止)	(廃止)	(廃止)	(廃止)
	z				z				z				z				z		
137	a	137cd	II	137	a	137c	②	137	a	下2+112a	II	137	a	137c	②	137	a		
変更	b	137cd		変更	b	137c		変更	b	137a		変更	b	137c			b		
	c	下2+A/10			c	下2+A			c	137a			c				c		
	d	下2+A/10			d	137c			d	137a			d	137c			d		
	z				z				z				z				z		
138	a	下3+131b	II	138	a		②	138	a	138c	II	138	a	+A	②	138	a	*	*
	b	+A/10			b				b	138c			b	138c			b	*	*
	c	下3+131b			c	+A			c	下3			c	+A			c	*	*
	d	138b			d	下2+A/10			d	138c			d	+A			d		
	e	下3+131b			e	下2+A			e	138c			e	138c			e	*	*
	f	下3+131b			f	138a			f	138c			f	138c			f	*	*
	z				z				z				z				z		
139	a	下3+131b	II	139	a	139b	②	139	a	138c	II	139	a	139b	②	139	a		
	b	下3+131b			b	下2+A/10			b	138c			b	+A			b		
	z				z				z				z				z		
140	a	下2+A/10	I	140	a	+A	②	140	a	106z	I	140	a	+A	②	140	a		
	b	下3+140a			b	140a			b	106z			b	140a			b		
	c	下1	III		c	下1			c	115a	III		c	110b			c		
	d	下3+140a			d	シナリオ(反応A/10)			d	106z			d	シナリオ(消滅A/100)			d		
	e	下3+140a	I		e	下2+140a			e	106z	I		e	+A			e		
	z				z				z				z				z		
141	a	下3+140a	II	141	a	A/20	③	141	a	110c	II	141	a	A/20	③	141	a		
	b	下3+140a			b	A/20			b	110c			b	A/20			b		
	c	下3+140a			c	A/20			c	110c			c	A/20			c		
	z				z				z				z				z		
142	a	下3+143a	I	142	a		①	142	a	106z	I	142	a	+A	①	142	a		
	b	143a			b	A/10+137c			b	106z			b	142a			b		
	z				z				z				z				z		
143	a	下2+A/10	I	143	a	+142a	①	143	a	106z	I	143	a	+142a	①	143	a		
	b	143a			b	143a			b	106z			b	143a			b		
	z				z				z				z				z		
144	a	下3+144b	I	144	a	A/1	④	144	a	106z	I	144	a	シナリオ	④	144	a	*	*
変更	b	+シナリオ(平)		変更	b	シナリオ(平)		変更	b			変更	b	シナリオ+調合段階 144b			b	*	*
	c	下2+A/10			c	A/1			c	106z			c	シナリオ			c	*	*
	d	下3+144b			d	A/1			d	106z			d	シナリオ			d	*	*
	e	下3+144b			e	A/1			e	106z			e	シナリオ			e	*	*
新設	f	144acde		新設	f	144acde		新設	f	144acde		新設	f	144acde		新設	f	*	*
	z				z				z				z				z		
145	a	下3+123c	II	145	a	A/1	④	145	a	110c	II	145	a	A/1	④	145	a		
	b	下3+123c			b	A/1			b	110c			b	A/1			b		
	c	下3+123c			c	A/1			c	110c			c	A/1			c		
	d	下3+123c			d	A/1			d	110c			d	A/1			d		
	e	下3+123c			e	A/1			e	110c			e	A/1			e		
	f	下3+123c			f	A/1			f	110c			f	A/1			f		
	z				z				z				z				z		
146	a	下3+144bc	I	146	a	シナリオ	③	146	a	106z	I	146	a	A/20	③	146	a		
	b	下3+144bc			b	シナリオ			b	106z			b	A/20			b		
	z				z				z				z				z		
147	a		I	147	a		①	147	a		I	147	a	シナリオ	①	147	a		
	b(1)			※	b	147a			b(1)			※	b	シナリオ			b		
	b(2)	147a							b(2)	147a									
	c(1)				c	147a			c(1)				c	シナリオ			c		
	c(2)	147a							c(2)	147a									
	d(1)				d	147a			d(1)				d	シナリオ			d		
	d(2)	147a							d(2)	147a									
	z(1)				z				z(1)				z				z		
	z(2)								z(2)										

2

198	z	シナリオ	IV	198	z	シナリオ		198	z	シナリオ	IV	198	z	シナリオ		198	z		
199	a	シナリオ		199	a	シナリオ		199	a	シナリオ		199	a	シナリオ		199	a		

3

IV.7.5 PRTR 情報の利用

IV.7.5.1 PRTR 制度の概要

PRTR 制度とは、化管法の中の１つの制度で、「人の健康を損なうおそれや動植物の生態若しくは生育に支障を及ぼすおそれがある化学物質[1]について、環境中への排出量及び廃棄物に含まれての移動量を事業者が自ら把握して国に報告し、さらに国が事業者からの報告や統計資料を用いた推計に基づき排出量・移動量を集計し、公表する制度」のことをいう。

ここで国が公表する排出量・移動量に係るデータを本スキームでは「PRTR データ」と呼ぶ。PRTR データは、事業者が自ら届け出た「届出データ」と国が推計した「届出外排出量データ」に大きく分かれる。これら届出、届出外排出量データは、平成 14 年度に平成 13 年度実績が公表されて以来、毎年度末に前年度実績が公表されている。また、事業所別の届出データは、以前は請求に応じてのみ開示されていたが、平成 20 年度からはそれに加え、国によって公表されている。評価Ⅱに１年以上の期間を要すると PRTR データは新たなものが公表されるが、同様に新たな年度の情報が得られる化審法の製造数量等の届出情報は事業者への照会等による精査が必要であるため、評価を実施するに際しては両者の実績年度の整合性に留意することが必要である。

以下、IV.7.5.2 と IV.7.5.3 では届出／届出外の別に排出量データの概略を説明し、IV.7.5.4 では本スキームで利用する上での留意点について説明する。

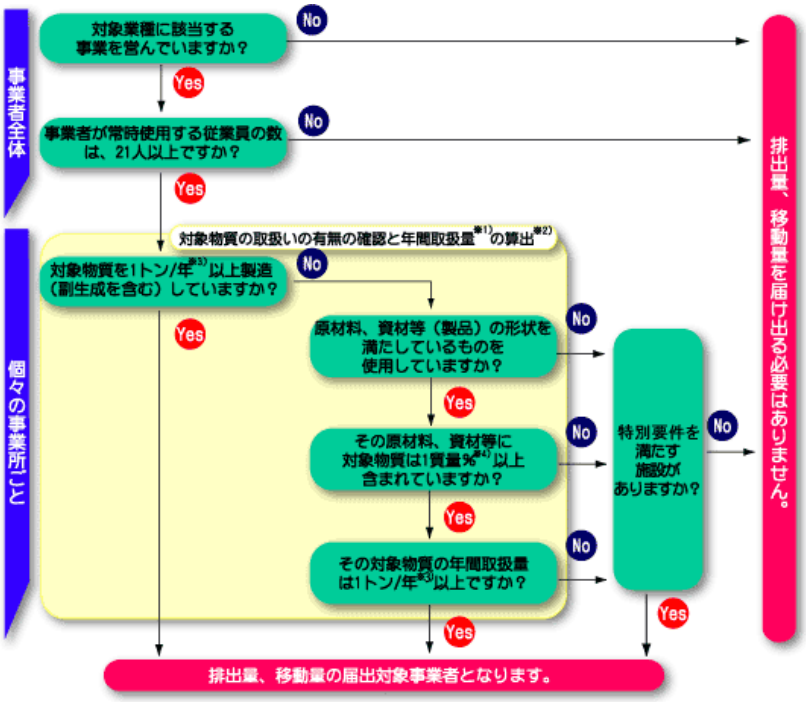
なお、本記述は、令和元年時点の化管法に基づく記述であり、また、化管法運用の正確な内容については必ず法律等の原文にあたられるとともに、国の担当部局[2]に確認されたい。

IV.7.5.2 届出データの内容

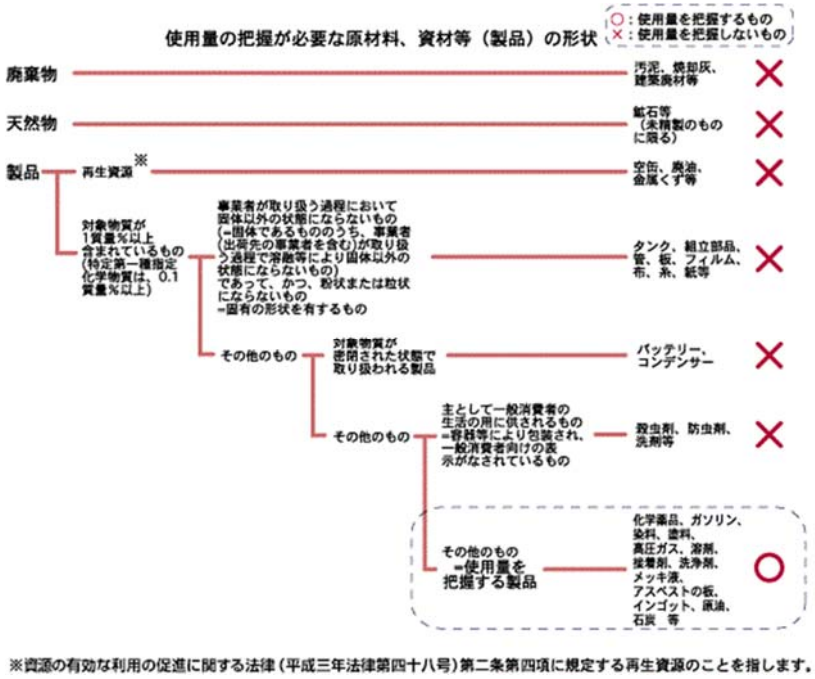
PRTR 制度における届出の義務は、図表 IV-１３１に示すように、24 の対象業種[3]に該当する事業を営んでいる事業者かつ常用雇用者数が 21 名以上の事業者であり、第一種指定化学物質（以下、「PRTR 対象物質」という。）462 物質[4]について、事業所で年間 1 トン以上(特定第一種指定化学物質は 0.5 トン以上)製造しているか、若しくは年間取扱量（製造、使用及びその他の取扱総量）が 1 トン以上（特定第一種指定化学物質は 0.5 トン以上)、若しくは特別要件施設に該当する施設を保有する事業者に課せられている。そのう

[1] 厳密には、当該化学物質の自然的作用による化学的変化により容易に生成する化学物質が同様のおそれがある場合（第２条第２項第２号）やオゾン層破壊物質（第２条第２項第３号）も含まれる。
[2] 経済産業省 製造産業局化学物質管理課及び環境省 環境保健部環境安全課
[3] 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律施行令第３条参照。なお、平成 11 年７月に制定された旧化管法施行令では、対象業種は 23 業種であった（医療業が存在しない）。
[4] 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律施行令第１条別表第１参照。なお、平成 11 年７月に制定された旧化管法施行令では、第一種指定化学物質は 354 物質であった。

ち、年間取扱量を把握する際に対象とする製品[1]については、図表 Ⅳ-１３２に示す製品が対象となる。



図表 Ⅳ-１３１　PRTR 制度における対象事業者判別フロー
（環境省 PRTR インフォメーション広場[2]より）



[1] 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律施行令第５条第１号から第４号参照。
[2] 環境省 PRTR インフォメーション広場 http://www.env.go.jp/chemi/prtr/notification/target.html

図表 Ⅳ-１３２　PRTR 制度における年間取扱量を把握する際に対象とする製品（環境省 PRTR インフォメーション広場[1]より）

届出データは、排出量と移動量に分けて届け出られる。排出量は排出先環境媒体である大気、公共用水域、土壌、埋立の 4 区分、移動量は下水道[2]への移動分、廃棄物としての事業所外への移動分の 2 区分に分けられる。また、公共用水域への排出量については、各都道府県が指定した排出先の河川、湖沼、海域等の名称[3]が付く。埋立については、安定型、管理型、遮断型の 3 種類のいずれかの処分場の方式が付く。さらに移動量については、「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律施行規則の一部を改正する省令（以下、「化管法施行規則」という）」が平成 22 年 4 月 1 日に施行され、それに伴い届出様式[4]が変更されたため、届出の対象となる平成 22 年度実績の届出データから、届出内容に「移動先の下水道終末処理施設の名称[5]」、「廃棄物の処理方法」、「廃棄物の種類」が追加されている。

続いて、対象事業者による届出データの算出方法及び算出手法の概要[6]を図表 Ⅳ-１３３に示す。

---

[1] 環境省 PRTR インフォメーション広場
http://www.env.go.jp/chemi/prtr/notification/target/hosoku2.html

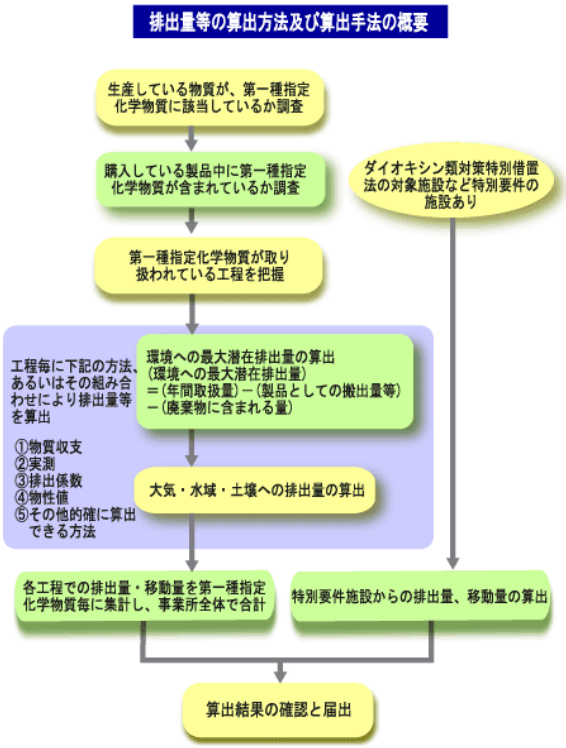
[2] 化管法において「下水」や「下水道」の定義はないことから、本付属書では下水道法の定義と同義とみなす。「下水」とは、生活若しくは事業（耕作の事業を除く。）に起因し、若しくは付随する廃水（以下「汚水」という。）又は雨水をいう。（下水道法第 2 条第一項）「下水道」とは、下水を排除するために設けられる排水管、排水渠その他の排水施設（かんがい排水施設を除く。）、これに接続して下水を処理するために設けられる処理施設（屎尿浄化槽を除く。）又はこれらの施設を補完するために設けられるポンプ施設その他の施設の総体をいう。（下水道法第 2 条第二項）
また、届出データでは「下水道への移動量」及び「下水道業」における「下水道（①）」と「下水道終末処理施設（②）」が、届出外排出量データでは「下水処理施設（③）」と、3 つの異なる用語が出てくるが、本付属書ではあえてそのまま記載している。なお、下水道法第 2 条第四項では、「終末処理場（④）」という用語が「下水を最終的に処理して河川その他の公共の水域又は海域に放流するために下水道の施設として設けられる処理施設及びこれを補完する施設をいう。」と定義されていること、また国土交通省ウェブサイト「下水道と他の汚水処理施設」
http://www.mlit.go.jp/crd/sewerage/shikumi/sonota-osuil.html において、農業集落排水施設、合併処理浄化槽及びコミュニティプラント等は、下水道法上の下水道とはみなしていないことから、これら 4 つの用語はほぼ同義（①∈④≒②≒③）とみなす。なお、化管法の届出の運用において「もっぱら生活排水等の処理を行う農業集落排水施設及び合併浄化槽についても届出は不要としている」（経済産業省・環境省(2018) PRTR 排出量等算出マニュアル第 4.2 版 第Ⅲ部 資料編 Q119 対象業種に属する事業所の接続がないことが明らかな下水道の場合 参照）ことから「下水道への移動」に浄化槽等への移動量は含まれていないと考えられる。

[3] NITE ウェブサイト PRTR 制度 公共用水域の名称
https://www.nite.go.jp/chem/prtr/waterarea.html

[4] 化管法施行規則第五条様式第一に「移動先の下水道終末処理施設の名称」等の欄が設けられた。

[5] NITE ウェブサイト PRTR 制度 下水道終末処理施設の名称
https://www.nite.go.jp/chem/prtr/sewageplant.html

[6] NITE ウェブサイト PRTR 制度 排出量算出方法 https://www.nite.go.jp/chem/prtr/calc.html



図表 Ⅳ-１３３　PRTR 制度における排出量の算出方法及び算出手法の概要フロー

排出量の具体的な算出方法及び算出手法については、大きく 2 種類のマニュアルが公開されている[1]。

- PRTR 排出量等算出マニュアル
- 化学物質排出量等算出マニュアル（11 種類）

PRTR 届出データをリスク評価に用いる際には、届出データがどのような算出方法及び算出手法に基づいているか理解しておくことが重要である。

Ⅳ.7.5.3 届出外排出量データの内容

届出外排出量の算出の基本的な考え方は、「想定される主要な排出源からの排出量について、信頼できる情報を用いて可能な限り推計を行う」というものである[2]。

「届出外排出量データ」は大きく 4 つの区分から構成される。

- 届出の対象業種ではあるが、年間取扱量や事業者の常用雇用者数などの要件を満たさない「対象業種届出外」
- 24 業種以外の農業や建設業といった「非対象業種」

[1] NITE ウェブサイト PRTR 制度 排出量算出方法 https://www.nite.go.jp/chem/prtr/calc.html
[2] 中央環境審議会環境保健部会及び産業構造審議会化学・バイオ部会リスク管理小委員会（平成 13 年 8 月）

・　「家庭」
・　自動車などの「移動体」

である。

また、これら４区分のデータに対しての排出量推計手法は、次に示すように大きく 23 に分けて示されている。

1. 対象業種を営むすそ切り以下事業者[1]からの排出量
2. 農薬に係る排出量
3. 殺虫剤に係る排出量
4. 接着剤に係る排出量
5. 塗料に係る排出量
6. 漁網防汚剤に係る排出量
7. 洗浄剤・化粧品等に係る排出量
8. 防虫剤・消臭剤に係る排出量
9. 汎用エンジンに係る排出量
10. たばこの煙に係る排出量
11. 自動車に係る排出量
12. 二輪車に係る排出量
13. 特殊自動車に係る排出量
14. 船舶に係る排出量
15. 鉄道車両に係る排出量
16. 航空機に係る排出量
17. 水道に係る排出量
18. オゾン層破壊物質の排出量
19. ダイオキシン類の排出量
20. 製品の使用に伴う低含有率物質の排出量
21. 下水処理施設に係る排出量
22. 一般廃棄物処理施設に係る排出量
23. 産業廃棄物焼却施設に係る排出量

前述の４区分とこれら 23 の排出量推計手法との関係を図表 Ⅳ-１３４に示す。

[1] 年間取扱量や常用雇用者数の要件を満たさない対象業種を営む事業者を「すそ切り以下事業者」という。

図表 Ⅳ-１３４　届出外排出量データの４区分と 23 の排出量推計手法の関係[1]

排出量推計手法	届出外排出量データの区分			
	対象業種届出外	非対象業種	家庭	移動体
対象業種を営むすそ切り以下事業者※	○			
農薬	○	○	○	
殺虫剤		○	○	
接着剤		○	○	
塗料		○	○	
漁網防汚剤		○		
洗浄剤・化粧品等		○	○	
防虫剤・消臭剤			○	
汎用エンジン		○		
たばこの煙			○	
自動車				○
二輪車				○
特殊自動車				○
船舶				○
鉄道車両				○
航空機				○
水道	○	○	○	
オゾン層破壊物質	○	○	○	○
ダイオキシン類	○	○	○	○
製品の使用に伴う低含有率物質	○			
下水処理施設	○			
一般廃棄物処理施設	○			
産業廃棄物焼却施設	○			

※すそ切り以下事業者の排出量推計手法の範囲は、対象業種に属するが届出対象とならない事業所からの排出量のうち、「農薬」、「水道」、「オゾン層破壊物質」、「ダイオキシン類」、「製品の使用に伴う低含有率物質」及び「下水処理施設」に含まれないものを指す。

[1] 経済産業省・環境省（2019）平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法等の概要，Ⅰ．推計方法の基本的考え方, p.3 届出外排出量の推計の概要より改編

例えば、4 区分の 1 つである「対象業種届出外」は「対象業種を営む事業者からのすそ切り以下の排出量」、「農薬に係る排出量」、「水道に係る排出量」、「オゾン層破壊物質の排出量」、「ダイオキシン類の排出量」、「製品の使用に伴う低含有率物質の排出量」、「下水処理施設に係る排出量」、「一般廃棄物処理施設に係る排出量」、「産業廃棄物焼却施設に係る排出量」と関係している。

また、23 の排出量推計手法のうち、「対象業種を営む事業者からのすそ切り以下の排出量」、「オゾン層破壊物質の排出量」及び「製品の使用に伴う低含有率物質の排出量」の 3 つの手法を経済産業省[1]が、残りの 20 の手法を環境省[2]が中心となって検討している。

ほとんどの排出量推計手法は排出係数を用いて排出量を算出する方法であるが、本スキームでの化審法データを用いた排出量推計手法が製造・輸入数量や出荷数量など川上側の情報を用いている[3]のに対し、PRTR 届出外排出量データは業界団体からの報告や統計資料を基に複数の推計手法[4]を用いて推計されている。また、全国排出量以外に、都道府県別の排出量が公表されているが、届出データと異なり、排出先環境媒体別の推計はされていない[5]。

(1) 対象業種届出外

ここでは、対象業種届出外排出量のうち、「対象業種を営むすそ切り以下事業者（以下、「すそ切り以下事業者」という）」及び「下水処理施設」からの排出量がどのように国によって推計されているかについて述べる。

① すそ切り以下事業者

「すそ切り以下事業者」からの排出量の推計手法として 3 つの手法が用いられている。

1 つ目は、排出源となる用途を特定し、用途ごとの化学物質の産業分野別の出荷数量、排出係数を用いて、その用途からの化学物質の環境中への国内総排出量を推計し、さらにすそ切り以下事業者の割合を乗じ、都道府県別業種別の事業所数等で割り振ることで推計する方法「全国出荷数量等に基づくベース物質の総排出量の推計[6]」である。

排出源となる用途は、平成 29 年度実績においては以下の 14 種類である。

---

[1] 「対象業者を営む事業者からのすそ切り以下の排出量」については「すそ切り以下事業者排出量推計手法検討会」において検討されている。
[2] 「PRTR 非点源排出量推計方法検討会」において検討されている。
[3] 総量方式（トップダウン型）の推計手法という。
[4] 対象となる推計区分に応じて総量方式と積み上げ方式（ボトムアップ型）を使い分けている。
[5] 届出データについては、特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律施行規則第 4 条第二号を、届出外排出量データについては、第一種指定化学物質の排出量等の届出事項の集計の方法等を定める省令第 5 条及び第 6 条を参照。
[6] 経済産業省・環境省（2019）平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法の詳細, 1. 対象業種を営むすそ切り以下事業者からの排出量, 2-1 全国出荷数量等に基づくベース物質の総排出量の推計

1. 塗料
2. 接着剤
3. 粘着剤等
4. 印刷インキ
5. 工業用洗浄剤等
6. 燃料（蒸発ガス）
7. ゴム溶剤等
8. 化学品原料等[1]
9. 剥離剤（リムーバー）
10. 滅菌・殺菌・消毒剤
11. 表面処理剤
12. 試薬
13. 繊維用薬剤[2]
14. プラスチック発泡剤

２つ目は、推計に際して実施した「PRTR の対象化学物質の取扱状況に係るアンケート調査」（以下、「アンケート調査」という。）の集計データに基づき、ベース物質（全国出荷量等に基づき国内総排出量を推計する物質）の推計による総排出量の値とアンケート調査によって設定される排出量としての物質間の相対的な比率を掛け合わせることにより、ベース物質の推計の対象となっていない物質の総排出量を推計する「アンケート調査に基づく追加物質の総排出量の推計[3]」である。この方法で推計された追加物質の国内総排出量を、さらにすそ切り以下事業者の割合を乗じ、都道府県別業種別の事業所数等で割り振ることで推計する。

３つ目は、アンケート調査の集計データに基づき、ベース排出源（全国出荷量等が得られる塗料、接着剤等の 14 種類の排出源）の推計による総排出量の値とアンケート調査によって設定される追加排出源としての排出量の相対的な比率を掛け合わせることにより、ベース排出源の推計の対象となっていない排出源の総排出量を推計する「アンケート調査に基づく追加排出源からの総排出量の推計[4]」である。この方法で推計された追加排出源の国内総排出量を、さらにすそ切り以下事業者の割合を乗じ、都道府県別業種別の事業所数

[1] 排出係数を用いて推計する手法ではなく、（社）日本化学工業協会から排出量データそのものが提供されている。
[2] 本ガイダンスで「繊維仕上げ用溶剤」としているものは、「対象業種を営むすそ切り以下事業者からの排出量推計手法」では「繊維用薬剤」と呼ばれている。この排出源も「化学品原料等」と同様に排出係数を用いて推計する手法ではなく、（社）日本染色協会から排出量データそのものが提供されている。
[3] 経済産業省・環境省（2019）平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法の詳細, 1. 対象業種を営むすそ切り以下事業者からの排出量, 2-2 アンケート調査に基づく追加物質の総排出量の推計
[4] 経済産業省・環境省（2019）平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法の詳細, 1. 対象業種を営むすそ切り以下事業者からの排出量, 2-3 アンケート調査に基づく追加排出源からの総排出量の推計

等で割り振ることで推計する。

PRTR 制度の初年度であった平成 13 年度実績時には「平均取扱量等に基づく排出量推計方法」（事業所の平均取扱量、平均排出係数から１事業所の平均排出量を推計し、これに都道府県別にすそ切り対象となる事業所数を乗じて推計する方法）を用いてすべての PRTR 対象物質を対象に排出量が推計されていた。

その後もすそ切り以下事業者からの排出量推計手法は見直しが行われており、平成 29 年度実績においては、PRTR 対象物質 462 物質中 124 物質について推計されている。

また、平成 29 年度実績時のすそ切り以下事業者からの推計排出量（124 物質の合計）の約８割の推計排出量が「全国出荷量等に基づくベース物質の総排出量の推計」によって推計された排出量で占められ、残り約２割が「アンケート調査に基づく追加物質の総排出量の推計」及び「アンケート調査に基づく追加排出源からの総排出量の推計」による排出量であり、前者の割合が大きいことが特徴的である。

② 下水処理施設

「下水処理施設」の対象範囲については、「下水処理施設が設置されている事業所からの PRTR 制度に基づく届出については、化管法施行規則第 4 条第 1 号ニにより、下水道法第 21 条第 1 項の規定に基づく水質検査の対象となる第一種指定化学物質の当該施設からの排出量を届け出ることとされている。これらの届出されている対象化学物質の排出量以外に下水処理施設から排出されるものを推計対象とする。」との定義がある[1]。

そのため、「対象業種届出外」の位置づけでもって、届け出されない PRTR 対象物質の排出量が推計されている。

この推計手法[2]は、国土交通省による検討結果[3]を参考として、平成 19 年度実績から、PRTR 届出データの下水道への移動量、PRTR 届出外排出量データのうち、「すそ切り以下事業者」、「家庭」かつ「非対象業種」からの下水道への推計移動量、PRTR 届出外排出量以外に家庭排水に含まれる金属化合物等の下水道への流入量及び路面等からの雨水として下水処理施設に流入する金属化合物等の流入量から活性汚泥処理等を経て環境へ排出される化学物質の量が推計されている。

---

[1] 環境省・経済産業省(2019) 平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法等の概要, p.15
この推計方法において、「下水処理施設」の定義はないが、農業集落排水施設、コミュニティプラント、浄化槽等は含まれないものとして推計が行われており、下水道法第２条第六項の「終末処理場」と同義と考えられる。

[2] 環境省・経済産業省(2019) 平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法の詳細, 21. 下水処理施設に係る排出量

[3] 国土交通省都市・地域整備局下水道部(平成23年6月) 下水道における化学物質排出量の把握と化学物質管理計画の策定等に関するガイドライン（案）

(2) 非対象業種

「非対象業種」とは、24 種類の対象業種以外の農業、林業、建設業、及び漁業などを指し、これらの業種については、農薬や殺虫剤、漁網防汚剤などに用いられる化学物質の排出量が推計されている。

(3) 家庭

「家庭」とは、前述の(1),(2)のような事業を営まないが、化学物質を含んだ製品を使用する一般消費者を指し、家庭で用いられる洗浄剤や化粧品、防虫剤、消臭剤などの一般消費者の生活の用に供される製品や人が吸うたばこの煙からの化学物質の排出量が推計されている。

(4) 移動体

「移動体」とは、自動車や船、飛行機などを指し、その区分は、化管法上で以下の 6 つとされている[1]。

1. 自動車（二輪車及び特殊自動車を除く）
2. 二輪車（ 二輪自動車及び原動機付自転車をいう）
3. 特殊自動車
4. 鉄道車両
5. 船舶
6. 航空機

これら移動体に用いられる燃料由来の排出量、すなわち「排ガス」と「燃料の蒸発」からの化学物質の排出量が推計されている。

IV.7.5.4 本スキームに利用する上での留意点[2]

(1) 化審法と化管法 PRTR 制度の法律上の対象範囲

化審法と化管法 PRTR 制度のそれぞれの法律上の化学物質の定義や排出源とみなす対象範囲が異なることから、評価 II で双方の排出量を利用する際にはその違いを把握しておく

[1] 平成 15 年 1 月 15 日 経済産業省・環境省告示 1 号第一種指定化学物質の排出量等の届出事項の集計の方法等を定める省令第六条第二号の規定に基づき、経済産業大臣及び環境大臣が定める移動体の区分を定める件

[2] 本ガイダンスは優先評価化学物質を対象としたものであるが、届出データに関する記載部分については、一般化学物質を対象としたスクリーニング評価における「PRTR 排出量による暴露クラスの見直し」（今回のスクリーニング評価における専門家による詳細評価と判断基準（平成 24 年 12 月 21 日改訂）参照）とも関連する。

必要がある。

ここでは、PRTR 情報を本スキームに利用する上での留意点[1]を総論と各論に分けて順に述べる。

① 総論

総論としては大きく以下の i)～iii)の 3 点がある。

i) 物質の対象範囲

化審法が対象とする優先評価化学物質と PRTR 対象物質では、その対象範囲の考え方が異なる場合がある。代表的な例として、1 つは異性体や金属及びその化合物（図表 Ⅳ-１３５参照）、もう 1 つは塩（えん）の扱いである[2,3]（図表 Ⅳ-１３６参照）。このように対象物質が一致していない場合があるため、評価 II において両法の対象範囲を精査することになる。

その他には特別な例として、化審法第 8 条第三項により届出不要となっており[4]、化管法では届出対象となっているガソリン等に含まれる PRTR 対象物質との違いに留意されたい。

図表 Ⅳ-１３５　化審法と化管法において物質の対象範囲が異なるケース 1（異性体や金属及びその化合物）

化審法（H26.4.1 時点）	化管法（H26.4.1 時点）
p-ジクロロベンゼン（優先評価化学物質）	ジクロロベンゼン
o-ジクロロベンゼン（優先評価化学物質）	
1,3-ジクロロベンゼン（一般化学物質）	
二塩化ニッケル（Ⅱ）（優先評価化学物質）	ニッケル化合物

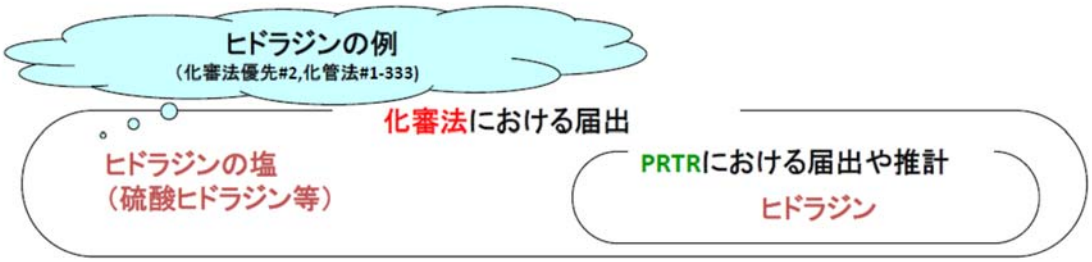
[1] 平成 23 年度第 6 回薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会化学物質調査会化学物質審議会安全対策部会第 5 回評価手法検討小委員会第 115 回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会(2011)「参考資料４　PRTR 情報の利用について（留意点）」から本付属資料では加筆・修正している。

[2] 化審法の優先評価化学物質の場合、新規化学物質とは扱わない物質のうち、構造の一部に優先評価化学物質の構成部分（アニオン又はカチオンに限る）を有するもの（付加塩、オニウム塩に限る）については、優先評価化学物質を含む混合物として取り扱う。これらの製造等に関しては、優先評価化学物質の規定を適用するものとする。
厚生労働省、経済産業省、環境省: 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について（最終改正　平成 23 年 3 月 31 日）

[3] 「PRTR 届出に関する Q&A 4.対象物質に関するもの」において、Q.40, Q41 で水加ヒドラジン、ヒドラジン誘導体の扱いをそれぞれ述べている。
http://www.env.go.jp/chemi/prtr/notification/qa/busshitsu.html#Q40

[4] 他の法律（揮発油等の品質の確保等に関する法律）による上市規制が課されうる化学物質という考え方で製造数量等の届出が不要となっている（「製造数量等の届出を要しない一般化学物質の選定の考え方について」参照）。

化審法（H26.4.1 時点）	化管法（H26.4.1 時点）
硫酸ニッケル（Ⅱ）（優先評価化学物質）	
酸化ニッケル（一般化学物質）	



図表 Ⅳ-１３６　化審法と化管法において物質の対象範囲が異なるケース２（塩の扱い）

ii) 用途の対象範囲[1]

化審法第 55 条（他の法令との関係）において、食品衛生法（食品、添加物、容器包装、おもちや、洗浄剤）、農薬取締法（農薬）、肥料取締法（普通肥料）、飼料の安全性の確保及び品質の改善に関する法律（飼料、飼料添加物）、薬機法（医薬品、医薬部外品、化粧品、医療機器）で規定され、用いられる化学物質については、化審法の適用除外となる。一方で、化管法ではこのような適用除外はないため、対象化学物質が食品衛生法の洗浄剤用途や農薬取締法の農薬用途で用いられていても環境への排出量を把握することとなっている。

その他にも、自社内中間物や試験研究の用途についても両法で対象範囲が異なる。詳細は後述する。

iii) i), ii)以外に届出が不要となる要件の違い

i), ii)以外に両法での届出が不要となる要件の違いを述べる。

a) 年間製造・輸入数量や年間取扱量：化審法の優先評価化学物質の場合、1 事業者あたり年間製造・輸入数量 1 トン/年未満で届出が不要となり、化管法の PRTR 対象物質の場合 1 事業所あたり年間取扱量（製造数量を含む）1 トン/年未満で届出が不要となる（特定第一種指定化学物質の場合には、年間取扱量 0.5 トン/年未満）点に留意する必要がある。

b)　事業者の常用雇用者数：前述したように、化審法ではこのような要件はないが、化管法では事業者の常用雇用者数が 21 人未満の場合に届出が不要となる。このようなケースは協同出資会社において見られる可能性があり、すべてを確認することはできないが、必要

[1] 化審法逐条解説では、法第 55 条について「…本法で各号に列記されている法律は化学物質の特定の用途を規律するものであり、当該化学物質が当該法律の規制を受けている限りにおいて本法の関連規定の適用除外とするものである。」とある。

に応じて化審法の製造数量等の届出制度で届け出ている製造事業者を PRTR 届出データで確認したり、化審法の出荷先都道府県において PRTR 届出データがあるか確認したりすること等、評価の不確実性に言及する必要がある。

② 各論

現時点で把握している両法の細かな対象範囲の違いをここでは届出データと届出外排出量データに分けて述べる。

i) 届出データ

IV.4.4 で前述したように、「届出データ」については、化審法対象外（又は適用除外）を取り除くことは不可能であることから、基本的に、取り除くことなく評価Ⅱにおいて利用するとしている。例外的に取り除くことを検討する場合というのは、「届出データ」を利用して「リスク懸念」のリスク評価結果が得られた場合である。そのような場合、必要に応じて化管法所管の経済産業省と環境省のいずれかが事業所に確認し、評価結果の不確実性に言及する必要がある。その際の確認する事項として、現時点では以下の(a)～(e)の 5 点があると考えられる。

(a) 自家消費（自社内中間物）

化審法運用通知[1]「3-5 全量他の化学物質に変化させられる特定化学物質、監視化学物質、優先評価化学物質及び一般化学物質の取扱い」の「(3)優先評価化学物質及び一般化学物質」に規定される場合（いわゆる同一事業者内での「自家消費」の場合）には、化審法では届出が除外されるが、化管法ではこれらは含まれる。

(b) 試験研究

化審法第 9 条第一項第一号に規定される試験研究用に該当する場合[2]には、化審法では届出が除外されるが、化管法ではこれらは含まれる。

特に化管法では届出対象業種のうち、商品検査業、計量証明業、高等教育機関、自然科学研究所で取り扱われる PRTR 対象物質は、化審法の試験研究用という可能性が考えられる。

[1] 厚生労働省、経済産業省、環境省：化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について（最終改正 平成 23 年 3 月 31 日）

[2] 厚生労働省、経済産業省、環境省：化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について（最終改正 平成 23 年 3 月 31 日）2-3 試験研究の範囲について も参照されたい。

(c) 副生成[1]と不純物（各法における「化学物質の製造」の範囲）

化管法 PRTR 排出量等算出マニュアル[2]において、副生成であっても条件[3]によっては製造しているとみなされるとある。一方で、化審法では優先評価化学物質に対して副生成という用語は用いられないが、運用通知において、不純物であっても条件[4]によっては製造数量等の届出が必要とある。このように両法は、「化学物質の製造」の範囲や副生成を表す用語が異なる点[5,6]を留意する必要がある。

特に化管法の PRTR 排出量にのみ、排ガスや排水処理工程などで副生成した PRTR 対象物質の排出量が含まれることになる。

(d) 特別要件施設[7]

化管法施行規則第 4 条第一項ハ，ニ，ホ，ヘ，ト，チで説明される以下の 4 つの特別要件施設のある事業所を持つことが届出対象事業者の要件の 1 つとなっている。

- 鉱山保安法に規定する建設物、工作物その他の施設
- 下水道終末処理施設（下水道法）
- 一般廃棄物処理施設又は産業廃棄物処理施設（廃棄物の処理及び清掃に関する法律）
- ダイオキシン類対策特別措置法に規定する特定施設[8]

---

[1] 化管法（法律、政令、施行規則）において「副生成」という用語は出てこない。

[2] 経済産業省、環境省(2018) PRTR 排出量等算出マニュアル第 4.2 版 第Ⅱ部 解説編 1-4-1 対象物質の年間製造量の確認, p.Ⅱ-17

[3] 事業者が製造する製品中に 1 質量%(特定第一種指定化学物質の場合は 0.1 質量%)以上含有される場合や、排ガス、排水、廃棄物などに含まれることが明らかな場合を指す。

[4] 他の化学物質に不純物として含まれる優先評価化学物質については、その含有割合が 1 重量%未満の場合（3-2 により混合物として取り扱うものを含む。）は、優先評価化学物質に関する規定を適用しないものとする。
厚生労働省、経済産業省、環境省：化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について（最終改正 平成 23 年 3 月 31 日）,3-4 不純物として含まれる新規化学物質、第一種特定化学物質以外の化学物質の取扱い

[5] 化審法逐条解説 第二条及び厚生労働省、経済産業省、環境省: 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について（最終改正 平成 23 年 3 月 31 日）1 化学物質の範囲関係

[6] 化管法（法律、政令、施行規則）において「製造」の定義は出てこないが、PRTR 排出量等算出マニュアルの用語集において、「販売や事業所内での原料としての使用などを目的として、対象物質を化学反応や精製等により作り出すこと」とある。

[7] 化管法（法律、政令、施行規則）において「特別要件施設」という用語は出てこないが、PRTR 排出量等算出マニュアルの用語集において、「鉱山保安法により規定される建設物、工作物、その他の施設（金属鉱業、原油・天然ガス鉱業に属する事業を営む者が有するものに限る。）、下水道終末処理施設（下水道業に属する事業を営む者が有するものに限る。）、廃棄物の処理及び清掃に関する法律に規定される一般廃棄物処理施設及び産業廃棄物処理施設（ごみ処分業及び産業廃棄物処分業に属する事業を営む者が有するものに限る。）、及びダイオキシン類対策特別措置法により規定される特定施設のこと。」とある。

[8] 非意図的生成物であるダイオキシン類は、化審法の「製造」に該当しえないため、本ガイダンスの対象としない。そのため、この特定施設については本ガイダンスではこれ以上言及しない。

これらの法に規定する施設のうち、ダイオキシン類対策特別措置法に規定する特定施設を除いては、各法で水質検査として測定項目が定められている物質（そのうち、PRTR 対象物質は 30 物質（図表 Ⅳ-１３７参照））があり、これらの PRTR 対象物質を取り扱っていなくとも、測定結果から水域への排出量を算出し、届け出なくてはならない[1]。化審法ではこのような規定はない。

図表 Ⅳ-１３７ 特別要件施設から届け出られる PRTR 対象物質※

物質番号	PRTR 対象物質名	物質番号	PRTR 対象物質名
1	亜鉛の水溶性化合物	237	水銀及びその化合物
48	O-エチル=O-4-ニトロフェニル=フェニルホスホノチオアート(別名 EPN)	242	セレン及びその化合物
75	カドミウム及びその化合物	262	テトラクロロエチレン
87	クロム及び三価クロム化合物	268	テトラメチルチウラムジスルフィド(別名チウラム又はチラム)
88	六価クロム化合物	272	銅水溶性塩(錯塩を除く。)
113	2-クロロ-4,6-ビス(エチルアミノ)-1,3,5-トリアジン(別名シマジン又は CAT)	279	1,1,1-トリクロロエタン
144	無機シアン化合物(錯塩及びシアン酸塩を除く。)	280	1,1,2-トリクロロエタン
147	N,N-ジエチルチオカルバミン酸 S-4-クロロベンジル(別名チオベンカルブ又はベンチオカーブ)	281	トリクロロエチレン
149	四塩化炭素	305	鉛化合物
150	1,4-ジオキサン	332	砒素及びその無機化合物
157	1,2-ジクロロエタン	374	ふっ化水素及びその水溶性塩
158	1,1-ジクロロエチレン(別名塩化ビニリデン)	400	ベンゼン
159	シス-1,2-ジクロロエチレン	405	ほう素化合物
179	1,3-ジクロロプロペン(別名 D-D)	406	ポリ塩化ビフェニル(別名 PCB)
186	ジクロロメタン(別名塩化メチレン)	412	マンガン及びその化合物

[1] 鉱山保安法に規定する建設物、工作物その他の施設からは大気排出、ダイオキシン類対策特別措置法に規定する特定施設からは排出量又は移動量もある。

※ ダイオキシン類を除く

特に、化管法における特別要件施設からの届出排出量データを用いて水域への排出に起因する「リスク懸念」のリスク評価結果が得られた場合には、その特別要件施設の PRTR 届出排出量の算出方法を確認し、評価結果の不確実性に言及することになる。

PRTR 排出量等算出マニュアルでは、測定した結果で用いて届出排出量を算出する場合、特徴的な事項が 2 点ある。

1 つ目は、「測定値が検出下限未満(N.D.)の場合は 0 とみなし、検出下限以上、定量下限未満の場合には、定量下限値の 1/2 とみなすこと」とされている点である。届出データの算出に定量下限値の 1/2 を用いている場合、特に年間の処理水量が多い下水道業などにおいて、年間数トンから数十トンの排出量の届出がなされる場合がある。

2 つ目は、PRTR 対象でない他の化学物質の量も届出データに含まれている場合がある。O-エチル=O-4-ニトロフェニル=フェニルホスホノチオアート(別名 EPN) を例に挙げると、化管法では EPN 単体が届出の対象である第一種指定化学物質(PRTR 物質番号 48)とされているが、下水道法や水質汚濁防止法等の法定測定項目ではパラチオン、メチルパラチオン、メチルジメトン及び EPN の総量で「有機燐化合物」として測定している。そのため、外部委託で測定を実施している場合、有機燐化合物として環境計量証明が出されており、EPN 単体としては証明されていないのが通常である。このような場合、「有機燐化合物」としての測定値を用いて、「EPN」の排出量を算出しても、差し支えないと運用されている。

(e) 輸入製品

化審法の製品の定義[1]と化管法の製品の定義[2]の比較には運用の解釈が入るために明記することが難しい。

留意する点は、化審法の製品の定義には、「必要な小分けがされた状態であり、表示等の最小限の変更により、店頭等で販売されうる形態になっている混合物」という記載があり、化管法については、図表 Ⅳ-１３２のフローで前述したように、製品に該当しない要件に「主として一般消費者の生活の用に供される製品」という記載があり、この両者の運用の解釈によっては化管法の届出データには化審法の製造・輸入数量等のデータには含まれない輸入製品からの排出量が含まれている可能性がある点である。

ii) 届出外排出量データ

「届出データ」が、化審法対象外（この場合、第 2 条、第 9 条、第 55 条を含む）を基本的に取り除くことなく評価Ⅱにおいて利用するのに対して、「届出外排出量データ」

[1] 厚生労働省、経済産業省、環境省: 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について（最終改正 平成 23 年 3 月 31 日）1 化学物質の範囲関係 (4) 参照。なお、本ガイダンスでは第一種及び第二種特定化学物質に関係する製品の定義については言及していない。

[2] 厳密には、化管法施行令第 5 条は、製品に該当しない要件を記載している。

は、推計に用いているデータが細かく区分されているため、用途等の対象範囲の観点で化審法対象外分を取り除くことが基本的に可能である。

したがって、基本的に、化審法の寄与分を考慮しつつ、評価Ⅱにおいて利用することとなる。ここでは、代表的な事項(a)～(e)の５点を紹介する。

(a) 「対象業種届出外」での代表例

試薬：成分分析等に使われる薬剤と定義されている[1]ことから「試験研究用」と解釈でき、化審法の届出対象外である。

(b) 「非対象業種」での代表例

農薬：農薬取締法に規定されており、化審法適用除外の用途である。

(c) 「家庭」での代表例

殺虫剤（農薬以外）：衛生害虫用殺虫剤に関しては、薬機法に規定されており、化審法適用除外の用途である[2]。

洗浄剤：台所用洗剤など野菜、果実又は飲食器用に用いる洗浄剤は、食品衛生法に規定されており、化審法適用除外の用途である。

防虫剤・消臭剤：衛生害虫用殺虫剤に関しては、薬機法に規定されており、化審法適用除外の用途である。

たばこの煙：燃焼による化学物質の生成であるため、化審法上の製造にあたらない。

滅菌・殺菌・消毒剤、化粧品：薬機法に規定されているため、化審法の適用除外の用途である。

(d) 「移動体」での代表例

燃料の燃焼生成分の場合、化審法上の製造にあたらない。揮発分であれば、対象である。

(e) 上記(a)～(d)をまたぐもの

燃料：燃料用途からの排出量は、(a)の「すそ切り以下事業者」、(b)の汎用エンジン、(d)「移動体」で推計されている。燃料の燃焼生成分の場合、化審法上の製造にあたらない。揮発分であれば、対象である。

水道のトリハロメタン：塩素消毒による副生成は、化審法上の製造にあたらない。

---

[1] 環境省・経済産業省(2019) 平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法の詳細, 1. 対象業種を営むすそ切り以下事業者からの排出量, 2-1 全国出荷量等に基づくベース物質の総排出量の推計 表 2-1-1

[2] NITE(2019) 身の回りの製品に含まれる化学物質シリーズ　家庭用防除剤（5）家庭用防除剤に関連する法規制等 参照。
https://www.nite.go.jp/chem/shiryo/product/productinfo.html

ダイオキシン類：ダイオキシン類の付随的な生成[1]は、化審法上の製造にあたらない。
なお、寄与分の考慮の仕方は後述する。

(2) 優先評価化学物質と PRTR 対象物質の関係

前項の法律上の対象範囲に引き続き、そもそも化審法の優先評価化学物質と化管法の PRTR 対象物質とはどこが異なるのかについて、条文及び化管法における物質の指定に係る答申[2,3]の指定条件からの違いを図表 Ⅳ-１３８に示す。ここでは平成 23 年度に行われた経済産業省委託事業の内容を土台にした考えを紹介する[4]。なお、この委託事業の報告書では、リスクの観点で指定条件を見れば、PRTR 対象物質の指定条件と近いのは優先評価化学物質よりも第二種特定化学物質であるとの意見も出ている。

図表 Ⅳ-１３８　優先評価化学物質と PRTR 対象物質の指定条件の違い

	優先評価化学物質	PRTR 対象物質(第一種指定化学物質)
条文	その化学物質に関して得られている知見からみて、当該化学物質が第三項各号のいずれにも該当しないことが明らかであると認められず、かつ、その知見及びその製造、輸入等の状況からみて、当該化学物質が環境において相当程度残留しているか、又はその状況にいたる見込みがあると認められる化学物質であって、当該化学物質による環境の汚染により人の健康に係る被害又は生活環境動植物の生息若しくは生育に係る被害を生ずるおそれがないと認められないものであるため、その性状に関する情報を収集、及びその使用等の状況を把握することにより、そのおそれがあるものであるかどうかについての評価を優先的に行う必要があると認められる化学物質として厚生労働大臣、経済産業大臣、環境大臣が指定するものをいう。	次の各号のいずれかに該当し、かつ、その有する物理化学的性状、その製造、輸入、使用又は生成の状況等からみて、相当広範な地域の環境において当該化学物質が継続して存在すると認められる化学物質で政令で定めるものをいう。 一　当該化学物質が人の健康を損なうおそれ又は動植物の生息若しくは生育に支障を及ぼすおそれがあるものであること。 二　当該化学物質が前号に該当しない場合には、当該化学物質の自然的作用による化学的変化により容易に生成する化学物質が同号に該当するものであること。 三　当該化学物質がオゾン層を破壊し、太陽紫外放射の地表に到達する量を増加させることにより、人の健康を損なうおそれがあるものであること。

[1] 化管法第 2 条第 5 項第 2 号参照。
[2] 化学品審議会(2000) 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律に基づく第一種指定化学物質及び第二種指定化学物質の指定について（答申）
[3] 化学物質審議会(2008) 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律に基づく第一種指定化学物質及び第二種指定化学物質の指定の見直しについて（答申）
[4] 詳細は、平成 23 年度経済産業省委託事業「平成 23 年度環境対応技術開発等（化管法対象物質の選定基準改正のための基礎的調査）報告書」の「2.3 化審法優先評価化学物質についての調査」を参照されたい。http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/other/itaku/index.html

	優先評価化学物質	PRTR 対象物質(第一種指定化学物質)
条文・答申からの各指定条件の主な違い		
リスク	人の健康又は生活環境動植物にリスクの懸念がない[1]とは認められないことが条件	人の健康又は動植物にリスクの懸念があることが条件[2]
人健康影響	28 日間反復投与毒性試験結果からも指定（長期毒性の疑い）	原則として投与期間 1 年以上の試験結果から指定（長期毒性）。また、気道感作性から指定。
生態影響	生活環境動植物[3]への影響	動植物への影響
暴露の状況	環境において相当程度残留しているか、又はその状況にいたる見込みがあると認められるもの	相当広範な地域の環境において当該化学物質が継続して存在すると認められるもの 年間製造・輸入数量が 100 トン以上* 一般環境中で最近 10 年間に複数地域から検出されたもの
その他指定条件	優先的に評価する必要があると 3 大臣が指定するもの	オゾン層破壊物質からも指定

＊農薬及び特定第一種指定化学物質については 10 トン、オゾン層破壊物質については累積製造・輸入数量が 10 トン

(3) 届出データの利用（下水道への移動量データの利用方法）

ここでは、PRTR 届出データの利用の中でも、データ加工が必要な下水道への移動量データを用いる方法（IV.4.5.2 ）の詳細を述べる。なお、届出外排出量において、「下水処理施設に係る排出量」が推計されているにもかかわらず、本手法を用いる理由は 2 つある。1 つはできる限り排出源を明確にするためである。もう 1 つは現時点で「下水処理施設に係る排出量」では推計する年度と同年度のデータではなく、前年度の「下水道への移動量」等のデータを用いている点である。

前述したように化管法施行令改正により、どの下水道終末処理施設にどの程度 PRTR 対象物質が流入しているかを把握できることになった。一方で、各都道府県の一覧には、主要な施設名称が掲載されており、掲載されていない施設については「その他」と記載され、届出がされている。

[1] 化審法逐条解説 p.12 などの行政文書では、優先評価化学物質について、条文上の「おそれがないとは認められないもの」から「リスクがないとは認められないため、優先的にリスク評価する必要がある物質」として紹介されているが、本表では、「リスクがない」という表現は「Free risk（ゼロリスク）」を想定させるため「リスクは懸念されるレベルにない」という意味の「リスクの懸念がない」に表現を改めている。

[2] 詳細は、「化学品審議会/中央環境審議会(2008) 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律に基づく第一種指定化学物質及び第二種指定化学物質の指定について（答申）」を参照されたい。

[3] 化審法逐条解説 p.18 には、「「生活環境動植物」とは、第一種特定化学物質及び第二種特定化学物質が数量制限等を伴う直接規制の対象となりうるものであるところ、「動植物（一般）」あるいは生態系全体に及ぼす影響を定量的に評価する方法が確立されていないこと等を踏まえ、こうした直接規制を講ずる場合における評価の対象となる動植物の範囲を環境基本法に規定する「生活環境」保全に限定する趣旨を示しているものである。」とある。

そこで、本スキームでは移動先の下水道終末処理施設が特定できる場合と、特定できず「その他」となっている場合の 2 通りについて下水道への移動量データを利用して、水域への排出量を推計する方法を用いる。

i) 移動先の下水道終末処理施設が特定できる場合

(ア) まず、届出データを下水道終末処理施設名称ごとに集計する。

(イ) 次に、点源として、下水処理除去率（IV.7.4.3 参照）を用いて水域への排出量を推計する。

(ウ) 最後に、下水道業として各下水道終末処理施設の届出があるか確認し、届出があれば、推計排出量よりも届出データを採用する。また、該当する物質自体の届出がなくとも、別の PRTR 対象物質の届出があり、排出先の水域名が得られれば、河川への排出か海域への排出かの推測が可能である。

ii) 移動先の下水道終末処理施設が特定できず、「その他」の場合

(ア) まず、都道府県別に「その他」のデータを集計する。

(イ) そして、点源として、下水処理除去率（IV.7.4.3 参照）を用いて水域への排出量を推計する。

このようにして水域への排出量が推計された下水道終末処理施設は点源（排出源ごとの暴露シナリオ）として扱われ、暴露評価に用いられる。なお、下水道終末処理施設からの大気への排出量の推計も必要に応じて検討する。

(4) 届出外排出量データの利用

届出外排出量データの利用の中でも、データの加工が必要な 4 点について述べる。

① 割り振り

割り振りについての考え方は IV.4.6.1(2)及び IV.4.6.2(2)に前述した。詳細な方法は、現在検討中である。

② 排出先環境媒体への案分

排出先環境媒体への案分についての考え方は IV.4.6.1(2)及び IV.4.6.2(2)に前述した。詳細な方法は、現在検討中である[1]。

[1] すそ切り以下事業者からの排出量推計手法では、次の資料に業種別・対象化学物質別・媒体別（大気等と公共用水域の 2 種類）に排出量が推計されている。このため、すそ切り以下事業者からの公共用水域への推計排出量には、これを用いることができる。
経済産業省・環境省（2019）平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法の詳細, 1. 対象業種を営むすそ切り以下事業者からの排出量, 4-2 都道府県別排出量の推計方法

③ 下水処理施設に係る排出量の扱い

ここでは、届出外排出量データとして得られる「下水処理施設に係る排出量」を「水系の非点源シナリオ」で用いる方法を述べる。なお、下水道終末処理施設からの大気への排出量の推計も必要に応じて検討する。

「下水処理施設に係る排出量」が推計されている物質は、PRTR 対象物質 462 物質中 191 物質と約４割である（図表 Ⅳ-１３９参照）。

図表 Ⅳ-１３９　「下水処理施設に係る排出量」が推計されている物質

流入源		対象化学物質数		
		流入量の把握が可能なもの (a)	排出量の推計が困難なもの (b)	排出量の推計対象としたもの =(a)-(b)
ア	届出事業者	185	9	176
イ	すそ切り以下事業者	98	5	93
ウ	非点源推計（家庭・非対象業種）	13	－	13
エ	家庭排水（その他の物質）	9	－	9
オ	路面等からの雨水	20	－	20
合計（物質の重複を除く）		201	10	191

（経済産業省・環境省(2019)[1] 表 21-3 より）

本スキームでは、「下水処理施設に係る排出量」のうち、「ア　届出事業者」については、下水道への移動量データの利用方法のところで前述したように下水道終末処理施設ごとの評価（排出源ごとの暴露シナリオ）に用いるため、「下水処理施設に係る排出量」から除く。

また、「エ　家庭排水（その他の物質）」、「オ　路面等からの雨水」を流入源とした「下水処理施設に係る排出量」については、引用されている文献の中には「VIII.3.2.1　分析精度等の信頼性を担保しているとみなす環境モニタリング情報」の考えに準ずると、国や地方自治体が行っていなかったり、過去 10 年以内の測定結果でなかったりする場合があるため、評価Ⅱで利用した結果、「リスク懸念」となるようであれば精査する。なお、「イ　すそ切り以下事業者」、「ウ　非点源推計」及び「オ　路面等からの雨水」由来の化学物質が化審法の規制の対象に入るのかについても検討の余地がある。

ここでは「ア　届出事業者」を除いた「下水処理施設に係る排出量」の評価Ⅱでの「水

[1] 経済産業省・環境省(2019) 平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法の詳細 21. 下水処理施設に係る排出量, 表 21-3, p.21-3

系非点源シナリオ」へ利用するための全国排出量の推計方法を述べる。なお、この方法以外にも算出する方法は複数通りあり、必ずしも本方法が最良というわけではない。ただし、他の方法を用いる際は、「下水処理施設に係る排出量」の推計で用いられた下水処理除去率と、前述の下水道への移動量データを利用した際に用いる下水処理除去率をそろえる必要がある。

i)「下水処理施設に係る排出量」が推計されている場合（図表 IV-１３９のイ及びウの(a)-(b)のこと）

(ア) 届出データのうち、下水道業による届出排出量データを都道府県別に集計する。
(イ) 「ア 届出事業者」からの下水道への移動量データを都道府県別に集計する。
(ウ) 公表されている都道府県別の「下水処理施設に係る対象化学物質別の排出量」に(ア)を足す。
(エ) (イ)を PRTR 届出外排出量推計手法で用いられた「下水処理施設に係る媒体別移行率（大気、公共用水域（放流水）[1]等）」で除して、都道府県別の下水処理施設への流入量を求める。
(オ) (エ)から(イ)を差し引く。
(カ) (オ)の都道府県別流入量を評価 I 同様に全国合計し、国民一人当たりの使用・排出量に換算して原単位ベースで推計する。なお、詳細な河川水中濃度モデル等[2]を用いる際は、都道府県別のデータをそのまま利用する場合もある。
(キ) 排出量の推計の際には、下水処理除去率[3]（IV.7.4.3 参照）を用いる。

ii)「下水処理施設に係る排出量」が推計されていない場合（図表 IV-１３９イの (b)のこと）

この場合、PRTR 届出外推計では、下水処理に伴う媒体への移行率のデータが得られない場合を意味する[4]。これら 5 物質については、現時点（平成 26 年 4 月 1 日時点）で優先評価化学物質に該当する物質がないことから、優先評価化学物質に指定された際に個別にケースバイケースで検討することとする。

---

[1] 経済産業省・環境省(2019) 平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法等の詳細 21. 下水処理施設に係る排出量, 表 21-21, p.21-39～21-47
[2] 必要に応じて、AIST-SHANEL などを使うことを想定している。
[3] PRTR 届出外排出量の推計方法との関係でいえば、ここでの「下水処理除去率」とは「100%－水域への移行率(%)」という意味で用いている。なお、大気への排出量の推計も評価に利用する場合には、下水処理除去率の内訳（例えば下水処理場モデル Simple Treat（IV.7.4.3 (4)）では、除去率＝100%－水域への移行率＝大気への移行率＋汚泥への移行率＋分解率）を確認し、大気への移行率等を利用することが考えられる。
[4] 経済産業省、環境省(2019) 平成 29 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法等の詳細 21. 下水処理施設に係る排出量, p.21-3～21-4

④ 化審法の対象外の PRTR 届出外排出量の寄与の求め方

ここでは化審法の対象外の PRTR 届出外排出量の寄与の求める際に PRTR 届出外推計手法の中のどのデータが該当するかを整理した。

結果を図表 Ⅳ-１４０に示す。

塗りつぶしで示す部分が化審法における対象外又は適用除外用途である。これらを合計して、リスク評価を行った場合に「リスク懸念」となった場合、これらを除いてリスク評価を行った場合の評価を行うことで、その寄与を留意したリスク評価結果を得ることができる[1]。

[1] 2014 年 4 月 1 日時点では、図表 Ⅳ-１４０に示す 7-2-2 の中和剤については、食品衛生法の寄与分と化審法の寄与分を分けることは不可能であり、今後の課題である。

図表 Ⅳ-１４０　PRTR 届出外排出量の内、化審法の対象外又は適用除外となるもの（塗りつぶし箇所）[1]

	大分類		中分類		小分類	物質数	詳細用途	
1	すそ切り以下	1-1	平均取扱量等に基づく推計方法			144		
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-1	塗料	4	#02-a	
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-2	接着剤等	4	#03-a	
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-3	印刷インキ	5	#02-e	
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-4	工業用洗浄剤等	11	#04-#06, #12	
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-5	燃料(蒸発ガス)	6	#47	
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-6	ゴム溶剤等	5	#03-c	
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-7	化学品原料等	19	#01, #07	
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-8	剥離剤(リムーバー)	1	#02-b	
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-9	滅菌・殺菌・消毒剤	1	化審法適用除外	薬事法(滅菌剤のエチレンオキシド)
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-10	表面処理剤	1	#04-z	
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-11	試薬	2	化審法対象外	試験研究用
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-12	コンバーティング溶剤	3	#07-d	
1	すそ切り以下	1-2	排出源別推計方法	1-2-13	プラスチック発泡剤	1	#27-k	
2	農薬					161	化審法適用除外	農薬取締法
3	殺虫剤	3-1	家庭用殺虫剤	3-1-1	有効成分	5	化審法適用除外	薬事法(衛生害虫用殺虫剤)
3	殺虫剤	3-1	家庭用殺虫剤	3-1-2	補助剤	4	化審法適用除外	薬事法(衛生害虫用殺虫剤)
3	殺虫剤	3-2	防疫用殺虫剤	3-2-1	有効成分	10	化審法適用除外	薬事法(衛生害虫用殺虫剤)
3	殺虫剤	3-2	防疫用殺虫剤	3-2-2	補助剤	7	化審法適用除外	薬事法(衛生害虫用殺虫剤)
3	殺虫剤	3-3	不快害虫用殺虫剤			13	#20-a, #20-f, #20-z	
3	殺虫剤	3-4	シロアリ防除剤			15	#20-c, #20-f, #20-z	
4	接着剤	4-1	溶剤			3	#03-a	
4	接着剤	4-2	樹脂原料			6	#23-z	
5	塗料	5-1	溶剤			6	#02-a	
5	塗料	5-2	可塑剤			2	#15-e	
5	塗料	5-3	顔料			2	#15-b	
6	漁網防汚剤	6-1	有効成分			2	#17-c	
6	漁網防汚剤	6-2	溶剤			1	#02-f	
7	洗浄剤・化粧品等	7-1	界面活性剤	7-1-1	化粧品	8	化審法適用除外	薬事法
7	洗浄剤・化粧品等	7-1	界面活性剤	7-1-2	身体用	8	化審法適用除外	薬事法
7	洗浄剤・化粧品等	7-1	界面活性剤	7-1-3	台所用	5	化審法適用除外	食品衛生法
7	洗浄剤・化粧品等	7-1	界面活性剤	7-1-4	洗濯・住宅用等	6	#13-a	
7	洗浄剤・化粧品等	7-1	界面活性剤	7-1-5	業務用(食器洗い用)	5	#13-a	食品衛生法
7	洗浄剤・化粧品等	7-1	界面活性剤	7-1-6	業務用(洗濯・清掃用等	8	#13-a	
7	洗浄剤・化粧品等	7-2	中和剤	7-2-1	身体用	2	化審法適用除外	薬事法
7	洗浄剤・化粧品等	7-2	中和剤	7-2-2	洗濯・台所・住宅用等	2	#13-c, 化審法適用除外	食品衛生法と化審法とが混在
7	洗浄剤・化粧品等	7-2	中和剤	7-2-3	トイレタリー用	1	#13-c	
7	洗浄剤・化粧品等	7-2	中和剤	7-2-4	飲食店	1	#13-c	
7	洗浄剤・化粧品等	7-2	中和剤	7-2-5	建物サービス業	1	#13-c	
8	防虫剤・消臭剤	8-1	防虫剤			2	#20-b	
8	防虫剤・消臭剤	8-2	消臭剤			1	#22-c	
9	汎用エンジン					11	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
10	たばこの煙					9	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
11	自動車	11-1	ホットスタート			11	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
11	自動車	11-2	コールドスタート			11	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
11	自動車	11-3	蒸発ガス			5	#47	
12	二輪車	12-1	ホットスタート			11	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
12	二輪車	12-2	コールドスタート			11	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
12	二輪車	12-3	蒸発ガス			3	#47	
13	特殊自動車	13-1	建設機械			11	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
13	特殊自動車	13-2	農業機械			11	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
13	特殊自動車	13-3	産業機械			13	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
14	船舶	14-1	貨物船・旅客船等			7	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
14	船舶	14-2	漁船			11	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
14	船舶	14-3	プレジャーボート			11	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
15	鉄道車輌	15-1	エンジン			9	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
15	鉄道車輌	15-2	ブレーキパッド(摩耗)			1	#32-a	
16	航空機	16-1	エンジン			6	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
16	航空機	16-2	APU			6	化審法対象外	燃料の燃焼に伴う排出
17	水道	17-1	対象業種			3	化審法対象外	塩素消毒による副生成
17	水道	17-2	非対象業種			3	化審法対象外	塩素消毒による副生成
17	水道	17-3	家庭			3	化審法対象外	塩素消毒による副生成
18	オゾン層破壊物質					14		
19	ダイオキシン類					1	化審法対象外	非意図的生成
20	低含有率物質					14		
21	下水処理施設	21-1	届出対象			214		
21	下水処理施設	21-2	すそ切り			133	小分類1-2-9, 1-2-11由来は除く	
21	下水処理施設	21-3	非点源(家庭・非対象業種)			13	小分類7-1-1～7-1-3, 7-1-5由来は除く(7-2-2は除けない)	
21	下水処理施設	21-4	家庭排水(その他の物質)			9		
21	下水処理施設	21-5	路面等からの雨水			20	化審法の規制の対象に入るのかについて検討の余地がある	

[1] 表中の低含有率物質（20.製品の使用に伴う低含有率物質の排出量）については石炭火力発電所で取り扱う石炭中に低含有率で存在する PRTR 対象物質の排出量が推計されているが、これらが化審法の化学物質の製造に該当するかは、個別に検討されたい。

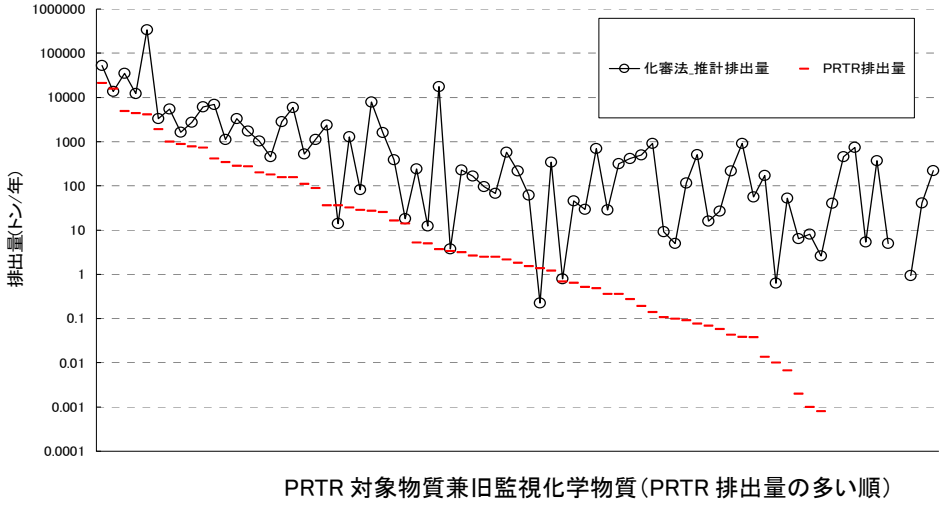
IV.7.6 排出量推計の検証

IV.7.6.1 排出量推計の試行とその精度

(1) 全国推計排出量に係る検証結果概要

平成 21 年度環境対応技術開発等(改正化審法における監視化学物質のリスク評価スキームに関する調査)報告書[1]では、化学物質の『用途』に着目し、製造量や用途別出荷数量に排出係数を乗じて排出量を推計する手法を化審法の対象とする化学物質について試行し、その妥当性を検討した。以下に概要を示す。

PRTR 対象物質である旧化審法（平成 15 年度改正法）における旧第二種又は旧第三種監視化学物質ごとの化審法届出情報に基づく推計排出量の全国総量と PRTR 排出量（届出と届出外排出量の和）の全国総量を比較した結果をに示した。この結果から、本スキームの化審法届出情報に基づく排出量推計手法は、PRTR 排出量を過小評価しない手法となっていることがわかる[2]。また、ほとんどの物質が 1～1,000 倍未満にあり、EU-TGD の手法と同等の精度[3]を有する手法である。



図表 Ⅳ-１４１　旧監視化学物質ごとの化審法届出情報を用いた推計排出量と PRTR 排出量の比較

[1] 経済産業省(2009) 平成 21 年度環境対応技術開発等(改正化審法における監視化学物質のリスク評価スキームに関する調査)報告書
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/other/development.html

[2] 一部の物質に過小評価が見られるのは、化審法の対象とならない自社内消費からの排出量が PRTR 情報に含まれているためである。

[3] EU-TGD では、EUSES というリスク評価システム（パッケージソフトウェア）を利用しており、そこに組み込まれたモジュール（排出量推計、局所の環境中濃度推計、広域の環境中濃度推計、消費者暴露推計等）ごとにバリデーションが進められてきている。排出量推計である Release estimation の Indication of possible deviation from measured values は 1～1,000 とある.(RIVM(2004) RIVM Report no. 601900005, EUSES 2.0 Background Report, I .7 Validation Status より)。この数値に“過小評価をしない”という思想が現れている。

(2) 排出源ごとの推計排出量に係る検証結果

製造数量等の届出情報に基づく暴露評価を行う場合、優先評価化学物質の排出源は、製造、調合及び使用に至るライフサイクル全体を仮想的に網羅した形で設定されている。本スキームでは「製造」と「出荷先」というライフサイクルの一部の情報と「詳細用途」の情報を用いた「仮想的排出源」を設定している。排出源の所在地について化審法届出情報から製造事業所については届出情報として得られるが、出荷先事業所については、「出荷先都道府県」の情報しかなく、地理的分布を正確に把握することはできない。そのため、「出荷先都道府県」の単位での地理的な分布状況を捉えることにしている。つまり、「仮想的排出源」の数は、製造事業所数、詳細用途の数、出荷先都道府県数によって決まる（(2)参照）。

一方、PRTR 届出データは、排出量と移動量に分けて届け出られ、排出量は届出事業所から、排出先環境媒体である大気、公共用水域、土壌、埋立の 4 区分への排出量が届け出られる（IV.7.5 参照）。

ここでは、化学物質ごとに、化審法届出情報に基づく仮想的排出源の推計排出量の都道府県別最大値と PRTR 届出排出量の最大値を比較し、大気と水域への排出量での比較検証を行った。

① 試行に用いた情報

i) 製造量や用途別出荷数量

旧化審法（平成 15 年度改正法）に基づき届け出された平成 19 年度実績の旧第二種又は旧第三種監視化学物質（以下、「旧監視化学物質」という）の製造・輸入数量、都道府県別用途(「機能別分類」という)別出荷数量の情報を用いた。

ii) 用途情報

平成 19 年度において旧化審法（平成 15 年度改正法）に基づき届け出された旧監視化学物質の用途情報である機能別分類を用いた。また、その際、機能別分類について化学物質用途分類表[1]を用いて用途分類・詳細用途分類に置き換える作業を行った。

iii) 排出係数

排出係数については、IV.7.4.2 で示した産業界からの意見募集などをホームページで行った際の化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表（案）を用いた。

iv) 物理化学的性状データ

物理化学的性状データとして、旧第二種又は旧第三種監視化学物質の蒸気圧及び水溶解度を用いて排出係数の決定に用いた。

[1] 化学物質用途分類表
https://www.nite.go.jp/chem/risk/yusenyoto.pdf

v) 試行対象物質

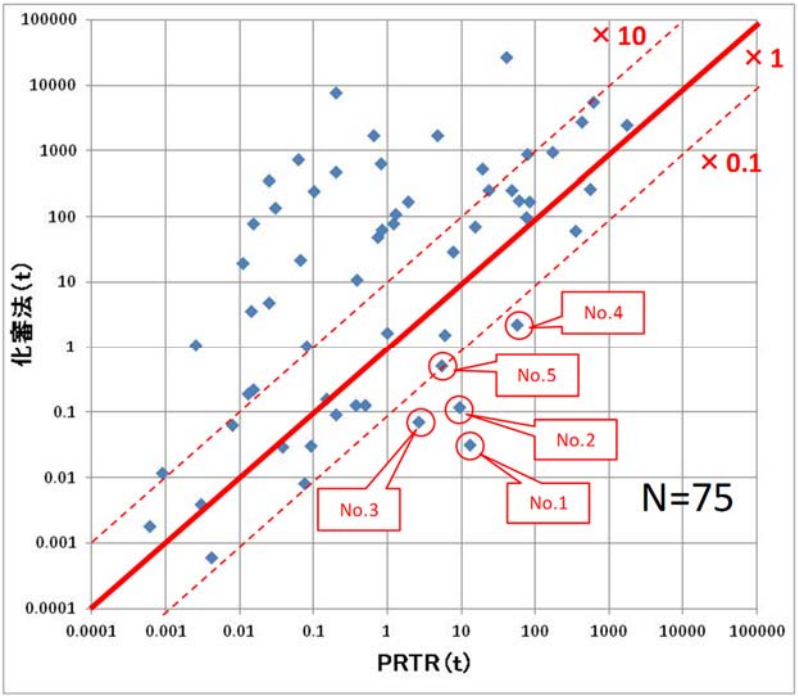
平成 19 年度実績の製造・輸入数量が 1 トン/年以上ある旧第二種又は旧第三種監視化学物質 511 物質を対象物質とした。その場合、旧化審法（平成 15 年度改正法）届出情報に基づく推計排出量については「その他」の用途で届け出られたものについて、その具体的用途の精査を行い、排出量を推計した。

さらにその中から、製造・輸入数量が 1 トン/年以上あり、旧第二種又は旧第三種監視化学物質兼 PRTR 制度対象である 98 物質を抽出した。

98 物質の中には、化審法の対象とはならないと考えられる農薬用途の排出が多い 16 物質、金属化合物 6 物質（重金属塩を含む）の合計 22 が存在していたため、その 22 物質を除外して 76 物質を試行対象物質とした。農薬用途がある化学物質の場合、化審法の届出制度から得られた製造・輸入数量、出荷数量から排出量を推計しても、PRTR 排出量には農薬用途分（農薬取締法対象分）が加味されているため、目的に沿った試行の意味があまりないことが昨年度の結果から明らかであったので除外した。金属化合物の場合、PRTR 制度対象物質と旧監視化学物質との包含関係において、対象物質の範囲が異なるため（ex. 鉛及びその化合物とメタンスルホン酸鉛）、これもまた試行対象として不適切であったので除外した。

② 結果と考察

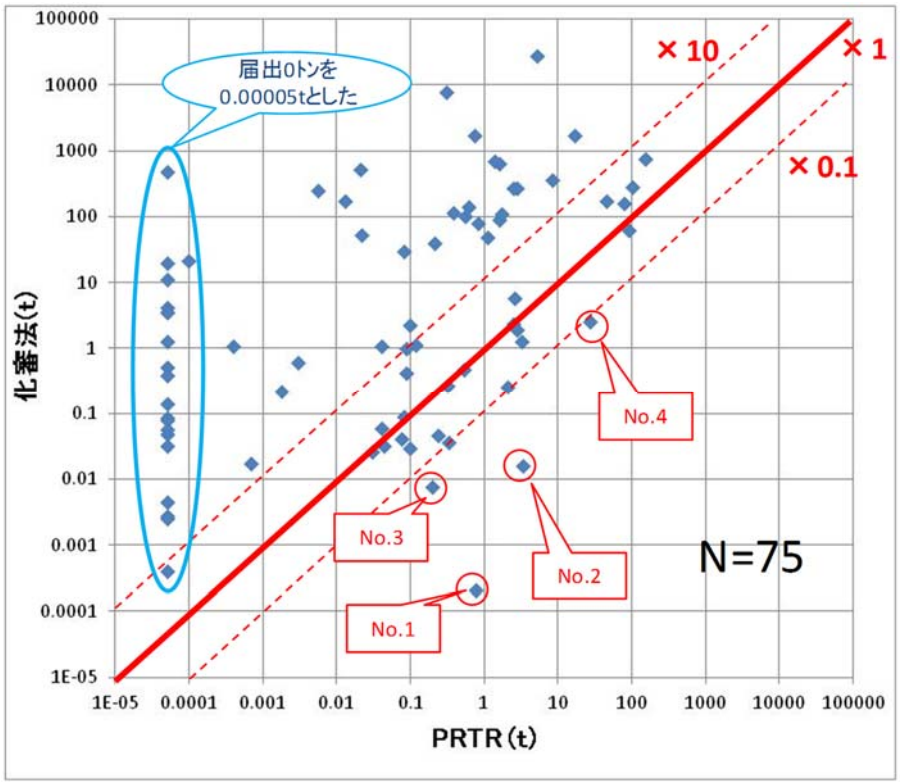
旧化審法（平成 15 年度改正法）届出情報と PRTR 排出量の比較結果を図表 Ⅳ-１４２から図表 Ⅳ-１４５に示し、図表 Ⅳ-１４６にその内訳を示す。



図表 Ⅳ-１４２　化審法推計排出量と PRTR 届出排出量最大排出源の比較検証－大気

図表 Ⅳ-１４３　化審法の推計排出量が過小評価となる物質一覧－大気

No	化管法政令番号	旧二監_通し番号	旧三監_通し番号	監視名称	化審法最大値(t)	PRTR最大値(t)	化審法/PRTR	過小評価となる理由・解釈等
1	210	375		1，1，2－トリクロロエタン	0.03	13	0.0024	塩化ビニリデン製造における自社内中間物としての排出がカウントされているかどうか
2	119	380		trans－1，2－ジクロロエチレン	0.1	9.4	0.013	塩化ビニリデン製造における副生成物としての排出がカウントされているかどうか
3	8	789	171	アクロレイン	0.04	2.6	0.014	メチルメルカプトプロピオンアルデヒド製造における自社内中間物としての排出がカウントされているかどうか
4	117	378		1，1－ジクロロエチレン（別名塩化ビニリデン）	2	57	0.039	ポリ塩化ビニリデン製造における自社内中間物としての排出がカウントされているかどうか
5	255	425	126	4－ビニル－１－シクロヘキセン	0.5	5.4	0.097	PRTR届出事業所がどのような用途で扱っているのか不明のため、理由不明。合成原料用途や5-エチリデン-2-ノルボルネン製造における副生成物。
6	73	405	18	m－クロロアニリン	0.0083	0.075	0.11	1トン未満の差
7	32	38		2－イミダゾリン－2－チオール又は2－イミダゾリジンチオン	0.00061	0.0041	0.15	1トン未満の差
8	228	124		2，4－ジアミノトルエン	0.014	0.091	0.15	1トン未満の差
9	74	374		クロロエタン	61	350	0.17	要確認：ｽｸﾘｰﾆﾝｸﾞ評価でも過小評価
10	264	401	88	m－フェニレンジアミン	0.13	0.5	0.25	1トン未満の差
11	89		20	o－クロロトルエン	1.6	6	0.26	
12	256	435	128	2－ビニルピリジン	0.13	0.37	0.34	1トン未満の差
13	118	379		cis－1，2－ジクロロエチレン	0.094	0.2	0.47	1トン未満の差
14	96	370		クロロメタン（別名塩化メチル）	261	550	0.48	
15	218	799		1，3，5－トリス（2，3－エポキシプロピル）－1，3，5－トリアジン－2，4，6（1H，3H，5H）－トリオン	0.030	0.038	0.79	1トン未満の差



図表 Ⅳ-１４４　化審法推計排出量と PRTR 届出排出量最大排出源の比較検証－水域

図表 Ⅳ-１４５　化審法の推計排出量が過小評価となる物質一覧－水域

No	化管法政令番号	旧二監_通し番号	旧三監_通し番号	監視名称	化審法最大値(t)	PRTR最大値(t)	化審法/PRTR	過小評価となる理由・解釈等
1	238		36	N−ニトロソジフェニルアミン	0.00021	0.77	0.00028	1事業所を除いてPRTR排出量はすべてゼロの特異的なケース。化審法届出者が届出している用途と使用者の用途が異なる。1トン未満の差
2	210	375		1，1，2−トリクロロエタン	0.016	3.4	0.0046	大気のNo.1と同様の理由。
3	72	404	17	p−クロロアニリン	0.0077	0.20	0.039	1事業所を除いてPRTR排出量はすべてゼロの特異的なケース。合成原料用途。1トン未満の差
4	113	8		1，4−ジオキサン	2.6	27	0.096	化審法の詳細用途分類の届出が適切でない可能性のあるケース。その場合、化審法最大値(t)の値は5倍となる。
5	256	435	128	2−ビニルピリジン	0.25	2.1	0.12	
6	118	379		cis−1，2−ジクロロエチレン	0.047	0.24	0.20	1トン未満の差
7	354	394		りん酸トリブチル	0.030	0.097	0.31	1トン未満の差
8	264	401	88	m−フェニレンジアミン	1.3	3.2	0.40	
9	73	405	18	m−クロロアニリン	0.042	0.076	0.55	1トン未満の差
10	93		21	クロロベンゼン	1.9	2.8	0.68	1トン未満の差
11	17	382		N−（2−アミノエチル）−1，2−エタンジアミン（別名ジエチレントリアミン）	62	90	0.69	
12	212	439		2，4，6−トリクロロ−1，3，5−トリアジン	0.032	0.044	0.73	1トン未満の差
13	244	803		ピクリン酸	0.27	0.32	0.85	1トン未満の差
14	255	425	126	4−ビニル−1−シクロヘキセン	0.026	0.03	0.87	1トン未満の差
15	71	403	16	o−クロロアニリン	0.49	0.53	0.92	1トン未満の差
16	233	802		ニトリロ三酢酸	2.3	2.5	0.93	1トン未満の差

図表 Ⅳ-１４６　推計排出量と PRTR 排出量の比と検証 76 物質におけるその割合

推計排出量／PRTR 排出量	物質数		割合	
	大気	水域	大気	水域
＜0.1 倍	1	2	1%	3%
0.1～＜1 倍	4	2	5%	3%
1～＜10 倍	25	23	33%	30%
10～＜100 倍	19	13	25%	17%
100～＜1,000 倍	10	13	13%	17%
1,000～＜10,000 倍	9	9	12%	12%
10,000 倍以上	7	13	9%	17%
PRTR 届出がない	1	1	1%	1%

図表 Ⅳ-１４６に示すように、推計排出量が PRTR 排出量の 1～1,000 倍未満となる物質の割合が大気、水域ともに 90%以上であった。1 倍未満となる物質の割合は、大気、水域ともに約 6%となった。続いて、過小評価の要因についていくつか考察し、以下に述べた。

1,1,2−トリクロロエタン及び trans-1,2-ジクロロエチレンは、PRTR 届出排出量において塩化ビニリデン製造における自社内中間物としての排出がカウントされているために推計排出量よりも数値が大きくなる可能性が考えられた。アクロレインについても、メチルメルカプトプロピオンアルデヒド製造における自社内中間物としての排出が PRTR ではカウ

ントされている可能性が高いため、推計排出量よりも高い排出量となっていると考えられた。1,1－ジクロロエチレン（別名塩化ビニリデン）については、塩化ビニリデン製造における副生成物としての排出がカウントされている可能性があるため、PRTR 排出量が大きいと考えられた。また、水域で推計排出量のほうが過少となった *N*－ニトロソジフェニルアミン及び p－クロロアニリンについては、1 事業所を除いて PRTR 排出量はすべてゼロの特異的なケースであり、数量的には 1 トン未満の差である。

つまり、今回の比較検証で 10 倍以上過小評価した主な要因は「①自社内中間物の排出」、「②副生成物の排出」及び「③特異的な事業所の排出」であったと考えられた。

③ まとめ

用途別排出係数一覧表を用いて仮想的排出源ごとに排出量を推計する本手法では、ほとんどの試行対象物質について PRTR 排出量より大きく排出量を見積もり、過小評価しないことが検証された。

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

Ⅴ．暴露評価

～排出源ごとの暴露シナリオ～

Ver.1.0

平成 26 年 6 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	平成 26 年 6 月	初版

目　次

V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～ 1

V.1 はじめに 1
V.1.1 本章の位置づけ 1
V.1.2 他の章との関係 2

V.2 前提と基本的な考え方 2
V.2.1 リスク評価の手段としての製造数量等の届出制度 3
V.2.2 暴露評価の対象範囲 4
V.2.3 人の暴露経路 5
V.2.4 人の暴露量推計における時間の捉え方 6
V.2.5 生態の評価における対象生物 8
V.2.6 分解性の扱い 8
V.2.7 暴露評価の構成要素 10
V.2.8 暴露シナリオの設定 11
V.2.9 数理モデルの設定等 18

V.3 暴露評価Ⅰ 21
V.3.1 はじめに 21
V.3.2 暴露評価Ⅰのフロー 22
V.3.3 環境中濃度推計 24
V.3.4 人の摂取量推計 42
V.3.5 水生生物の暴露濃度推計 44
V.3.6 物質の分類に応じた暴露評価Ⅰでの扱い 45

V.4 暴露評価Ⅱ 49
V.4.1 はじめに 49
V.4.2 暴露評価Ⅱのフロー 49
V.4.3 暴露評価Ⅰとの違い 50
V.4.4 暴露評価Ⅱでの評価対象物質 51
V.4.5 暴露評価Ⅱで追加する情報等 52
V.4.6 環境中濃度推計 56
V.4.7 人の摂取量推計 57
V.4.8 水生生物及び底生生物の暴露濃度推計 58
V.4.9 物質の分類に応じた暴露評価Ⅱの扱い 62

V.5 暴露評価Ⅲ 63
V.5.1 評価Ⅲの目的 63

V.5.2 暴露評価Ⅲの例示 63

V.6 リスク評価（二次）における暴露評価 65

V.7 付属資料 66

V.7.1 はじめに 66

V.7.2 数理モデルに用いるデータ 66

V.7.3 環境中濃度推計に用いる数理モデル 67

V.7.4 人の暴露量の推計 108

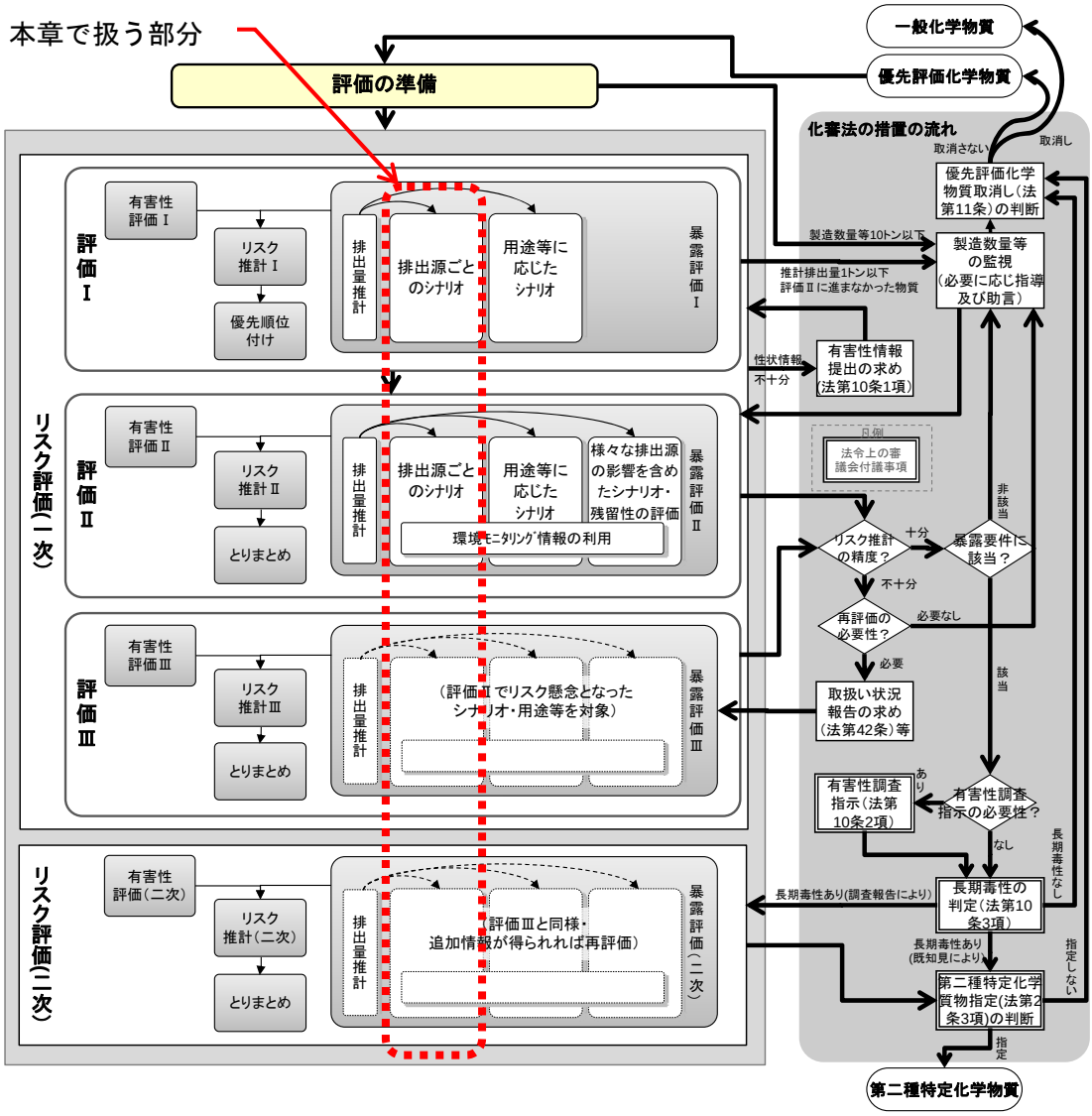
V.7.5 数理モデル及びデフォルト値設定の経緯等 109

V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～

V.1 はじめに

V.1.1 本章の位置づけ

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、排出源ごとの暴露シナリオについて記載する。リスク評価の手順フロー全体において本章で扱う部分を図表 V-1 に示す。排出源ごとの暴露シナリオは、評価段階に応じて 4 つの段階（暴露評価Ⅰ～Ⅲ及び暴露評価(二次)）があり、そのいずれにも設けられている。



図表 V-1　リスク評価の手順フローにおいて本章で扱う部分

排出源ごとの暴露シナリオによる暴露評価の目的は、評価の準備（Ⅰ章）で得られた物

理化学的性状と排出量推計（Ⅳ章）で求めた排出量を用いて排出源ごとの暴露量を推計することである。

暴露評価Ⅰで推計した暴露量は、有害性評価Ⅰで導いた有害性評価値（Ⅱ章、Ⅲ章）とともにリスク推計Ⅰに用いられる。同様に、評価段階に応じた暴露量によって、各段階のリスク推計が行われ、評価結果のとりまとめが行われる。

V.1.2 他の章との関係

排出源から排出された化学物質に人や生活環境動植物が暴露されるまでの一連の仮定である暴露シナリオには、本章で扱う排出源ごとの暴露シナリオ以外に、用途等に応じた暴露シナリオ（Ⅵ章）、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ（Ⅶ章）がある。環境モニタリング情報が得られれば環境モニタリング情報を用いた暴露評価（Ⅷ章）を行う。

排出源ごとの暴露シナリオは基本となる暴露シナリオであり、この暴露シナリオに基づく暴露評価はいずれの物質でも必ず行われる。一方、排出源ごとの暴露シナリオ以外に、得られる情報の種類、用途や性状等に応じて、他のシナリオや手法も用いられる。どのような場合に他のシナリオや手法が適用されるかは各章の文書を参照されたい。

以下、本章は断りがない限り排出源ごとの暴露シナリオに関する記述である。例えば単に暴露評価とあれば排出源ごとの暴露シナリオに基づく暴露評価のことを指している。他のシナリオや手法に基づく事柄を指す場合や関連する場合はその都度断って記載するものとする。

V.2 前提と基本的な考え方

暴露評価では、暴露シナリオを設定してそれに沿った一連の数式による計算結果として暴露量を推計する。その中には多くの前提や仮定が含まれる。

本節では、暴露評価における前提と基本的な考え方を説明する。本節のうち、V.2.1 から V.2.7 までの説明は本シナリオだけでなく、他のシナリオに基づく暴露評価にも概ね共通する内容となっている[1]。数式上の仮定やデフォルト設定は V.3.3 から V.3.6 までに触れるほか、詳細は付属資料に記載している。

[1] 正確には V.2.1、V.2.2 が製造数量等の届出情報を用いた他のシナリオの暴露評価に共通し、V.2.4.1 、V.2.6 及び V.2.7 が製造数量等の届出情報又は PRTR 排出量を用いた他のシナリオの暴露評価に共通する内容である。V.2.3、V.2.4.2 及び V.2.5 は、用いる情報の種類に関わらず共通する内容である。ただし、V.2.6 で排出後の環境中で排出量の全量が直ちにその変化物になるとの仮定や、土壌中の分解速度のみを考慮するという仮定は本シナリオに用いる数理モデルの話であり、他のシナリオで用いる数理モデルには異なるものがある。

V.2.1 リスク評価の手段としての製造数量等の届出制度

優先評価化学物質が暴露要件に該当する状況にあるか、すなわちリスクが懸念される地域が広範に生じているかどうかを把握するため、国は優先評価化学物質を製造・輸入する者から製造・輸入数量及び都道府県別・詳細用途別出荷数量の実績値を毎年度届け出させる。これが優先評価化学物質の「製造数量等の届出制度」である（詳細はⅣ章のリスク評価の手段としての製造数量等の届出制度に関する記載を参照）。

暴露要件に該当する状況にあるかどうかの把握には、「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律」（以下、「化管法」という）に基づく排出量の情報（以下、「PRTR 情報」という）や環境モニタリング情報が利用できる場合もある。しかし、これらの情報が利用できるのは、優先評価化学物質全体の中では一部の物質に限られる。したがって、すべての優先評価化学物質について環境汚染の状況を把握するためには、製造数量等の届出制度に基づく情報を使うことが基本となる。

製造数量等の届出制度では、以下の情報が事業者ごと、優先評価化学物質ごとに把握できる。

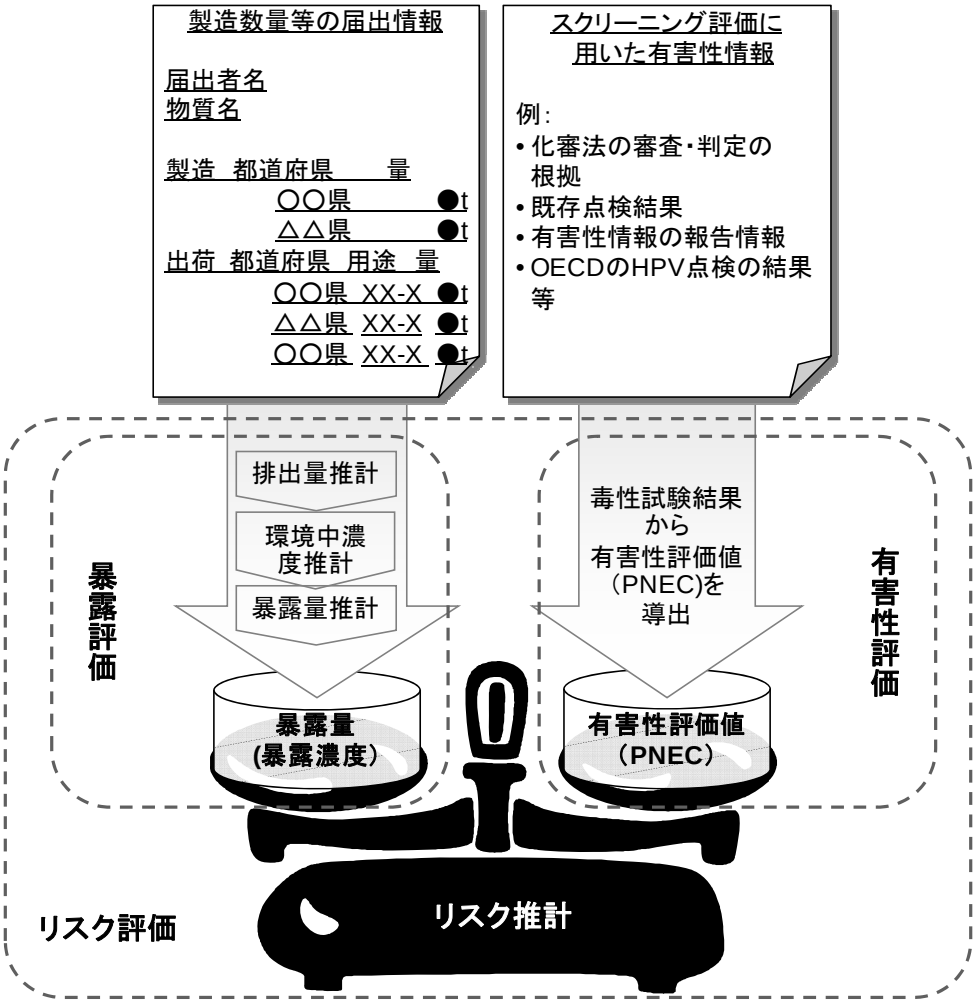
- 都道府県別の製造数量、製造場所の住所
- 輸入数量
- 都道府県別・詳細用途別の出荷数量

これらの情報から、製造段階については製造場所ごとの製造数量[1]、出荷段階については出荷先都道府県と詳細用途の情報を有する出荷数量が得られる。

この届出制度で得られる情報とリスク評価との関係を図表 V-2 に示す。リスク評価の中で、人や生活環境動植物が暴露される量を推計する過程でこれら製造数量等の届出情報と物理化学的性状を用いて排出量を推計し、そこから環境中濃度を推計する手順を踏む。人の健康に対するリスク評価では環境中濃度からさらに摂取量を推計する。この摂取量（人健康の場合）や環境中濃度（生態の場合）を有害性評価値や PNEC と比較することでリスクが推計される（詳細はⅨ章を参照）。有害性評価値や PNEC は優先評価化学物質の選定時に使用された有害性情報等から導出する（詳細はⅡ章及びⅢ章を参照）。

このように、製造数量等の届出制度は優先評価化学物質のリスク評価の根幹となっている。

[1] 届出様式上は、製造数量は都道府県別に記載し、別枠に製造場所の住所を記載するため、１つの都道府県内に複数の製造事業所を有する事業者からの届出の場合は、その内訳は判別できない。ただし、そのようなことは稀である。



図表 V-2　製造数量等の届出制度とリスク評価

V.2.2 暴露評価の対象範囲

化審法における暴露評価では、化学物質の製造・使用等に起因する環境経由の人又は生活環境動植物の暴露量（暴露濃度）を推計する。暴露評価は化審法の製造数量等の届出情報に基づいて行われるが[1]、この評価の対象外の排出源に係る暴露の具体例は、次のようなものが挙げられる（排出量推計の対象範囲についてはⅣ章の排出量推計の対象範囲に関する記載を参照）。

・ 化審法の規制対象とならない排出源に起因する暴露
　例：移動体の排ガス（燃焼生成分）、自然発生源（火山、食物中成分等）、爆発等の事

[1] 評価Ⅱ以降で PRTR 情報が使用可能な物質の場合は、化審法適用除外用途の排出分についても暴露量の推計に含むことがありうる。また、環境モニタリング情報が使用可能な場合は、暴露量（暴露濃度）に占める各種の排出源の寄与は明らかではない。そのため、これらの情報を利用する際は、化審法の規制対象寄与分の解釈が必要となる（Ⅸ章を参照）。

故による排出、国外の環境汚染源等に起因する暴露

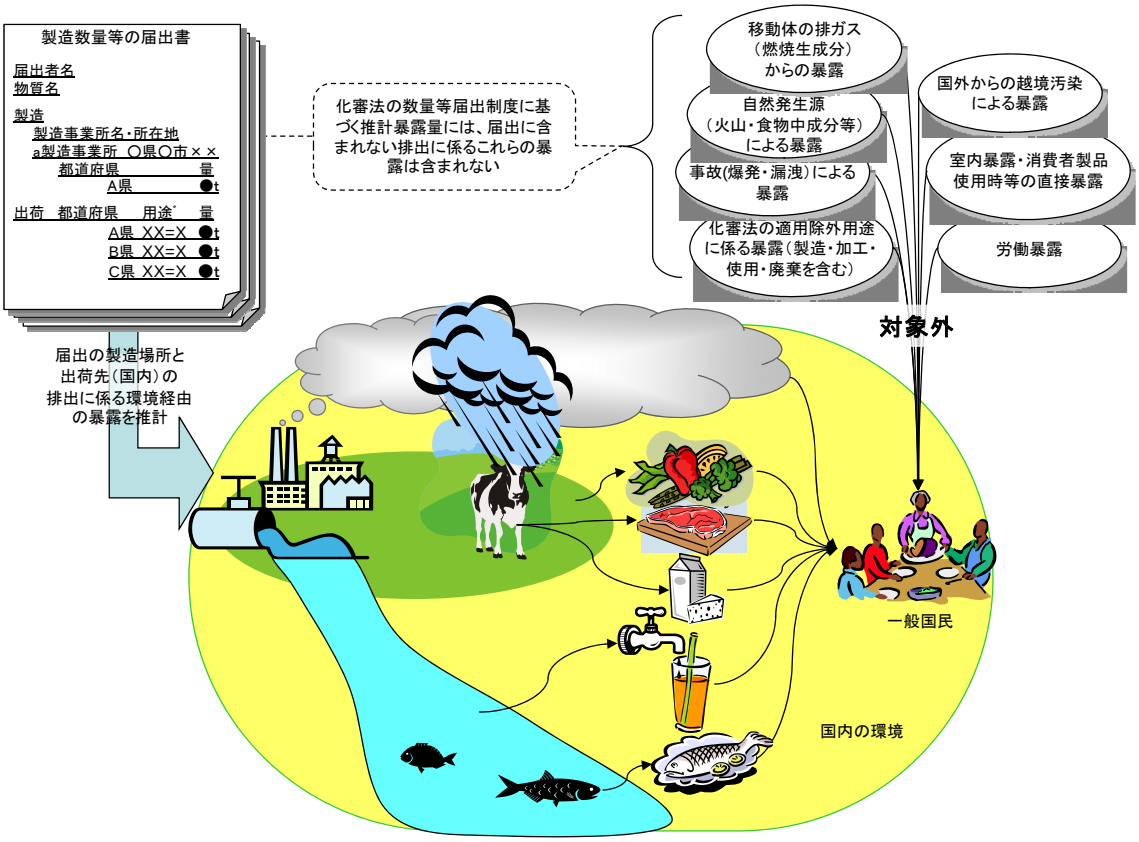
・「環境経由」ではない暴露

例：室内暴露、消費者製品使用時の直接暴露、労働暴露

・化審法適用除外用途に係る暴露

例：食品衛生法・農薬取締法・薬事法等の対象用途からの暴露

以上を図にすると図表 V-3 のようなイメージとなる。



図表 V-3　化審法の製造数量等の届出制度に基づく暴露評価の範囲

V.2.3 人の暴露経路

人の体に化学物質が取り込まれる経路は吸入、経口及び経皮の 3 つの経路がある。優先評価化学物質のリスク評価では環境経由の暴露を対象としているため（V.2.2 参照）、原則として吸入と経口の経路を対象とし、経皮経路は考慮しない。

なお、評価Ⅰでは、吸入経路と経口経路の区別はせず、両経路とも摂取量換算（単位は mg/kg/day）をして合算した全経路の暴露量を求める。この際、原則として経口経路、吸入経路いずれの経路でも吸収率（生物利用能）100%という仮定を置いている。

V.2.4 人の暴露量推計における時間の捉え方

化学物質の人の健康に対するリスク評価を行う際、有害性評価において NOAEL 等が体重当たり一日当たりの用量（mg/kg/day）で表されるので、暴露評価もこれと同じ単位の平均一日摂取量（又は暴露量）として結果を算出する[1]。

１つの媒体からの平均一日摂取量は、以下の式によって算出される[2]。

$$I = \frac{C \cdot IR \cdot ED}{BW \cdot AT} \qquad \text{式 V-1}$$

I	：平均一日摂取量 Average Daily Intake	（mg/kg/day）
C	：媒体中濃度 Concentration	（例えば mg/kg）
	なお C は環境への排出量（又は排出速度）の関数である	
IR	：媒体摂取速度 Intake Rate	（例えば kg/day）
ED	：暴露期間 Exposure Duration	（例えば year）
BW	：体重 Body Weight	（kg）
AT	：平均化時間 Averaging Time	（例えば year）

次に、この式に関連した２つの簡略化について述べる。

V.2.4.1 暴露濃度の時間変化

化審法の届出情報や PRTR 排出量を用いた暴露評価は「実績数量届出の年度に基づく暴露濃度が時間変化をせず長期にわたり継続する」という前提の下での評価であり、将来の予測である。

このことを少し詳しく説明すると以下のようになる。

優先評価化学物質の暴露評価において基となる製造数量等の届出数量や評価Ⅱで使用する PRTR 排出量データの単位は「t／year」で表される。すなわち、１年間の数量の増減や排出する期間等は把握できず、年間を通じた平均排出速度を用いて暴露評価を行うことになる。本シナリオで用いる環境中濃度を推計する数理モデル（

図表 V-8 参照）に年間排出速度を入力すると、その排出速度の下での環境中濃度が算出される[3]。

---

[1] 一般的には吸入経路の場合は暴露濃度で表すこともあるが、本スキームでは摂取量換算で統一している。

[2] この式は、媒体中濃度と媒体摂取速度が暴露期間中で一定、もしくはその期間の平均値とした式である。次ページでさらに説明。

[3] 暴露評価では、排出量は「ｔ/year」という単位で扱い、本シナリオで用いる数理モデルの流量や風速等はデフォルト設定で一律の値を置いており、便宜的に評価年度の排出量とデフォルトの流量や風速等が将来にわたってずっと続くと仮定して求めた環境中濃度を長期平均値とみなしている。

このことを優先評価化学物質の毎年度の暴露評価に当てはめて考えると以下のようになる。毎年度の届出数量は変化するが、ある年の排出量を入力して式 V-1 の平均一日摂取量 *D* の算出式で暴露評価を行うということは、評価年度の排出量により推計される濃度を数十年間ずっと暴露し続けるという前提を置いていることになる。

平均一日摂取量 *D* を求める式 V-1 の「媒体中濃度 *C*×媒体摂取速度 *IR*」の部分は本来、

$$D = \int_{t1}^{t2} C(t) \times IR(t)dt \quad \text{や} D = \sum_i C_i \times IR_i \times ED_i \qquad \text{式 V-2}$$

といったように時間変化をする媒体中濃度 $C(t)$ と媒体摂取速度 $IR(t)$ の積の積分、もしくは単位時間ごとの暴露量の総和として求めるところであるが、式 V-1 では暴露期間 *ED* の間で一定であるとして簡略化を行っている。

この簡略化は、経年の届出数量が大きく変化している物質の評価をする場合は、過小もしくは過大評価をもたらす可能性がある。そのため、最終的な評価の判断を下す際には、暴露評価の基となっている届出数量の経年変化を考慮した解釈を行う必要がある（詳細はⅨ章を参照）。

V.2.4.2　暴露期間と平均化時間

式 V-1 で、暴露期間 *ED* と平均化時間 *AT* は、急性影響を評価するのか慢性影響を評価するのかで異なってくる。例えば、TSCA の新規化学物質事前審査におけるリスク評価では、

- 急性影響と発生毒性（Developmental Toxicity（又は Developmental Effect））を評価する場合は暴露期間、平均化時間とも 1 日[1]
- 非発がんの慢性影響を評価する場合は暴露期間、平均化時間とも 30 年
- 発がん性の評価をする場合は、暴露期間 30 年、平均化時間 75 年

[1] U.S. EPA (2011) Interpretive assistance document for assessment of discrete organic chemicals sustainable futures summary assessment.
発生毒性の評価をするための暴露評価に関しては、U.S. EPA の暴露評価ガイダンス（U.S. EPA (1992) 3.5.1 Plannning an exposure assessment as part of a risk assessment. In: U.S. EPA, Guidelines for exposure assessment, Federal Register 57(104):22888-22938, EPA/600/Z-92/001, pp.38-39.）でも以下のように述べられている。
“""For developmental effects, for example, lifetime time-weighted averages have little relevance, so different type of data must be collected, in this case usually shorter-term exposure profile data during a paticular time window.”
「発生毒性については、例えば、生涯時間加重平均はほとんど関連しないため、種々のデータ - この場合には、特別な期間の短期暴露プロファイルデータ - を収集しなければならない」
このように、発生毒性がある場合については慢性影響と同様の長期間の平均暴露量ではなく短期的な暴露量の評価が必要と考えられ、今後の課題である。

等と設定して、評価が行われている[1]。

本スキームの人の健康に係る暴露評価では、暴露期間と平均化時間が長期であり、その数値が同じであるという前提を置いている[2]。それは、化審法が人や生態への慢性影響を予防するという目的が根底にあるためである。なお、本スキームでは非発がんと発がんの評価とも暴露期間と平均化時間を同じ数値としている。

すなわち本スキームの暴露評価では式 V-1 の ED と AT は相殺され、以下のように簡略化される。

$$D = \frac{C \cdot IR}{BW} \qquad \text{式 V-3}$$

V.2.5 生態の評価における対象生物

生態に関して、化審法では「動植物」と「生活環境動植物」という用語が使い分けられている。前者の方が概念として広く、後者は、動植物のうち「人の生活と密接な関係のある動植物（例えば、有用な動植物）」等が該当するとされている。優先評価化学物質のリスク評価では、生活環境動植物を対象とし、それは、水生生物及び底生生物とする（詳細はⅢ章を参照）。

暴露評価Ⅰでは水生生物を対象とし、暴露評価Ⅱ以降では化学物質の性状に応じて（V.4.8.2 参照）底生生物も対象とする。

V.2.6 分解性の扱い

化学物質は、環境中で生分解（微生物による分解）の他、加水分解、光分解等、様々な機序で分解される。化審法では、分解性の評価のための試験方法は、微生物等による化学物質の分解度試験が用いられており、優先評価化学物質の中には分解度試験の結果、変化物が生成することが判明している場合がある。

一般的に分解性を暴露評価で考慮するには、環境中の分解速度に関するパラメータとして半減期や分解速度定数を収集、数理モデルのパラメータとして入力し、環境中濃度を推計する。

---

[1] US. EPA (2007) Exposure and Fate Assessment Screening Tool (E-FAST) Version 2.0 Documentation Manual.
(http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/efast2man.pdf)

[2] この前提は TSCA の例で言うと非発がんの慢性影響の評価の場合に該当する。
なお、NITE の初期リスク評価や環境省の環境リスク初期評価の指針等で示されている摂取量を求める式は D=C×IR／BW であり、ED=AT という前提があると考えられる。

本スキームでは分解性に関して以下のような扱い[1]とする。

(ア) 変化物の扱い

・評価Ⅰでは評価対象物質は１つとするため、化審法の分解度試験等により変化物が生じることが判明している優先評価化学物質の場合、性状データの揃い具合等を考慮し、親化合物や変化物のうち１つを評価対象物質とする。評価Ⅱ以降では、必要に応じて複数の評価対象物質を設定する（詳細はⅠ章を参照）。

・変化物を評価対象物質とする場合は、排出後の環境中で排出量の全量が直ちにその変化物になるとの仮定を置いて変化物の生成量（式 V-5 参照）を求め、その値を用いて環境中濃度を推計する（排出量は親化合物の性状で推計し、環境中濃度は変化物の性状で推計）。これを式で表すと以下のようになる。

次のような変化物を生じる物質を例に示す。

$X_mA_n \rightarrow mX+nA$　　式 V-4

X_mA_n：親化合物　X と A：変化物

変化物 A の生成量[2]

＝親化合物 X_mA_n の排出量　　式 V-5

×（変化物 A の分子量）×n／（親化合物 X_mA_n の分子量）

変化物 A の環境中濃度

＝*f*（変化物 A の生成量、変化物 A の性状）　　式 V-6

ここで、*f* は環境中濃度の推計式を表す。

・変化物を評価対象物質とする場合は、評価Ⅰでは大気排出分と水域排出分のどちらも変化物の生成量を求める。一方、評価Ⅱ以降では、大気と水域における分解性は別々に考慮する。例えば、大気排出分は親化合物で評価する一方、水域排出分は変化物で評価を行う等である。

(イ) 環境中濃度推計における分解速度の扱い

・評価Ⅰでは、環境中濃度推計に分解速度を考慮しないものとする。

・評価Ⅱ以降は、土壌中における分解速度に関する情報[1]（分解速度定数又は半減期）

[1] 水系の非点源シナリオの評価Ⅰでは、下水処理場を経由して環境中へ排出されると想定される用途の水域への排出量推計において、化審法の分解度試験結果が「良分解性」であれば、下水処理場での除去率を想定したファクターを乗じる。「難分解性」又は「分解性が不明」であればこのファクターを乗じない（Ⅳ章の水系の非点源シナリオにおける排出量推計に関する記載を参照）。

[2] 変化物 A の分子量を n 倍するのは、親化合物 X_mA_n の 1 分子当たり変化物 A が n 分子生成するためである。

を調査・推計し、入手できれば環境中濃度推計に利用する。

V.2.7 暴露評価の構成要素

暴露評価では評価段階（Ⅰ～Ⅲ）に共通[2]して、製造数量等の届出情報（V.2.1 参照）を出発点とし、人が環境経由で化学物質を摂取する量と生活環境動植物（水生生物と底生生物）が暴露される環境中濃度を推計する。このような優先評価化学物質の製造数量等の届出情報に基づく暴露評価には、図表 V-4 に挙げた構成要素が含まれる。

図表 V-4　暴露評価の構成要素

構成要素		概要	参照先
1　暴露シナリオの設定		化学物質の排出源から人や生活環境動植物が暴露されるまでの一連の経路等を仮定	
	a　排出シナリオの設定	排出源、排出先の媒体、排出係数、排出源高さ等の設定	V.2.8.1
	b　暴露集団の設定	暴露される人や生活環境動植物を想定	V.2.8.2
	c　環境スケールの設定	排出源からの距離、評価面積等の設定	V.2.8.2
	d　暴露シナリオ（排出以外）の設定	暴露集団の摂取媒体・経路、集団の特性（成人等）等の設定	V.2.8.2
2　数理モデル等の選定		暴露シナリオに適した数理モデルの選定と調整	V.2.9
3　データの収集・設定		数理モデルにインプットするデータの収集・設定・推計等	
	a　環境パラメータの設定	風速等の気象条件、流量等を設定	付属資料 V.7.2.2
	b　人の摂取量推計のための暴露係数の設定	媒体別の摂取量（摂食量、呼吸量等）等の設定	付属資料 V.7.4.1
	c　化学物質の物理化学的性状と環境中運命の調査・推定・選定	国による文献調査や事業者からの報告、構造活性相関による推計等により化学物質ごとに収集・選定	Ⅰ章
	d　化学物質の環境への排出量の推計	製造数量等の届出制度により届出された製造数量、出荷数量、用途から環境媒体別の排出量を推計	Ⅳ章

[1] 排出源ごとの暴露シナリオで適用する数理モデルでは、土壌中の分解のみが考慮されている（詳細は付属資料 V.7.3.2 参照）。
これは、大気へ排出された化学物質は 1 ～2 時間（風速 2m/s、エリア半径 10km の場合で約 1.4 時間）でエリアの外へ出て、また、河川へ排出した場合は 3～4 日（河川の流速 1m/s、河川の長さ 300km の場合で約 3.5 日）で河口に到達するため、非常に分解速度が速くない限り、大気や河川の推計濃度に大きく影響しないと考えられたためである。また、本手法で参考にした REACH-TGD の局所的スケールの環境濃度(PEClocal)の推計式においても分解を考慮するのは土壌であり、大気や表層水では考慮されていない。

[2] 評価対象物質によっては、評価Ⅱでは PRTR 情報や環境モニタリングデータ、評価Ⅲでは事業者の取扱情報を暴露評価に利用することがあるが、評価段階で共通して得られるのは製造数量等の届出情報である。

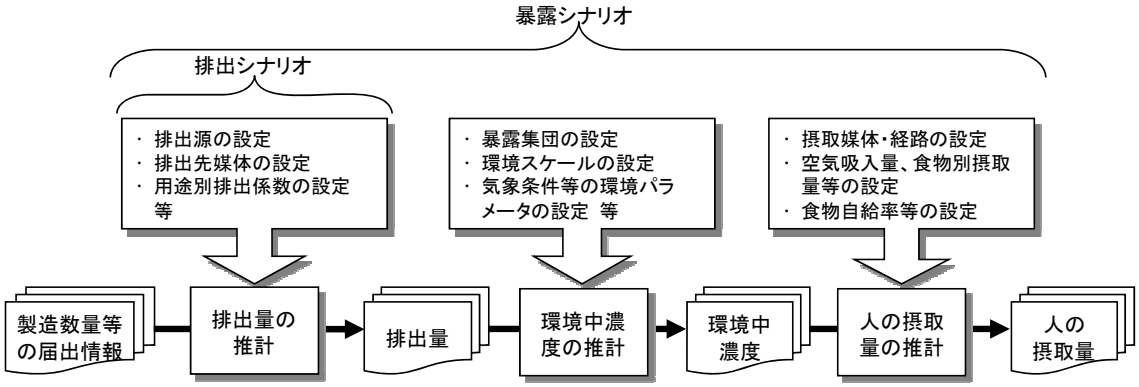
構成要素	概要	参照先
4　環境中濃度推計	2 で選定した数理モデルに 3a、c、d のデータを入力して計算	V.3.3
5　人の摂取量推計	4 で計算した環境中濃度と 3b で設定した暴露係数により計算	V.3.4

図表 V-4 の構成要素のうち、1 と 2、3- a、3- b とについてはあらかじめ一律に設定しておくものである。暴露シナリオや環境中濃度を推計する数理モデルは物質間で基本的に共通である[1]。3-c については初めてリスク評価対象になる際に設定するもので、1 つの物質について一度設定すればよい[2]。3- d と 4、5 については毎年度の製造数量等の届出に応じ、毎年度排出量を推計し、その値を数理モデルに入力して環境中濃度や摂取量を推計する。

それぞれの構成要素について、図表 V-4 の参照先に示す本章の該当箇所又は他の文書で説明している。

V.2.8 暴露シナリオの設定

優先評価化学物質の製造数量等の届出情報とリスク評価との関係について V.2.1 で前述した。その続きとして、製造数量等の届出情報から環境中濃度（生活環境動植物の暴露濃度）や人の摂取量を推計するまでの流れを図表 V-5 に示す。図中に示すように、製造数量等の届出情報から人の摂取量を推計するためには一連の仮定を置く必要がある。本章では、製造数量等の届出情報から排出量を推計するまでの一連の仮定を「排出シナリオ」と呼び、排出シナリオも包含し人の摂取量あるいは生活環境動植物の暴露濃度を推計するまでの一連の仮定を「暴露シナリオ」と呼ぶ。以下では暴露シナリオについて説明する。



図表 V-5　製造数量等の届出制度の情報から人の摂取量を推計する流れ

[1] 物質の分類によって、数理モデルのうち単純希釈部分のみ適用する場合がある（V.3.6.2 環境分配モデル適用外物質の暴露評価Ⅰ）。

[2] ただし、原則として評価Ⅰの際には定型的なルールにしたがって設定し、評価Ⅱ以降は必要に応じて精査を行う。

V.2.8.1　排出シナリオの設定

製造数量等の届出情報を用いた排出シナリオの設定では「仮想的排出源」と呼ばれる排出源を設定する。詳細はⅣ章の排出シナリオの設定に関する記載を参照されたい。

V.2.8.2　暴露シナリオの設定

一般的に暴露評価では、対象とする暴露集団を想定して暴露シナリオを設定する。暴露集団はリスク評価の目的に応じて設定する。例えば、労働環境のリスク評価が目的ならば暴露集団は労働者であり、特定の排出源に起因するリスク評価が目的ならば暴露集団はその排出源近傍の住民といった具合である。

ここでは、排出源ごとの暴露シナリオにおける暴露評価について(1)で基本的な考え方を説明し、(2)で暴露集団と暴露される経路を示し、(3)では暴露評価の環境スケールを説明する。

(1) 排出源ごとの暴露シナリオの基本的な考え方

排出源ごとの暴露シナリオでは排出源周辺に着目している。この暴露シナリオは、以下の２つの観点により設定した。

１つ目は、暴露要件に関わる。暴露要件は“相当広範な地域の環境において人や生態へのリスクが見込まれる”という状況である。このような暴露要件に該当する状況として、本シナリオでは基本的に、排出源の周辺における局所的な環境汚染が全国に散在しているというケースを想定する（以下、ここではこのような環境汚染を「局所汚染散在タイプ」という。）。例えば、長期毒性を有し、かつ、国内使用量が多いものとして PRTR 対象物質となっている物質の大半は大気に排出されており、物質によっては全国に多数の排出源が分布する。本シナリオの想定では、大気中の化学物質濃度は排出源からの距離によって大きく減衰するため、リスクが見込まれるような大気汚染の多くは局所的な汚染ということができる。大量に排出している排出源が全国に多数あれば、局所汚染が多数散在することになる。

したがって、リスク評価結果が暴露要件該当性の判断に資するには、排出源周辺の環境中濃度がリスクをもたらすようなレベルであるか、それが全国にどの程度分布しているのかという事項を予測することが有用と考えられる。

２つ目は、局所汚染散在タイプと異なるタイプの広範な環境汚染と化審法上の区分に関係する。局所汚染散在タイプとは異なる広範な環境汚染には、以下のようなケースが考えられる。難分解性の化学物質が大量に使用され環境中に放出されると、長期間環境中に残留する。拡散した環境中の濃度は低くても生物への高蓄積性を有する場合は生物中に濃縮し、魚等の食物を通じて人や高次捕食動物が暴露されることが考えられる（以下、このような環境汚染を「広域環境残留タイプ」という。）。これは、化審法制定の契機となったポ

リ塩化ビフェニル（PCB）による環境汚染が典型例であり、残留性有機汚染物質（POPs: Persistent Organic Pollutants）に関して想定される暴露シナリオである。化審法においては、難分解性かつ高濃縮性を有する化学物質は監視化学物質に指定され、優先評価化学物質から第二種特定化学物質へのルートとは別に扱われることとなる。また、環境中での残留性の指標としては、本シナリオとは別に多媒体モデルを用い、環境中の定常到達時間等を推計することにしている（詳細はⅦ章を参照）。そのため、本シナリオでは、広域環境残留タイプの環境汚染を基本的には想定していない。ただし、仮に広域環境残留タイプの汚染に至る場合もその始まりは局所的な汚染であることから、排出源周辺に着目した暴露評価を行うことは、広域環境残留タイプに至る潜在的可能性を有する化学物質の汚染状況の把握にも有効であると考えられる。

(2) 暴露集団と暴露される経路

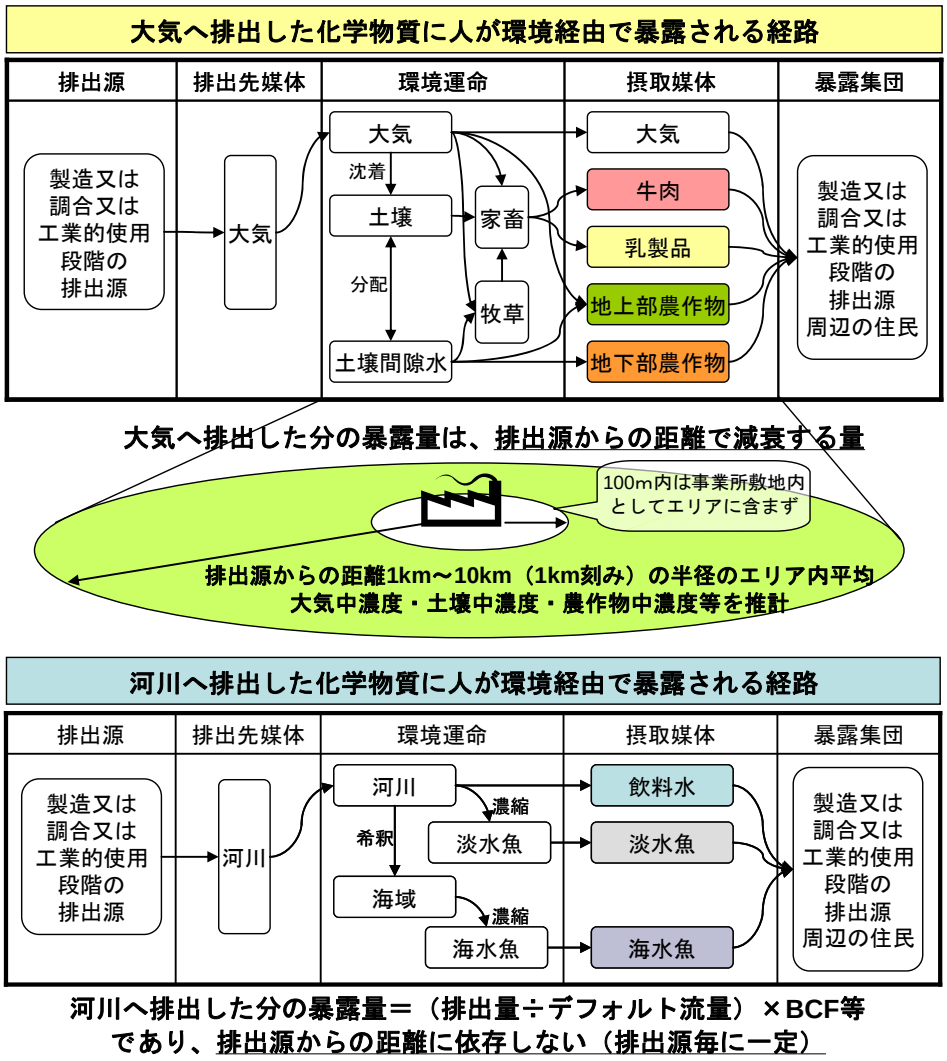
本スキームでは、一般工業化学品の製造・使用等に起因する環境汚染による一般国民又は生活環境動植物に対するリスク評価を行う。すなわち、リスク評価で想定する暴露集団は、一般工業化学品の製造・使用等に起因する環境経由の暴露を受ける一般国民又は生活環境動植物ということになる。以上より、暴露評価では、仮想的排出源周辺の住民又は生活環境動植物が暴露集団と設定される。

人に関しては以下のような暴露集団を仮定している。

(ア) 仮想的排出源を中心とした半径 1～10km（1km 刻み）のエリア（ただし半径 100m 内は除く）を生活圏とする（スケール設定は次の(3)で説明）。生活圏では次の(イ)～(オ)を想定する。
(イ) そのエリア内の平均大気中濃度に暴露される。
(ウ) そのエリア内で産出する農作物と畜産物を一定の割合で摂取する。
(エ) 仮想的排出源から排出される化学物質が流入した仮想的な河川から取水した水を摂取し、河川及びその流入先の海域でその化学物質を濃縮した魚介類を一定の割合で摂取する。
(オ) 上記(イ)～(エ)の暴露期間はいずれも長期間（数十年～生涯）とする。
(カ) 空気吸入量、飲水量、食物摂取量は一般的な成人を想定する。

(ア)～(エ)について、仮想的排出源から人の摂取までの経路も含めて図表 V-6 に図化した。同図に示すように、排出源ごとの暴露評価の暴露シナリオでは、人は大気に排出された化学物質については大気吸入、牛肉の摂取、乳製品の摂取、地上部農作物（葉菜等）の摂取、地下部農作物（根菜等）の経路から、河川へ排出された化学物質については飲料水、淡水魚の摂取、海水魚の摂取の経路から暴露されると設定している。環境経由の暴露とはこれらを指している。また、大気排出による経路の暴露量については排出源からの距離で減衰する量として仮定し、河川排出による経路の暴露量については排出源からの距離に依存し

ない量として仮定している[1]。



図表 V-6　排出源ごとの暴露シナリオ

生活環境動植物に関しては以下のような暴露集団を想定している。なお、これらの暴露濃度である河川水中濃度は人の摂取量と同じく、排出源からの距離に依存しない量として推計される。

---

[1] 暴露シナリオの設定にあたっては、REACH-TGD（情報要件及び化学物質安全性評価に関するガイダンス）の local-scale のシナリオをベースとした。また、U.S. EPA における TSCA の新規化学物質の上市前届出(PMN)の審査において使用されている暴露評価システム E-FAST のシナリオも参考にした。これらでは大気中濃度は距離に依存するシナリオ、河川水中濃度は距離に依存しないシナリオが採用されている（図表 V-8 参照）。

ただし、仮想的排出源を中心とした半径 1km から 10km（1km 刻み）のエリアを人の生活圏と考えて暴露量を求めることは本シナリオ特有の設定である。

(ア) 仮想的排出源から排出される化学物質が流入した仮想的な河川の水にさらされる。
(イ) 暴露期間は、生活環境動植物にとって長期間（数十時間～数十日等、水生生物の寿命又は世代交代の期間程度）とする。

なお、図表 V-6 に示した各種の媒体中濃度と人の摂取量の推計方法は「V.3.3 環境中濃度推計」や「V.3.4 人の摂取量推計」で説明する。

(3) 暴露評価の環境スケール

ここでの内容は「V.2.8.1 排出シナリオの設定」とつながっている。

(1)で設定した暴露集団に対して、製造数量等の届出制度による届出内容を土台にした暴露評価を行う。製造数量等の届出制度による届出内容は、都道府県別製造量、都道府県別・詳細用途別出荷数量であり、これが排出源の最小単位となる。ここで、V.2.8.1 で示した排出シナリオとつながる。

図表 V-7 に本シナリオの概要を示す。中段には製造数量等の届出情報から人の摂取量を推計するまでの流れを示し、上段の吹き出しに排出シナリオの中身を、下段の吹き出しに暴露シナリオの一部を示す。

上段の排出シナリオは V.2.8.1 で説明したとおり、製造段階又は出荷先の段階の仮想的排出源を想定し、それら仮想的排出源ごとに環境への排出量を推計する。

さらに、ここでは環境中濃度を推計する環境のスケールを設定する。本シナリオでは、排出源ごとの環境中濃度を推計する環境スケールを、図表 V-7 の下段に示すように「仮想的排出源を中心とした半径 1km から 10km（1km 刻み）のエリア（ただし半径 100m 以内は除く[1]）」と設定した。この大きさは、以下の理由により設定した。

(ア) 人の長期間の平均暴露濃度を推計する範囲であるため、生活圏とみなせる範囲であること。
(イ) 製造数量等の届出制度で想定されている排出源の最小単位（都道府県別・詳細用途別）と整合する大きさであること。
(ウ) 個別排出源の有意な影響を受けると想定される範囲であること。

(ア)については、暴露濃度を推計する環境の設定を地点ではなくエリアとしたことに関わる。本スキームが長期毒性[2]のリスク評価を行うものであるため、暴露評価では「V.2.4.2　暴露期間と平均化時間」で説明したとおり、長期の継続した暴露期間を想定している。長期

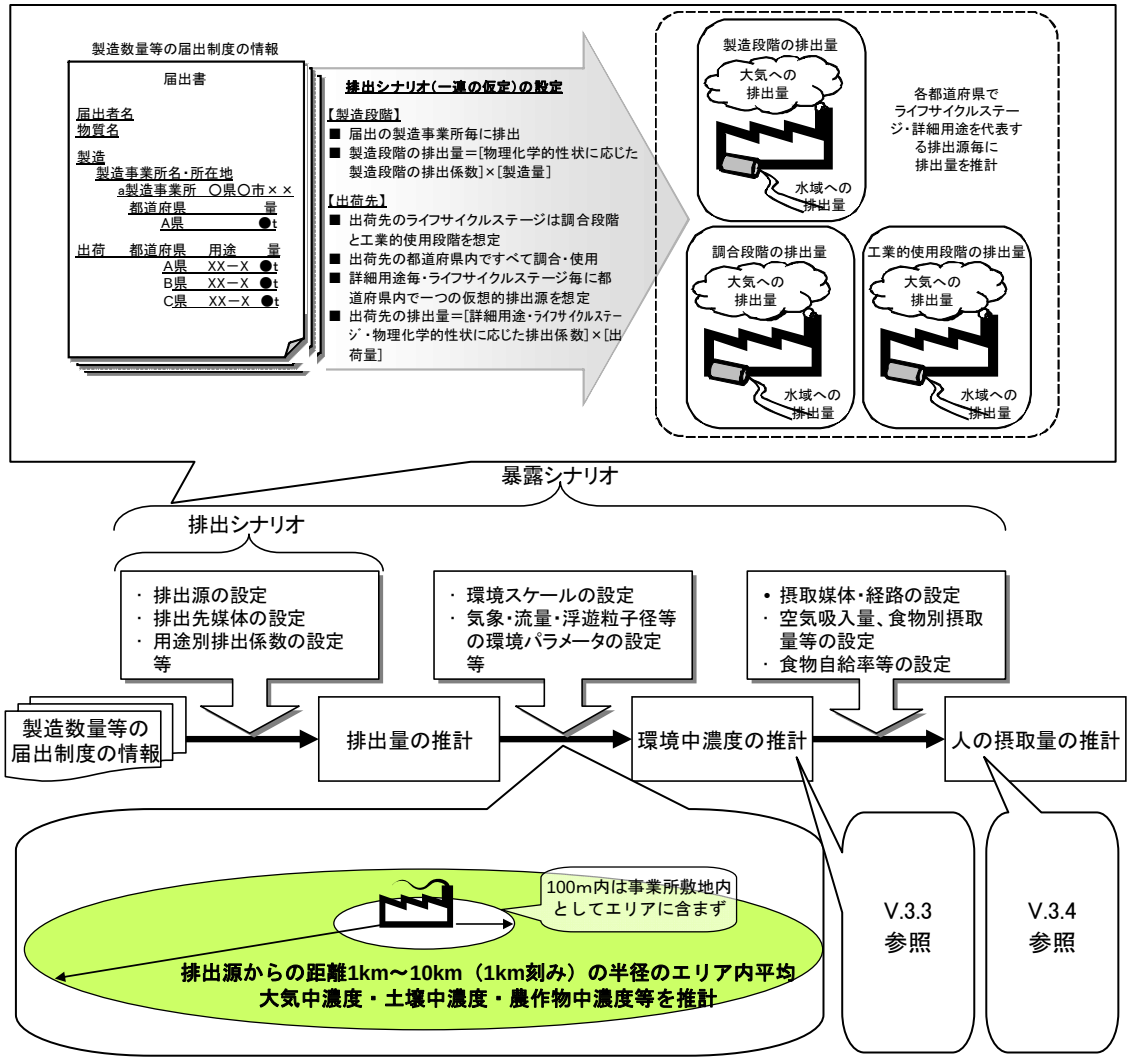
[1] 排出源から半径 100m 以内を除いたのは、事業所等の排出源の敷地境界内と想定したためである。
[2] 長期毒性に関する化審法上の文言は「継続的に摂取される場合には人の健康を損なうおそれがあるものであること」又は「継続的に摂取され、又はこれにさらされる場合には生活環境動植物の生息又は生育に支障を及ぼすおそれがあるものであること」である。

間の環境経由の平均暴露濃度の推計では、生活圏を想定するのがふさわしいと考えられる。そこで、ここでは暴露濃度を推計する環境の設定を、排出源から一定の距離の地点ではなく、ある程度の面積を持ったエリアとした。このエリアは、長期（数十年～生涯）にわたってそのエリア内の住民が空気を吸入し、そこで産出される食物等を摂取する空間と想定している。ここで設定した半径 1～10km のエリア面積はおよそ 3 ～300 km² であり、おおむね市区町村程度の大きさである。エリア内の暴露濃度推計手法の考え方は「V.3.3 環境中濃度推計」、推計式の詳細は付属資料 V.7.3 を参照されたい。

(イ)については、排出量を推計する最小単位が都道府県別・詳細用途別であるため、排出量ひいては暴露濃度を推計する範囲は少なくとも都道府県よりは小さく、その中でさらに詳細用途別に分割されるということが想定される。半径 1km～10km のエリアは最大で約 300 km² で、最小の都道府県（約 1900 km² 程度）の数分の 1 程度であり、製造数量等の届出による排出源の単位と整合すると考えられる。

(ウ)については、本シナリオは排出源の周辺における局所的な環境汚染が全国に散在しているという「局所汚染散在タイプ」を対象としている（V.2.8.2 (1)参照）ため、排出源の周辺で、その排出源からの影響を受ける範囲と考えて設定した。化学物質を大気へ排出している排出源からの影響を受ける距離を 1km と設定して濃度推計している例があるため[1]、最小のエリアを半径 1km のエリアと設定した。

[1] 下記の資料によれば、大気汚染防止法における有害大気汚染物質に該当する可能性のある物質のリスク評価にモデル推計値を用いる際、排出源からの距離 1km 地点での濃度を算出している。
環境省（2007）中央環境審議会大気環境部会健康リスク総合専門委員会（第 7 回）配付資料 3-2　有害性大気汚染物質に該当する可能性のある物質のリスク評価に用いるばく露情報について（案）.
(http://www.env.go.jp/council/07air/y073-07/mat03_2.pdf)
環境省（2007)中央環境審議会大気環境部会健康リスク総合専門委員会（第 8 回）議事録.
(http://www.env.go.jp/council/07air/y073-08a.html)



図表 V-7　排出源ごとの暴露シナリオの概要

排出源を中心とした半径 1～10km（1km 刻み）のエリア設定とは、暴露量推計とリスク推計に関して以下のようなことを意味する。

１つの仮想的排出源について、大気への排出分に関し半径 1km のエリア、半径 2km のエリア、…半径 10km のエリアの 10 通りの暴露量を推計する。暴露量は、半径ごとにエリア内平均値として１つ推計する。すなわち、同一エリア内では均一の濃度と仮定している。エリア内の平均濃度は、排出源周辺のエリアをグリッドで区切り、グリッドの格子点ごとに濃度を推計し、エリア内に含まれる全計算地点の濃度の平均値を求めるという方法で計算している（大気中濃度の場合。図表 V-13 参照）。排出源から距離が離れる計算点ほど濃度は低くなるため、エリア内平均濃度も半径の大きなエリアほど低くなる。10 通りのエリア内平均暴露量を推計し、それぞれを有害性評価値と比較することにより、リスク懸念の有無を判定する。例えば、半径 2km のエリア内平均暴露量ではリスク懸念となり、半径 3km のそれではリスク懸念ではなかった場合、その排出源のリスク懸念の影響面積は半径 2km のエリアであると判定する。このようにして、排出源ごとに、リスク懸念の影響面積を決

めるために 10 通りの暴露量を求めている。

以上のような暴露シナリオの設定と暴露量の推計における前提では、エリア内の環境は均一で人の集団も均一と想定している。この暴露評価の結果は、エリア内の平均濃度（実環境では観測され得ない濃度）に暴露され、エリア半径ごとに想定する暴露集団の生活圏の大きさが異なるといったように、抽象性の高い仮想的な推計値である。

Ⅴ.2.9 数理モデルの設定等

排出源ごとの暴露シナリオで使用している環境中濃度等を推計する数理モデル（一連の数式）や排出量推計手法は、新たに開発したものではなく既存のものを利用し、必要に応じて一部手を加えたものである（
図表 Ⅴ-8 参照）[1]。

環境中濃度を推計する数理モデルには、大気中濃度を推計するもの、水中濃度を推計するもの、多媒体間の分配を予測するもの、植物中濃度を推計するものなどがある。これらはそれぞれ、化学物質の環境中での移流や拡散、分配等を記述する一連の数式からなる。手計算の手間の軽減等のために、必要なデータを入力すると結果が出力されるプログラムも数多くあり、各国の化学物質管理制度で利用されているものの多くは無償で公開されている。

環境中濃度等を推計する数理モデルは欧米の化学物質管理制度で使用されてきた各種のモデル、又は同等のタイプの日本版モデルを土台にした。ただし、これらのモデルがプログラム化されたものは使用せず、各種ガイダンス等に記載されている数式を表計算ソフト上で計算できるようにした。デフォルト設定などの変更や、多数の物質の計算を一括処理するバッチ処理を可能にするためである。

以下、Ⅴ.2.9.1 では数理モデル等の推計手法選定の考え方を説明し、Ⅴ.2.9.2 では土台としている数理モデル等を一覧表で示す。

Ⅴ.2.9.1　数理モデル選定の考え方

環境中濃度推計等の手法選定に当たっての視点は以下のとおりである。

(ア) 国内外の化学物質管理制度等における適用実績があるモデルや手法
(イ) 入力パラメータや適用に必要な情報ができるだけ少なくてすむシンプルなモデルや

[1] ただし、排出量推計手法及び大気中濃度・沈着量の推計手法については、EU 等の手法をベースにはしているものの、前者は化審法の製造数量等の届出制度の情報で推計を可能とするため、後者はリスク評価結果を面積表示につなげるために、様々に手を加えており、開発的要素も大きい。排出量推計はⅣ章を参照。大気中濃度・沈着量の推計手法については Ⅴ.3.3.2 と付属資料 Ⅴ.7.3.1 参照。

手法

(ア)に関しては、科学的な手法としての根拠がさかのぼれ、一定の妥当性が認められている手法の中から選定することで、行政判断の根拠とするリスク評価手法の透明性・信頼性を担保することを意図している。

(イ)に関しては次のような理由による。環境中濃度を推計する数理モデルには、単純なものから複雑なものまで様々存在する。最も単純なものの１つは単純希釈モデルで、濃度＝[ある空間中の化学物質の量]／[空間の体積]である。複雑なものでは、場所ごとや時系列の変化を再現するために多くのパラメータが必要となる。

数理モデルの選択に関連して、OECD のマルチメディアモデルの利用に関するガイダンス[1]では「複雑なモデルは正確さ（accuracy）が高まり得るが、入力に必要な適切なデータがなければ、正確でもなければ信頼性もない」と述べられている。また、「モデルの利用者がモデルを選択する際に左右される要因は、モデルに必要なデータと、入手できるデータの量及びその正確さとの兼ね合いである」とも述べられている。すなわち、モデルに入力するための正確なデータが得られないのに複雑なモデルを選択しても、その予測結果は正確さも信頼性もないということである。モデルに入力するデータのうち化審法の制度上得られるものは限定的であることに注意が必要である。

入力するデータの少ない単純なモデルについては、予測結果の正確さ（現実をどのくらい再現するか）は期待できないが、使い方次第で信頼性（confidence）を確保しうると言われている [1]。例えばリスク評価で通常行われるように、安全側（conservative）の仮定を設定し、パラメータに最大値を用いる等により、予測結果が現実（の暴露濃度など）よりも大きくなるようにすることで、フォールスネガティブ（リスクがあるのにないという結果になる）を避けるという信頼性を確保することなどである。

本スキームでは、環境中濃度推計を最も左右する排出量推計において安全側に排出係数や排出シナリオを設定している部分は、比較的単純なモデルで多くの仮定を重ねながらも、過小評価を避けるという信頼性を確保しているということができる。

このように、目的に沿ったモデルを選択したり、モデルを用いたリスク評価結果を適切に解釈したりするためには、モデルの骨格、モデルに必要な入力データの種類、実測値との比較による推計精度等、モデルの特徴をよく認識して用いることが重要である。

V.2.9.2　数理モデル等の一覧

排出源ごとの暴露シナリオで利用している数理モデル等を
図表 V-8 に整理した。各手法の詳細については表中に示した参照先を参照されたい。

[1] OECD (2004)　OECD Series on Testing and Assessment No. 45, ENV/JM/MONO(2004)5,　Guidance document on the use of multimedia models for estimating overall environmental persistence and long-range transport.[1] OECD (2004) 5.2.2. Factors to consider when selecting a model. pp.52-54.

1

2 **図表 V-8　排出源ごとの暴露シナリオで土台としている数理モデル等**

推計手法	土台とした数理モデル等	土台にした数理モデル等の概要	本シナリオ用に変更した点	参照先【付属資料】
大気中濃度推計	REACH-TGD [1] や E-FAST[2]の排出源周辺の大気濃度推計式の手法	・大気拡散モデルであるプルームモデルのパラメータのデフォルト設定による排出源から 100m地点濃度の簡易推計式（単位排出量の濃度換算係数）	・単位排出量を排出源から半径 1～10km(1km 刻み)ｴﾘｱ平均濃度に換算する係数を日本の気象条件(10 年分約 800 地点分)のｼﾐｭﾚｰｼｮﾝにより導出 ・沈着による減少後の大気中濃度を推計	V.3.3.2 (1) 【V.7.3.1 (1)】
大気からの沈着量推計	MNSEM2 [3]（ガス態の乾性沈着、粒子吸着態の乾性沈着、粒子吸着態の湿性沈着、ガス態の湿性沈着）、ダイオキシン類の解析（大気からの降下量推計方法）[4]	・粒子吸着態の乾性沈着：ストークスの式 ・ガス態の乾性沈着：土壌と大気境界の二薄膜理論による速度式 ・粒子吸着態の湿性沈着：浮遊粒子の洗浄比（捕集率）は定数 ・ガス態の湿性沈着：ガス態の洗浄比は無次元ヘンリー係数の逆数で推定 ・大気からの降下量：乾性沈着は高度付近の濃度×降下量、湿性沈着は大気柱中の存在量×雨滴の通過時間（＝大気中の平均濃度×降雨量）	・降雨時と晴天時に分けて沈着量を推計 ・評価エリアでの沈着量の総量が大気への排出量を超えないよう補正係数を設定 ・湿性沈着量推計に用いる大気柱中での平均濃度は 1.5m の高度の濃度から推計	V.3.3.2 (2) 【V.7.3.1 (2)】
土壌中濃度推計	REACH-TGD の排出源周辺の土壌中濃度推計方法、MNSEM2 の消失速度	・排出源からの大気排出→拡散→排出源周辺土壌への沈着の経路で化学物質のインプットがある土壌区画の物質収支式 ・農作物と畜産物濃度推計につながるもの	排出源からの距離や範囲、排出年数の設定等	V.3.3.3 (1) 【V.7.3.2 (1)】
河川水中濃度推計	REACH-TGD や E-FAST の事業所排出による河川水中濃度推計式	基本的には化学物質排出量を流量で除す単純希釈式で、REACH-TGD では懸濁粒子への吸着を加味	・日本の河川流量から流量デフォルト値を設定	V.3.3.6 (1) 【V.7.3.5 (1)】

[1] ECHA (2010) Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter R.16: environmental exposure estimation, Version: 2.

[2] E-FAST (Exposure and Fate Assessment Screening Tool)：U.S. EPA で TSCA の新規化学物質の上市前届出(PMN)の審査において使用されている暴露評価システムで、複数の濃度推計モデルを搭載している。
(http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/efast.htm)

[3] MNSEM2 (Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model ver.2：日本版マルチメディアモデルで株式会社三菱安全科学研究所により開発された。環境媒体間の分配のほか、人の摂取量を推計するために農作物・畜産物中濃度推計モデルも組み込まれている。
株式会社三菱化学安全科学研究所 (1998) Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model version 2.0 ユーザーズマニュアル.
Yoshida, K., Shigeoka, T. and Yamauchi, F. (1987) Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model for evaluation of environmental fate of organic chemicals, Toxicol. Environ. Chem., 15(3), 159-183.

[4] 中西準子, 益永茂樹, 松田裕之編『演習　環境リスクを計算する』pp.105-117. 岩波書店,

推計手法	土台とした数理モデル等	土台にした数理モデル等の概要	本シナリオ用に変更した点	参照先【付属資料】
海水中濃度推計	REACH-TGD の海水中濃度推計式	化学物質排出量を希釈率で除す単純希釈式で REACH-TGD のデフォルト希釈率は 100	河川→海域の希釈率を 10 として上記デフォルト流量×10 と設定	V.3.3.6【V.7.3.5 (2)】
底質中濃度推計	REACH-TGD の底質中濃度推計式	新たに堆積した底質中の化学物質濃度を底質に対する PEC とみなして推算するもの	なし	V.4.8.2【V.7.3.5 (3)②】
地上部の農作物中濃度推計	農作物を Exposed と Protect に分類（HHRAP[1]） Trapp ら[2]の方法(大気ガス態および土壌経由) McKone ら[3]の方法(大気粒子態経由) (EUSES[4] 等採用)	大気相ガス態および土壌経由：根からの取込や大気中ガス態の沈着などを考慮するコンパートメントモデル 大気相粒子吸着態経由：粒子態の沈着と風化による消失を推算するもの	大気相ガス態および土壌経由： ・農作物の栽培期間を考慮して 60 日目の濃度を計算 ・農作物表皮への分配を考慮、ただし牧草については考慮せず（HHRAP） ・土壌からの吸収について分配係数をその相関式の logPow の定義域で制限（HHRAP） 大気相粒子吸着態経由： ・農作物の栽培期間を考慮して、60 日目の濃度を計算	Exposed：V.3.3.4 (2)【V.7.3.3 (2)】 Protected：V.3.3.4 (3)【V.7.3.3 (3)】
地下部の農作物中濃度推計	Briggs らの方法 (MNSEM2,HHRAP 採用)	魚の BCF に該当する地下部農作物への濃縮係数(RCF)を logPow との相関式から推算するもの	・相関式の logPow の定義域で制限（HHRAP） ・農作物表皮への分配を考慮（HHRAP）	V.3.3.4 (1)【V.7.3.3 (1)】
畜産物中濃度推計	Travis ら[5]の方法（EUSES, MNSEM2 採用）	牧草・大気・土壌から畜産物への濃縮係数 BTF（魚の BCF に相当）を logPow との相関式から推算するもの	相関式の logPow の定義域で制限	V.3.3.5【V.7.3.4 】
魚介類中濃度推計	REACH-TGD や E-FAST の魚類濃度推計式	水中溶存態濃度に生物濃縮倍率を掛けるもの	なし	V.3.3.6 (2)【V.7.3.5 (2)】あ

V.3 暴露評価 I

V.3.1 はじめに

本節では、暴露評価 I の全体像と各ステップ間の関係、各種の推計における考え方を解

1 U.S. EPA (2005) Human health risk assessment protocol for hazardous waste combustion facilities, EPA530-R05-006.
2 Trapp, S. and Matthies, M. (1998) 9.3 PLANT Model.In: Trapp, S. and Matthies, M., Chemodynamics and environmental modeling, Springer, pp.118-123.
3 McKone, T.E. and Ryan, P.B. (1989) Human exposure to chemicals through food chains: an uncertainty analysis. Environ. Sci. Technol., 23(9), 1154-1163.
4 EC (2008) EUSES 2.1 background report: chapterIII model calculations. (http://ihcp.jrc.ec.europa.eu/our_activities/public-health/risk_assessment_of_Biocides/euses/EUSES_2.1/EUSES_2.1_documentation/EUSES_2.1_Chapter_III_Model_Calculations.doc)
5 Travis, C.C. and Arms, A.D. (1988) Bioconcentration of organics in beef, milk, and vegetation. Environ. Sci. Technol., 22(3), 271-274.

説する。

暴露評価Ⅰでは、製造数量等の届出情報を用いて、優先評価化学物質（人健康）の場合には摂取量、優先評価化学物質（生態）の場合には PEC[1]（水生生物が対象であるので水中濃度）の推計を行う。これらの推計値を、次のステップで有害性評価値（人健康の場合）や PNEC（生態の場合）と比較して、リスク推計Ⅰを行うことになる。

なお、排出量推計の詳細はⅣ章に記載し、環境中濃度・暴露量推計の具体的な計算式やデフォルト値等は V.7 付属資料に収載している。

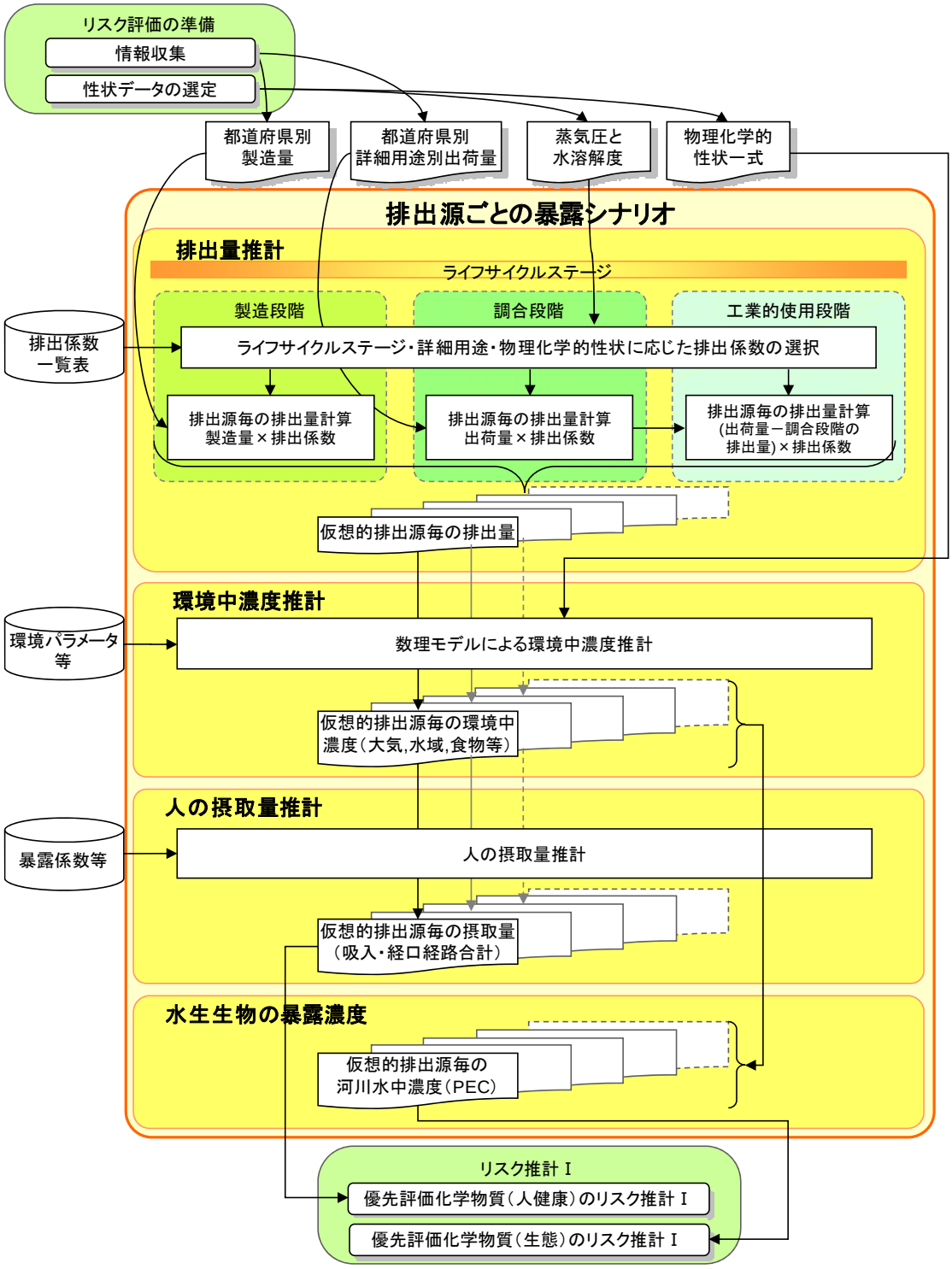
V.3.2 暴露評価Ⅰのフロー

暴露評価Ⅰのフローを図表 V-9 に示す。このフローでは V.2.7 の図表 V-4 で示した暴露評価の構成要素のうち、評価を行う年度のたびに実施する排出量推計（3-d）、環境中濃度推計（4）、摂取量推計（5）の部分を示している。

暴露評価は評価Ⅰ～Ⅲを通じ、予め設定したシナリオに沿った数理モデルを使って推計することが基本となる。これまでに、評価Ⅰ～Ⅲに共通した暴露評価における基本的な前提については V.2.2～V.2.7 で、暴露シナリオの設定を V.2.8 でそれぞれ説明した。また、使用する数理モデルについては V.2.9 で概説した。

V.3.3～V.3.4 では、評価手法について、図表 V-9 のフローに沿って環境中濃度の推計及び人の摂取量の推計について順に説明する。V.3.5 で生態に係る暴露評価Ⅰについて人健康と扱いが異なる部分について述べ、V.3.6 では、「構造不定の環境分配モデル適用物質」や「環境分配モデル適用外物質」と分類された物質について環境中濃度の推計手法等を説明する。

1 PEC：予測環境中濃度。Predicted Environmental Concentrasion の略。



図表 V-9　暴露評価Ⅰのフロー

V.3.3 環境中濃度推計

ここでは、環境中の媒体別の濃度推計手法について、ステップごとの関係に言及しつつ基本的な概念を説明する。

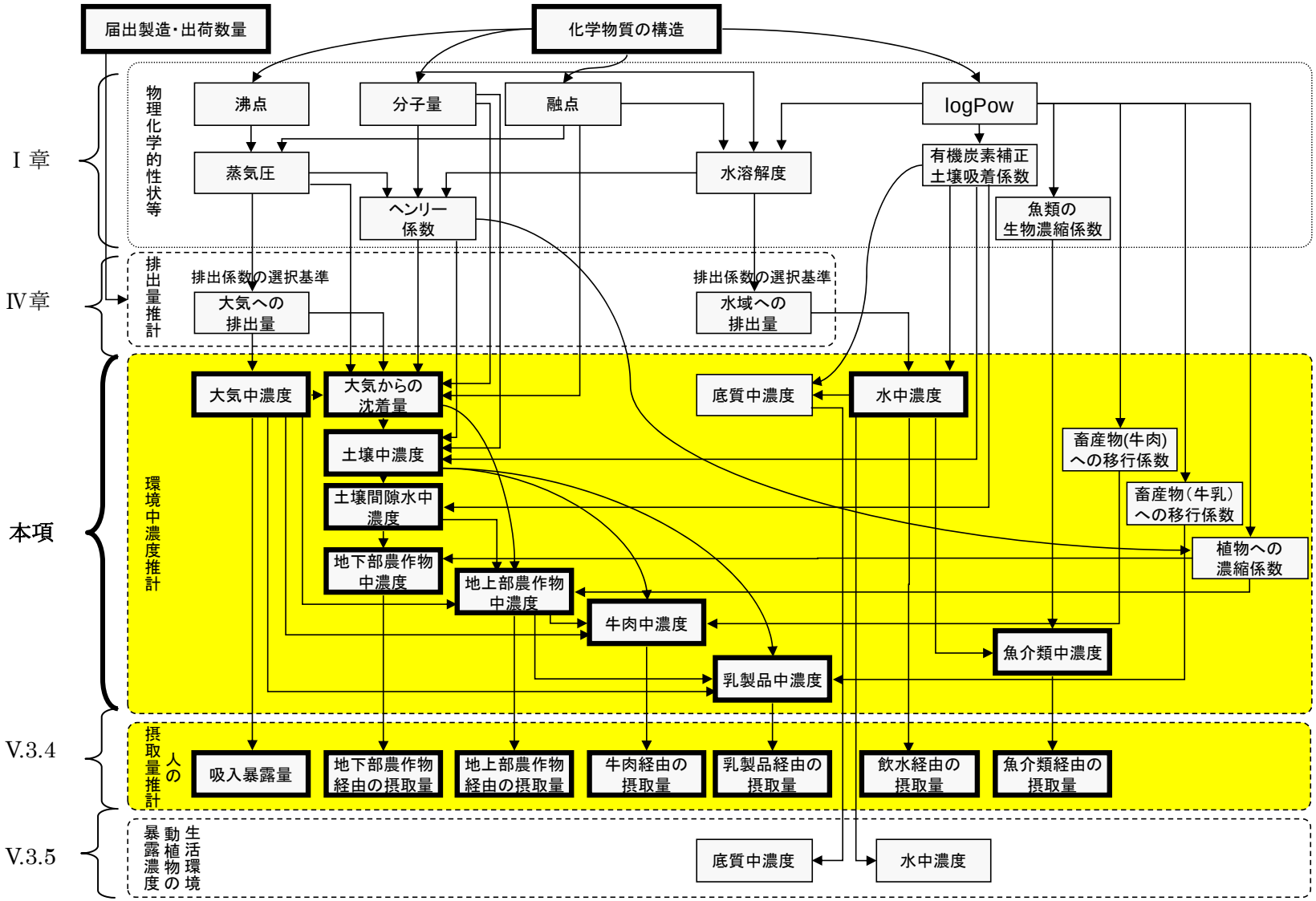
環境中濃度は、数理モデルに評価対象物質の物理化学的性状等と排出量を入力して推計する。数理モデルは暴露シナリオに沿って選定・設定している。したがって、本項は「V.2.8.2 暴露シナリオの設定」の続きであり、評価の準備（Ⅰ章）で得られる物理化学的性状等と排出量推計（Ⅳ章）の方法で得られる排出量が入力値となる。

なお、具体的な計算式とデフォルト値、その設定根拠等については V.7 付属資料に収載している。

V.3.3.1　環境中濃度推計の全体の流れ

暴露評価Ⅰにおける環境中濃度推計の全体フローを図表 V-10 に示す。この図では、矢印の終点の項目の推計に、矢印の始点の項目が入力値になっていることを表現している。

図表 V-10 に示した食物を含む環境媒体（太線で表示）ごとの濃度推計手法を V.3.3.2 から V.3.3.6 まで説明する。

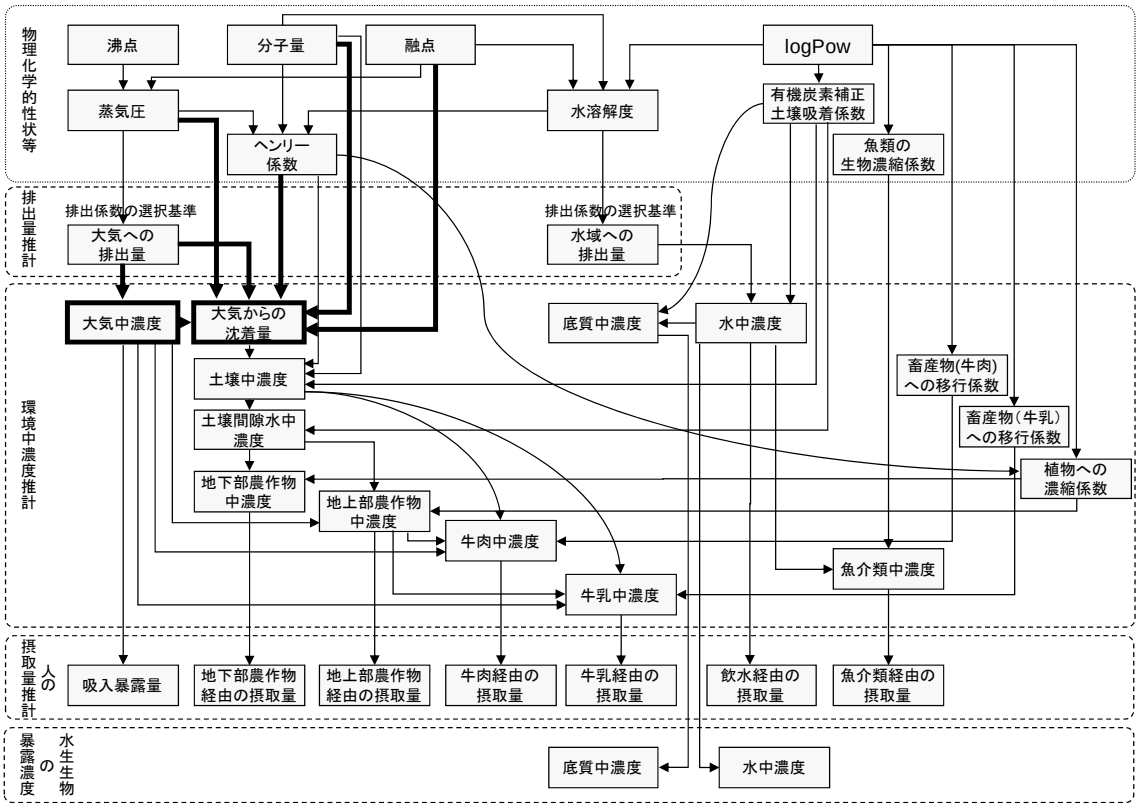


図表 V-10　環境中濃度推計の全体フロー

V.3.3.2　大気中濃度と沈着量の推計

ここで説明する部分を図表 V-11 に太線で示す。

詳細は付属資料 V.7.3.1 を参照されたい。



図表 V-11　大気中濃度・沈着量の推計の相互関係（太線部分）

ここでは以下の濃度の推計手法を説明する（図表 V-11 に太字で示す部分）。

- 大気中濃度　　（排出源から半径 1～10km の評価エリア平均濃度）
- 大気からの沈着量　（上記評価エリアの単位面積・単位時間当たりの地上への沈着量）

大気中濃度と沈着量を推計するために、化学物質に係るパラメータとして以下の数値が必要である。

- 大気への排出量　　（排出量推計（Ⅳ章）の手法で推計）
- 化学物質の物理化学的性状　　（分子量、融点、蒸気圧、ヘンリー係数）

大気中濃度は人の吸入暴露量の推計（V.3.4）に用いるほか、地上部農作物と畜産物に取り込まれる量の元となる。大気からの沈着量は土壌中濃度推計（V.3.3.3 ）に用いる。

(1) 大気中濃度

大気中濃度は、排出源からの大気への排出量を用い以下の式で求める。大気から土壌への沈着によって大気から化学物質が除去され、大気中濃度が減少することも考慮した式 V-8 を暴露量の推計に用いる。

大気中濃度（沈着による減少を考慮する前）＝大気濃度換算係数×大気への排出量　式 V-7

大気中濃度（沈着による減少を考慮した後）　式 V-8

＝大気中濃度（沈着による減少を考慮する前）×沈着による補正係数

大気中濃度（沈着による減少を考慮する前）
：排出源を中心とした評価エリア内平均の地上 1.5m の濃度 。土壌への沈着を考えない場合の濃度[mg/m^3]

大気中濃度（沈着による減少を考慮した後）
：排出源を中心とした評価エリア内平均の地上 1.5m の濃度 。土壌への沈着による大気中濃度の減少を考慮[mg/m^3]

大気への排出量　：排出源からの大気への排出量
[t/year]

大気中濃度換算係数　：単位排出量 1[t/year]を評価エリア内平均大気中濃度に換算する係数（評価エリア半径ごとに 1 つずつ、図表 V-12 の値を設定）
[(mg/m^3)／(t/year)]

沈着による補正係数　：大気から土壌への沈着による大気中濃度の減少を考慮する項（V.3.3.2 (2)式 V-17 で後述）
[無次元]

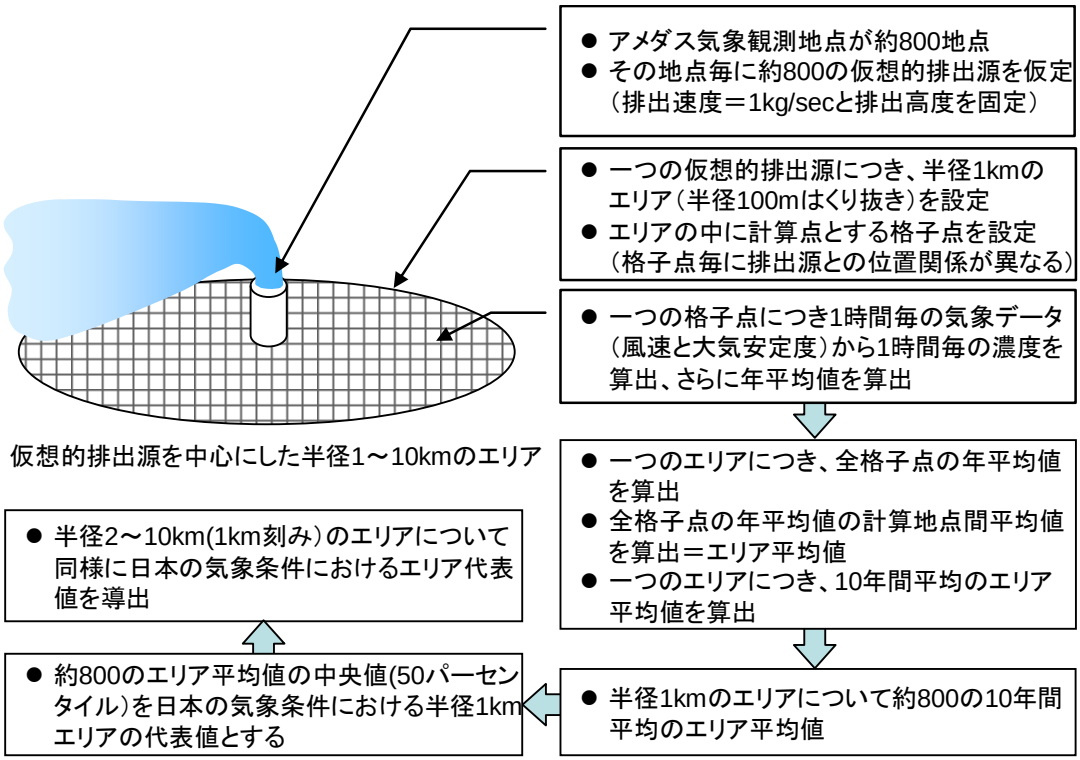
図表 V-12　大気中濃度換算係数

評価エリア半径 [km]	大気中濃度換算係数 [mg/m^3／(t/year)]
1	1.8×10^{-4}
2	7.5×10^{-5}
3	4.1×10^{-5}
4	2.9×10^{-5}
5	2.0×10^{-5}
6	1.6×10^{-5}
7	1.2×10^{-5}
8	1.0×10^{-5}
9	8.4×10^{-6}
10	7.2×10^{-6}

この手法で求める大気中濃度は、仮想的排出源からの大気への排出が一定速度の下での

評価エリア内平均濃度である。気象条件は、日本の気象条件のうち、長期的・全国的にみて平均的な条件を設定している。

ある点源からの化学物質の排出による大気中濃度は、排出量と排出条件（排気ガス温度、排出高度など）、排出源との空間的位置関係、気象条件（風速と大気安定度）によって変化する。本シナリオでは、V.2.8.2 に示した暴露シナリオに沿った大気の暴露濃度―すなわち排出源を中心として設定したエリア内に居住する住民が暴露される濃度の長期平均値―を推計するために、大気中濃度換算係数を、過去 10 年間、全国約 800 地点分のアメダス気象観測データを用い、大気中濃度推計モデル METI-LIS を適用[1]してあらかじめ導出して利用している。この導出方法の概念を図表 V-13 に示す。



図表 V-13　大気中濃度換算係数の導出方法

(2) 沈着量

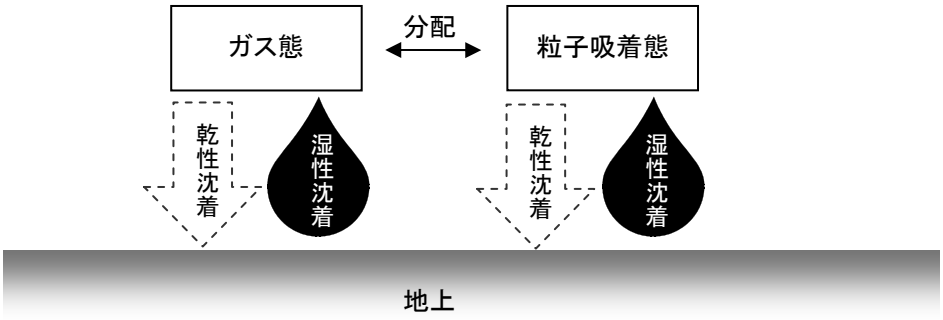
化学物質が大気から地上へ沈着する量の推計では、以下のことを仮定している。

・ 大気へ排出された化学物質はガス態と粒子吸着態（浮遊粒子に吸着した状態）で存在

[1] METI-LIS は、事業所などの点源から排出される化学物質がその地域の気象条件に応じて周辺に拡散する状況を解析するもので、対象範囲は 10km 以内（半径 5km）が目安とされている。
中西準子，花井荘輔，東野晴行，吉門洋，吉田喜久雄（2007）『リスク評価の知恵袋シリーズ１　大気拡散から暴露まで ADMER・METI-LIS』丸善株式会社.

し、分配平衡にある。

- 大気中の化学物質が地上へ沈着する機序には、ガス態・粒子吸着態が重力や拡散等により沈着する「乾性沈着」と、雨水に取り込まれ降雨により沈着する「湿性沈着」がある。
- 降雨時には乾性沈着と湿性沈着の両方が起き、雨が降らない晴天時には乾性沈着だけが起きる。



図表 V-14　大気から地上への化学物質の沈着の機序

沈着量は単位面積・単位時間当たり沈着する量（単位は mg/m²/day など）で表す。地表付近（1.5m）の大気中濃度を $C(1.5)_0$、大気柱中濃度（後述）Ca_0 を用いて、図表 V-14 に示す機序ごとに沈着量を以下の式で求める。

なお、以下でガス態の洗浄比とは雨水中のガス態濃度と大気中のガス態濃度の比であり、粒子吸着態の洗浄比とは雨水中の粒子吸着態濃度と大気中の粒子吸着態濃度の比である。

ガス態乾性沈着量＝$C(1.5)_0$×ガス態の比率×ガス態沈着速度　式 V-9

粒子吸着態乾性沈着量＝$C(1.5)_0$×粒子吸着態の比率×粒子吸着態沈着速度　式 V-10

ガス態湿性沈着量＝Ca_0×ガス態の比率×ガス態の洗浄比×降水量　式 V-11

粒子吸着湿性沈着量＝Ca_0×粒子吸着態の比率×粒子吸着態の洗浄比×降水量　式 V-12

Ca_0= $C(1.5)_0$**×大気柱中濃度への換算係数**　式 V-13

$C(1.5)_0$ には大気中濃度（沈着による減少を考慮する前）である V.3.3.2 (1)の式 V-7 を用いる。沈着による減少を考慮した後の式 V-8 を用いないのは、最後にまとめて考慮するためである（後述の式 V-16）。

湿性沈着を考える場合、雨は地表面から十分に高い所から降ってくるため、湿性沈着量推計に用いる大気中濃度は $C(1.5)_0$ のような地表付近の濃度ではなく、十分に高い所までの平均濃度を用いることが適当である。本手法では十分に高い大気の柱を考え、その中の平均濃度 Ca_0 を求めることにした。式 V-13 の大気柱中濃度への換算係数とは Ca_0 と $C(1.5)_0$ の比であり、定数（排出量や評価エリア半径にもよらない）としている。

なお、式 V-9～式 V-12 でのガス態の比率及び粒子吸着態の比率は、正確には降雨時と晴天時で異なり別々の値を推計に用いるため、以下の説明ではガス態乾性沈着量（降雨時）

等と表記する。

晴天時には湿性沈着が起きないと考えて、晴天時と降雨時で分けて総沈着量を以下の式で求める。

降雨時の総沈着量＝ガス態乾性沈着量（降雨時）＋粒子吸着態乾性沈着量（降雨時）＋ガス態湿性沈着量＋粒子吸着態湿性沈着量　式 V-14

晴天時の総沈着量＝ガス態乾性沈着量（晴天時）＋粒子吸着態乾性沈着量（晴天時）　式 V-15

最後に、上記 2 式の値を 1 年間の降雨の割合で平均化して以下の式で総沈着量を求める。この式の値が土壌への化学物質の入力値になる。

総沈着量＝降雨の割合×降雨時の総沈着量×降雨時の沈着の補正係数＋晴天の割合×晴天時の総沈着量×晴天時の沈着の補正係数　式 V-16

式 V-16 における沈着の補正係数とは、総沈着量を過大評価しないようにして乗じられる値である。これは以下の推計上の技術的な理由により作られた係数である。

$C(1.5)_0$ は大気中濃度換算係数と大気への排出量で決まる（式 V-7）。大気柱中濃度への換算係数が定数のため、Ca_0 も大気中濃度換算係数と大気への排出量で決まる（式 V-13）。大気中濃度換算係数は評価エリア半径によって 1 つに決まる値（V.3.3.2 (1)の図表 V-12 参照）であり、沈着による濃度の減少を考慮していない値である。沈着量があまり大きくない物質であればこれでも問題ない。しかし、例えばヘンリー係数が極端に小さい物質の場合、本手法ではガス態の洗浄比（式 V-11）を無次元ヘンリー係数の逆数で推計する（付属資料 V.3.3.2 (2)参照、これ自体は一般的な手法である）ため、洗浄比が極端に大きい値となり、Ca_0 は沈着によって減少しない値のため、式 V-11 からガス態湿性沈着量が非常に大きくなってしまう。場合によっては評価エリア内の沈着量の総量が大気への排出量を超えてしまうことがある。このような現象を防ぎ、物質収支を保つために補正係数を乗じることにした。この係数の導出等は付属資料 V.7.5.1 を参照されたい。

この補正係数を降雨の割合で平均化した値を以下の式で求める。

沈着による補正係数＝降雨の割合×降雨時の沈着の補正係数＋晴天の割合×晴天時の沈着の補正係数　式 V-17

前式の値を大気中濃度換算係数に乗じる（式 V-7）ことで、近似的[1]ではあるが、沈着に

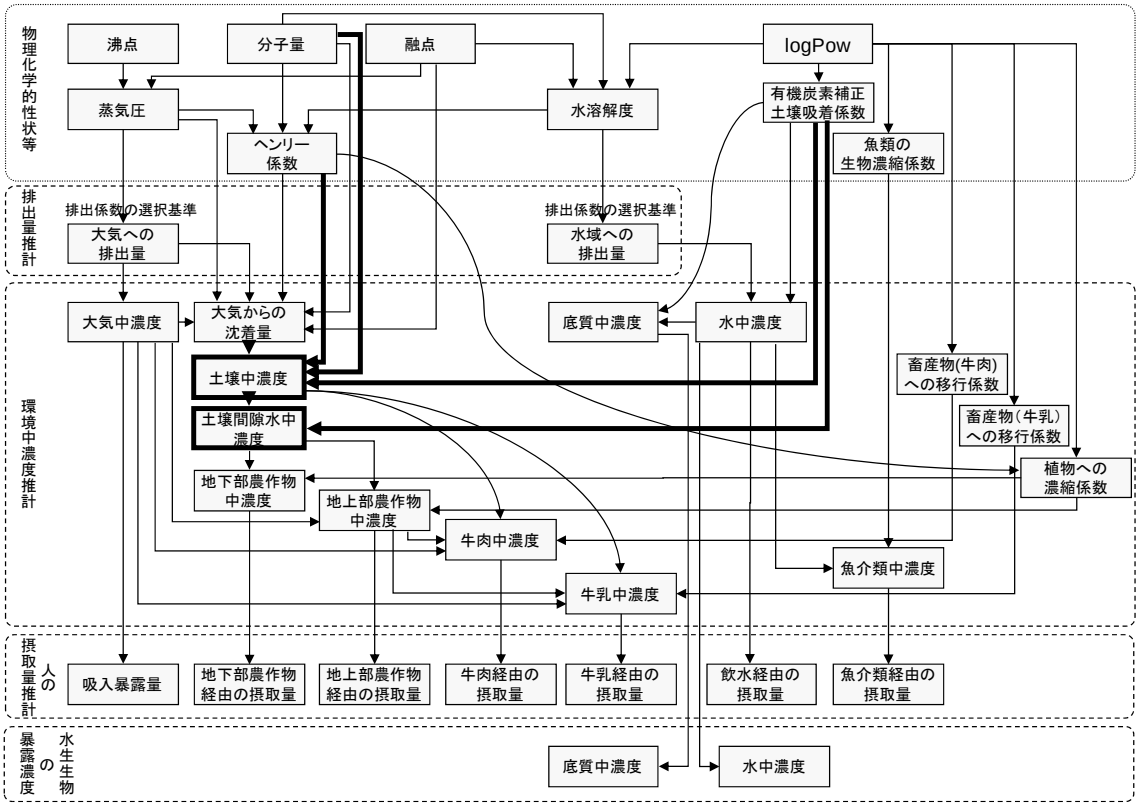
[1] 正確には大気と土壌の間で物質収支の連立方程式を解いて大気中濃度と土壌中濃度を一緒に求める必要があるが、大気中濃度は METI-LIS を使って先に求めているため、そのようにはなっていない。

よる減少を考慮した大気中濃度を推計する。

V.3.3.3　土壌中濃度と土壌間隙水中濃度の推計

ここで説明する部分を図表 V-15 に太線で示す。

詳細は付属資料 V.7.3.2 を参照されたい。



図表 V-15　土壌中及び土壌間隙水中濃度の推計の相互関係（太線部分）

ここでは以下の濃度の推計手法を説明する（図表 V-15 に太字で示す部分）。

- 土壌中濃度　　（排出源から半径 1～10km のエリア平均の土壌中濃度）
- 土壌間隙水中濃度　（上記土壌のエリア平均の間隙水中濃度）

これらの濃度を推計するために、化学物質に係るパラメータとして以下の数値が必要である。

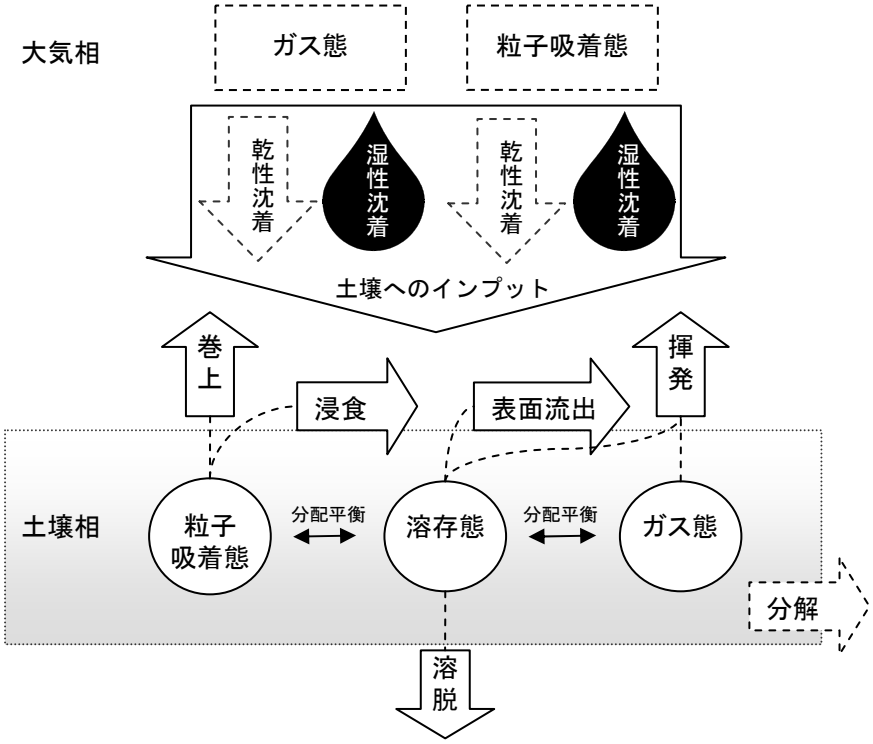
- 大気からの沈着量　　（V.3.3.2 (2)で推計）
- 化学物質の物理化学的性状　　（分子量、ヘンリー係数、有機炭素補正土壌吸着係数）

土壌中濃度は、土壌間隙水中濃度の推計と畜産物中濃度の推計の入力値となる。土壌間隙水中濃度は農作物中濃度推計（V.3.3.4 ）に用いる。

(1) 土壌中濃度

化学物質の土壌中濃度・土壌間隙水中濃度の推計では、以下のことを仮定している。

- 土壌は土壌粒子、水、空気から構成される。
- 土壌中の化学物質は粒子吸着態（土壌粒子に吸着した状態）、溶存態、ガス態で存在し、図表 V-16 に示すような分配平衡にある。
- 土壌への化学物質の入力は大気からの沈着のみである。
- 土壌のある区画から化学物質が消失する機序には揮発、分解、表面流出、溶脱、侵食、巻上げがある。



図表 V-16　土壌中の化学物質の挙動と物質収支

ここで、ある土壌の区画の中の化学物質の物質収支は以下の式で表せる。

土壌中濃度の変動
＝大気から土壌への総沈着量（土壌の単位重量当たり）
　－揮発、分解、表面流出、溶脱、浸食、巻上げによる土壌からの消失量
　（土壌の単位重量当たり）　　式 V-18

この物質収支を微分方程式で表し、その解となる土壌中濃度を導く式を用いて、土壌中濃度の 10 年間の平均値を算出している。土壌に流入する化学物質は、V.3.3.2 (2)で求めた

沈着量の合計であり、評価エリア（排出源から半径 1～10km のエリアで 1km 刻みに 10 通りある）の大きさによって異なることになる。ここで求める土壌中濃度は、仮想的排出源からの大気への排出速度が一定の下で評価年度から 10 年間の期間平均値である評価エリア内平均濃度（粒子吸着態、溶存態、ガス態合計）である。

土壌から化学物質が消失する 6 種類の機序は、図表 V-16 に示すとおり土壌中の化学物質の存在形態ごとに異なる。この 6 種類のうち、分解のみが物質自体が消失する機序であり、それ以外の 5 種類は他の媒体や対象区画外へ移行する機序である。

それぞれの概略は以下のとおりである。

① 揮発

土壌相のガス態と溶存態から大気相への揮発・蒸発を考える。揮発に対する一次速度定数は、土壌相のガス態から大気相、土壌相の溶存態から大気相への分子拡散を仮定し、化学物質の分子量・ヘンリー係数・有機炭素補正土壌吸着係数を用いて求める。

② 分解（生分解と非生物分解）

土壌相の分解は生分解と非生物分解が考えられる。ここでは非生物分解として加水分解を想定する。ただし、暴露評価Ⅰでは分解は考慮しないため、分解の速度定数ををゼロとしている。

暴露評価Ⅱを行う際には環境中での分解速度（又は半減期）の情報を収集し、濃度推計に加味することとしている。詳しくは V.4.5.4 を参照。

③ 表面流出

土壌相の溶存態の降水による地表面での流出を考える。表面流出に対する一次速度定数は、降雨のうち表面流出する水量の割合や土壌の組成等（いずれもデフォルト値として設定）から求め、化学物質の性状に依存しない定数として設定している。

④ 溶脱

降水が土壌中の空隙を鉛直方向に浸透するのに伴う土壌相の溶存態の移送を考える。溶脱に対する一次速度定数は、降雨のうち浸透する水量の割合や土壌の組成等（いずれもデフォルト値として設定）から求め、化学物質の性状に依存しない定数として設定している。

⑤ 浸食

土壌相の粒子吸着態の降水による輸送を考える。浸食に対する一次速度定数は、土壌浸食速度と土壌の組成等（いずれもデフォルト値として設定）から求め、化学物質の性状に依存しない定数として設定している。

⑥ 巻上げ

土壌相の粒子吸着態の風による大気相への移行を考える。巻上げに対する一次速度定数は、大気からの浮遊粒子沈着と量的に釣り合いがとれているという仮定の下、大気中浮遊粒子の濃度と降下速度、土壌の組成等（いずれもデフォルト値として設定）から求め、化学物質の性状に依存しない定数として設定している。

(2) 土壌間隙水中濃度

土壌間隙水中濃度は、土壌中の化学物質が図表 V-16 に示すような分配平衡にあるという仮定の下、前述の(1)で求める土壌中濃度と、粒子吸着態と溶存態との分配係数から下式のように求める。土壌-水分配係数の算出には化学物質の有機炭素補正土壌吸着係数・ヘンリー係数を用いる。

土壌間隙水中濃度＝（土壌中濃度×土壌バルク密度）／土壌−水分配係数　　式 V-19

V.3.3.4　農作物中濃度の推計

ここで説明する部分を図表 V-17 に太線で示す。
詳細は付属資料 V.7.3.3 を参照されたい。

ここでは以下の 3 種類の農作物中濃度の推計手法を説明する（図表 V-17 に太字で示す部分）。
地上部農作物は、可食部が地上にあり、葉菜等丸ごと食する農作物（トマト、キャベツ、ほうれん草等）と、可食部が地上にあり、表皮は食しない農作物（米、豆類、バナナ、みかん等）の 2 種類に分けて濃度を推計する。前者を「地上部農作物（Exposed）」、後者を「地上部農作物（Protected）」と表記する。これらはいずれも評価エリア（排出源から半径 1～10km のエリアで 1km 刻みに 10 通りある）で産出される作物中の濃度である。

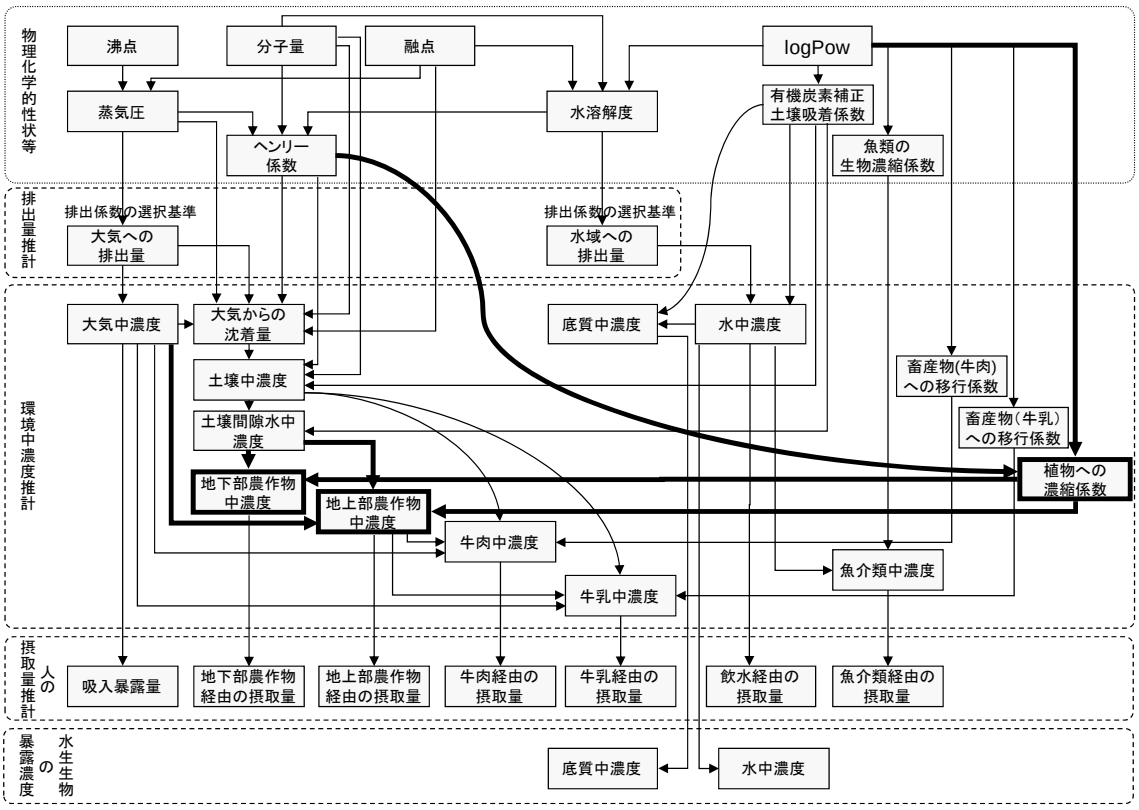
- 地下部農作物中濃度　（可食部が地下にある農作物）
- 地上部農作物中濃度（Exposed）（可食部が地上にあり、葉菜等丸ごと食する農作物と牧草）
- 地上部農作物中濃度（Protected）　（可食部が地上にあり、表皮は食しない農作物）

これらの濃度を推計するために、化学物質に係るパラメータとして以下の数値が必要である。

- 大気中濃度　（V.3.3.2 (1)で推計）
- 大気中における粒子吸着態とガス態存在割合　（V.3.3.2 (2)で推計）

・　大気からの沈着量　　(V.3.3.2 (2)で推計)
・　土壌間隙水中濃度　　(V.3.3.3 (2)で推計)
・　化学物質の物理化学的性状　　(logPow とヘンリー係数)

上記の各農作物中濃度は人の摂取量の推計（V.3.4）に用いるほか、地上部農作物中濃度（Exposed）は牧草中濃度として畜産物中濃度の推計（V.3.3.5 ）にも用いる。



図表 V-17　農作物中濃度の推計の相互関係（太線部分）

農作物中濃度は人の暴露量推計を大きく左右しうる。しかし、現状ではこの濃度推計手法の精度は限定的である。農作物となる植物は多種多様であり、食する部位も種類により異なり（葉、茎、根、果実)、栽培法により化学物質への暴露状況も異なるため（ハウス栽培など)、数理モデルによる農作物中濃度の推計は概算にすぎないということを念頭におく必要がある[1]。

(1) 地下部農作物中濃度

地下部農作物とは、じゃがいも、にんじん、大根等の可食部が地下にある農作物を想定

[1] EC (2004) EUSES 2.0 background report. II model eescription, p.66. (http://ihcp.jrc.ec.europa.eu/our_activities/public-health/risk_assessment_of_Biocides/euses/EUSES_2.1/EUSES_2.1_documentation/EUSES_2.1_Chapter_III_Model_Calculations.doc)

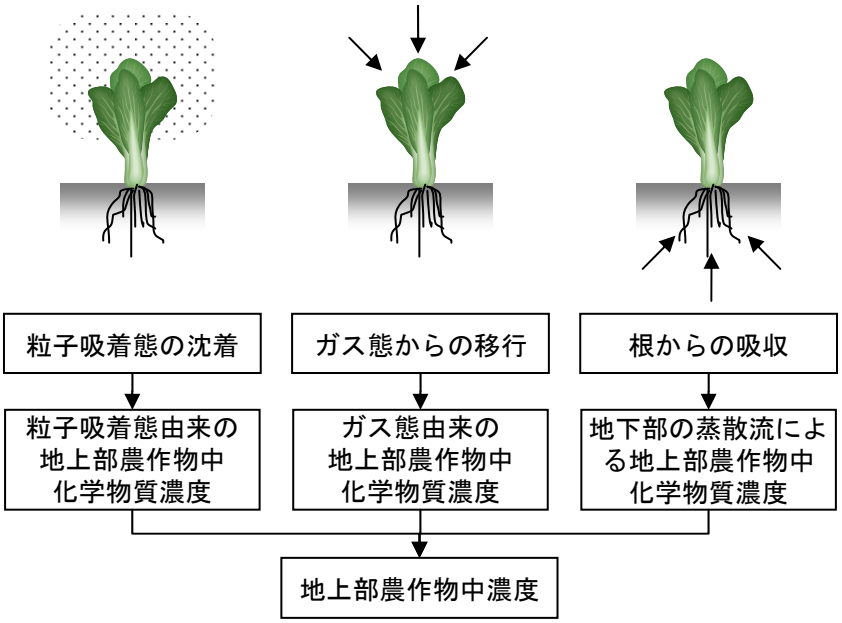
している。地下部農作物中濃度は、土壌間隙水中濃度等を用いて以下の式で求める。

地下部農作物中濃度＝土壌間隙水中濃度×農作物の濃縮係数×補正係数　　式 V-20

この式では土壌中の間隙水と地下部農作物との間で化学物質の分配を仮定している。土壌間隙水中濃度は、仮想的排出源からの大気への排出速度が一定の下で評価年度から 10 年間の期間平均値としての評価エリア内平均濃度である（V.3.3.3 (2)で推計）。農作物への濃縮係数は化学物質の logPow から推計する。補正係数は、根菜等の地下部農作物は表皮を除去して食することを考慮した可食部への化学物質の分配比率に相当するものである。

(2) **地上部農作物中濃度**（Exposed）

地上部農作物（Exposed）は、トマトやキャベツ、ほうれん草等の可食部が地上にあり、葉菜等丸ごと食する農作物と牧草を想定している。これらは図表 V-18 に示す 3 つの経路で化学物質を取り込むと仮定している。



図表 V-18　地上部農作物の化学物質の取込経路

地上部農作物（Exposed）中濃度は以下の式で求める。

地上部農作物（Exposed）中濃度
＝粒子吸着態由来の地上部農作物中濃度　　式 V-21
＋ガス態由来及び根からの吸収による地上部農作物中濃度

大気相粒子吸着態由来の地上部農作物中の化学物質の物質収支は以下の式で表せる。

大気相粒子吸着態由来の地上部農作物中濃度の変動
＝粒子吸着態沈着による地上部農作物への流入量（植物の単位重量当たり）
－風化や壊死（老化）による消失量（植物の単位重量当たり）　式 V-22

大気相ガス態由来及び根からの吸収による地上部農作物中の化学物質の物質収支は以下の式で表せる。

大気相ガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度の変動
＝地上部農作物への大気相ガス態及び土壌間隙水中化学物質の吸収量（植物の単位重量当たり）
－代謝と光分解による消失と農作物の成長による希釈量（植物の単位重量当たり）　式 V-23

これらの物質収支を微分方程式で表し、その解となる地上部農作物中濃度を導く式を用いて、農作物の栽培期間として 60 日目の農作物中濃度を算出している。なお、ガス態由来及び根からの吸収については、脂溶性の高い物質の表皮等への濃縮を考慮した補正係数を適用する。これは、可食部への化学物質の分配比率に相当するものである。ただし、牧草についてはこの補正係数は考慮しない。

(3) **地上部農作物中濃度**（Protected）

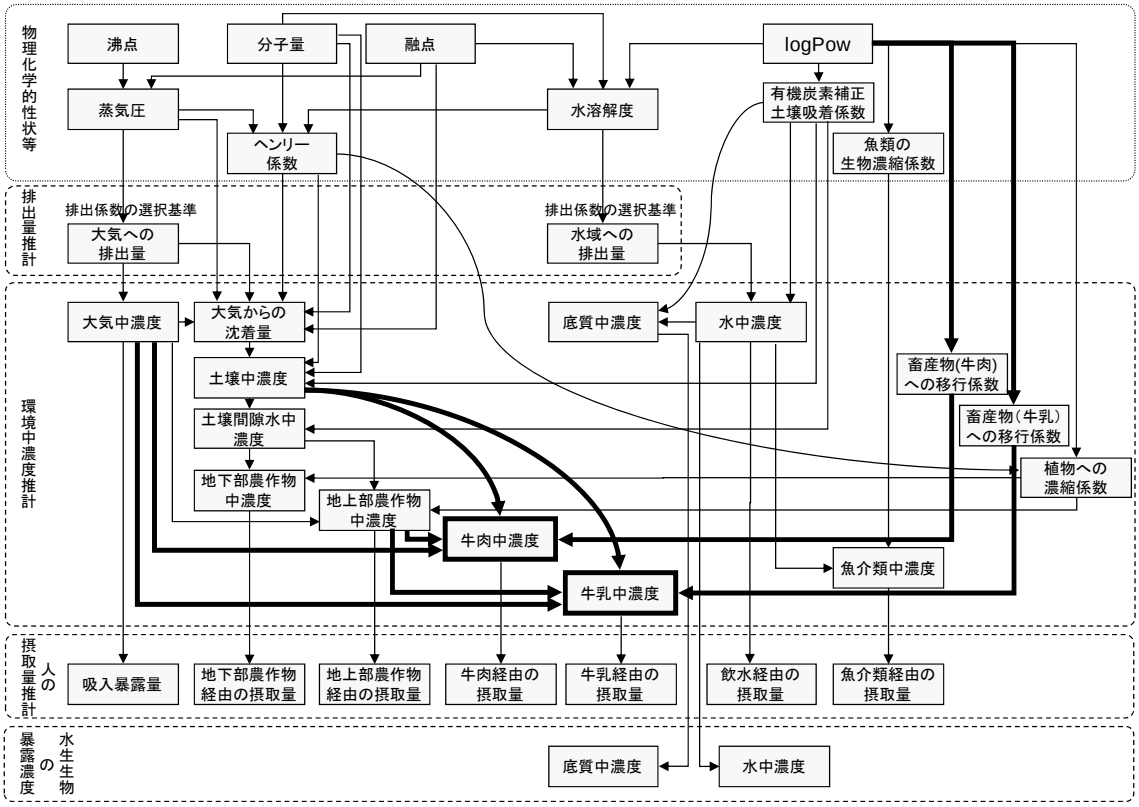
地上部農作物（Protected）は、米や豆類、みかん等の可食部が地上にあり、表皮は食しない農作物を想定している。

農作物が化学物質を取り込む 3 つの経路（図表 V-18 参照）のうち、ガス態からの移行及び根からの吸収のみを仮定している。これはその他の経路からの取り込みがないということではなく、その部位を食さないため推計していないということである。濃度推計式は式 V-23 と同様である。

V.3.3.5　畜産物中濃度の推計

ここで説明する部分を図表 V-19 に太線で示す。

詳細は付属資料 V.7.3.4 を参照されたい。



図表 V-19　畜産物中濃度推計の相互関係（太線部分）

ここでは畜産物として牛肉中と牛乳中の濃度の推計手法を説明する（図表 V-19 に太字で示す部分）。

- 牛肉中濃度　（排出源から半径 1～10km のエリアで産出される牛肉の化学物質濃度）
- 牛乳中濃度　（上記エリアで産出される牛乳（乳製品を代表すると想定）の化学物質濃度）

畜産物中濃度を推計するために、化学物質に係るパラメータとして以下の数値が必要である。

- 大気中濃度　（V.3.3.2 (1)で推計）
- 土壌中濃度　（V.3.3.3 (1)で推計）
- 地上部農作物(Exposed)中濃度　（V.3.3.4 (2)で推計。牧草と想定している）
- 化学物質の物理化学的性状　（logPow）

牛肉と牛乳中濃度は人の経口暴露量の推計（V.3.4）に用いる。

畜産物（牛肉又は牛乳）中濃度は、以下の式で求める。

畜産物中濃度　　＝畜産物への移行係数×牛の化学物質摂取量　　式 V-24

牛の化学物質摂取量＝大気中濃度×牛の大気吸入量＋土壌中濃度×牛の土壌摂取量＋牧草中濃度×牛の牧草摂取量　　式 V-25

畜産物中濃度　　：排出源を中心とした評価エリア内の空気・土壌・牧草から化学物質を摂取している牛の肉又は牛乳中の濃度 [mg/kg]

畜産物への移行係数　　：畜産物（牛肉又は牛乳）への化学物質の移行係数で化学物質の logPow から推計する（推計式は牛肉と牛乳では異なる） [day/kg]

牛の化学物質摂取量　　：牛一頭当たりの化学物質の摂取量 [kg/day]

大気中濃度　　：排出源を中心とした評価エリア内平均の地上 1.5m の濃度で牛の暴露濃度と想定 [mg/m3]（V.3.3.2 (1)で推計）

土壌中濃度　　：排出源を中心とした評価エリア内平均の土壌中濃度で牛が牧草とともに摂取する土の暴露濃度と想定 [mg/kg]（V.3.3.3 (1)で推計）

牧草中濃度　　：排出源を中心とした評価エリア内平均の地上部農作物中濃度(Exposed)で牛が摂取する牧草の濃度と想定 [mg/kg]（V.3.3.4 で推計）

畜産物中濃度は、仮想的排出源を中心とした評価エリア（排出源から半径 1～10km のエリアで 1km 刻みに 10 通りある）内で牧養され、そのエリア平均の大気、土壌、牧草（地上部農作物(Exposed)）を摂取している牛の肉と牛乳の濃度である。

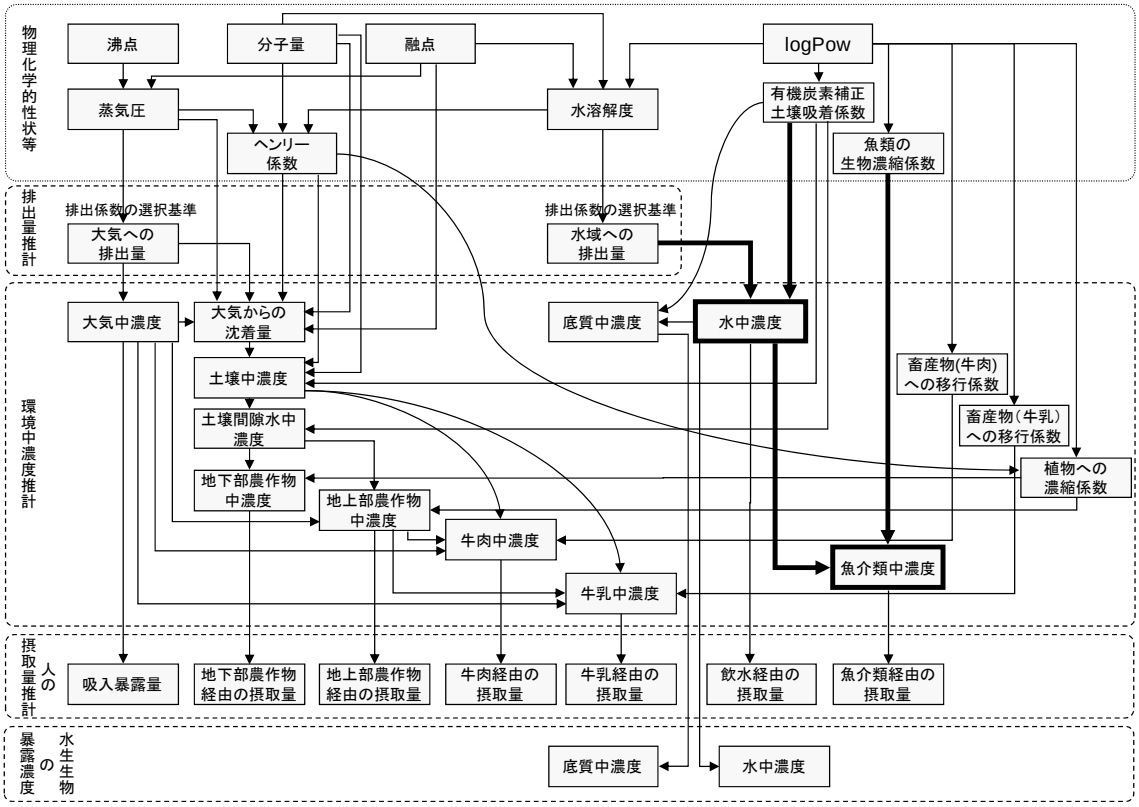
畜産物中濃度の推計方法は、複数の物質に係る logPow と BTF（畜産物への移行係数の計算値）の対数スケールの回帰式がベースになっている。そのため、理論的な背景が限定的で不確実性は相当あるといわれている[1]ことを念頭に置く必要がある。

V.3.3.6　河川水中濃度と魚介類中濃度の推計

ここで説明する部分を図表 V-20 に太線で示す。

詳細については付属資料 V.7.3.5 を参照されたい。

[1] EC (2004) II.5.2.6 Biotransfer to meat and milk. Lijzen, J.P.A and Rikken, M.G.J. eds., EUSES 2.0 background report II model description, p.67. (http://ihcp.jrc.ec.europa.eu/our_activities/public-health/risk_assessment_of_Biocides/euses/EUSES_2.1/EUSES_2.1_documentation/EUSES_2.1_Chapter_III_Model_Calculations.doc)



図表 V-20　水中濃度と魚介類中濃度推計の相互関係（太線部分）

ここでは以下の濃度の推計手法を説明する（図表 V-20 に太字で示す部分）。魚介類は河川水中の淡水魚と、海水魚を想定している。

- 河川水中の溶存態濃度　（仮想的排出源から排出される化学物質が流入する河川の溶存態濃度）
- 魚介類中濃度　（上記河川水を濃縮した淡水魚の濃度と、上記河川が流入する海域の海水を濃縮した海水魚の濃度）

河川水及び海水中濃度を推計するために、化学物質に係るパラメータとして以下の数値が必要である。

- 水域への排出量　（排出量推計（Ⅳ章）の手法で推計）
- 化学物質の物理化学的性状　（有機炭素補正土壌吸着係数）

魚介類中濃度を推計するために、化学物質に係るパラメータとして以下の数値が必要である。

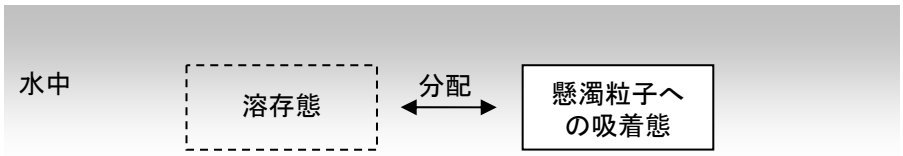
- 水中の溶存態濃度（河川水又は海水）　（以下の(1)で推計）
- 生物濃縮係数（BCF）　（評価の準備（Ⅰ章）で収集するデータ）

河川水中の溶存態濃度は人の飲水中濃度として摂取量の推計（V.3.4）に用いるほか、魚介類中濃度推計の入力値となる。評価Ⅱでは底生生物の暴露濃度となる底質中濃度の推計に用いる（V.4.8.2 ）。なお、優先評価化学物質（生態）の評価における水生生物の暴露濃度については河川水中の溶存態濃度を適用する（V.3.5 で後出）。

(1) 河川水中濃度

化学物質の河川水中の溶存態濃度の推計では、以下のことを仮定している。

- 仮想的排出源からの排出先水域は河川である。
- 水中の化学物質は溶存態と懸濁粒子への吸着態で存在し、分配平衡にある。



図表 V-21　水中の化学物質の存在形態

河川水中の溶存態濃度は、水域への排出量を用いて以下の式で求める。

河川水中の溶存態濃度＝（1－懸濁粒子への吸着率）×河川水中濃度　　式 V-26

河川水中濃度　　＝水域への排出量／河川流量　　式 V-27

河川水中の溶存態濃度	：仮想的排出源から排出された化学物質が流入する河川の化学物質の溶存態濃度
懸濁粒子への吸着率	：化学物質の有機炭素補正土壌吸着係数、水中の懸濁粒子の濃度、懸濁粒子の有機炭素含有率を用いて推計
河川水中濃度	：仮想的排出源から排出された化学物質が流入する河川の化学物質濃度（溶存態と粒子吸着態の合計）
水域への排出量	：排出源の水域への排出量
河川流量	：一級河川の長期平水流量から設定したデフォルト値

(2) 魚介類中濃度

魚介類中濃度は、淡水魚と海水魚の別に推計し、それぞれ河川水中濃度（溶存態）を使って以下の式で求める。生物蓄積係数は、生物濃縮係数又は logPow の値によって数値（1～10）を選択する（付属資料 V.7.3.5 (2)参照）。

淡水魚中濃度＝河川水中の溶存態濃度×生物濃縮係数×生物蓄積係数　　式 V-28

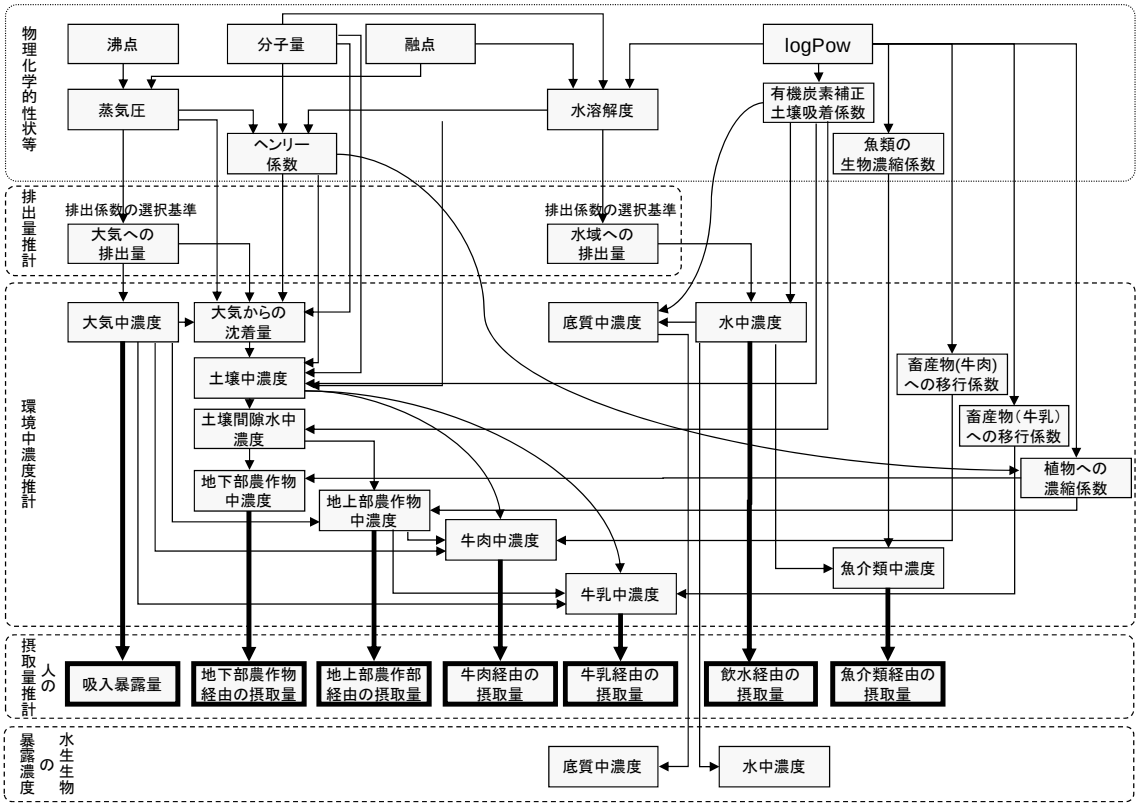
河川水中の溶存態濃度　：式 V-26 で推計した溶存態濃度
生物濃縮係数　：魚類への化学物質の水からの生物濃縮係数
生物蓄積係数　：魚類への化学物質の餌の摂取を介した生物蓄積係数

海水魚中濃度＝海水中の溶存態濃度×生物濃縮係数×生物蓄積係数　式 V-29
海水中の溶存態濃度＝河川水中の溶存態濃度／海域の希釈率　式 V-30

海水中の溶存態濃度　：仮想的排出源から排出された化学物質が流入する河川が流入する海域の溶存態濃度
海域の希釈率　：海域での河川水の希釈倍率

V.3.4 人の摂取量推計

ここで説明する部分を図表 V-22 に太線で示す。
詳細については付属資料 V.7.4 を参照されたい。



図表 V-22　人の摂取量推計の相互関係（太線部分）

ここでは V.3.3.2 ～V.3.3.6 で推計した環境媒体中の濃度を用い、人の環境経由の化学物質摂取量を推計する。摂取量推計は、人の健康に係る暴露評価 I の終着点である。

人の摂取量を推計するために、化学物質に係るパラメータとして以下の数値が必要である。人は環境経由でこれらの媒体を通じて化学物質に暴露されると仮定している。

- 大気中濃度　(V.3.3.2 (1)で推計)
- 地下部農作物中濃度　(V.3.3.4 (1)で推計)
- 地上部農作物中濃度 Exposed　(V.3.3.4 (2)で推計)
- 地上部農作物中濃度 Protected　(V.3.3.4 (3)で推計)
- 牛肉中濃度　(V.3.3.5 で推計)
- 牛乳中濃度　(V.3.3.5 で推計。乳製品を代表する濃度と想定)
- 河川水中濃度　(V.3.3.6 (1)で推計。飲料水濃度と想定)
- 魚介類中濃度　(V.3.3.6 (2)で推計。淡水魚と海水魚)

人の化学物質の摂取量は以下の式で求める。

人の化学物質摂取量＝Σ(媒体中濃度×媒体別摂取量)／体重　　式 V-31

人の化学物質摂取量　：仮想的排出源を中心とした評価エリア内の大気・農作物・畜産物と、排出源から化学物質が流入している河川の水と淡水魚、その河川が流入している海域の海水魚を一定割合で摂取している成人の化学物質摂取量 [mg/kg/day]

媒体中濃度　：大気、地下部農作物、地上部農作物（Protected）、地上部農作物（Exposed）、牛肉、牛乳、河川水、淡水魚、海水魚の各濃度 [大気は mg/m^3、河川水は mg/L その他は mg/kg]

媒体別摂取量　：成人一人当たりの媒体別摂取量 [大気は m^3/day、飲水は L/day、その他は kg/day]

体重　：成人の体重 [kg]

暴露評価 I では「V.2.3 人の暴露経路」で述べたとおり、大気からの吸入摂取量とその他の媒体からの経口摂取量を合計した摂取量を求める。合計摂取量は、1 つの仮想的排出源につき評価エリアの大きさごとに 10 通り推計する（「V.2.8.2 (3) 暴露評価の環境スケール」参照)。

媒体中濃度は「図表 V-6　排出源ごとの暴露シナリオ」に示すとおり、大気排出に起因する媒体中濃度（大気、農作物、畜産物）は暴露評価の評価エリア（排出源から半径 1～10km のエリアで 1km 刻みに 10 通りある）に応じて濃度が変化する。河川排出に起因する媒体中濃度（河川水、魚介類）は評価エリアの大きさに左右されない値として推計される。

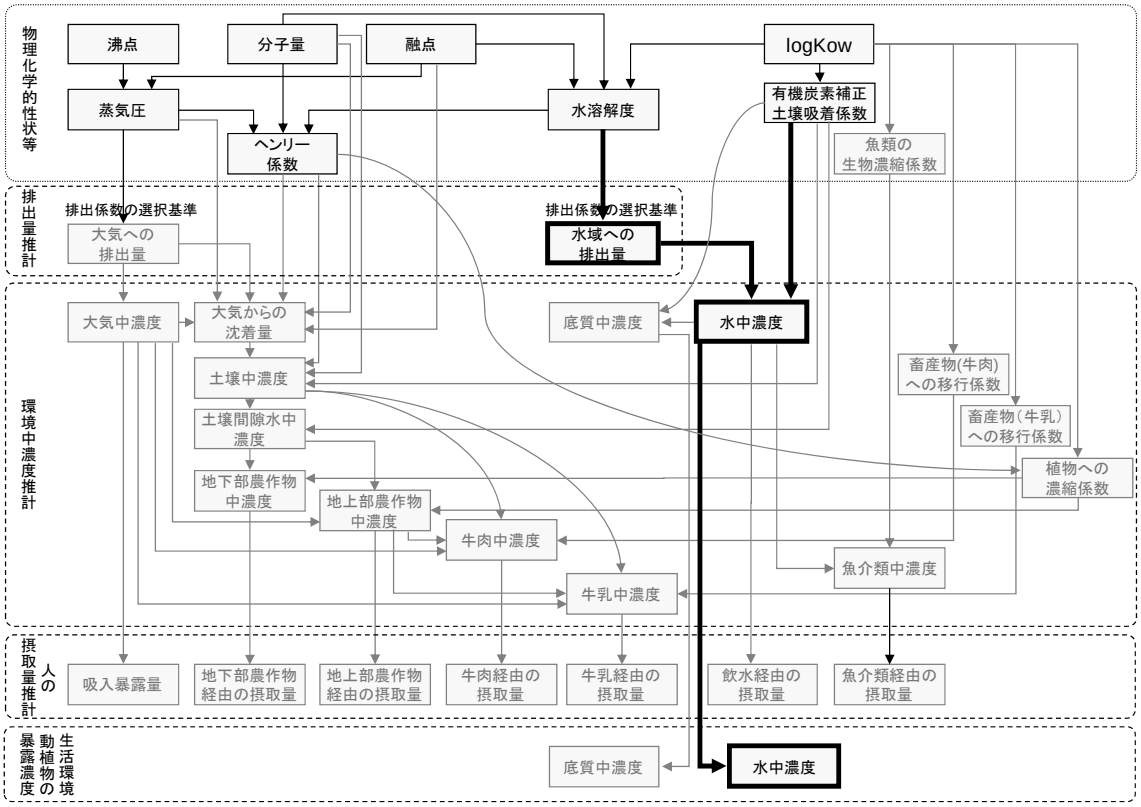
大気吸入速度等の各媒体の摂取量と体重は、日本の平均的な成人を想定して設定してい

る。食物摂取量については、濃度推計をしている媒体に対応した食品別の平均的な摂取量に、自給率と評価エリア内で産出する食物を摂取する割合（近郊生産物摂取割合）を加味して設定している。また、暴露評価 I では河川水から取水した飲料水について、化学物質の浄水率（除去率）はゼロと仮定している。

具体的な数値や設定の経緯の詳細については付属資料の V.7.4 や V.7.5.5 を参照されたい。

V.3.5 水生生物の暴露濃度推計

優先評価化学物質（生態）については生活環境動植物を対象にリスク評価を行う。生活環境動植物である水生生物と底生生物のうち、評価 I では水生生物のみを評価対象とする。そのため、暴露評価 I では PEC[1]として河川水中濃度のみを推計する。優先評価化学物質（生態）の暴露評価 I に関連する部分を図表 V-23 に太線で示す。



図表 V-23　優先評価化学物質（生態）の暴露評価 I

排出量推計では水域への排出量のみが関連し、推計方法はⅣ章に示すとおりである。

河川水中の溶存態濃度を水生生物の暴露濃度、すなわち PEC とする。推計式は、既出の式 V-26 を用いる。

生態の評価の場合には、河川流量を人の健康の評価の場合のデフォルト値とは異なる数

[1] PEC：予測環境中濃度（Predicted Environmental Concentration）で、水生生物を対象とした評価の場合は水中濃度を指す。

値に置き換えている。河川流量は、人の健康の評価では一級河川の長期平水流量[1]から設定したのに対し、水生生物の評価では長期低水流量[2]から設定している。具体的な数値は付属資料 V.7.3.5 を参照されたい。

河川流量等のデフォルト値を人の健康の評価の場合と置き換えた理由は以下のとおりである。

生活環境動植物の暴露集団について、排出源ごとのシナリオに関して V.2.8.2 で定義した。そこで暴露期間は「生活環境動植物にとって長期間（数十時間～数十日等、水生生物の寿命程度）」とした。暴露量の捉え方は、人の場合は数十年といった長期間の算術平均値であるのに対し（「V.2.4 人の暴露量推計における時間の捉え方」参照）、水生生物では数十時間～数十日間、継続してさらされる濃度という意味となる。そのため、欧米の水生生物の PEC の推計では、年間の排出期間の期間平均値を PEC としている[3,4,5]。

化審法の届出数量の単位は「t/year」であり、一年のうちの排出期間は不明であるため、期間平均値を求めることはできない。そこで本シナリオではその代替的な方法として流量の側を低水流量と置くことにした。それにより、人よりも寿命が短い水生生物への暴露期間を考慮している。

V.3.6 物質の分類に応じた暴露評価Ⅰでの扱い

本スキームの評価Ⅰでは、暴露評価を実施するときには、優先評価化学物質が下記の図表 V-24 の 3 つの分類のどれに該当するかを識別し、それに対応する数理モデルや物理化学的性状を用いるものとしている。これは以下の定義と考え方に基づいている。なお、識別は評価の準備段階で行うのでⅠ章も参照されたい。

[1] 平水流量 : 流量の観測開始から欠測期間を除いた統計期間の「1 年を通じて 185 日はこれを下らない日流量」（国土交通省河川局編（2005）『流量年表　第５５回（平成 14 年）』日本河川協会）

[2] 低水流量 : 流量の観測開始から欠測期間を除いた統計期間の「1 年を通じて 275 日はこれを下らない日流量」（国土交通省河川局編（2005）『流量年表　第５５回（平成 14 年）』日本河川協会.）

[3] ECHA (2010)　Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter R.16: environmental exposure estimation, Version: 2, R.16.2.3. Time frame. pp.8-9.

[4] ECHA (2010) ECHA, Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter R.16: environmental exposure estimation, version: 2, R.16.6.6.2. Calculation of PEClocal for the aquatic compartment. pp.61-64.

[5] U.S. EPA (2007) Exposure and Fate Assessment Screening Tool (E-FAST) Version 2.0 Documentation Manual. (http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/efast2man.pdf)

図表 V-24　物質の分類と暴露評価Ⅰの扱い対応箇所

物質の分類	対応箇所
環境分配モデル適用物質（構造特定可能）	V.3.3（既出）
環境分配モデル適用物質（構造不定）	V.3.6.1
環境分配モデル適用外物質	V.3.6.2

「環境分配モデル適用物質」とは、本スキームの暴露評価Ⅰにおいては「環境媒体間の分配の予測に必要な物理化学的性状が測定もしくは推計可能な化学物質」と定義する。反対に「環境媒体間の分配の予測に必要な物理化学的性状が測定不可かつ推計不可な化学物質」を「環境分配モデル適用外物質」と定義する。

リスク評価に用いる暴露評価手法の多くは、単一構造の低分子有機化合物を想定して作られている。化学物質の環境中の分配を予測するために、評価Ⅰで排出源ごとの暴露シナリオで用いる環境分配モデルでは、物理化学的性状のうち分子量、融点、蒸気圧、水溶解度、logPow、Koc、ヘンリー係数、生物濃縮係数（BCF）が必要であり、これらが上記の定義での「環境媒体間の分配の予測に必要な物理化学的性状」に該当する。なお、暴露評価Ⅰでは、これらの環境媒体間の分配の予測に必要な物理化学的性状がそろい、環境分配モデル適用物質として分類していた物質でも暴露評価Ⅱでは個別に対応し、物質の性状に応じた手法を用いる場合もある（後述の V.4.9 参照）。

「環境分配モデル適用物質（構造不定）」とは、「○と△の反応生成物」といった名称の物質のうち、構造は特定できないものの有機化学物質等であるため「環境分配モデル適用物質相当」と分類したものであり、環境分配モデルの適用範囲に属する。なお、構造が特定できる環境分配モデルの適用物質は「環境分配モデル適用物質（構造特定可能）」と定義する。

３つに分類した物質のうち、環境分配モデル適用物質（構造特定可能）は V.3.3 で説明した環境中濃度推計手法を適用することができる。本項では、残りの２つの分類について暴露評価Ⅰでの扱いを記載する。

V.3.6.1　環境分配モデル適用物質（構造不定）の暴露評価Ⅰ

この分類の化学物質は、構造は特定できないものの「環境分配モデル適用物質相当」と分類したものである。しかし、この物質群は、基本的に物理化学的性状の実測値は通常は得られず、構造が特定できないために推計も不可能である。そこで、以下のように扱うものとする。

(1) 排出量推計

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排出係数については、Ⅳ章の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で記載した次のとおりであり、高

分子化合物であるか否かでそのデフォルト値の設定が異なる。

評価Ⅰでは、高分子化合物であれば、蒸気圧区分＜1Pa、水溶解度区分≧10,000mg/L の排出係数の値をデフォルト値として付与する。高分子化合物でなければ、蒸気圧区分≧10,000Pa、水溶解度区分≧10,000mg/L の値をデフォルト値として付与する。これは、各化学物質において物理化学的性状データが得られない場合に、推計排出量がワーストになるようなデフォルト値を設定するためである。

(2) 環境中濃度と人の摂取量の推計

環境中濃度と人の摂取量の推計においては、環境分配モデルによる人の暴露量が最大（すなわち、きびしく暴露評価する安全側）となる物理化学的性状一式の組合せを見つけ、そのワーストデフォルト暴露量（単位排出量当たり）を暴露評価Ⅰに用いる。なお、水域排出の場合、水域経由の人の暴露量は BCF に大きく依存し、BCF が大きいほど人の暴露量が大きくなる。BCF は評価の準備段階のキースタディ選定によって選ばれた値を用いる。よって、大気経由の暴露量を最大とする物理化学的性状一式の組合せを見つけて設定した。

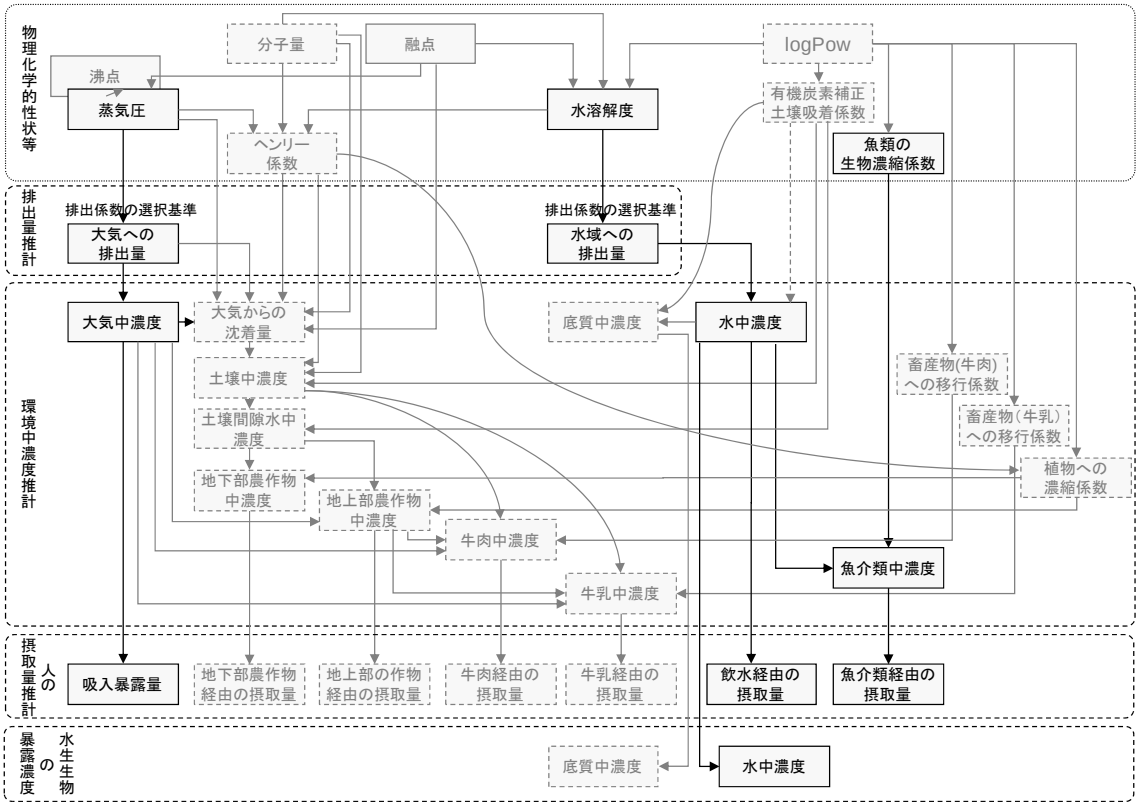
この大気経由の暴露量の最大値は、最初に 352 種類の組合せの物理化学的性状の中から暴露量が最大となる組合せを見つけ、次にその組合せの値を起点として最適化機能（目的関数の最大値や最小値等を求める機能）を搭載したソフトウェアに入力し、暴露量の最大値を計算する、という手順によって導出している（付属資料 V.7.4.2 、V.7.5.6 参照）。

(3) 水生生物の暴露濃度推計

物理化学的性状は(2)と同じものを用い、「V.3.5　水生生物の暴露濃度推計」と同じ推計式を用いる。

V.3.6.2　環境分配モデル適用外物質の暴露評価Ⅰ

環境分配モデル適用外物質は、通常、logPow が測定又は予測できないものになるため、図表 V-25 に示すとおり logPow を出発点として推計する農作物と畜産物等の濃度の推計は不可能となる。ここではこれらの化学物質の暴露評価Ⅰにおける扱いを示す。



図表 V-25　環境分配モデル適用外物質の暴露評価で考慮する経路（濃い部分）

(1) 排出量推計

V.3.6.1 (1)と同じ扱いとする。

(2) 環境中濃度と人の摂取量の推計

環境中濃度推計では、図表 V-25 に薄く示した部分の推計はできないため、物理化学的性状データを用いない単純希釈による推計と魚介類中濃度推計の部分のみの推計を行う。単純希釈とは、ここでは、大気相に関しては拡散のみを考慮し土壌への沈着は考慮しない[1]こと、水相に関しては希釈のみを考慮し懸濁粒子への吸着等は考慮しないことと定義する[2]。これを本スキームでは単純希釈モデルという。単純希釈モデルの推計式を以下に示す。

大気から土壌への沈着以降の経路を考えないため、大気中濃度推計では沈着による減少を考慮しない V.3.3.2 (1)の式 V-7 を用いる。

大気中濃度＝大気濃度換算係数×大気への排出量　　式 V-7（再掲）

[1] 土壌へ沈着以降の農作物、畜産物への濃縮を推計できないためである。
[2] 同じ単純希釈という呼び方であっても、大気相は距離による濃度の減衰を考慮し、水相は考慮してないという相違があることに注意。

河川水中濃度推計は式 V-27 の懸濁粒子への吸着補正項がなく、次式となる。淡水魚、海水魚の濃度は式 V-28 と式 V-29 と同様である。

河川水中濃度＝水域への排出量／河川流量　　式 V-32

人の摂取量の推計式は式 V-31 と同様であるが、経路は大気吸入、飲料水・魚介類（淡水魚・海水魚）からの摂取のみとなる。なお、魚介類中濃度の推計に必要な BCF は評価の準備段階のキースタディ選定によって選ばれた値を用いる。

(3) 水生生物の暴露濃度推計

水生生物の暴露濃度である河川水中濃度の推計には、懸濁粒子への吸着補正項がない式 V-32 を用いる。この場合、河川流量は生態評価用の値を用いる（「V.3.5　水生生物の暴露濃度推計」参照）。

V.4 暴露評価Ⅱ

V.4.1 はじめに

本節では、排出源ごとの暴露シナリオに係る暴露評価Ⅱの方法を解説する。暴露評価Ⅱでは、リスク推計Ⅰと優先順位付けを経て評価Ⅱ対象となった優先評価化学物質について各種の既存情報を追加して暴露量を推計する。

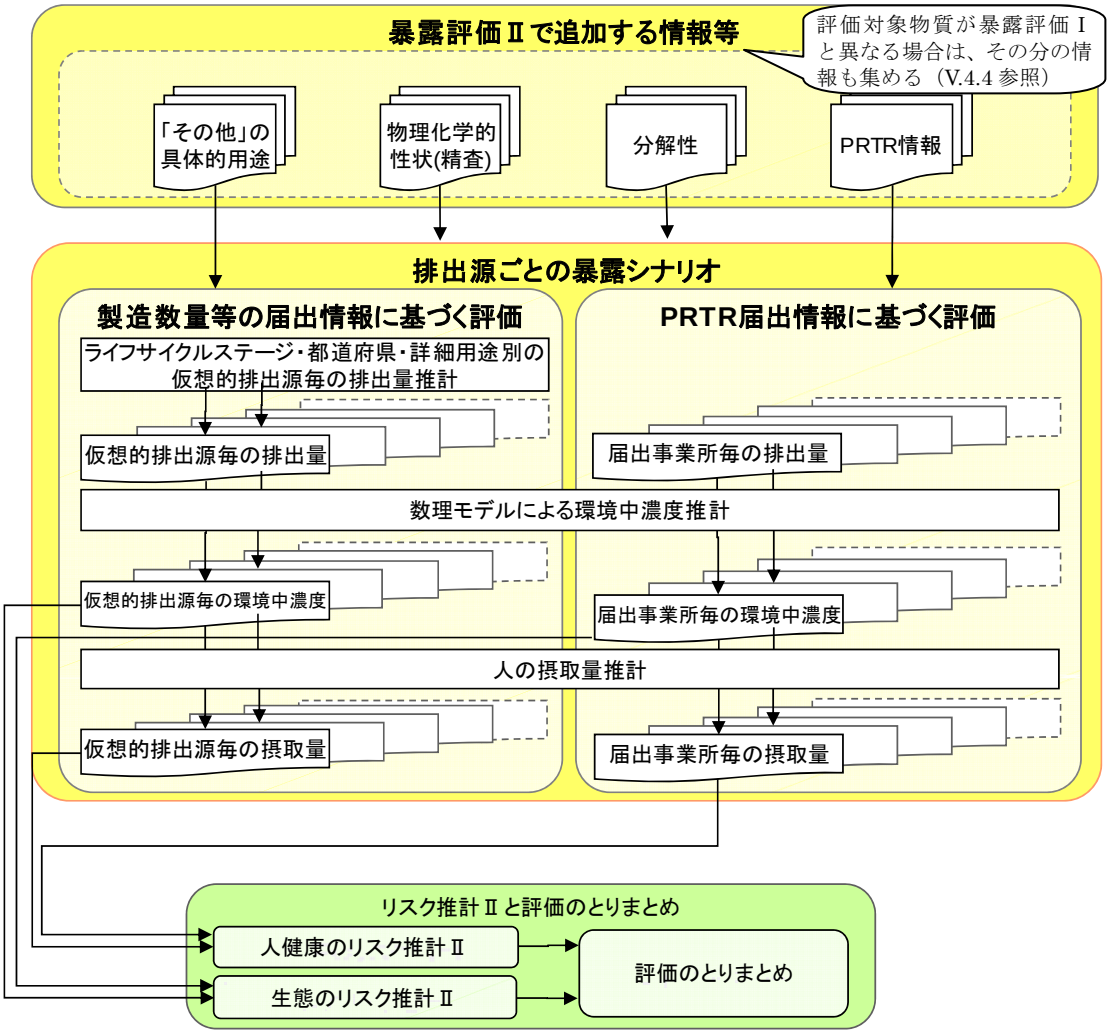
ここで推計する暴露量（人の場合は摂取量、生態の場合は環境中濃度）は次のステップでリスク推計Ⅱに用いるとともに、暴露量の推計の過程と結果が評価のとりまとめに反映される。

V.4.2 暴露評価Ⅱのフロー

排出源ごとの暴露シナリオにおける暴露評価Ⅱのフローを図表 V-26 に示す。暴露評価Ⅱでは、評価Ⅱ対象となった優先評価化学物質について暴露評価Ⅰで用いた情報を精査し、さらに各種の既存情報を追加するため、製造数量等の届出情報のみを用いた暴露評価Ⅰに比べて、暴露評価Ⅱは評価対象物質が有する情報の多寡に応じた推計を行うことになる。例えば、フローにあるように PRTR 対象物質である場合は、排出源ごとの暴露シナリオによる評価を製造数量等の届出情報に基づく評価と PRTR 届出情報に基づく評価とで並列に行う[1]。

[1] 製造数量等の届出情報に基づく場合の評価結果と PRTR 届出情報に基づく場合の評価結果のいずれで（もしくは補足しあって）評価Ⅱの結論を導くのかについては、Ⅸ章を参照のこと。

次項以降は、暴露評価Ⅱについて、フローに沿って順に説明する。まず、「V.4.3 暴露評価Ⅰとの違い」から「V.4.5 暴露評価Ⅱで追加する情報」までは暴露評価Ⅰとの違いや既存情報の収集・精査を説明する。その後、それらを踏まえて「V.4.6 環境中濃度推計」から「V.4.7 人の摂取量推計」までは優先評価化学物質（人健康）に係る暴露評価Ⅱを説明し、優先評価化学物質（生態）に係る暴露評価Ⅱについては「V.4.8 水生生物及び底生生物の暴露濃度推計」にまとめて説明する。最後に「環境分配モデル適用物質（構造不定）」や「環境分配モデル適用外物質」と分類された物質の扱いを「V.4.9 物質の分類に応じた暴露評価Ⅱの扱い」で説明する。



図表 V-26　排出源ごとの暴露シナリオに係る暴露評価Ⅱのフロー

V.4.3 暴露評価Ⅰとの違い

排出源ごとの暴露シナリオにおける暴露評価ⅠとⅡの違いを図表 V-27 に示す。評価段階の違いは、用いる情報の範囲と情報の精査の程度及び評価内容の詳細さである。

暴露評価Ⅱでは、推計する暴露量を次のステップでリスク推計Ⅱに用いるとともに、暴

露量の推計の過程と結果を評価のとりまとめにつなげ、「暴露要件」への該当性の判断材料となる評価Ⅱの結論を得ることを念頭に置いている。

図表 V-27　排出源ごとの暴露シナリオにおける暴露評価ⅠとⅡの違い

評価段階 実施項目 等	評価Ⅰ	評価Ⅱ （評価Ⅰから追加・変更のある部分を記載）
評価対象物質	・原則として優先評価化学物質ごとに評価対象物質は１つ	・必要に応じて１つの優先評価化学物質に対して評価対象物質が複数
用いる情報	・製造数量等の届出情報 ・物理化学的性状（信頼性ランクに基づくが未精査） ・分解性：考慮しない ・環境条件：デフォルト設定	・製造数量等の届出情報 ✓ 経年的 ✓ 用途分類「#98 その他」又は詳細用途分類「z その他」の具体的用途を精査 ・PRTR 情報 ・物理化学的性状（精査して改めて選択） ・分解性： ✓ 変化物でリスク評価する場合、大気と水域の環境中運命は別々に考慮 ✓ 土壌中の分解速度データを収集し推計に反映 ・PRTR 情報が利用できる場合に排出先水域の流量データや排出源周辺の土地利用等も調査し推計に反映する等
環境中濃度の推計	・製造数量等の届出情報に基づき、仮想的排出源ごとの環境中濃度を推計	・製造数量等の届出情報での用途分類「#98 その他」又は詳細用途分類「z その他」の具体的用途を精査し、排出量推計に反映 ・PRTR 情報があれば並行して PRTR の届出事業所ごとに環境中濃度を推計
人の摂取量の推計	・暴露量は吸入・経口暴露量を摂取量に合算 ・点推計	・有害性の内容に応じて吸入暴露量と経口暴露量を別々に推計 ・必要に応じ、近郊生産物摂取割合等の暴露係数に幅を持たせて暴露量を推計

次項以降では図表 V-27 の評価Ⅱの各記載項目について順に説明する。

Ⅴ.4.4 暴露評価Ⅱでの評価対象物質

暴露評価Ⅰでは評価対象物質を１つ決め、優先評価化学物質ごとに 1 つの評価対象物質についての暴露評価を行うこととし、暴露評価で用いる物理化学的性状データは評価対象物質のデータを用いる（詳細はⅠ章を参照）。これに対し、暴露評価Ⅱではより詳細な評価を行うため、必要に応じて評価対象物質が複数になる。このため、暴露評価Ⅰで評価対象とした物質だけでなく、暴露評価Ⅱで新たに評価対象とした物質の情報について追加収集する必要がある。

なお、評価対象物質が複数になりうる例として以下の（ア）～（ウ）が挙げられる。詳細はⅣ章の評価対象物質が複数の場合の扱いに関する記載を参照されたい。

（ア）構造の一部又は構成部分に優先評価化学物質を含む化学物質が、製造数量等の届出

の対象となる場合

（イ）分解度試験より変化物が生じることが判明している優先評価化学物質の場合

（ウ）優先評価化学物質に高分子化合物ではない場合と高分子化合物である場合が混在する場合

V.4.5 暴露評価Ⅱで追加する情報等

本項では、図表 V-27 で示した暴露評価Ⅱで追加して用いる情報の情報源、情報の中身、使用目的等について説明する。

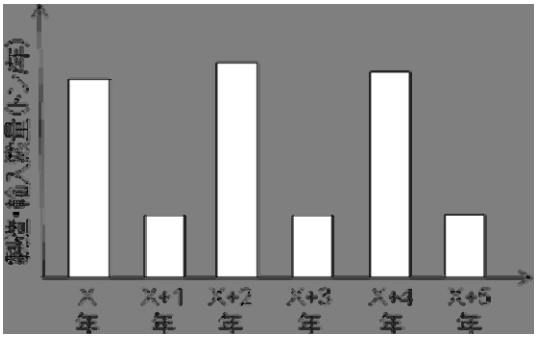
V.4.5.1　製造数量等の届出情報

評価Ⅰでも製造数量等の届出情報を用いて暴露評価を行ったが、暴露評価Ⅱで用いる際には以下の点が異なる。

(1) 経年的な変化

既に説明したように（V.2.4.1 参照）、暴露評価は「実績数量届出の年度に基づく暴露濃度が時間変化をせず長期にわたり継続する」という前提の下での評価であり、将来の予測である。しかし、製造数量等が年度によって大きく変化するような場合は、ある年度の製造数量等を用いた暴露評価では、将来の予測が過大評価又は過小評価になるおそれがある。

例えば、図表 V-28 のように製造・輸入数量が 1 年おきに大きく変化する場合であれば、数量が少ない年度での情報を用いた評価結果だけで結論を導くのは妥当でない可能性がある。



図表 V-28　製造・輸入数量が 1 年おきに大きく変化する例

したがって暴露評価を行う際には製造数量等の経年的な変化も概観しておき、必要に応じて評価結果のとりまとめに利用する。

(2) **用途分類「#98 その他」又は詳細用途分類「z その他」の精査**

この内容についての詳細は、Ⅳ章の製造数量等の届出情報における詳細用途の精査に関する記載を参照されたい。

V.4.5.2　PRTR 情報の利用

PRTR 情報は排出量のデータであり、排出源ごとの暴露シナリオにおける排出量に当てはめて利用する。

PRTR 情報を利用する場合、PRTR 届出排出量データをこのシナリオの排出量に利用する。つまり、届出事業所ごとに、大気への排出量と公共用水域への排出量を使用し、排出源ごとの暴露量推計の入力値とする（図表 V-26 の「排出源ごとの暴露シナリオの暴露評価」の右側参照）。

PRTR 情報を利用する場合、製造数量等の届出情報を用いた暴露評価の推計排出量と異なる点に注意する必要がある。相異点はⅣ章に記載しているのでそちらを参照されたい。

V.4.5.3　物理化学的性状データ・蓄積性データの精査

物理化学的性状データ・蓄積性データについては評価Ⅰでは「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」[1]に基づき収集・選定していた。評価Ⅱでは、評価Ⅰで用いたデータ、収集したが評価Ⅰでは用いなかったデータ、及び新たに得られたデータについて、情報源の出典までさかのぼるなどして精査することにより、改めて暴露評価に用いるデータを選定し直す。

具体的な精査の観点についてはⅠ章の記載を参照されたい。

V.4.5.4　分解性の扱い

暴露評価Ⅱでは環境中の分解に関して以下のような扱いとする。

(1) **変化物の扱い**

評価Ⅱでは、変化物でリスク評価を行う場合、大気と水域で評価対象物質を別々に考慮する。例えば、大気排出分は親化合物で評価する一方、水域排出分は変化物で評価を行うなどである。

[1] 経済産業省（2011）化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について，平成 23 年 9 月 15 日.
(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/reliability_criteria02.pdf)

(2) 分解速度定数と半減期

本スキームでは、土壌中濃度の推計に 1 次反応による分解を想定した数式を用いている（付属資料 V.7.3.2 (1)土壌中濃度を参照）[1]。このため、土壌中濃度を計算するためには土壌における分解の 1 次速度定数を設定することが必要である。暴露評価Ⅰでは、環境中における分解は考慮しないため、土壌における分解の 1 次速度定数を一律ゼロとしていた。（「V.3.3.3 (1)② 分解（生分解と非生物分解）」参照）。暴露評価Ⅱでは、土壌における分解速度に関するデータ（分解速度定数又は半減期）を収集・選定し、土壌における分解の 1 次速度定数を設定して環境中濃度推計を行う。

分解に係る情報には、分解の機序ごとの速度定数又は半減期と、分解の機序を区別しないトータルの分解速度定数又は半減期（以下、総括分解速度定数又は総括分解半減期という。)がある。総括分解速度定数とは、分解の機序を総括した媒体中の分解速度定数の和である。本スキームでは土壌における分解の機序として、生分解と加水分解を想定している。このため、図表 V-29 に示すように、総括分解速度（又は総括分解半減期）に関するデータ、もしくは土壌における機序別（生分解、加水分解）の分解速度（又は半減期）に関するデータを収集する。

図表 V-29　排出源ごとの暴露シナリオの暴露評価Ⅱに用いる分解速度（又は半減期）に関するデータの種類

環境媒体	収集項目
土壌	総括分解速度（又は総括分解半減期）データ
	生分解の分解速度（又は半減期）データ
	加水分解の分解速度（又は半減期）データ

分解の 1 次速度定数と半減期には以下の関係がある。

$$\text{分解の 1 次速度定数 [1/日]} = \ln 2 / \text{半減期 [日]} \fallingdotseq 0.693 / \text{半減期 [日]} \qquad \text{式 V-33}$$

図表 V-29 のデータをどのような情報源から収集し、総括分解のデータと分解の機序別のデータから採用するデータをどのように選定するかについてはⅠ章を参照されたい。

排出源ごとの暴露シナリオでの数理モデルにおける土壌の消失の 1 次速度定数（分解）は、総括分解のデータを用いる場合と機序別の分解のデータを用いる場合に分けて式 V-34 で求める。総括分解のデータを用いる場合はそのままで利用する。一方、機序別の分解のデータを用いる場合、生分解のデータは土壌における粒子吸着態と溶存態に適用し、加水分解のデータは土壌における溶存態に適用するため、それぞれの質量分布比を乗じる。土壌は固体（土壌粒子）、水、空気から構成され、土壌中の化学物質は粒子吸着態（土壌粒子に吸着した状態）、溶存態、ガス態で存在すると仮定している（V.3.3.3 参照）。粒子吸着態

[1] 本スキームでは、1 次反応による分解を想定した数式を用いており、分解の速度＝分解速度定数×化学物質濃度を仮定している。

質量分布比とは、粒子吸着態、溶存態及びガス態の化学物質の質量の総和に対する粒子吸着態の化学物質の質量の比を表している（無次元の値）。溶存態質量分布比も同様の考え方である。

■総括分解のデータを用いる場合：

土壌における消失の１次速度定数（分解）[1/日]

＝土壌における総括分解１次速度定数[1/日]

■機序別の分解のデータを用いる場合：

土壌における消失の１次速度定数（分解）[1/日]

＝土壌における生分解の１次速度定数[1/日]×（粒子吸着態質量分布比＋溶存態質量分布比）＋土壌における加水分解の１次速度定数[1/日]×溶存態質量分布比

式 V-34

式 V-34 の機序別の分解のデータを用いる場合の式は、分解の機序として生分解と加水分解を想定したものであるが、より一般的には、式 V-35 により土壌の消失の１次速度定数（分解）を求めることができる。右辺の F は土壌中の粒子吸着態、溶存態、ガス態の質量分布比であり、k は粒子吸着態、溶存態、ガス態に適用する分解の機序の１次速度定数である。排出源ごとの暴露シナリオで用いる数理モデルでは、基本的に機序別の分解のデータは式 V-34 によって利用することを想定しているが、これだけでは対応出来ない場合は、必要に応じてより一般的な式 V-35 を用いる。

土壌における消失の１次速度定数（分解）[1/日]

$$= F_{粒子吸着態} \times k_{粒子吸着態} + F_{溶存態} \times k_{溶存態} + F_{ガス態} \times k_{ガス態}$$

式 V-35

V.4.5.5　必要に応じて追加する情報

V.4.5.3 ～V.4.5.4 で述べた項目以外に、必要に応じ図表 V-30 のようなケースに情報を追加調査し、入手できた場合は暴露評価Ⅱの中で利用する。

この追加調査は、暴露評価に用いる数理モデルにデフォルトで設定しているパラメータやシナリオによる推計暴露量でリスク懸念となる場合に、デフォルト設定を可能な範囲で実態を反映したデータに置き換えたり、解釈を加えたりするために行う。なお、図表 V-30 は例示であり、他に調査可能な情報があれば必要に応じて追加して用いる。

図表 V-30　追加調査する情報の例

項目	収集するケース	使用目的	情報源の例
排出先河川の流量	PRTR 対象物質で河川への排出の届出があり、その排出源でリスク懸念となる場合	デフォルト流量を置き換え、暴露量を推計し直すため	国土交通省の流量年表
排出地域での土地利用状況	PRTR 対象物質で届出事業所から大気への排出があり、農作物・畜産物経由の寄与でリスク懸念となる場合	排出源周辺で産出する農作物・畜産物を摂取するというデフォルトのシナリオを設定し直すため	国土数値情報「土地利用メッシュ」
排出先河川の取水口	PRTR 対象物質で河川への排出の届出があり、その排出源が飲料水経由の寄与でリスク懸念となる場合	排出先河川から飲料水を摂取するというデフォルトのシナリオを設定し直すため	浄水場の取水口（取水堰）の位置情報
水道水の浄化率	飲料水経由の寄与でリスク懸念となる場合	浄化率 0%（浄化されない）というデフォルトのシナリオを設定し直すため	水道法に基づく水質基準等[1]

V.4.6 環境中濃度推計

本項では、排出源ごとの暴露シナリオに基づく暴露評価に関し、環境中濃度を推計する手法について暴露評価 I と異なる部分を整理する。

環境中濃度推計モデルに対象物質の物理化学的性状等と排出源ごとの排出量を入力し、環境中濃度を推計して人の摂取量を推計する手順は基本的に暴露評価 I と同じである。PRTR 情報が得られる場合、製造数量等の届出情報に基づく場合と並列で実施する（図表 V-26 参照）。

暴露評価 I と異なるのは、V.4.5 で示した暴露関連の既存情報収集と精査の結果、得られた情報に応じて暴露量を推計し直す等の以下の点である。逆に言えば、これらの情報が得られなければ推計暴露量は評価 I と同じである。

■製造数量等の届出情報と PRTR 情報を適用する場合に共通する点

（ア）対象物質の物理化学的性状の採用値を変更した場合（V.4.5.3 参照）、数理モデルの入力データも置き換える。

（イ）環境媒体中の分解速度に関するデータについて（V.4.5.4 参照）暴露評価 I におけるゼロの替わりに得られたデータに置き換える。排出源ごとの暴露シナリオに用いる数理モデルに関連する箇所は土壌中濃度推計の部分のみである（V.4.5.4 (2) 参照）。

■製造数量等の届出情報を適用する場合

（ウ）物理化学的性状の精査（V.4.5.3 参照）や用途分類が「#98 その他の原料、その他の添加剤」又は詳細用途分類が「z その他」となっている届出の調査（V.4.5.1 (2)参照）

[1] 個別の化学物質の浄化率は不明な場合が多いと想定されるので、水質基準等の基準値や目標値を参考にすることが考えられる。

を行った結果、推計排出量が変わった場合、排出量を置き換えて暴露量を推計し直す。

■PRTR 届出情報を適用する場合

(エ) 河川への排出がある場合には、デフォルトの流量に製造数量等の届出情報を用いる場合とは異なる数値を用いる[1]。

(オ) 河川への排出があり、その寄与で人の健康へのリスクが懸念される場合、その排出先河川の流量が得られればデフォルト流量を置き換え、その届出事業所に係る暴露量を推計し直す（V.4.5.5 図表 V-30 参照）。

V.4.7 人の摂取量推計

本項では、排出源ごとの暴露シナリオに基づく暴露評価に関し、人の摂取量を推計する手法について暴露評価Ⅰと異なる部分を整理する。

■製造数量等の届出情報と PRTR 情報を適用する場合に共通する点

(ア) 暴露評価Ⅱでは、有害性の内容によっては経路別に人の暴露量を求める[2]（詳細はⅡ章を参照）。

(イ) 人の食物からの摂取量の推計では、暴露評価Ⅰでは排出源ごとの暴露シナリオでは自給率と近郊生産物摂取割合を加味していた（V.3.4 参照）。暴露評価Ⅱでは、必要に応じて、近郊生産物摂取割合等の暴露係数に幅をもたせて暴露量を求める[3]ことにする。安全側に立った場合とそうでない場合の暴露評価やリスク推計の結果を求め、評価のとりまとめの際の考察等に利用する。

■製造数量等の届出情報を適用する場合

特になし。

■PRTR 届出情報を適用する場合

(ウ) 海域への排出がある場合、その届出事業所の水域への排出による暴露経路は海域の魚介類摂取のみとし、摂取量を推計する（飲料水と淡水魚の摂取のシナリオの適用はしない）。

(エ) (ウ)の暴露量の推計では PRTR 届出情報のデフォルト流量に河川から海域への希釈率として 10 を乗じたものを用いて海水中濃度を求め、海水魚中濃度を求める（付属

[1] 水域への排出量が、製造数量等の届出情報を用いたものは安全側の推計値であり、PRTR 届出排出量は実態を反映しているものという違いを考慮するためである。付属資料 V.7.3.5 (1)参照。

[2] 例えば、吸入経路と経口経路では標的臓器が異なる場合である。

[3] 例えば、近郊生産物摂取割合を加味したケースと加味しないケースの両方で暴露量を求め、リスク推計の結果がどのように変わるかをみる。

資料 V.7.3.5 参照)。

(オ) 大気への排出があり、暴露評価の結果、農作物・畜産物経由の寄与で人の健康へのリスクが懸念される場合、その届出事業所の周辺（リスク懸念のエリア）に農地・牧草地が分布しないという情報が得られれば、その届出事業所に係る農作物・畜産物摂取のシナリオは適用せず、摂取量を推計し直す（V.4.5.5 図表 V-30 参照)。

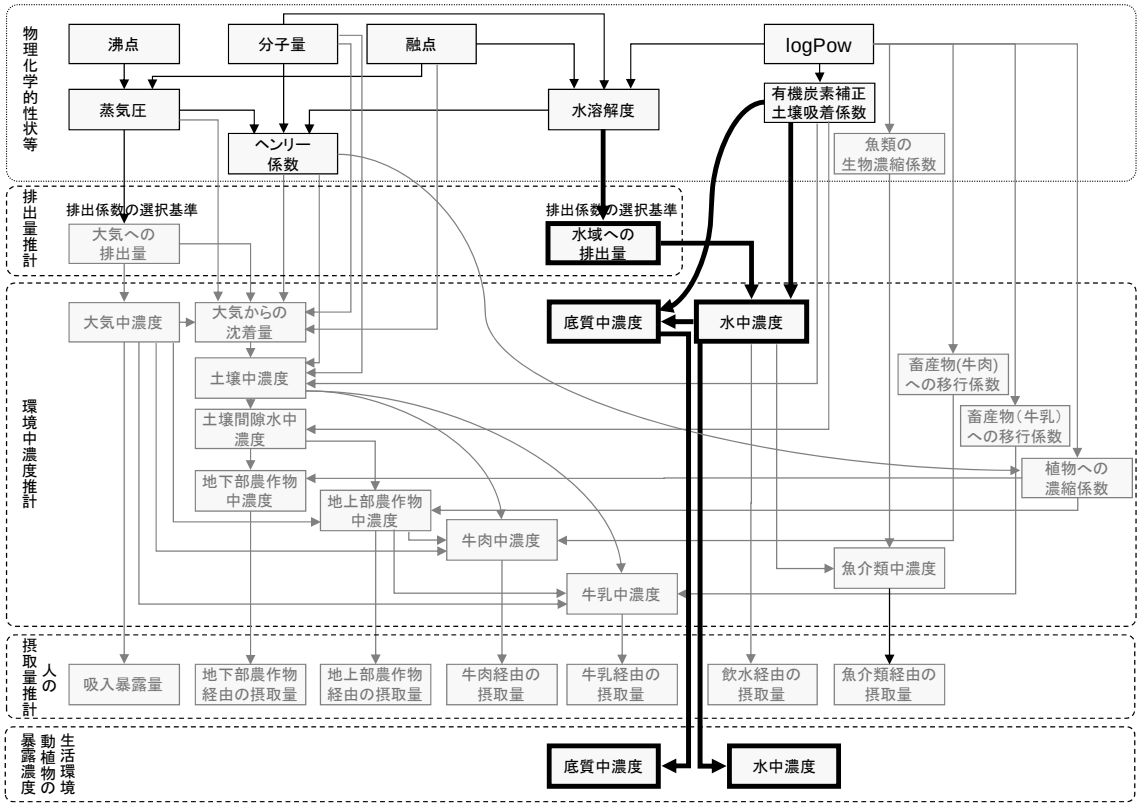
(カ) 河川への排出があり、暴露評価の結果、飲料水経由の寄与で人の健康へのリスクが懸念される場合、排出先河川とその下流には浄水場の取水口がないという情報が得られれば、その届出事業所に係る飲料水摂取のシナリオは適用せず、摂取量を推計し直す（V.4.5.5 図表 V-30 参照)。

V.4.8 水生生物及び底生生物の暴露濃度推計

本項では優先評価化学物質（生態）に対する暴露評価Ⅱについて、優先評価化学物質（人健康）に対する暴露評価Ⅱと異なる点を整理し、説明する。

優先評価化学物質（生態）については生活環境動植物に対するリスク評価を行う。生活環境動植物は水生生物と底生生物とし、評価Ⅰでは水生生物のみを対象としたが、評価Ⅱではこの両方を評価対象とする。すなわち PEC として水中濃度と底質中濃度を推計する。

優先評価化学物質（生態）の暴露評価Ⅱに関連する部分を図表 V-31 に太線で示す。



図表 V-31　優先評価化学物質（生態）の暴露評価Ⅱ（太線部分）

優先評価化学物質（生態）の暴露評価Ⅱについて、(1)製造数量等の届出情報を適用する場合、(2)PRTR 届出情報を適用する場合、(3)底質中濃度の推計の 3 点について説明する。

V.4.8.1　水中濃度の推計

本項では、排出源ごとの暴露シナリオに基づく暴露評価に関し、水中濃度を推計する手法について暴露評価Ⅰと異なる部分を整理する。

■製造数量等の届出情報と PRTR 情報を適用する場合に共通する点

(ア) 対象物質の物理化学的性状の採用値を変更した場合（V.4.5.3 参照）、数理モデルの入力データも置き換える。

■製造数量等の届出情報を適用する場合

(イ) 物理化学的性状の精査（V.4.5.3 参照）や用途分類が「＃98 その他」又は詳細用途分類が「z その他」となっている届出の調査（V.4.5.1 (2)参照）を行った結果、推計排出量が変わった場合、排出量を置き換えて暴露量を推計し直す（ただし、人の暴露量推計に係る部分は除く）。

■PRTR 届出情報を適用する場合

PRTR 届出排出量と排出先水域名が利用できる場合、河川水中濃度の推計式は暴露評価Ⅰの「V.3.5 水生生物の暴露濃度推計」と同じである。ただし、流量のデフォルト値を製造数量等の届出情報を用いる場合と変えて、以下のとおりとする。

(ウ) 河川への排出がある場合、デフォルトの流量には製造数量等の届出情報を用いる場合とは異なる数値を用いる（V.4.6(エ)と同様）。

(エ) (ウ)の結果、リスクが懸念され、排出先河川の流量が得られる場合はデフォルト流量を置き換え、その届出事業所に係る河川水中濃度を推計する（V.4.5.5 図表 V-30 参照）。

(オ) 海域への排出の場合、デフォルト流量に河川から海域への希釈率として 10 を乗じたものを用いて海水中濃度を求める(付属資料 V.7.3.5 参照)[1]。

V.4.8.2　底質中濃度の推計

logPow が 3 以上の物質については底生生物も評価対象とし（詳細はⅢ章を参照）、以下に示す方法で河川水中濃度から底質中濃度を推計する。

[1] つまり、基本的に水生生物の評価では河川中濃度を PEC として計算するが、PRTR 届出情報で排出先水域名が海域と特定できる場合は、海域中濃度を PEC として計算することになる。底生生物も同様。

ここで推計する底質中濃度は、暴露評価Ⅱで利用する排出量の種類に応じて次のようなものである。ただし、(イ)と(ウ)については、排出量が実態に即していても排出先の水域の情報が得られなければ、デフォルトの流量や希釈率、その他底質の性状等の仮定に基づく推計値であることは(ア)の推計値と変わりはない。

(ア) 製造数量等の届出情報に基づく水域への排出量の場合：
　　仮想的排出源から排出される化学物質が流入する仮想的な河川の底質中濃度
(イ) PRTR 届出情報に基づく河川への排出量の場合：
　　その届出事業所から排出される化学物質が流入する河川の底質中濃度
(ウ) PRTR 届出情報に基づく海域への排出量の場合：
　　その届出事業所から排出される化学物質が流入する海域の底質中濃度

底質中濃度を推計するために化学物質に係るパラメータとして以下の数値が必要である。

- 河川水中濃度　　（V.4.8.1 で推計）
- 有機炭素補正土壌吸着係数

また、化学物質の底質中濃度の推計では、以下のことを仮定している。

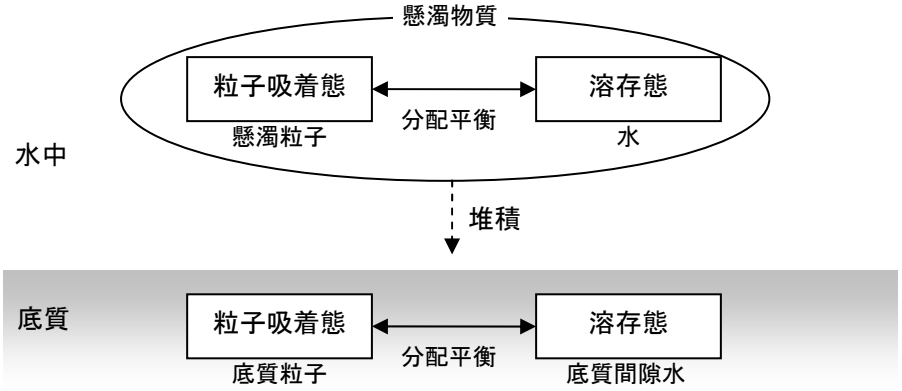
- 仮想的排出源からの排出先水域は河川である（製造数量等の届出情報を用いる場合）。
- 新たに堆積した底質中の化学物質濃度を底質に対する PEC とみなし、水中の懸濁物質の性状を計算に用いる（REACH-TGD[1]での考え方）。
- 懸濁物質中の化学物質は粒子吸着態（懸濁粒子）と溶存態（水）で存在し、分配平衡にある（=底質中の化学物質は粒子吸着態（底質粒子）と溶存態（底質間隙水）で存在し、分配平衡にある）。

また、$PNEC_{sed}$ が乾燥重量当たりの濃度で表されるため[2]、PEC_{sed} である底質中濃度も乾

[1] ECHA (2010) Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.16: environmental exposure estimation, version: 2

[2] 底生生物の有害性評価は、化審法では原則、底質添加によるユスリカ毒性試験（OECD TGD 218）で定められた方法に準じて実施することになっている。厚生労働省医薬食品局長，経済産業省製造産業局長，環境省総合環境政策局長（2011）新規化学物質等に係る試験の方法について，平成 23 年 3 月 31 日，薬食発 0331 第 7 号，平成 23・03・29 製局第 5 号，環保企発第 110331009 号.
　この試験における底質は以下のようなものであり、底質（乾重量当たりの化学物質重量）の測定濃度を影響濃度として用いている。
OECD (2004) OECD Guidelines for the testing of chemicals No218: Sediment-water chironomid toxicity test using spiked sediment.
- 人工的に調整した底質を用いることを推奨。人工底質の成分は石英砂 75-76%、ピートモス 4-5%、カオリン（粘土鉱物）20%（全て乾重量割合、段落 13 より）。
- 被験物質は脱イオン水に溶かして、調整底質に混合される。しかし、難水溶性の場合には、試験物質は出来る限り少量の有機溶剤に溶かして、石英砂と混合することも可

燥重量当たりの濃度で求める。



図表 V-32　底質中の化学物質の存在形態

底質中濃度（乾燥重量当たり）は、以下の式で求める。

底質中濃度(乾燥重量当たり)
＝溶存態濃度×懸濁物質-水分配係数／懸濁物質のバルク密度　　式 V-36
×換算係数(湿潤重量から乾燥重量へ)

溶存態濃度＝(1－懸濁粒子への吸着率)×水域への排出量／河川流量　　式 V-37

底質中濃度(乾燥重量当たり)	：底質相の化学物質質量を底質粒子の質量で除したもの
溶存態濃度	：河川水中溶存態濃度＝懸濁物質中溶存態濃度と仮定。河川水中溶存態濃度を求める式（式 V-26）による仮想的排出源から排出された化学物質が流入する河川の化学物質の溶存態濃度。海域の場合は、海域の希釈率を考慮した式（式 V-30）による海水中の溶存態濃度
懸濁物質-水分配係数	：化学物質の Koc と懸濁物質の性状（懸濁物質中の懸濁粒子の容積比率、懸濁物質中の懸濁粒子に対する有機炭素含有率等）で決まる値
懸濁物質のバルク密度	：デフォルト値
濃度換算係数(湿潤重量→乾燥重量)	：デフォルト値

能である。なお、溶剤は完全に蒸発除去させる（段落 16 より）。
・ 上層水、間隙水、底質の３種類を、暴露開始時と終了時に実測することを推奨する。これらは、試験化学物質の水・底質における分配動態を示すものである(段落 38 より)。
・ 影響濃度は、試験開始時の底質の測定濃度に基づいて計算することが望ましく、乾重量当たりの化学物質重量として示す（段落 43 より）。

V.4.9 物質の分類に応じた暴露評価Ⅱの扱い

本項では、モデル推計に関して、暴露評価Ⅰで記載した内容「V.3.6 物質の分類に応じた暴露評価Ⅰ」にさらに追加する部分の概要を記載する。

V.4.9.1　環境分配モデル適用物質（構造不定）の暴露評価Ⅱ

「環境分配モデル適用物質（構造不定）」に分類した化学物質は、暴露評価Ⅰでは、推計排出量に関してはワーストになるようなデフォルト値を設定した。暴露量に関しては一定の条件下で環境分配モデルによる人の暴露量が最大となる物理化学的性状一式の組合せを見つけ、そのワーストデフォルト暴露量（単位排出量当たり）を暴露評価Ⅰに用いた（V.3.6.1 参照）。

暴露評価Ⅱでは、物質の性状を確認し個別に検討することになる。例えば、物理化学的性状がたとえ得られなくても、物質の構造上、その物質が明らかに取り得ない蒸気圧や水溶解度の値の範囲を推測できれば、その範囲を除外した上でワーストデフォルト暴露量を設定する等である。

V.4.9.2　環境分配モデル適用外物質の暴露評価Ⅱ

「環境分配モデル適用外物質」に分類した化学物質は、暴露評価Ⅰでは、物理化学的性状を用いない単純希釈と魚介類中濃度推計の部分のみ推計した（V.3.6.2 参照）。

暴露評価Ⅱでは、物質の性状を確認し個別に検討することになる。例えば、logPow が測定できない物質であっても土壌と水の間の分配係数が得られたり、金属に関して農作物や畜産物への移行係数を推計する手法があったりするなど、ケースバイケースで環境媒体間の推計も含むモデルの適用が可能になる場合がある。

なお、暴露評価Ⅰで環境分配モデル適用物質として分類していた物質も、暴露評価Ⅱでは個別対応を行う場合がある。多くの物質を対象とする暴露評価Ⅰでは効率的に評価を進めるため、一定の基準のもとで得られた物理化学的性状の値を、基本的に個別に妥当性を精査することなく用いていた。暴露評価Ⅱでは、物質の性状に応じた手法を用いる。例えば、環境中でイオンに解離する物質の場合、適切に評価するためには得られた物理化学的性状の値が解離状態における値なのか、イオンの値なのかを区別する必要がある。そのような物質では、環境中で想定される pH と評価対象物質の pKa の値により、物理化学的性状や環境中濃度推計式を必要に応じて補正して用いること等を検討する。

V.5 暴露評価Ⅲ

V.5.1 評価Ⅲの目的

評価Ⅲは、評価Ⅱのリスク評価結果が「暴露要件への該当性等の判断の根拠に足る信頼性がない」と判断された優先評価化学物質を対象に行う。そのような物質の場合、評価Ⅱで抽出された不確実性を低減させるための暴露関連情報の種類が示される。評価Ⅲに先立ち、それらの情報を入手の上、評価Ⅲに着手することになる。入手した情報を加味し、排出量や暴露量の再計算等を行う。原則として、判断の根拠に足る評価結果が得られるまでこの段階に留まると想定される。手法自体は基本的には評価Ⅱと変わらないが、得られる情報等に応じて暴露シナリオの見直しや適用する推計モデルの追加等は考えられる。

以下では排出源ごとの暴露シナリオの暴露評価Ⅲの例を示す。

V.5.2 暴露評価Ⅲの例示

評価Ⅲでは化審法第 42 条に基づいた使用実態の調査を行い、それにより取扱事業者から提供された情報も加味することになる。リスク懸念となる用途について産業界からの情報（例えば排出源の位置情報や排出先の河川名等）の提供により暴露量の推計が精緻化される場合には、必要に応じ、図表 Ⅴ-34 のような情報を調査し、入手できた場合は暴露評価Ⅲで暴露シナリオの見直しに活用する。これらの情報は暴露評価Ⅱの「V.4.5.5 必要に応じて追加する情報」の図表 V-30 とほぼ同様であるが、製造数量等の届出情報だけでは製造場所を除き排出源の位置情報等が得られないため、PRTR 対象物質でないと追加の情報収集ができなかった。しかし、暴露評価Ⅲでの産業界からの情報提供により排出源の位置情報や排出先河川名等が判明することによって追加の情報収集とそれによる暴露シナリオの見直しが可能となる。

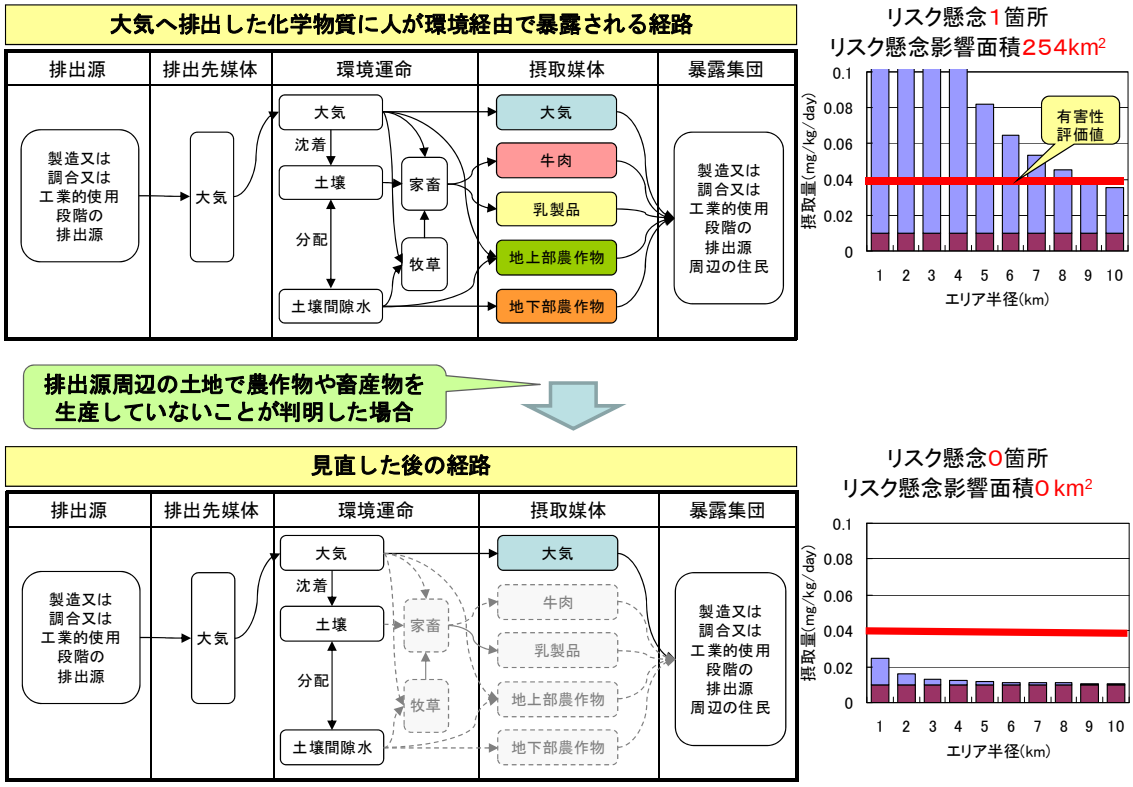
図表 V-33　暴露シナリオの見直しのため収集する情報の例

項目	収集するケース	使用目的	情報源の例
排出先河川の流量	河川経由の寄与でリスク懸念となる用途があり、排出先の河川名が判明した場合	デフォルト流量を置き換え、暴露量を推計し直すため	国土交通省の流量年表
排出地域での土地利用状況	農作物・畜産物経由の寄与でリスク懸念となる場合の用途があり、その用途の排出源の位置情報が得られた場合	排出源周辺で産出する農作物・畜産物を摂取するというデフォルトのシナリオを設定し直すため	国土数値情報「土地利用メッシュ」
排出先河川の取水口	飲料水経由の寄与でリスク懸念となる用途があり、排出先の河川名が判明した場合	排出先河川から飲料水を摂取するというデフォルトのシナリオを設定し直すため	浄水場の取水口（取水堰）の位置情報

暴露シナリオの見直しがリスク推計結果を左右する例を図表 V-34 に示す。

この場合、リスク懸念となる排出源の位置情報を得られ、その地域での土地利用状況を調べた結果、農作物や畜産物の生産を行っていないことが判明したケースである。農作物や畜産物経由の暴露経路を暴露シナリオから削除し、農作物摂取や畜産物摂取の暴露量を人の合計暴露量から除くため、リスク推計結果が大きく変化する。

なお、暴露シナリオの見直しに必要な排出源の位置情報等を全ての排出源について得ることは困難であると想定されるため、先に信頼性の低い物理化学的性状データ等の信頼性を高めておき、そのうえでリスク懸念となる用途を特定しておく必要がある。



図表 V-34　暴露シナリオの見直しによるリスク推計結果の変化のイメージ

V.6 リスク評価（二次）における暴露評価

この段階では、新たに得られた長期毒性情報を用いて、暴露要件該当性の確認を行うための再評価を行う。

リスク評価（二次）の有害性評価については、有害性調査指示に基づき事業者から報告された長期毒性に係る有害性情報を用いて、有害性評価値を導出することとし、暴露評価については評価Ⅲと同様の方法を基本とするが、新たに情報が得られた場合には、それらを踏まえて、排出係数の見直しや暴露シナリオの見直しを行うなどの改善、精緻化を図ることとする。

V.7 付属資料

V.7.1　はじめに

この付属資料では、排出源ごとの暴露シナリオにおける暴露評価で環境中濃度や人摂取量を推計するために使用する数理モデルに関して、具体的な数式やパラメーター式、それらの数式やパラメータを選択した経緯等を収載する。

本編（V.6 までのこと）には数理モデルの概要をなるべく数式を使わない形で記載していたが、この付属資料では数式を用いて数理モデルを正確な形で記載している。

必要に応じて本編と同じ説明を繰り返している箇所もあるが、全ての内容を再度説明しているわけではない。読者が本編の該当箇所に目を通していることを前提にして記載している点に留意されたい。

V.7.2 数理モデルに用いるデータ

V.7.2.1　化学物質に関するデータ

排出源ごとの暴露シナリオに適用する数理モデルで用いる化学物質のデータを図表 V-35 に示す。

図表 V-35　数理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※1
MW	分子量	—	
WS	水溶解度	[mg/L]	
VP	蒸気圧	[Pa]	
MP	融点	[℃]	
logPow	1-オクタノールと水との間の分配係数	—	
Henry	ヘンリー係数	[Pa・m3/mol]	
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]	
BCF	生物濃縮係数	[L/kg]	
$t_{1/2,\,sobio}$	土壌における生分解の半減期※2	[day]	
$t_{1/2,\,sowater}$	土壌における加水分解の半減期※2	[day]	
$t_{1/2,\,sototal}$	土壌における総括分解半減期※2	[day]	

※1　いずれの情報も評価の準備（Ⅰ章）で選定された数値を用いる。
※2　評価Ⅰにおいては半減期を「∞（無限大）」[day]、分解速度定数を「0」[1/day]とし、評価Ⅱで考慮する。

V.7.2.2　気象・環境特性のデータ

排出源ごとの暴露シナリオに適用する数理モデルに設定している主な気象・環境特性の

データのデフォルト値を図表 V-36 に示す。なお、環境中濃度推計のために、他にも多くのデフォルト値を設定しているが、それらは V.7.3 から始まる各推計式の説明を参照されたい。

図表 V-36　主な気象・環境特性のデータのデフォルト値

記号	説明	単位	値	出典･参照先
TEMP	環境温度	[℃]	20	MNSEM UM[1]デフォルト
大気				
u	風速	[m/sec]	2.0	※1(この表の下を参照)
TRF_{year}	年間降水量	[mm/year]	1500	MNSEM UM デフォルト
rainyday	降雨日数	[day/year]	100	MNSEM UM デフォルト
C_{AER}	大気浮遊粒子濃度	[mg/m^3]	0.03	MNSEM UM デフォルト
ρ_p	粒子みかけ密度	[kg/m^3]	1500	MNSEM UM デフォルト
r	粒子の半径	[μm]	5	MNSEM UM デフォルト
水域				
Vriver_man	河川流量(人評価用)			
	①化審法推計排出量用	[m^3/sec]	20.85	長期平水流量の 50%ile 値
	②PRTR 届出排出量用(海域以外)	[m^3/sec]	4.35	長期平水流量の 10%ile 値
Vsea_man	海域流量(人評価用)	[m^3/sec]	43.5	長期平水流量の 10%ile 値の 10 倍
Vriver_body_env	生態の暴露量推算に係る水域流量			
	①化審法推計排出量用	[m^3/sec]	13.47	長期低水流量の 50%ile 値
	②PRTR 届出排出量用(海域以外)	[m^3/sec]	2.51	長期低水流量の 10%ile 値
	③PRTR 届出排出量用(海域)	[m^3/sec]	25.1	長期低水流量の 10%ile 値の 10 倍
CWss	水中懸濁粒子濃度	[mg/L]	50	MNSEM UM デフォルト
FOC_{susp}	懸濁物質中の懸濁粒子に対する有機炭素比率	—	0.1	REACH-TGD デフォルト※2
土壌				
DEP_{SO}	土壌深度	[m]	0.2	MNSEM UM デフォルト
SOAF	土壌空気容積比	—	0.2	MNSEM UM デフォルト
SOWF	土壌水容積比	—	0.3	MNSEM UM デフォルト
SOSF	土壌粒子容積比	—	0.5	MNSEM UM デフォルト
OC_{SOS}	土壌粒子の有機炭素含有率	—	0.04	MNSEM UM デフォルト
DEN_{SOS}	土壌粒子の密度	[kg/L]	1.5	MNSEM UM デフォルト

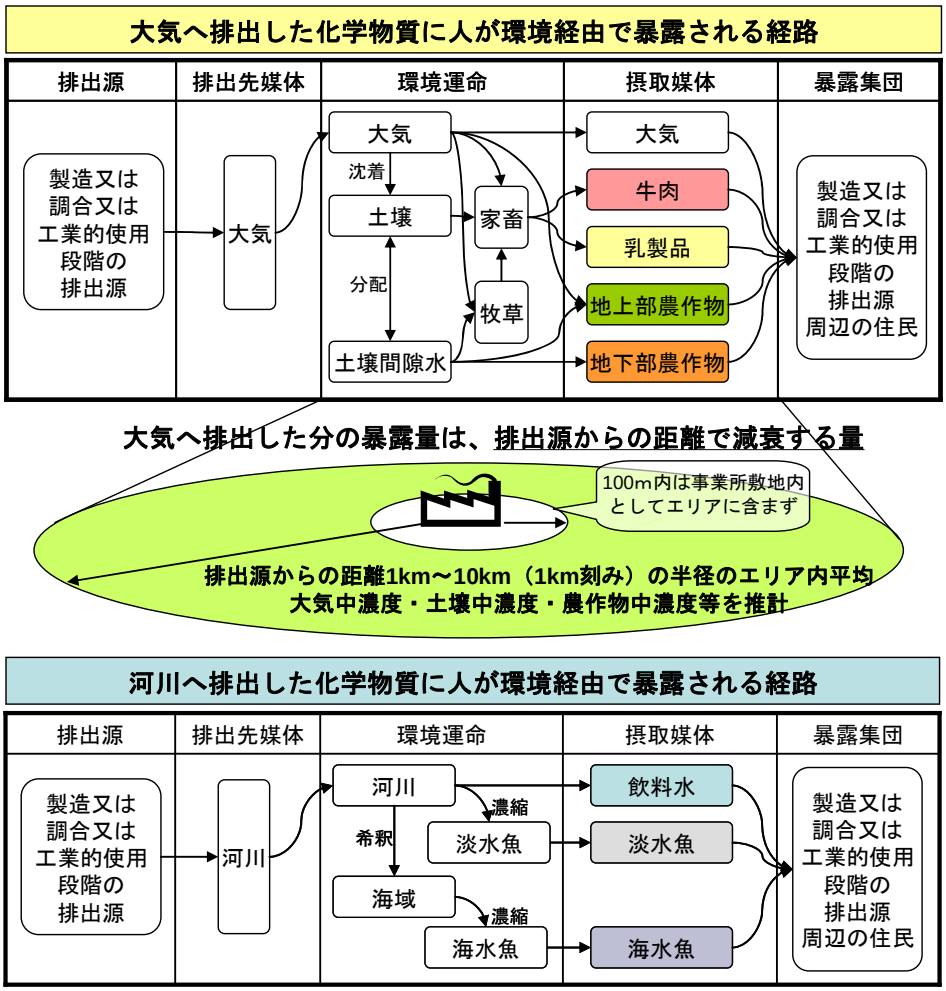
※1　1994 年度から 2003 年度までの全国約 800 地点のアメダス気象観測データの中央値を求めた。
※2　底質中濃度を推計する際に懸濁粒子の性状を用いる REACH-TGD の手法を利用したので、デフォルト値もそれに合わせた。

V.7.3 環境中濃度推計に用いる数理モデル

図表 V-37 に排出源ごとの暴露シナリオで考慮している暴露経路を再掲する。

以下では各環境媒体（摂取媒体）の濃度推計に用いる数理モデルの詳細を順に説明する。

[1] 株式会社三菱化学安全科学研究所（1998) Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model version 2.0 ユーザーズマニュアル.（以下 MNSEM UM と呼ぶ）



図表 V-37　排出源の暴露シナリオの暴露経路（図表 V-6 の再掲）

V.7.3.1　大気中濃度と沈着量の推計

本編 V.3.3.2 に対応しており、大気中濃度推計と大気からの沈着量の推計について具体的な数式やパラメータを説明する。

大気中濃度は人の吸入暴露量の推計（V.7.4.1 ）、地上部農作物中濃度の推計（V.7.3.3 (2)、V.7.3.3 (3)）、牛肉中濃度及び牛乳中濃度の推計（V.7.3.4 ）に利用する。沈着量は化学物質の土壌中濃度及び農作物中濃度の推計に利用し、最終的に経口暴露量の推計に利用する。

大気中濃度と沈着量を推計するために、以下の数値が入力値となる。

- 大気への排出量　（IV.4.4「排出源ごとの暴露シナリオにおける排出量推計」で推計）
- 化学物質の物理化学的性状　（分子量、融点、蒸気圧、ヘンリー係数）

排出源から大気へ排出された化学物質はガス態、又は浮遊粒子に吸着した状態（粒子吸着態）で大気中に存在すると仮定し、沈着に関しては、ガス態や粒子吸着態が重力や拡散等により土壌に沈着する「乾性沈着」と、ガス態や粒子吸着態が雨水に取り込まれて降雨により土壌に沈着する「湿性沈着」を想定している。

ここで用いる「沈着量」とは、特に断りがない限り単位時間・単位面積当たりの沈着量を表している。土壌への沈着が起きるということは大気中から化学物質が除去され、大気中濃度が減少することを意味する。本手法では大気中に存在する化学物質と土壌へ沈着する化学物質の和が大気への排出量以上にならないようにするために補正係数を作り、補正係数を大気中濃度や沈着量に乗じることで過度な過大評価を抑制している（経緯等は V.7.5.1 (2)を参照）。

(1) 大気中濃度

大気中濃度は、本シナリオ用に単位排出量[1]当たりの大気中濃度（式 V-38 の *a* に相当）をあらかじめ導出しておき、それに評価対象物質の大気への排出量（変化物の場合は大気における変化物の生成量。「V.2.6 分解性の扱い」参照）を乗じることにより求める。

この比例係数 *a* をここでは「大気中濃度換算係数」という。

大気中濃度換算係数 *a* は、日本の気象条件を考慮した値にするため、「経済産業省－低煙源工場拡散モデル：Ministry of Economy, Trade and Industry - Low rise Industrial Source dispersion Model (METI-LIS) ver.2.03」（以下、「METI-LIS」という）の計算エンジンを組み込んだプログラムを作成し、アメダス気象観測データをインプットして計算することで導出した。導出の詳細は V.7.5.1 (1)を参照されたい。

$$C_0(1.5) = a \times Q' \qquad \text{式 V-38}$$

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C0(1.5)	大気中濃度（沈着による減少を考慮する前）	[mg/m³]		
Q'	排出量（t/year）	[t/year]		
TEMA	評価対象物質の大気への排出量	[kg/year]		Ⅳ章
a	大気中濃度換算係数	[mg/m³/(t/year)]	※	

※　評価エリア半径により変化する（図表 V-38）。

大気中濃度換算係数 *a* は、評価エリア半径 1[km]～10[km]によって異なる値をとる。そ

[1] 単位排出量とはここでは 1[t/year]のこと。ただし、実際に大気中濃度換算係数を導出する際は、排出量が 1[kg/s]の時の値を求めておき、後で単位換算している。

の値を図表 V-38 に示す。

図表 V-38　評価対象半径ごとの大気中濃度換算係数 *a*

評価対象半径[km]	大気中濃度換算係数[mg/m³／(t/year)]
1	1.8×10^{-4}
2	7.5×10^{-5}
3	4.1×10^{-5}
4	2.9×10^{-5}
5	2.0×10^{-5}
6	1.6×10^{-5}
7	1.2×10^{-5}
8	1.0×10^{-5}
9	8.4×10^{-6}
10	7.2×10^{-6}

式 V-38 で求めた $C_0(1.5)$は、沈着による減少を考慮していない大気中濃度である。沈着によって減少した大気中濃度は、以下のように $C_0(1.5)$に沈着による補正係数を乗じることにより求める。

$$C(1.5) = C_0(1.5) \times K_{dep}$$ 式 V-40

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C(1.5)$	大気中濃度（沈着による減少を考慮した後）	[mg/m³]		V.7.5.1 (2)②
$C_0(1.5)$	大気中濃度（沈着による減少を考慮する前）	[mg/m³]		式 V-38
K_{dep}	沈着による補正係数	—		V.7.3.1 (2)②i) 式 V-52

(2) 大気から土壌への沈着量

大気相から土壌相への化学物質の沈着は土壌中濃度の増加要因で、その沈着過程は大気相における粒子吸着態及びガス態の湿性及び乾性沈着がある。減少要因である消失については V.7.3.2 で述べる。ここでは沈着量の求め方を説明する。

① 乾性・湿性沈着で共通のパラメータ

大気相から土壌相への化学物質の沈着量の推計において、粒子吸着態及びガス態の乾性・湿性の沈着に共通して用いられるパラメータがある。このパラメータを以下に示す。

$$FP = \frac{CJ \times SP}{VPL + CJ \times SP}$$ 式 V-41

$$1 - FP = \frac{VPL}{VPL + CJ \times SP}$$ 式 V-42

記号	説明	単位	値	出典・参照先
FP	大気相における化学物質の粒子吸着態の割合※1	—		REACH-TGD[1] Chapter R.16.5.3 (式 R.16-2)
$1-FP$	大気相における化学物質のガス態の割合※2	—		REACH-TGD Chapter R.16.5.3 (式 R.16-2)
$CJ \times SP$	Junge 式の定数（CJ）と浮遊粒子の表面積（SP）の積	[Pa]	0.0001	REACH-TGD Chapter R.16.5.3 (式 R.16-2)デフォルト
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 又は式 V-44

※1　FPの定義は以下のとおり。
大気相における粒子吸着態の化学物質の濃度を C_g[mg/m³]、粒子吸着態の化学物質の濃度を C_p [mg/m³]とすると、$FP = C_g / (C_g + C_p)$
※2　※１より、$1 - FP = C_p / (C_g + C_p)$

化学物質の融点が 20℃より高い場合は、式 V-41 及び式 V-42 の VPL に過冷却液体状態の飽和蒸気圧を使う。固体状態の飽和蒸気圧を過冷却液体状態の飽和蒸気圧に変換するには式 V-43 を用いる。

MP>20 のとき

$$VPL = VP \times e^{\frac{\Delta Sf}{R} \times \frac{MP-20}{293.15}}$$ 式 V-43

MP≦20 のとき

$$VPL = VP$$ 式 V-44

記号	説明	単位	値	出典・参照先
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]		HHRAP[2],AppendixB, TABLE B-1-1 ※1
VP	蒸気圧 ※2	[Pa]		化学物質情報
$\Delta Sf / R$	融解エントロピー／気体定数	—	6.79	HHRAP デフォルト
MP	融点	[℃]		化学物質情報

※1　HHRAP では e の指数の右側は(MP−284)／284（MPの単位は[K]）となっている。これは環境温

[1] ECHA (2010) Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.16: environmental exposure estimation, version: 2.
[2] U.S. EPA (2005) Human health risk assessment protocol for hazardous waste combustion facilities, EPA530-R05-006.

度 11℃としているためであり、本スキームの環境温度 20℃に合わせ、さらに絶対零度を 273.15℃とすると((*MP*+273.15)-(20+273.15))／(20+273.15) = (*MP*−20)／293.15（*MP*の単位は[℃]）となる。

※2　*MP*>20℃の時には固体状態の 20℃における飽和蒸気圧である。

降雨時は、大気相は空気、浮遊粒子、雨水で構成されているものとする。空気、浮遊粒子、雨水に分配される化学物質をそれぞれ、ガス態、粒子吸着態、雨水溶存態の化学物質とする。分配平衡を仮定すると、ガス態の化学物質の質量比 *FAA*（＝ガス態の化学物質の質量／（ガス態の化学物質の質量＋粒子吸着態の化学物質の質量＋雨水溶存態の化学物質の質量））と、粒子吸着態の化学物質の質量比 *FAP*（＝粒子吸着態の化学物質の質量／（ガス態の化学物質の質量＋粒子吸着態の化学物質の質量＋雨水溶存態の化学物質の質量））は以下式 V-45 と式 V-46 のように表せる。

また、雨の降らない晴れた時では、大気相は空気と浮遊粒子で構成されているものとする。ガス態、粒子吸着態の化学物質を考え分配平衡を仮定すると、ガス態の化学物質の質量比 1-*FP*（＝ガス態の化学物質の質量／（ガス態の化学物質の質量＋粒子吸着態の化学物質の質量）は前述の式 V-41 で表せ、粒子吸着態の質量比（＝粒子吸着態の化学物質の質量／（ガス態の化学物質の質量＋粒子吸着態の化学物質の質量））*FP*は前述の式 V-42 で表せる。

洗浄比 *RRT*は、ガス態と粒子吸着態の合計化学物質濃度と雨水中の化学物質濃度の比を表しており、洗浄比が大きいほど雨水によく取り込まれることになる。

$$FAA = \frac{1 - FP}{1 + \dfrac{RRT \times TRF}{V_{rain} - TRF}}$$ 式 V-45

$$FAP = \frac{FP}{1 + \dfrac{RRT \times TRF}{V_{rain} - TRF}}$$ 式 V-46

$$RRT = \frac{1 - FP}{HENRY} + CEP \times FP$$ 式 V-47

記号	説明	単位	値	出典・参照先
FAA	降雨時の大気相でのガス態の化学物質の質量比	—		MNSEM UM3.1.1※1
FAP	降雨時の大気相での粒子吸着態の化学物質の質量比	—		MNSEM UM3.1.1※1
RRT	洗浄比	—		MNSEM UM3.1.1
TRF	日平均降水量	[m/day]		式 V-48
Vrain	雨水降下速度	[m/day]	561600	MNSEM UM デフォルト※2
FP	大気相における化学物質の粒子吸着態の割合	—		式 V-41

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$1-FP$	大気相における化学物質のガス態の割合	—		式 V-42
CEP	浮遊粒子の捕集率	—	2×10^5	MNSEM UM デフォルト
$HENRY$	無次元ヘンリー係数	—		化学物質情報

※1　MNSEM UM では右辺の分母は $1+RRT\times VOLAW/VOLAAP$ と表されている（$VOLAW$ は雨水コンパートメントの容積[m³]で、$VOLAAP$ は大気相でのガス態コンパートメントと粒子吸着態コンパートメントの合計容積[m³]）。
$VOLAW=TRF\times DEPA/Vrain\times SUA$（DEPA は大気相の高さ[m]）、$VOLAAP=VOLA-VOLAW$、$VOLA=SUA\times DEPA$ を $VOLAW/VOLAAP$ に代入すれば、$VOLAW/VOLAAP=TRF\times SUA\times DEPA/Vrain/(SUA\times DEPA-TRF\times DEPA/Vrain\times SUA)=TRF\times(Vrain-TRF)$ となり、同じ式になる。

※2　雨水降下速度は MNSEM UM デフォルトの「6.5」[m/s]を[m/day]に単位換算した値である。

湿性沈着量を推計するためには降水量が必要であり、雨の日の 1 日当たり平均降水量（日平均降水量）は降雨日数を考慮して以下のように求める。

$$TRF=\frac{TRF_{year}}{1000\times rainyday}$$ 式 V-48

記号	説明	単位	値	出典・参照先
TRF	日平均降水量	[m/day]	0.015	※
TRF_{year}	年間降水量	[mm/year]	1500	MNSEM UM デフォルト
$rainyday$	降雨日数	[day/year]	100	MNSEM UM デフォルト

※　日平均降水量は、降雨日数の 100[day/year]（1mm/day 以上の降雨がある日数）の間に平均的に降雨するものと仮定して算出した。

② 沈着量の推計

以下の推計手法を順に説明する。

- 総沈着量の推計
- 乾性沈着量・湿性沈着量の推計
- 沈着速度と雨水中濃度の推計

最終的に土壌中濃度と農作物中濃度を求める際に必要となるのは、上記の 1 番目の推計結果である。1 番目の推計のために 2 番目の推計結果が必要になり、2 番目の推計のために 3 番目の推計結果が必要になる。

i) 総沈着量の推計

ここでは大気から土壌への「総沈着量」を推計する方法について説明する。総沈着量とは 4 つの沈着の要因（ガス態乾性沈着、粒子吸着態乾性沈着、ガス態湿性沈着及び粒子吸着態湿性沈着）による沈着量の総和のことである。

本推計手法では、降雨の日と晴天の日の 2 パターンに分け、湿性沈着は降雨の日に起きると考える。総沈着量は、降雨の時の沈着量と晴天の時の沈着量を日数で平均化して以下

のように求め、「沈着による補正係数」を乗じる。沈着による補正係数とは沈着量を大きく推計し過ぎることを避けるために作られた係数であり、0 から 1 の値を取る。

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
DEP_{total}	総沈着量	[mg/day/m²]		V.7.5.1 (2)②
$rainyday$	降雨日数	[day/year]	100	MNSEM UM デフォルト
DEP_r	降雨時の総沈着量	[mg/day/m²]		式 V-55
K_{dep_r}	降雨時の沈着による補正係数	—		式 V-50
DEP_s	晴天時の総沈着量	[mg/day/m²]		式 V-56
K_{dep_s}	晴天時の沈着による補正係数	—		式 V-51

上述の沈着による補正係数は、降雨時と晴天時[1]に分けて具体的には以下のように表せる。この係数は本手法独自のものであり、導出の過程等は V.7.5.1 (2)②に示している。

また、この補正係数を降雨時と晴天時で平均化した K_{dep} を求める。それを大気中濃度に乗じて、沈着によって減少した大気中濃度を推計する。

$$K_{dep_r} = \frac{Q_d}{DEP_r \times SUA} \times (1 - \exp(-\frac{DEP_r \times SUA}{Q_d})) \qquad \text{式 V-50}$$

$$K_{dep_s} = \frac{Q_d}{DEP_s \times SUA} \times (1 - \exp(-\frac{DEP_s \times SUA}{Q_d})) \qquad \text{式 V-51}$$

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

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

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
K_{dep_r}	降雨時の沈着による補正係数	—		V.7.5.1 (2)②
K_{dep_s}	晴天時の沈着による補正係数	—		V.7.5.1 (2)②
K_{dep}	沈着による補正係数	—		V.7.5.1 (2)②
SUA	評価対象エリア面積	[m²]		※
Q_d	排出量（mg/day）	[mg/day]		
DEP_r	降雨時の総沈着量	[mg/day/m²]		式 V-55

[1] 晴天時とは、単に雨が降らない時という意味であり、曇りの時も含んでいる。

記号	説明	単位	値	出典・参照先
DEP_s	晴天時の総沈着量	[mg/day/m²]		式 V-56
rainyday	降雨日数	[day/year]	100	MNSEM UM デフォルト
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]		Ⅳ章

※　半径 *R*[km]の円から半径 100[m]の円を除いた面積

ii) **乾性沈着量・湿性沈着量の推計**

ここでは、乾性沈着量・湿性沈着量とそれらを降雨時と晴天時でそれぞれ合計した総沈着量の推計式を説明する。

降雨時の総沈着量は、４種類の沈着量、すなわち、ガス態乾性沈着量、粒子吸着態乾性沈着量、ガス態湿性沈着量及び粒子吸着態湿性沈着量を合計して求める。晴天時の総沈着量は、湿性沈着量を除く 2 種類の沈着量、すなわち、ガス態乾性沈着量及び粒子吸着態乾性沈着量を合計して求める。

$$DEP_r = DEP_{dry_g_r} + DEP_{dry_p_r} + DEP_{wet_g} + DEP_{wet_p}$$ 式 V-55

$$DEP_s = DEP_{dry_g_s} + DEP_{dry_p_s}$$ 式 V-56

記号	説明	単位	値	出典・参照先
DEP_r	降雨時の総沈着量	[mg/day/m²]		
DEP_s	晴天時の総沈着量	[mg/day/m²]		
$DEP_{dry_g_r}$	降雨時のガス態乾性沈着量	[mg/day/m²]		式 V-57
$DEP_{dry_p_r}$	降雨時の粒子吸着態乾性沈着量	[mg/day/m²]		式 V-58
DEP_{wet_g}	ガス態湿性沈着量	[mg/day/m²]		式 V-61
DEP_{wet_p}	粒子吸着態湿性沈着量	[mg/day/m²]		式 V-62
$DEP_{dry_g_s}$	晴天時のガス態乾性沈着量	[mg/day/m²]		式 V-59
$DEP_{dry_p_s}$	晴天時の粒子吸着態乾性沈着量	[mg/day/m²]		式 V-60

乾性沈着量は大気中濃度×沈着速度で求めて、湿性沈着量は雨水中濃度×日平均降水量で求める。

ガス態と粒子吸着態の比率は前述（V.7.3.1 (2)①）の式を降雨時と晴天時で使い分ける。この結果、4 種類の沈着量（ガス態乾性沈着量、粒子吸着態乾性沈着量、ガス態湿性沈着量及び粒子吸着態湿性沈着量）のうち、ガス態乾性沈着量及び粒子吸着態乾性沈着量は降雨時と晴天時で分けて推計するため､以下のように合計 6 種類の沈着量を求めることになる。

$$DEP_{dry_g_r} = C_0(1.5) \times FAA \times Rag$$ 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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$DEP_{dry_g_r}$	降雨時のガス態乾性沈着量	[mg/day/m²]		※1
$DEP_{dry_p_r}$	降雨時の粒子吸着態乾性沈着量	[mg/day/m²]		※1
$DEP_{dry_g_s}$	晴天時のガス態乾性沈着量	[mg/day/m²]		※2
$DEP_{dry_p_s}$	晴天時の粒子吸着態乾性沈着量	[mg/day/m²]		※2
DEP_{wet_g}	ガス態湿性沈着量	[mg/day/m²]		※3
DEP_{wet_p}	粒子吸着態湿性沈着量	[mg/day/m²]		※3
$C_0(1.5)$	大気中濃度（沈着による減少を考慮する前）	[mg/m³]		V.7.3.1 (1) 式 V-38
FAA	降雨時の大気相でのガス態中の化学物質の質量比	—		式 V-45
FAP	降雨時の大気相での粒子吸着態中の化学物質の質量比	—		式 V-46
Rag	ガス態乾性沈着速度	[m/day]		式 V-63
V_d	粒子吸着態乾性沈着速度（1 日当たり）	[m/day]		式 V-65
FP	大気相における化学物質の粒子吸着態の割合	—		式 V-41
$1-FP$	大気相における化学物質のガス態の割合	—		式 V-42
Cr_g	雨水中ガス態濃度	[mg/m³]		式 V-67
Cr_p	雨水中粒子吸着態濃度	[mg/m³]		式 V-68
TRF	日平均降水量	[m/day]	0.015	式 V-48

※1　中西ら(2003)『演習　環境リスクを計算する』岩波書店 p.111 の記述を参考にして、乾性沈着量＝地表付近（ここでは高度 1.5[m]と仮定）のガス態化学物質濃度×乾性沈着速度とした。

※2　※1 と同じ考え方を適用した。
なお、ガス態と粒子吸着態の割合は、降雨時は雨水への分配も考慮して FAA と FAP を用い、晴天時は雨水への分配は考えないため(1—FP)と FP を用いて区別した。

※3　中西ら(2003) 『演習　環境リスクを計算する』岩波書店 p.110 の記述を参考にして、湿性沈着量＝雨水中化学物質濃度×降水量とした。

iii) 沈着速度と雨水中濃度の推計

以下では沈着量を求める際に必要となる沈着速度と雨水中濃度の推計方法について述べる。

(a) ガス態乾性沈着速度

ガス態乾性沈着速度 R_{ag} には MNSEM で採用されている 2 薄膜理論に基づく式を利用する。

$$R_{ag} = \frac{KG \times KASLSA + \dfrac{KG \times KASLSW}{HENRY}}{KG + KASLSA + \dfrac{KASLSW}{HENRY}}$$ 式 V-63

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]		MNSEM UM3.1.2※1
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※2	MNSEM UM デフォルト
KASLSW	土壌中水質量移動係数	[m/day]	4.8×10^{-5}※3	MNSEM UM デフォルト
HENRY	無次元ヘンリー係数	—		化学物質情報

※1　MNSEM UM では式 V-63 の右辺を（*DEPA*／*LLS*）=（大気相高度／陸地面積比）で除すことで *KAS*（大気相から土壌相への拡散移動に対する 1 次速度定数）を求めているが、ここで必要なものは沈着速度であるため（*DEPA*／*LLS*）で除さない。
※2　$24\times3600\times5.56\times10^{-6}$ により単位換算した値
※3　$24\times3600\times5.56\times10^{-10}$ により単位換算した値

$$KG = 24\times36\times(0.3+0.2\times u)\times\left(\frac{18}{MW}\right)^{0.335}$$ 式 V-64

記号	説明	単位	値	出典・参照先
KG	気相質量移動係数	[m/day]		Environmental Organic Chemistry[1] ※1
u	風速	[m/s]	2.0	※2
MW	対象物質の分子量	[g/mol]		化学物質情報

※1　文献では KG のべき乗に該当する箇所は 0.5×0.67=0.355 としているが、ここでは正確に 0.335 とした。
※2　1994 年度から 2003 年度までの 10 年間分の全国約 800 地点のアメダス気象観測データを用い、中央値を求めた。

(b) 粒子吸着態乾性沈着速度

粒子吸着態乾性沈着速度 V_dには重力沈降[2]に基づくストークスの式を利用する。

[1] Schwarzenbach, R.P. et al. (2003) Environmental Organic Chemistry second edition. John Wiley and Sons Inc. p.919

[2] 下記の文献によれば、乾性沈着は①粒子の重力沈降②粒子の拡散や泳動、慣性衝突等による沈着③ガス態の湿潤表面での吸収、の 3 つに分類される。本スキームで仮定している粒子径 10[μm]では①の寄与が大きいと考えてストークスの式を用いているが、粒子径や沈着面の状態によっては②や③（③は粒子径が小さくガス態と同じとみなせる場合）の寄与が大きくなることも考えられる。そのため、10[μm]と異なる粒径の粒子に吸着した物質や様々な沈着面で測定された実測値と比べた場合、本スキームの沈着量の推計値には、かなりの不確実性を伴う可能性があることに留意が必要である。
　環境庁大気保全局大気規制課　監修（1997）『浮遊粒子状物質汚染予測マニュアル』東洋館出版社 p.219

$$V_d = V_s \times 60 \times 60 \times 24$$ 式 V-65

記号	説明	単位	値	出典・参照先
V_d	粒子吸着態乾性沈着速度	[m/day]		Vs の単位換算
Vs	重力沈降速度	[m/s]	0.004211	式 V-66

$$V_s = \frac{2 \times r^2 \times \rho_p \times g}{9 \times \mu \times \rho_a} \times \frac{1}{\alpha^*}$$ 式 V-66

記号	説明	単位	値	出典・参照先
Vs	重力沈降速度	[m/s]	0.004211	浮遊粒子状物質汚染予測マニュアル[1]
ρ_p	粒子みかけ密度	[kg/m^3]	1500	MNSEM UM デフォルト
ρ_a	空気密度	[kg/m^3]	1.293	MNSEM UM デフォルト
μ	空気の動粘性係数	[m^2/s]	1.5×10^{-5}	MNSEM UM デフォルト ※
α^*	粒子形状による抵抗補正係数	―	1	球形と仮定
g	重力加速度	[m/s^2]	9.8	デフォルト
r	粒子の半径	[m]	5×10^{-6}	MNSEM3.0β[2]

※　MNSEM UM3.1.2 の *KAEF*（浮遊粒子の 1 次降下速度定数）の式中の数値が相当するとみなした。

(c) 雨水中濃度(ガス態及び粒子吸着態)

雨水中濃度は、洗浄比 RRT(式 V-47)の式より、雨水に溶ける量は化学物質の無次元ヘンリー係数の逆数に比例し、雨水に捕集される量は浮遊粒子の捕集率（定数）に比例することを用いて求める。

雨は地表から十分に高い所から降ってくると考えられるため、雨水中濃度を求める際には、1.5m の高さの大気中濃度 $C_0(1.5)$を用いるのではなく、地表から十分な高さまでの大気の柱を想定し、その柱の中の濃度平均値である「大気柱中化学物質平均濃度」Ca_0を用いる。この Ca_0は高さ方向の濃度変化が正規分布であると仮定し、地表から標準偏差の 3 倍まで

なお、次の文献では粒子吸着態乾性沈着の速度は大気の拡散条件、粒子の大きさや性質、地表面の性質に依存するとしつつも、典型的な速度を約 0.3[cm/s]としている（本スキームの値 Vs は 0.4211[cm/s]）。
Mackay, D. (1992) Multimedia Environmental Models：The Fugacity Approach. Lewis Publishers Inc. p.58

[1] 環境庁大気保全局大気規制課　監修（1997）『浮遊粒子状物質汚染予測マニュアル』東洋館出版社　p.221

[2] MNSEM3.0β の計算シートに記載されているデフォルト値又は式のこと（以下同じ）。

の高さの平均値であり、$C_0(1.5)$を定数 Kc で除して求める。Kc の導出は V.7.5.1 に示す。

$$Cr_g = Ca_0 \times FAA \times \frac{1}{HENRY} \qquad \text{式 V-67}$$

$$Cr_p = Ca_0 \times FAP \times CEP \qquad \text{式 V-68}$$

$$Ca_0 = \frac{C_0(1.5)}{Kc} \qquad \text{式 V-69}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
Cr_g	雨水中ガス態濃度	[mg/m³]		MNSEM UM 3.3.1※
Cr_p	雨水中粒子吸着態濃度	[mg/m³]		MNSEM UM 3.3.1※
Ca_0	大気柱中化学物質平均濃度（沈着による減少を考慮する前）	[mg/m³]		V.7.5.1 (2)②
FAA	降雨時の大気相でのガス態中の化学物質の質量比	—		式 V-45
FAP	降雨時の大気相での粒子吸着態中の化学物質の質量比	—		式 V-46
$C_0(1.5)$	大気中濃度（沈着による減少を考慮する前）	[mg/m³]		V.7.3.1 (1) 式 V-38
Kc	大気柱中濃度への換算係数	2.4		V.7.5.1 (2)②
$HENRY$	無次元ヘンリー係数	—		化学物質情報
CEP	浮遊粒子の捕集率	—	2×10^5	MNSEM UM デフォルト

※　MNSEM UM の洗浄比 RRT の第 1 項をガス態に、第 2 項を粒子吸着態に対応する箇所と考え、洗浄比の定義から、雨水中化学物質濃度＝大気柱中化学物質平均濃度×洗浄比とした。なお、MNSEM UM の RRT の定義と式 V-67、式 V-68 のようにガス態と粒子吸着態に雨水中濃度を分けて推計することが矛盾していないことが以下のようにして確認できる。

式 V-67、式 V-68 より雨水中濃度（ガス態＋粒子吸着態）は、

$$C_{rg}+C_{rp}=Ca_0\times(FAA\times 1/HENRY+FAP\times CEP)$$

である。式 V-45、式 V-46 によると、

$$C_{rg}+C_{rp}=Ca_0\times(1-FP/HENRY+FP\times CEP)/(1+(RRT\times TRF)/(V_{rain}-TRF))$$

と表せる。ここで、式 V-45、式 V-46、式 V-47 によれば

$$RRT=1-FP/HENRY+FP\times CEP、FAA+FAP=1/(1+(RRT\times TRF)/(V_{rain}-TRF))$$

であるため、

$$C_{rg}+C_{rp}=Ca_0\times RRT\times(FAA+FAP)$$

となる。従って、

$$RRT=(C_{rg}+C_{rp})/(Ca_0\times(FAA+FAP))$$ と表せる。

MNSEM UM の記号を使って $CAW=C_{rg}+C_{rp}$、$Ca_0=MSA/VOLA$、$FAA+FAP=MAAP/MSA$ を代入すれば、$RRT=CAW/(MAAP/VOLA)$であり、$VOLA\fallingdotseq VOLAAP$ を考慮すれば $RRT=CAW/CAAP$ となるので MNSEM　UM 3.1.1 記載の RRT の定義に確かに一致している。

V.7.3.2　土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計

本編の V.3.3.3 に対応しており、土壌中の濃度推計について具体的な数式やパラメータを示す。数理モデル・デフォルト値設定の経緯は V.7.5.2 で説明する。

土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度は農作物中濃度の推計（V.7.3.3 ）に用いる。これらの

濃度を推計するために、以下の数値が入力値となる。

・ 大気からの沈着量　　（V.7.3.1 (2)参照）
・ 化学物質の物理化学的性状　　（分子量、ヘンリー係数、有機炭素補正土壌吸着係数）

(1) 土壌中濃度

大気から土壌への総沈着量と、揮発、分解、表面流出、溶脱、浸食、巻上げによる土壌からの消失量による物質収支式（式 V-70）を積分することにより得た式 V-71 を用いて、期間平均の土壌中濃度を式 V-72 のようにして求める。本シナリオでは初期濃度をゼロとして、10 年間の期間平均の土壌中濃度を求める式 V-73 を評価に用いるものとする。推算に用いるデフォルト値は、MNSEM で用いられているものを採用した[1]。沈着量に関しては、前出（V.7.3.1 (2)）の各沈着量の値を、消失に係る 1 次速度定数に関しては後述の各 1 次速度定数（V.7.3.2 (2)）を用いる。

$$\frac{dC_{soil}(t)}{dt} = D_{air} - k_{soil} \cdot C_{soil}(t)$$ 式 V-70

$$C_{soil}(t) = \frac{D_{air}}{k_{soil}} - \left(\frac{D_{air}}{k_{soil}} - C_{soil}(0)\right) \times e^{-k_{soil} \times t}$$ 式 V-71

$$C_{soil} = \frac{1}{T} \times \int_0^T C_{soil}(t)dt$$ 式 V-72

$$C_{soil} = \frac{D_{air}}{k_{soil}} - \frac{D_{air} \times (1 - e^{-k_{soil} \times T})}{k_{soil}^2 \times T}$$ 式 V-73

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{soil}(t)$	土壌中濃度（排出開始から t 日目）	[mg/kg]		REACH-TGD [2] Chapter R.16.6.6.6.式(R.16-41)
C_{soil}	土壌中濃度（10 年平均）	[mg/kg]		REACH-TGD [3] Chapter R.16.6.6.6.式(R.16-45) ※1
D_{air}	総沈着量（土壌 1kg 当たり）※２	[mg/kg/day]		式 V-74

[1] 株式会社三菱化学安全科学研究所 (1998) Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model version 2.0 ユーザーズマニュアルに記載のデフォルト値を採用した。このマニュアルに明記されていないデフォルト値は、MNSEM3.0β の計算シートに記載されているデフォルト値を採用した。MNSEM3.0β は MNSEM の開発者である吉田喜久雄氏より提供を受けた MNSEM2 の改良版である。

[2] ECHA (2010) Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.16: environmental exposure estimation, version: 2.

[3] ECHA (2010) Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.16: environmental exposure estimation, version: 2.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
k_{soil}	土壌から消失する総 1 次速度定数	[1/day]		式 V-76
T	平均化期間	[day]	3650	本シナリオの設定

※1　初期濃度を 0 とした。なお、式 V-71 を式 V-72 に代入し、$C_{soil}(0)=0$ とすると式 V-73 が求められる。また、REACH-TGD での土壌中の濃度は、下水処理場からの汚泥を肥料として加え、さらに近隣の点源からの大気による沈着を受けている農業用土壌における 10 年後の濃度を推計している。
※2　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。

$$D_{air} = \frac{DEP_{total}}{BD_{soil} \times DEP_{so}}$$ 式 V-74

$$BD_{soil} = SOAF \times \rho air + SOWF \times 1000[kg/m^3] + SOSF \times DENsos \times 1000[L/m^3]$$ 式 V-75

記号	説明	単位	値	出典・参照先
D_{air}	総沈着量（土壌 1kg 当たり）	[mg/kg/day]		REACH-TGD Chapter R.16.6.6.6.式(R.16-42)
DEP_{total}	総沈着量	[mg/day/m²]		式 V-49
BD_{soil}	土壌バルク密度	[kg/m³]		MNSEM3.0β
DEP_{so}	土壌深度	[m]	0.2	MNSEM UM デフォルト
$SOAF$	土壌空気容積比	—	0.2	MNSEM UM デフォルト
ρair	空気密度	[kg/m³]	1.293	MNSEM UM デフォルト
$SOWF$	土壌水容積比	—	0.3	MNSEM UM デフォルト
$SOSF$	土壌粒子容積比	—	0.5	MNSEM UM デフォルト
DEN_{SOS}	土壌粒子の密度	[kg/L]	1.5	MNSEM UM デフォルト

$$k_{soil} = K_{sa} + (K_{sro} + K_{sle}) \times FSOW + (K_{sr\sup} + K_{ser}) \times FSOS + K_{sot}$$ 式 V-76

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]		MNSEM UM3.2.3※1
K_{sa}	土壌における消失の 1 次速度定数（揮発）	[1/day]		式 V-80
K_{sot}	土壌における消失の 1 次速度定数（分解）	[1/day]		式 V-81 又は式 V-85
K_{sro}	土壌における消失の 1 次速度定数（表面流出）	[1/day]		式 V-89
K_{sle}	土壌における消失の 1 次速度定数（溶脱）	[1/day]		式 V-91
K_{ser}	土壌における消失の 1 次速度定数（浸食）	[1/day]		式 V-94
K_{srsup}	土壌における消失の 1 次速度定数（巻上げ）	[1/day]		式 V-95

記号	説明	単位	値	出典・参照先
FSOW	溶存態質量分布比	—		式 V-78
FSOS	粒子吸着態質量分布比	—		式 V-79

※1　MNSEM UM3.2.3 には TS(平均滞留時間)の式が掲載されているが、k=1/TS と見なせば同一の式である。

土壌相のガス態、溶存態及び粒子吸着態への化学物質の質量分布比（*FSOA*, *FSOW*, *FSOS*）は、下記の式で与えられる。

$$FSOA = \frac{HENRY \times SOAF}{(HENRY \times SOAF + SOWF + Koc \times OCsos \times (1 - SOAF - SOWF) \times DENsos)}$$

式 V-77

$$FSOW = \frac{SOWF}{(HENRY \times SOAF + SOWF + Koc \times OCsos \times (1 - SOAF - SOWF) \times DENsos)}$$

式 V-78

$$FSOS = \frac{Koc \times OCsos \times (1 - SOAF - SOWF) \times DENsos}{(HENRY \times SOAF + SOWF + Koc \times OCsos \times (1 - SOAF - SOWF) \times DENsos)}$$

式 V-79

記号	説明	単位	値	出典・参照先
FSOA	ガス態質量分布比	—		MNSEM UM3.2.1
FSOW	溶存態質量分布比	—		MNSEM UM3.2.1
FSOS	粒子吸着態質量分布比	—		MNSEM UM3.2.1
SOAF	土壌空気容積比	—	0.2	MNSEM UM デフォルト
SOWF	土壌水容積比	—	0.3	MNSEM UM デフォルト
OC_{SOS}	土壌粒子の有機炭素含有率	—	0.04	MNSEM UM デフォルト
DEN_{SOS}	土壌粒子の密度	[kg/L]	1.5	MNSEM UM デフォルト
HENRY	無次元ヘンリー係数	—		化学物質情報
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]		化学物質情報

(2) 土壌における消失の総 1 次速度定数

土壌からの消失に係る機序の種類とデフォルト値は、原則日本版多媒体モデル MNSEM の手法及びデフォルト値を用いることとしている（経緯は V.7.5.2 を参照）。多媒体モデルは各媒体内の濃度は均一と仮定するモデルであるが、本スキームの暴露評価の土壌中濃度推

算に用いることが可能と判断した手法及びデフォルト値を採用している。

土壌から大気への化学物質の移行として揮発（①揮発）を考慮し、土壌中での化学物質の生分解・非生物分解（②分解）を考慮した。また、土壌から水への移行は、土壌粒子に吸着した化学物質の土壌表面流出（③表面流出）と、雨水に溶存した化学物質の土壌間隙水流出（④溶脱）を考慮し、粒子吸着態は降水の水環境への流出に伴う土壌粒子の輸送過程（⑤浸食）により土壌粒子に吸着された化学物質の水環境への移行と風による巻上げ（⑥巻上げ）を考慮した。以上の 1 次速度定数の和を土壌からの消失に係る総 1 次速度定数kとして、土壌中濃度の推算に用いた。以下に各 1 次速度定数について述べる。

① 土壌における揮発の 1 次速度定数(K_{sa})

土壌における揮発の 1 次速度定数 K_{sa}[1/day]を次式に示す。

$$K_{sa} = \frac{\dfrac{1}{\dfrac{1}{KG \times HENRY} + \dfrac{1}{KASLSA \times HENRY + KASLSW}}}{\dfrac{SOAF \times HENRY + SOWF + (1 - SOAF - SOWF) \times Koc \times OC_{SOS} \times DEN_{SOS}}{DEP_{SO}}}$$

式 V-80

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]		MNSEM UM3.2.2
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 ※1	MNSEM UM デフォルト
$KASLSW$	土壌中水質量移動係数	[m/day]	4.8×10^{-5} ※2	MNSEM UM デフォルト
$SOAF$	土壌空気容積比	—	0.2	MNSEM UM デフォルト
$SOWF$	土壌水容積比	—	0.3	MNSEM UM デフォルト
OC_{SOS}	土壌粒子の有機炭素含有率	—	0.04	MNSEM UM デフォルト
DEN_{SOS}	土壌粒子の密度	[kg/L]	1.5	MNSEM UM デフォルト
DEP_{SO}	土壌深度	[m]	0.2	MNSEM UM デフォルト
$HENRY$	無次元ヘンリー係数	—		化学物質情報
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]		化学物質情報

※1　MNSEM UM3.1.2 より $KASLSA = 24 \times 3600 \times 0.00000556$
※2　MNSEM UM3.1.2 より $KASLSW = 24 \times 3600 \times 0.000000000556$

② 土壌における分解の 1 次速度定数(K_{sot})

土壌相での分解には、生分解（好気性）と非生物分解として加水分解を考慮する。本スキームの評価Ⅰでは、環境中における分解は考慮しないため、半減期を「∞（無限大)」とする。つまり式 V-81 のように「土壌における分解の 1 次速度定数（K_{sot})」を「0」と設定

する。

評価Ⅰのとき

$$K_{sot} = 0 \qquad \text{式 V-81}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
K_{sot}	土壌における消失の 1 次速度定数（分解）	[1/day]		

評価Ⅱでは、Ⅰ章に示したように文献等から土壌における分解速度に関するデータ（分解速度定数又は半減期）を収集し利用する（「V.4.5.4 (2)分解速度定数と半減期」も参照）。収集するデータは総括分解のデータ、生分解のデータ、加水分解のデータである。半減期については、式 V-82、式 V-83、式 V-84 を用いて分解の 1 次速度定数に換算する。

$$K_{sototal} = \frac{\ln 2}{t_{1/2_sototal}} \qquad \text{式 V-82}$$

$$K_{sobio} = \frac{\ln 2}{t_{1/2_sobio}} \qquad \text{式 V-83}$$

$$K_{sowater} = \frac{\ln 2}{t_{1/2_sowater}} \qquad \text{式 V-84}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{sototal}$	土壌における総括分解 1 次速度定数	[1/day]		
$t_{1/2_sototal}$	土壌における総括分解半減期	[day]		化学物質情報
K_{sobio}	土壌における生分解の 1 次速度定数	[1/day]		
$t_{1/2_sobio}$	土壌における生分解の半減期	[day]		化学物質情報
$K_{sowater}$	土壌における加水分解の 1 次速度定数	[1/day]		
$t_{1/2_sowater}$	土壌における加水分解の半減期	[day]		化学物質情報

土壌における消失の 1 次速度定数（分解）（K_{sot}）は、総括分解のデータを用いる場合は式 V-85 のようにそのまま用い、機序別の分解のデータを用いる場合は質量分布比を乗じて合計する式 V-86 で求める。どのような情報源からデータを収集し、総括分解のデータと機序別の分解のデータから採用するデータをどのように選定するかについてはⅠ章を参照されたい。

参考までに、安全側に考えて総括分解のデータと機序別の分解のデータから分解速度が遅い方を利用する場合を式 V-87 に示す。

評価Ⅱのとき

■総括分解のデータを用いる場合

$$K_{sot} = K_{sototal}$$ 式 V-85

■機序別の分解のデータを用いる場合

$$K_{sot} = (FSOS + FSOW) \times K_{sobio} + FSOW \times K_{sowater}$$ 式 V-86

【参考】安全側のデータを用いる場合

$$K_{sot} = \min[K_{sototal}, (FSOS + FSOW) \times K_{sobio} + FSOW \times K_{sowater}]$$ 式 V-87

記号	説明	単位	値	出典・参照先
K_{sot}	土壌における消失の 1 次速度定数（分解）	[1/day]		MNSEM UM3.2.2
$K_{sototal}$	土壌における総括分解 1 次速度定数	[1/day]		式 V-82
$FSOS$	粒子吸着態質量分布比	—		式 V-79
$FSOW$	溶存態質量分布比	—		式 V-78
K_{sobio}	土壌における生分解の 1 次速度定数	[1/day]		式 V-83
$K_{sowater}$	土壌における加水分解の 1 次速度定数	[1/day]		式 V-84

式 V-86 は、分解の機序として生分解と加水分解を想定した場合の式であるが、より一般的には、式 V-88 により土壌の消失の 1 次速度定数（分解）を求めることができる。基本的に機序別の分解のデータは式 V-86 によって用いることを想定しているが、これだけでは対応出来ない場合は、必要に応じてより一般的な式 V-88 を用いる。

$$K_{sototal} = FSOS \times K_{sotatl_ads} + FSOW \times K_{sotatl_dis} + FSOA \times K_{sotatl_gas}$$ 式 V-88

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{sototal}$	土壌における消失の 1 次速度定数（分解）	[1/day]		
$FSOS$	粒子吸着態質量分布比	—		式 V-79
$K_{sototal_ads}$	土壌粒子吸着態の分解の 1 次速度定数	[1/day]		化学物質情報
$FSOW$	溶存態質量分布比	—		式 V-78
$K_{sototal_dis}$	土壌間隙水溶存態の分解の 1 次速度定数	[1/day]		化学物質情報
$FSOA$	ガス態質量分布比	—		式 V-77
$K_{sototal_gass}$	土壌ガス態の分解の 1 次速度定数	[1/day]		化学物質情報

③ 土壌における消失の 1 次速度定数（表面流出）（K_{sro}）

降雨が地表傾斜面に沿って流れることに伴う土壌中の溶存態物質の水環境への移行を指す。降雨が土壌に浸透する割合と流出する割合の関係から求めている。土壌における消失の 1 次速度定数（表面流出）K_{sro}[1/day]を次式に示す。

$$K_{sro} = \frac{SRF}{1000} \times \frac{1}{DEP_{SO}} \times \frac{1}{SOWF} \times \frac{1}{365}$$ 式 V-89

記号	説明	単位	値	出典・参照先
K_{sro}	土壌における消失の 1 次速度定数（表面流出）	[1/day]		MNSEM UM3.2.2
SRF	流出流量	[mm/year]		式 V-90
$SOWF$	土壌水容積比	―	0.3	MNSEM UM デフォルト
DEP_{SO}	土壌深度	[m]	0.2	MNSEM UM デフォルト

$$SRF = TRFyear \times (1 - ETP) - RLE$$ 式 V-90

記号	説明	単位	値	出典・参照先
SRF	流出流量	[mm/year]		MNSEM UM3.2.2
$TRFyear$	年間降水量	[mm/year]	1500	MNSEM UM デフォルト
ETP	土壌水分蒸散率	―	0.35	MNSEM UM デフォルト
RLE	浸透水量	[mm/year]		式 V-92

④ 土壌における消失の 1 次速度定数（溶脱）（K_{sel}）

降雨が土壌中の空隙を鉛直方向に浸透する際に伴う土壌中の溶存態物質の輸送過程を指す。降雨が土壌に浸透する割合と流出する割合の関係から求めている。次式に土壌における消失の 1 次速度定数（溶脱）K_{sle}[1/day]を示す。

$$K_{sle} = \frac{RLE}{1000} \times \frac{1}{DEP_{SO}} \times \frac{1}{SOWF} \times \frac{1}{365}$$ 式 V-91

記号	説明	単位	値	出典・参照先
K_{sle}	土壌における消失の 1 次速度定数（溶脱）	[1/day]		MNSEM UM3.2.2
RLE	浸透水量	[mm/year]		式 V-92
$SOWF$	土壌水容積比	―	0.3	MNSEM UM デフォルト
DEP_{SO}	土壌深度	[m]	0.2	MNSEM UM デフォルト

$$RLE = K_{PED} \times rainyday$$ 式 V-92

記号	説明	単位	値	出典・参照先
RLE	浸透水量	[mm/year]		MNSEM UM3.2.2
K_{PED}	浸透係数	[mm/day]		式 V-93
rainyday	降雨日数	[day/year]	100	MNSEM UM デフォルト

$$K_{PED} = \frac{0.01 \times ADS^2 \times 980.7 \times 10 \times 24 \times 3600}{96 \times 0.010038}$$ 式 V-93

記号	説明	単位	値	出典・参照先
K_{PED}	浸透係数	[mm/day]		MNSEM UM3.2.2
ADS	土壌粒子の平均粒径	[cm]	0.0007 ※	MNSEM3.0β

※ MNSEM UM には ADS のデフォルト値は明記されていないため、MNSEM3.0β に記載されている $ADS = exp(0.4 \times LN(0.001) + 0.35 \times LN(0.01) + 0.25 \times LN(0.1)) \div 10$ という値を用いた。

⑤ 土壌における消失の 1 次速度定数（浸食）（K_{ser}）

降雨に伴い土壌に吸着している物質を流亡させる過程を指す土壌における消失の一次速度定数（浸食）K_{ser}[1/day]を次式に示す。

$$K_{ser} = \frac{ERS}{365} \times \frac{1}{DEP_{SO}} \times \frac{1}{1 - SOAF - SOWF}$$ 式 V-94

記号	説明	単位	値	出典・参照先
K_{ser}	土壌における消失の 1 次速度定数（浸食）	[1/day]		MNSEM UM3.2.2
ERS	土壌浸食速度	[m/year]	0.0002	MNSEM UM デフォルト
SOAF	土壌空気容積比	―	0.2	MNSEM UM デフォルト
SOWF	土壌水容積比	―	0.3	MNSEM UM デフォルト
DEP_{SO}	土壌深度	[m]	0.2	MNSEM UM デフォルト

⑥ 土壌における消失の 1 次速度定数（巻上げ）（K_{srsup}）

大気中の浮遊粒子の沈着量などから巻上げに関係する速度（巻上げ速度）を求め、そこに土壌粒子比率を考慮することで土壌での巻上げによる消失の挙動を求めるものである。土壌から大気への粒子の巻上げは大気からの粒子沈着と量的に釣り合いがとれていると仮定している。土壌における消失の 1 次速度定数（巻上げ）K_{srsup}[1/day]を以下に示す。

$$K_{sr\sup} = \frac{C_{AER}}{1000} \times \frac{V_d}{DEP_{so}} \times \frac{1}{1 - SOAF - SOWF} \times \frac{1}{DEN_{SOS}} \times \frac{1}{1000000}$$ 式 V-95

記号	説明	単位	値	出典・参照先
K_{srsup}	土壌における消失の 1 次速度定数（巻上げ）	[1/day]		MNSEM UM3.2.2※
C_{AER}	大気浮遊粒子濃度	[mg/m³]	0.03	MNSEM UM デフォルト
V_d	粒子吸着態乾性沈着速度	[m/day]		V.7.3.1 (2)②iii)(b)式 V-65
$DEPso$	土壌深度	[m]	0.2	MNSEM UM デフォルト
$SOAF$	土壌空気容積比	—	0.2	MNSEM UM デフォルト
$SOWF$	土壌水容積比	—	0.3	MNSEM UM デフォルト
DEN_{SOS}	土壌粒子の密度	[kg/L]	1.5	MNSEM UM デフォルト

※　MNSEM UM3.2.2 では右辺の $V_d/DEPso$ は $VOLA \times KAEF/VOLSO$ と記載されているが、$VOLA=SUA \times$DEPA（ただし DEPA は大気の高さ）、$KAEF=Vd/DE$PA、$VOLSO=SUA \times DEPso$ を代入すれば上式と同じ式になる。

(3) 土壌間隙水中濃度

土壌中濃度と土壌－水分配係数から算出する。次式に土壌間隙水中濃度の算出式を示す。

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{porewater}$	土壌間隙水中濃度	［mg/L］	※	REACH-TGD Chapter16.R.6.6.6.式 (R.16-57)
C_{soil}	土壌中濃度（10 年平均）	［mg/kg］		式 V-73
BD_{soil}	土壌バルク密度	[kg/m³]		式 V-75
K_{soil_water}	土壌―水分配係数	—		式 V-97
WS	水溶解度	[mg/L]		化学物質情報

※　化学物質の水溶解度を超えた場合は水溶解度を用いる。

$$K_{soil-water} = HENRY \times SOAF + SOWF + Koc \times OCsos \times DENsos \times (1 - SOAF - SOWF)$$ 式 V-97

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{soil\text{-}water}$	土壌―水分配係数	—		REACH-TGD ChapterR.16.5.3.式(R.16-6、R.16-7)※ MNSEM UM3.2.1 質量分布比（FSOA、FSOA、FSOS）の式

記号	説明	単位	値	出典・参照先
				の分母とも同じ
HENRY	無次元ヘンリー係数	—		化学物質情報
SOAF	土壌空気容積比	—	0.2	MNSEM UM デフォルト
SOWF	土壌水容積比	—	0.3	MNSEM UM デフォルト
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	［L/kg］		化学物質情報
OC_{SOS}	土壌粒子の有機炭素含有率	—	0.04	MNSEM UM デフォルト
DEN_{SOS}	土壌粒子の密度	[kg/L]	1.5	MNSEM UM デフォルト

※　REACH-TGD Chapter.16.5.3.の R.16-6 及び R16-7 は、土壌、底質、懸濁粒子に対する数式である。なお、同式では Kair-water（空気/水分配係数）が用いられているが、本ガイダンスでは他の部分とあわせて無次元ヘンリー係数と記述する。

土壌―水分配係数 $K_{soil\text{-}water}$ は土壌中の水（液体）、粒子（固体）及び空気（気体）への分配を考慮したものである。

このようにして計算する土壌間隙水中の化学物質濃度であるが、水溶解度を超えた濃度が計算された場合、そのまま農作物中濃度の推計に進まないように制限を設けている。

V.7.3.3　農作物中濃度の推計

本編の V.3.3.4 に対応しており、地下部農作物中濃度、地上部農作物中濃度（Exposed）及び地上部農作物中濃度（Protected）の 3 区分の農作物の濃度推計について具体的な数式やパラメータを示すとともに数理モデルを説明する。地上部農作物を Exposed と Protected に分けて考慮した経緯、各区分の農作物中濃度推計式の設定経緯については V.7.5.3 (1)及び V.7.5.3 (2)を参照されたい。

これらの濃度は人の暴露量の推計（V.7.4）に用いるほか、地上部農作物中濃度（Exposed）は牧草中濃度として畜産物中濃度の推計（V.7.3.4 ）に用いる。これらの濃度を推計するために、以下の数値が入力値となる。

- 大気中濃度　（V.7.3.1 (1)で推計）
- 大気中における粒子吸着態とガス態存在割合　（V.7.3.1 (2)で推計）
- 大気からの沈着量　（V.7.3.1 (2)で推計）
- 土壌間隙水中濃度　（V.7.3.2 (3)で推計）
- 化学物質の物理化学的性状　（logPow とヘンリー係数）

(1) 地下部農作物中濃度

地下部農作物中濃度は、式 V-98 のように地下部農作物濃縮係数（RCF）から計算する。地下部農作物濃縮係数（RCF）は、化学物質の 1-オクタノールと水との間の分配係数に影響を受け、1-オクタノールと水との間の分配係数の範囲に応じて式 V-99、式 V-100 のよう

に表される。両式とも農作物中濃度は、土壌間隙水中濃度に地下部農作物濃縮係数及び地下部農作物の補正係数を乗じて算出される。

なお、地下部農作物濃縮係数（RCF）の計算には、「V.7.5.3 (4)数式の適用範囲」に説明するように適用範囲を設ける。このため、logPow の下限（-0.57）及び上限（8.2）の範囲外の値は、下限値あるいは上限値に置き換える。

$$C_{rootveg} = C_{porewater} \times RCF \times VG_{rootveg}$$ 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	[mg/kg]		地下部農作物濃縮係数（RCF）用いた数式に補正係数を考慮した。
$C_{porewater}$	土壌間隙水中濃度	[mg/L]		V.7.3.2 (3)　式 V-96
RCF	地下部農作物濃縮係数	[L/kg]		式 V-99 と式 V-100
$VG_{rootveg}$	地下部農作物の補正係数	—	※	HHRAP 5.3.3 Equation 5-20B

※　$VG_{rootveg}$は $logPow$≧4 のとき「0.01」、$logPow$＜4 のとき「1.0」

－0.57≦logPow＜2 のとき、

$$RCF = 10^{0.77 \times \log Pow - 1.52} + 0.82$$ 式 V-99

2≦logPow≦8.2 のとき、

$$RCF = 10^{0.77 \times \log Pow - 1.52}$$ 式 V-100

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]	※	Briggs et al. (1982)[1]（HHRAP でも採用）適用範囲：HHRAP Appendix A2-2.12.1
$logPow$	1-オクタノールと水との間の分配係数	—		化学物質情報

※　$logPow$ の下限及び上限の範囲外の値は下限あるいは上限で置き換える。

(2) 地上部農作物中濃度（Exposed）

地上部農作物濃度（Exposed）は、式 V-101（牧草の場合式 V-102）のように、大気相の粒子吸着態の沈着及びガス態からの移行及び根からの吸収による取り込みを考慮する。

$$C_{ag_\exp} = C_{ag_aer} + C_{ag_gas_r}$$ 式 V-101

[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. Pestic. Sci., 13(5), 465-504.

$$C_{grass} = C_{grass_aer} + C_{grass_gas_r}$$ 式 V-102

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{ag_exp}	地上部農作物中濃度（Exposed）	[mg/kg]		V.7.5.3 (2)参照
C_{grass}	牧草中濃度	[mg/kg]		
C_{ag_aer}	大気相粒子吸着態由来の地上部農作物中濃度	[mg/kg]		式 V-106
C_{grass_aer}	大気相粒子吸着態由来の牧草中濃度	[mg/kg]		式 V-107
$C_{ag_gas_r}$	大気相ガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度	[mg/kg]		式 V-112
$C_{grass_gas_r}$	大気相ガス態及び土壌由来の牧草中濃度	[mg/kg]		式 V-112

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

McKone and Ryan (1989)[1] の粒子吸着態の地上部農作物中濃度の推定方法を参考にした。ここでは、農作物への粒子吸着態沈着と風化や枯死（老化）による消失による物質収支式（式 V-103、式 V-104、式 V-105）を積分することにより得た式 V-106 を用いて、地上部農作物中濃度 C_{ag_aer}［mg/kg］を求める。なお、ここでは、式 V-106（牧草の場合、式 V-107）のように農作物の栽培期間を考慮して 60 日目の濃度を計算する。栽培期間の設定経緯については、V.7.5.3 (5)を参照されたい。

農作物への粒子吸着態沈着量は、式 V-108 のように粒子吸着態の沈着量（総沈着量の式（V.7.3.1 (2)②i) 式 V-49）から粒子吸着態の沈着量の式が得られる）から計算する。

$$\frac{dC_{ag_aer}}{dt} = I_{ag_aer} - k_{ag_aer} \cdot C_{ag_aer}$$ 式 V-103

$$I_{ag_aer} = \frac{DEP_{total_p_ag}}{Mf}$$ 式 V-104

$$k_{ag_aer} = Rv$$ 式 V-105

$$C_{ag_aer} = \frac{DEP_{total_p_ag}}{Mf \times Rv}\left[1 - \exp(-Rv \times 60)\right]$$ 式 V-106

$$C_{grass_aer} = C_{ag_aer}$$ 式 V-107

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	[mg/kg]		※1
C_{grass_aer}	大気相粒子吸着態由来の牧草中濃度	[mg/kg]		※1
I_{ag_aer}	地上部農作物への粒子吸着態流入量	[mg/kg/day]		※1
k_{ag_aer}	地上部農作物からの粒子吸着態消失	[/day]		※1

[1] McKone, T.E. and Ryan P.B. (1989) Human exposures to chemicals through food chains an uncertainty analysis. Environ. Sci. Technol., 23(9), 1154-1163.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
	量			
$DEP_{total_p_ag}$	農作物への粒子吸着態沈着量(乾性＋湿性)	[mg/day/m²]		式 V-108
Mf※2	生産性	[kg/m²]	3.0	McKone and Ryan (1989)
Rv※2	風化・枯死（老化）率	[/day]	0.03	McKone and Ryan (1989)

※1　McKone and Ryan (1989)の粒子吸着態由来の地上部農作物中モデルより、農作物中化学物質の物質収支のマテリアルバランスの微分方程式を解いて、60 日目の地上部農作物中濃度を求めた。なお、初期濃度は 0mg/kg と仮定する。McKone and Ryan (1989)の数式による計算結果は、MNSEM UM でも参照されている。

※2　Mf は 1m² 当たりの食料収穫量の在庫の年平均量（湿潤重量）を指し、Rv は風化や枯死の結果として野菜の表面から取り除かれる化学物質の除去率を指す。

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

式 V-108

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$DEP_{total_p_ag}$	農作物への粒子吸着態沈着量(乾性＋湿性)	[mg/day/m²]		※1
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	McKone and Ryan (1989)（b に該当 0.1～0.3 の最大値）
$rainyday$	降雨日数	[day/year]	100	MNSEM UM デフォルト
DEP_{wet_p}	粒子吸着態湿性沈着量※2	[mg/day/m²]		V.7.3.1 (2)②ii)式 V-62
K_{dep_r}	降雨時の沈着による補正係数	—		V.7.3.1 (2)②i)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	McKone and Ryan (1989)（vg推定式係数に該当）
$DEP_{dry_p_r}$	降雨時の粒子吸着態乾性沈着量	[mg/day/m²]		V.7.3.1 (2)②ii)式 V-58
$DEP_{dry_p_s}$	晴天時の粒子吸着態乾性沈着量	[mg/day/m²]		V.7.3.1 (2)②ii)式 V-60
K_{dep_s}	晴天時の沈着による補正係数	—		V.7.3.1 (2)②i)式 V-51

※1 McKone and Ryan (1989)の V_{dp} 推計式に該当しており、V.7.3.1 (2)②i)式 V-49 に記述した本ガイダンスにおける沈着量推計方法に従い、これに降雨日数と沈着による補正係数を考慮した。

※2 降雨に伴い大気中の粒子が降下することを考慮に入れている。すなわち、降雨により捕集された大気中粒子に含まれる評価対象物質の量。

② 大気相ガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度

Trapp and Matthies (1998)[1]の大気相ガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度の推定方法を用いる。ここでは、農作物へのガス態沈着と代謝や光分解による消失などによる物質収支式（式 V-109、式 V-110、式 V-111）を積分することにより得た式 V-112 を用いて、大気相ガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度 $C_{ag_gas_r}$［mg/kg］を求める。なお、ここでは、農作物の栽培期間を考慮して 60 日目の濃度を計算している。また、補正係数 VG_{ag} により、脂溶性の高い物質の表皮等への濃縮を考慮している。栽培期間の設定経緯については V.7.5.3 (5)を、補正係数 VG_{ag} の設定経緯については V.7.5.3 (6)を参照されたい。

大気相のガス態濃度は、大気中濃度（V.7.3.1 (1)）と大気相でのガス態の化学物質の質量比（V.7.3.1 (2)）より計算する。また、大気相でのガス態の化学物質の葉・茎への濃縮係数（$K_{leaf\text{-}air}$）や水-植物濃度換算係数（$K_{plant\text{-}water}$）、植物の導管を流れる水分と土壌中水分の間の分配係数（$TSCF$）はそれぞれ式 V-114、式 V-115、式 V-116 で計算する。なお、植物の導管を流れる水分と土壌中水分の間の分配係数（$TSCF$）の計算には、「V.7.5.3 (4)数式の適用範囲」に説明するように適用範囲を設ける。このため、logPow の下限（-0.5）及び上限（4.5）の範囲外の値は、下限値あるいは上限値に置き換える。

$$\frac{dC_{ag_gas_r}}{dt} = I_{ag_gas_r} - k_{ag_gas_r} \cdot C_{ag_gas_r} \qquad \text{式 V-109}$$

$$I_{ag_gas_r} = \frac{C_{air_g} \times g_{plant} \times Area_{plant}}{V_{leaf} \times BD_{plant}} + \frac{C_{porewater} \times 1000[L/m^3] \times TSCF \times Qtransp}{V_{leaf} \times BD_{plant}} \qquad \text{式 V-110}$$

$$k_{ag_gas_r} = \frac{Area_{plant} \times g_{plant}}{K_{leaf-air} \times V_{leaf}} + \lambda_E + \lambda_G \qquad \text{式 V-111}$$

$C_{ag_gas_r}$　および　$C_{grass_gas_r}$

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

式 V-112

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{ag_gas_r}$	大気相ガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度	[mg/kg]		※1
$C_{grass_gas_r}$	大気相ガス態及び土壌由来の牧草中濃度	[mg/kg]		※1
$I_{ag_gas_r}$	地上部農作物への大気相ガス態及び土壌間隙水溶存態流入量	[mg/kg/day]		※1
$k_{ag_gas_r}$	地上部農作物からの大気相ガス態及び土壌間隙水溶存態消失量	[/day]		※1

[1] Trapp, S. and Matthies, M. (1998) 9.3 PLANT Model.In:　Trapp, S. and Matthies, M., Chemodynamics and environmental modeling, Springer, pp.118-123.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{air_g}	大気相のガス態濃度	[mg/m³]		式 V-113
g_{plant}	コンダクタンス	[m/day]	86.4	EUSES[1] TableIII-204 植物パラメータのデフォルト値
$Area_{plant}$	葉の表面積	[m²]	5	EUSES TableIII-204 植物パラメータのデフォルト値
V_{leaf}	葉の体積	[m³]	0.002	EUSES TableIII-204 植物パラメータのデフォルト値
$C_{porewater}$	土壌間隙水中濃度	[mg/L]		V.7.3.2 (3)　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 V-116
$Qtransp$	蒸散流量	[m³/day]	0.001	EUSES TableIII-204 植物パラメータのデフォルト値
$K_{leaf\text{-}air}$	大気相でのガス態の化学物質の葉・茎への濃縮係数	[m³/m³]		式 V-114
λE	消失速度係数（代謝と光分解）	[/day]	0 ※2	EUSES TableIII-204 植物パラメータのデフォルト値
λG	成長速度係数	[/day]	0.035	E-USES TableIII-204 植物パラメータのデフォルト値
VG_{ag}	地上部農作物のための補正係数	―	※3	HHRAP 5.3.2 Equation 5-18
BD_{plant}	植物のバルク密度	[kg/m³]	800	Calamari et al. (1987)[2]

※1　Trapp and Matthies (1998)[3]の地上部植物モデルを用いて、60 日目の値を計算した。なお、初期濃度は 0mg/kg と仮定する。Trapp and Matthies (1998)の数式は、EUSES III.5.2.2 式(718)～(731)でも採用されている。

※2　代謝と光分解それぞれの擬一次速度定数がそれぞれ 0 と設定されているため、合計値 0 とした。

※3　*logPow*≧4 のとき「0.01」、*logPow*＜4 のとき「1.0」、牧草については常に「1.0」

$$C_{air_g} = \frac{rainyday}{365} \times C_0(1.5) \times K_{dep_r} \times FAA + (1 - \frac{rainyday}{365}) \times C_0(1.5) \times K_{dep_s} \times (1 - FP)$$

式 V-113

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{air_g}	大気相のガス態濃度	[mg/m³]		※
$rainyday$	降雨日数	[day/year]	100	MNSEM UM デフォルト

[1] EC (2008) EUSES 2.1 background report: chapterIII model calculations (http://ihcp.jrc.ec.europa.eu/our_activities/public-health/risk_assessment_of_Biocides/euses/EUSES_2.1/EUSES_2.1_documentation/EUSES_2.1_Chapter_III_Model_Calculations.doc)

[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.

[3] Trapp, S. and Matthies, M. (1998) 9.3 PLANT Model.In:　Trapp, S. and Matthies, M., Chemodynamics and environmental modeling, Springer, pp.118-123.

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）	[mg/m³]		V.7.3.1 (1)式 V-38
K_{dep_r}	降雨時の沈着による補正係数	—		V.7.3.1 (2)②i)式 V-50
FAA	降雨時の大気相でのガス態の化学物質の質量比	—		V.7.3.1 (2)①式 V-47
K_{dep_s}	晴天時の沈着による補正係数	—		V.7.3.1 (2)②i)式 V-51
$1\text{-}FP$	大気相における化学物質のガス態の割合	—		V.7.3.1 (2)①式 V-42

※　大気相のガス態濃度を降雨の場合と晴天の場合で平均をとった。なお、大気相のガス態の割合は、降雨時は雨水への分配も考慮して *FAA* を用い、晴天時は雨水への分配は考えないため(1－*FP*)を用いた。

$$K_{leaf-air} = FPA + \frac{K_{plant-water}}{K_{air-water}}$$ 式 V-114

$$K_{plant-water} = FPW + FPLPD \times \left(10^{\log Pow}\right)^{b}$$ 式 V-115

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{leaf\text{-}air}$	大気相でのガス態の化学物質の葉・茎への濃縮係数	[m³/m³]		Trapp and Matthies (1998)[1]、EUSES III.5.2.2. 式(718)として若干変更した式を使用
$K_{plant\text{-}water}$	水-植物濃度換算係数	[m³/m³]		Trapp and Matthies (1998)、EUSES III.5.2.2. 式(719)として若干変更した式を使用
$K_{air\text{-}water}$	空気-水分配係数	[m³/m³]		無次元ヘンリー係数と同じ値
FPA	植物中の空気容積比	—	0.5	MNSEM UM デフォルト
FPW	植物中の水容積比	—	0.4	MNSEM UM デフォルト
$FPLPD$	植物中の脂質容積比	—	0.01	MNSEM UM デフォルト
b	植物脂質と 1-オクタノール間の差に対する修正指数	—	0.95	EUSES TableIII-204 植物パラメータのデフォルト値
$logPow$	1-オクタノールと水との間の分配係数	—		化学物質情報

－0.5＜logPow＜4.5 のとき

$$TSCF = 0.784 \times e^{-\frac{(\log Pow - 1.78)^2}{2.44}}$$ 式 V-116

[1] Trapp, S. and Matthies, M. (1998) 9.3 PLANT Model.In:　Trapp, S. and Matthies, M., Chemodynamics and environmental modeling, Springer, pp.118-123.

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壌中水分の間の分配係数	—	※	Briggs et al. (1982)[1]、EUSES III.5.2.2.式(720)として使用
logPow	1-オクタノールと水との間の分配係数	—		化学物質情報

※　*logPow* の下限及び上限の範囲外の値は下限値あるいは上限値に置き換える。

(3) 地上部農作物中濃度（Protected）

式 V-117 に示すように、地上部農作物濃度（Protected）には大気相ガス態からの移行及び根からの吸収による取り込みを考慮する。大気相ガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度（$C_{ag_gas_r}$）は V.7.3.3 (2)②大気相ガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度における式 V-112 で計算する。

$$C_{ag_prot} = C_{ag_gas_r} \qquad \text{式 V-117}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{ag_prot}	地上部農作物中濃度（Protected）	[mg/kg]		V.7.5.3 (2)参照
$C_{ag_gas_r}$	大気相ガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度	[mg/kg]		V.7.3.3 (2)②式 V-112

V.7.3.4　畜産物中濃度の推計

V.3.3.5 に対応しており、畜産物中の濃度推計について具体的な数式やパラメータを示す。畜産物中濃度推計式の設定経緯については V.7.5.3 (3)を参照されたい。

これらの濃度は人の暴露量の推計（V.7.4）に用いる。これらの濃度を推計するために、以下の数値が入力値となる。

- 大気中濃度　(V.7.3.1 (1)で推計)
- 土壌中濃度　(V.7.3.2 (1)で推計)
- 地上部農作物中濃度（Exposed）　(V.7.3.3 (2)で推計。牧草と想定している)
- 化学物質の物理化学的性状　(logPow)

畜産物中濃度の計算式の設定の経緯については、V.7.5.3 にて説明する。

(1) 牛肉中濃度

式 V-118 のように、各媒体中濃度に牛の摂取量を乗じて足し合わせ、その和に移行係数

[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. Pestic. Sci.,13(5), 465-504.

を乗じて牛肉中濃度（C_{meat}[mg/kg]）を算出する。牧草中濃度には地上部農作物濃度（Exposed）が相当する。

なお、移行係数は、式 V-119 のように「V.7.5.3 (4)数式の適用範囲」に説明する適用範囲を設けて計算する。このため、logPow の下限（1.5）及び上限（6.5）の範囲外の値は、下限値あるいは上限値に置き換える。土壌の換算係数（乾燥重量→湿潤重量）は、式 V-120 で計算する。

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

式 V-118

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{meat}	牛肉中濃度	[mg/kg]		MNSEM UM3.6.4
BTF_{meat}	牛肉への移行係数	[day/kg]		式 V-119
C_{grass}	牧草中濃度	[mg/kg]		V.7.3.3 (2)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	MNSEM UM デフォルト
$CONWD$	牧草の換算係数（乾燥重量→湿潤重量）	—	4	EUSES TableIII-205 家畜の摂取速度のデフォルト値
C_{soil}	土壌中濃度（10 年平均）	[mg/kg]		V.7.3.2 (1)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	EUSES TableIII-205 家畜の摂取速度のデフォルト値
$CONV_{soil}$	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）	[mg/m^3]		V.7.3.1 (1)式 V-40
CTL_{inhl}	牛の吸入摂取量（大気）	[m^3/day]	122	EUSES TableIII-205 家畜の摂取速度のデフォルト値

1.5＜logPow＜6.5 のとき

$$BTF_{meat} = 10^{-7.6+\log Pow}$$

式 V-119

$$CONV_{soil} = \frac{\frac{BD_{soil}}{1000}}{DEN_{SOS} \times SOSF}$$

式 V-120

記号	説明	単位	値	出典・参照先
BTF_{meat}	牛肉への移行係数	[day/kg]	※1	Travis and Arms(1988)[1]

[1] Travis, C. and Arms, A. (1988) Bioconcentration of Organics in Beef, Milk and Vegetation, Environ. Sci. Technol., 22(3), 271-274.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
				※2
logPow	1-オクタノールと水との間の分配係数	—		化学物質情報
$CONV_{soil}$	土壌の換算係数（乾燥重量→湿潤重量）	—	1.40	MNSEM エクセルファイル
BD_{soil}	土壌バルク密度	[kg/m³]	1050	MNSEM 内計算値
DEN_{SOS}	土壌粒子密度	[kg/L]	1.5	MNSEM UM デフォルト
SOSF	土壌中の粒子容積比	—	0.5	MNSEM UM デフォルト

※1　*logPow* の下限及び上限の範囲外の値は下限値あるいは上限値に置き換える。
※2　*logPow* の制限は EUSES III.5.2.3.　式(732)より

(2) 乳製品中濃度

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。

式 V-121 と式 V-122 に示すように、対象が肉牛から乳牛に変わることによってデフォルト値及び移行係数の計算式が異なるが、推計の考え方は同じである。

なお、移行係数は、「V.7.5.3 (4)数式の適用範囲」に説明する適用範囲を設けて計算する。このため、logPow の下限（3）及び上限（6.5）の範囲外の値は、下限値あるいは上限値に置き換える。

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

式 V-121

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{milk}	乳製品中濃度	[mg/kg]	—	MSNEM3.6.5
BTF_{milk}	牛乳への移行係数	[day/kg]	—	式 V-122
C_{grass}	牧草中濃度	[mg/kg]		V.7.3.3 (2) 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	MNSEM UM デフォルト
CONWD	牧草の換算係数（乾燥重量→湿潤重量）	—	4	EUSES TableIII-205 家畜の摂取速度のデフォルト値
C_{soil}	土壌中濃度（10 年平均）	[mg/kg]		V.7.3.2 (1) 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	EUSES TableIII-205 家畜の摂取速度のデフォルト値
$CONV_{soil}$	土壌の換算係数（乾燥重量→湿潤重量）	—	1.40	式 V-120
C(1.5)	（沈着による減少を考慮した後）	[mg/m³]		V.7.3.1 (1) 式 V-40
CTL_{inhl}	牛の吸入摂取量（大気）	[m³/day]	122	EUSES TableIII-205 家畜の摂取速度のデフォルト値

3＜logPow＜6.5 のとき

$$BTF_{milk} = 10^{-8.1+\log Pow}$$ 式 V-122

記号	説明	単位	値	出典・参照先
BTF_{milk}	牛乳への移行係数	[day/kg]	※1	Travis and Arms(1988)※2
logPow	1-オクタノールと水との間の分配係数	―		化学物質情報

※1　*logPow* の下限及び上限の範囲外の値は下限値あるいは上限値に置き換える。
※2　*logPow* の制限は EUSES III.5.2.3.　式(733)より

V.7.3.5　水域濃度・魚介類中濃度・底質中濃度の推計

本編の V.3.3.6 に対応しており、2 つの区分（河川水と海水）の水域中濃度及び魚介類中濃度推計及び底質中濃度推計について、具体的な数式やパラメータを示す。

- 河川水中濃度
- 海水中濃度
- 魚介類（淡水域）中濃度
- 魚介類（海水域）中濃度
- 底質中濃度

水と魚介類の濃度は人の化学物質摂取量の推計（V.7.4）に用いるほか、水中と底質中の化学物質濃度は生態への化学物質の影響を見るための環境媒体中濃度推計（V.7.3.5 (3)）に用いる。これらの濃度を推計するために、以下の数値が入力値となる。

- 水域への排出量　（排出量推計（Ⅳ章）の手法で推計）
- 化学物質の物理化学的性状　（有機炭素補正土壌吸着係数）
- 魚類への生物濃縮係数　（評価の準備（Ⅰ章）で収集するデータ）

(1) 河川水中濃度（人の健康に係る評価）

河川水中濃度の推計では、単純希釈と懸濁粒子への吸着を仮定する。この仮定は REACH-TGD の考え方[1]に従っている。

[1] ECHA (2010) R.16.6.6. Derivation of PEC. In: ECHA, Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.16: environmental exposure estimation, version: 2, pp.57-86.
「地表水中の濃度(PEClocalwater)は原則として、流出水出口の混合が完了してから計算される。流出水排出から暴露の位置までの時間が短いため、通常、希釈が優先的な「除去」プロセスとなる。したがって、地表水中での分解、水からの揮散及び沈殿は、除去のプロセスとして考慮されない。標準的な希釈倍率が使用される。吸着の余地を与えるために、懸濁物に吸着される化学物質の画分を考慮するための補正を行う。結果として得られる溶存濃度は PNECwater との比較に用いられる(2.3.8.3 節)。」

化審法推計排出量を用いた人の健康に係る評価における流量のデフォルト値を、国土交通省河川局編の一級河川流量年表（2002 年）における長期平水流量の全地点の 50%ile 値である 20.85[m³/sec]とした（式 V-123）。この値の基になった河川流量の集計結果を後述の V.7.5.4 (1)に示した。

海水中濃度は河川水中濃度を海域希釈率で除して求める。この海域希釈率については、NITE 初期リスク評価で用いている希釈倍率「10」（東京湾の河口付近から湾中までの塩分濃度分布より推計された数値）を用いる（式 V-124）。海域の希釈倍率に関して補足情報を後述の V.7.5.4 (2)に記載した。

PRTR 届出排出量は化審法の届出情報に基づく推計排出量に比べておおむね 1 倍～1000 分の 1 未満であることが排出量推計の検証結果から判明している（詳細はⅣ章を参照）。このことから、PRTR 届出排出量を用いて評価Ⅱを行う際には化審法推計排出量を用いる場合より河川流量のデフォルト値を小さく設定する。具体的には上記の一級河川流量年表における長期平水流量の全地点である 10%ile 値の 4.35[m³/sec]とした（式 V-123）。

なお、リスク懸念となった場合に、PRTR 届出情報により排出先河川名が判明した際はデフォルト流量から排出先河川の流量に置き換えることを検討する。人健康影響の評価には排出先河川の長期平水流量を用いる（なお、生態影響の評価には長期低水流量を用いる）。その具体的な手順については後述の V.7.3.5 (4)に記載した。

PRTR 届出情報で水域への排出先が海域となっている場合は、河川流量に海域への希釈率「10」を乗じた値を海域への排出量に対する海域希釈率に相当するものとみなし、海域中濃度を推計する（式 V-125）。

人の健康に係る評価に用いる河川水中濃度または海域中濃度の濃度推計式を以下に示す。

$$C_{river_man} = \frac{TEMW \times 10^6 [kg \rightarrow mg]}{V_{river_man} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60)[year \rightarrow \sec] \times 1000[m^3 \rightarrow L]} \qquad \text{式 V-123}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{river_man}	河川中濃度（人評価用）	[mg/L]	※1	
$TEMW$	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）	[m³/sec]	※2	NITE 報告書[1]

※1　排出量データに、PRTR 届出排出量（海域）を用いるときは 0。
※2　排出量データの種類により以下の値を用いる。
　化審法推計排出量：20.85（河川を仮定し、流量年表の長期平水流量の全地点の 50ile 値）
　PRTR 届出排出量（海域以外）：4.35（河川を仮定し、流量年表の長期平水流量の全地点の 10ile 値）

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）を用いるとき※1

[1] 製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター（2007）平成 18 年度　化学物質の暴露評価に資する河川等の希釈率等に関連する調査　報告書.
(http://www.safe.nite.go.jp/risk/pdf/h18fy_kasen_kisyakuritsu.pdf)

$$C_{sea_man} = \frac{C_{river_man}}{DILUTION_{sea}}$$ 式 V-124

排出量データに、PRTR 届出情報（海域）を用いるとき ※2

$$C_{sea_man} = \frac{TEMW \times 10^6 [kg \rightarrow mg]}{V_{sea_man} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60)[year \rightarrow \sec] \times 1000[m^3 \rightarrow L]}$$ 式 V-125

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{sea_man}	海域濃度（人評価用）	[mg/L]		
$DILUTION_{sea}$	海域希釈率	—	10	小谷ら[1]
C_{river_man}	河川中濃度（人評価用）	[mg/L]		式 V-123
$TEMW$	評価対象物質の水域への排出量	[kg/year]		Ⅲ章
V_{sea_man}	海域流量（人評価用）	[m^3/sec]	43.5　※3	NITE 報告書[2]

※1　評価対象物質は河川を経由して海域に移流することを仮定
※2　評価対象物質は直接海域に排出されることを仮定
※3　流量年表の長期平水流量の全地点の 10ile 値の 10 倍

吸着は有機炭素補正土壌吸着係数、水中懸濁粒子濃度及び懸濁粒子中の有機炭素比率に比例するため、懸濁粒子への吸着率は式 V-127 で表せる。本手法では、REACH-TGD の考え方[3]に従い、飲料水や魚への濃縮では式 V-126 による溶存態濃度を適用する。なお、計算上、溶存態濃度が化学物質の水溶解度を超える場合は溶存態濃度に水溶解度を用いて評価を行う。

$$C_{waterbody_man_ww} = C_{waterbody_man} \times (1 - fwp_{waterbody})$$ 式 V-126

記号※1	説明※2	単位	値	出典・参照先
$C_{waterbody_man_ww}$	水域の溶存態濃度（人評価用）※3	[mg/L]		詳細リスク評価書[4]

[1] 小谷憲雄, 平井祐介, 常見知広, 高久正昭, 松崎寿, 飛松潤, 佐渡友秀夫, 横山泰一 (2006) 化学物質の初期リスク評価手法の開発（１）－PRTR データを活用した暴露評価手法の開発―, 環境化学, 16(1), 1-17.

[2] 独立行政法人 製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター (2007) 平成 18 年度　化学物質の暴露評価に資する河川等の希釈率等に関連する調査　報告書. (http://www.safe.nite.go.jp/risk/pdf/h18fy_kasen_kisyakuritsu.pdf)

[3] ECHA (2010) Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.16: environmental exposure estimation, version: 2.の式 r.16-30 では、懸濁物への吸着による分配を考慮した表層水中濃度を計算しており、Table R.16-8 では、この値を水生生物の暴露濃度の推計に用いることが示されている。また、EC(2008) II.5.2.4 Bioconcentration in fish. In: Lijzen, J.P.A. and Rikken, M.G.J. eds., EUSES 2.0 background report.には、飲料水は表層水や地下水が使用され懸濁粒子の完全除去を仮定するとの記述がある。

[4] 中西準子, 東海明宏, 岩田光夫 (2008) 第Ⅵ章　暴露解析 4.3.3　水.『詳細リスク評価書シリーズ 23　デカブロモジフェニルエーテル』pp.122-123. 丸善株式会社,

記号※1	説明※2	単位	値	出典・参照先
$C_{waterbody_man}$	水域濃度（人評価用）	[mg/L]		式 V-123
$fwp_{waterbody}$	懸濁粒子への吸着率（水域）			式 V-127

※1　*waterbody*：*river* もしくは *sea*
※2　水域：河川もしくは海域
※3　化学物質の水溶解度を超えた場合は水溶解度を用いる。

$$fwp_{waterbody} = \frac{Koc \times FOC_{susp} \times (CW_{ss} \times 10^{-6}[mg \rightarrow kg])}{1 + Koc \times FOC_{susp} \times (CW_{ss} \times 10^{-6}[mg \rightarrow kg])}$$ 式 V-127

記号※1	説明※2	単位	値	出典・参照先
$fwp_{waterbody}$	懸濁粒子への吸着率（水域）	—		詳細リスク評価書[4]
CW_{ss}	水中懸濁粒子濃度	[mg/L]	50	MNSEM UM デフォルト
FOC_{susp}	懸濁物質中の懸濁粒子に対する有機炭素比率	—	0.1	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]		化学物質情報

※1　*waterbody*：*river* もしくは *sea*
※2　水域：河川もしくは海域

$$C_{dwater} = C_{river_man_ww}$$ 式 V-128

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{dwater}	飲料水濃度	[mg/L]		式 V-126
$C_{river_man_ww}$	河川水中の溶存態濃度（人評価用）	[mg/L]		

(2) 魚介類中濃度

魚介類中濃度の推計については、水域へ排出された化学物質が河川に生息する魚へ濃縮する場合と、海域に生息する魚へ濃縮する場合の２通りを想定する。

魚類以外の魚介類の濃度については魚体内中濃度と等しいという仮定をおく。つまり、魚介類中濃度を魚体内中濃度で代表させていることになる。

魚体内中濃度推計においては、水からの濃縮と餌からの濃縮の両経路を考慮した。水からの濃縮には BCF を用い、餌からの濃縮には BMF を用いて以下の式で推計する。

$$C_{fish_fresh} = C_{river_man_ww} \times BCF \times BMF$$ 式 V-129

$$C_{fish_sea} = C_{sea_man_ww} \times BCF \times BMF$$ 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）	[mg/kg]		REACH-TGD Chapter R.16.6.7.2.式(R.16-70)
$C_{river_man_ww}$	河川水中の溶存態濃度（人評価用）	[mg/L]		式 V-126
$C_{sea_man_ww}$	河川水中の溶存態濃度（人評価用）	[mg/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	—		図表 V-39
C_{fish_sea}	魚介類中濃度（海水域）	[mg/kg]		

BMF の値は実測値が得られない場合には次の図表 V-39 から選ぶことにする。

図表 V-39　BMF の値[1]

logPow [-]	BCF [L/kg]	BMF [-]※
< 4.5	< 2000	1
4.5～< 5	2000～5000	2
5～8	> 5000	10
> 8～9	2000～5000	3
> 9	< 2000	1

※　REACH-TGD では上位捕食者までの食物連鎖を考えているため、魚類の生物濃縮係数（BMF_1）と海洋環境の 5 段階程度以上の非常に長い食物連鎖の場合に乗じる値（BMF_2）の両方が記載されている。本スキームで用いるのは BMF_1 である。

評価対象物質の BCF の値が次のいずれに該当するかを確認し、それに応じて対応する BMF の値を図表 V-39 から選択する。

(ア) 実測値の場合
(イ) logPow の値から推定した値の場合
(ウ) デフォルト値を適用した場合

・　(ア)の場合は BCF の値を基準に BMF の値を選ぶ。
・　(イ)の場合は logPow の値を基準に BMF の値を選ぶ。

[1] ECHA (2010) R.7.10.4.5 Remaining uncertainty for aquatic bioaccumulation. In: ECHA, Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.7C: endpoint specific guidance, p.39.の Table R.7.10-4
　この表について「魚類の BCF が得られているならば、logPow の代わりにトリガー値として使用することもできる。推奨される BCF トリガー値には生物相（つまり魚類）における代謝の可能性が反映されているため、logPow トリガー値ほど保守的ではなく、より現実に近い。したがって、logPow に基づくトリガー値よりも BCF トリガー値の方が優先される」と説明されている。

・ (ウ)の場合は、BCF の測定値や推定値がどちらも得られない時に、化審法の濃縮度試験における「高濃縮性でない」の判定基準の 1 つである「濃縮倍率が 1,000 倍未満であること」から、「BCF＝1,000」とした場合などが相当する。この場合は次のようにする。
  - logPow の値があれば logPow の値を基準に BMF の値を選ぶ。
  - logPow の値がなければ BCF の値を基準に BMF の値を選ぶ。

ただし、(ア)の場合で実測値の BCF が 2000～5000 の時、図表 V-39 によると BMF の値は 2 又は 3 の 2 通りの値があるが、logPow<5 ならば BMF＝2、logPow≧5 ならば BMF＝3 とする。logPow の値が不明であれば安全側に考えて BMF＝3 とする。(ウ)の場合、BCF の値が 2000～5000 の時、logPow の値がなく BCF の値を基準にする時は安全側に考えて BMF＝3 とする。

なお、化審法の濃縮度試験の判定が「類推」により行われている場合では、BMF の選び方は評価対象物質との関係から基本的に次のようになる。

・ 評価対象物質の BCF の値に類似化合物の BCF の実測値を用いれば(ア) に該当する。一方、logPow の値からの推定値を用いれば(イ)に該当する。

(3) 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では、本スキームにおける評価対象生物が水生生物及び底生生物であるため、水域の排出シナリオのみを考慮する。つまり、排出源近傍の水域（河川又は海域）における化学物質濃度を推計して評価を行う。対象種（水生生物、底生生物）別に求める暴露濃度（量）等が異なる。人の健康に係る評価との違いを以下に説明する。

① 水生生物の暴露濃度推計

水生生物の PNEC は溶存態の化学物質濃度であるため、暴露濃度も溶存態濃度で推計する。水域濃度の推計式は人の健康に係る評価の式 V-123 と同様であるが、人よりも寿命が短い水生生物への暴露期間を考慮して、河川流量のデフォルト値を国土交通省河川局編の一級河川流量年表（2002 年）における長期低水流量の 50%ile 値である 13.47[m^3/sec]とした（式 V-131）。この値の基になった河川流量の集計結果を後述の V.7.5.4 (1)に示した。

PRTR 届出情報を用いて評価Ⅱを行う際には、人の健康に係る評価と同じく化審法届出情報を用いる場合よりも河川流量のデフォルト値を小さく設定し、上記の一級河川流量年表の長期平水流量における全地点の 10%ile 値である 2.51[m^3/sec]とした（式 V-131）。

なお、PRTR 届出情報では水域への排出先が海域となっている場合は河川流量に海域への希釈率「10」を乗じた値を海域への排出量に対する海域希釈率に相当するものとみなし、

海域中濃度を推計する点は人健康評価と同じである。

生態評価用の水域濃度と水域の溶存態濃度の推計式を以下に示す。

$$C_{waterbody_env} = \frac{TEMW \times 10^6 [kg \rightarrow mg]}{V_{waterbody_env} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60)[year \rightarrow \sec] \times 1000[m^3 \rightarrow L]} \quad \text{式 V-131}$$

記号※1	説明※2	単位	値※3	出典・参照先
$C_{waterbody_env}$	水域濃度（生態評価用）	[mg/L]		
$TEMW$	評価対象物質の水域への排出量	[kg/year]		
$V_{waterbody_env}$	生態の暴露量推算に係る水域流量	[m³/sec]	13.47	報告書[1]

※1,2,3 排出量データにより以下のように計算する。
化審法データ（河川生態を対象）：水域=河川、*waterbody=river*、 $V_{waterbody_env}=13.47$
PRTR 海域以外（河川生態を対象）：水域=河川、*waterbody=river*、 $V_{waterbody_env}=2.51$
PRTR 海域（海域生態を対象）：水域=海域、*waterbody=sea*、 $V_{waterbody_env}=25.1$

$$C_{waterbody_env_ww} = C_{rwaterbody_env} \times (1 - fwp) \quad \text{式 V-132}$$

記号※1	説明※2	単位	値	出典・参照先
$C_{waterbody_env_ww}$	水域の溶存態濃度（生態評価用）※3	[mg/L]		詳細リスク評価書[2]
$C_{waterbody_env}$	水域濃度（生態評価用）	[mg/L]		式 V-131
fwp	懸濁粒子への吸着率	—		式 V-127

※1　*waterbody*：*river* もしくは *sea*
※2　水域：河川もしくは海域
※3　化学物質の水溶解度を超えた場合は水溶解度を用いる。

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以降で考慮する。logPow が 3 以上の物質は底質に残留しやすいと判定し、評価Ⅱ以降で底生生物の評価を行うこととする。底生生物の暴露評価では、河川水中の溶存態濃度を求め、それに基づき排出源周辺の河川の底質中濃度を推計する。推計にあたり以下の仮定を置く。

・新たに堆積した底質中の化学物質濃度を底質に対する PEC とみなし、水中の懸濁物質の性状を計算に用いる（REACH-TGD の考え方）。
・懸濁物質中の化学物質は粒子吸着態（懸濁粒子）と溶存態（懸濁物質中の水）で存在し、

[1] 独立行政法人 製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター（2007）平成 18 年度　化学物質の暴露評価に資する河川等の希釈率等に関連する調査　報告書 (http://www.safe.nite.go.jp/risk/pdf/h18fy_kasen_kisyakuritsu.pdf)
[2] 中西準子，東海明宏，岩田光夫（2008）第Ⅵ章　暴露解析 4.3.3　水.『詳細リスク評価書シリーズ 23　デカブロモジフェニルエーテル』pp.122-123. 丸善株式会社,

分配平衡にある（＝底質中の化学物質は粒子吸着態（底質粒子）と溶存態（底質間隙水）で存在し、分配平衡にある）。

底質中濃度（湿潤重量当たり）は以下の式で推計される。

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

記号※1	説明※2	単位	値	出典・参照先
C_{sed_wet}	底質中濃度（湿潤重量当たり）	[mg/kg]		REACH-TGD Chapter R.16.6.6.3.式(R.16-35)
$K_{susp\text{-}water}$	懸濁物質-水分配係数	—		式 V-134
RHO_{susp}	懸濁物質のバルク密度	[kg/m^3]	1150	REACH-TGD Chapter R.16.6.4.式(R.16-16)で計算した値
$C_{waterbody_env_ww}$	水域の溶存態濃度（生態評価用）	[mg/L]		式 V-132

※1　*waterbody*：*river* もしくは *sea*
※2　水域：河川もしくは海域

$$K_{susp-water} = Fwater_{susp} + Fsolid_{susp} \times \frac{FOC_{susp} \times Koc}{1000} \times RHO_{solid}$$ 式 V-134

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{susp\text{-}water}$	懸濁物質-水分配係数	—		REACH-TGD Chapter R.16.5.3.3.式(R.16-7)
$Fwater_{susp}$	懸濁物質中の水の容積比率	—	0.9	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9
$Fsolid_{susp}$	懸濁物質中の懸濁粒子の容積比率	—	0.1	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9
FOC_{susp}	懸濁物質中の懸濁粒子に対する有機炭素比率	—	0.1	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]		化学物質情報
RHO_{solid}	懸濁粒子の密度	[kg/m^3]	2500	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9

PNEC$_{sed}$ が乾燥重量当たりの濃度で表されるため（本編 V.4.8.2 の脚注参照）、底質中濃度も乾燥重量当たりの濃度に換算し、これを実際の評価（PNEC$_{sed}$ との比較）に用いる。

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

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）	[mg/kg]		EUSES III.4.1.2 を参考.

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）	[mg/kg]		式 V-133
$conv_{susp}$	懸懸濁物質中の濃度の換算係数(湿潤重量→乾燥重量)	—		式 V-136

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$conv_{susp}$	懸濁物質中の濃度の換算係数(湿潤重量→乾燥重量)	—		EUSES III.4.1.2.式(622)
RHO_{susp}	懸濁物質のバルク密度	[kg/m³]	1150	REACH-TGD Chapter R.16.6.4.式(R.16-16)で計算した値
$Fsolid_{susp}$	懸濁物質中の懸濁粒子の容積比率	—	0.1	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9
RHO_{solid}	懸濁粒子の密度	[kg/m³]	2500	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9

(4) PRTR 届出情報を利用した評価における河川流量の置き換え

PRTR 届出排出量用のデフォルト流量を用いた評価Ⅱでリスクが懸念される場合には、個別地点ごとの流量を調査し、PRTR 届出情報に記載されている公共用水域（河川名）に対応する河川の流量情報が得られる場合には、その河川流量に置き換えて暴露評価を行うこととする。ただし、一級河川ではない場合等の理由で河川流量が得られない場合には、デフォルト流量を使った評価のままとなる。

濃度推計に利用可能な河川流量については、排出先河川を「流量年表[1]」や国土交通省の水文水質データベース[2]で調査し、PRTR 届出事業所に一番近い観測地点の河川流量データを選択する。採用する流量は、人健康影響の評価には、一級河川流量年表の長期平水流量とし、生態影響の評価には長期低水流量とする。本スキームでは、地点ごとの流量が採用可能か否かの判断について以下の手順で検討し、採用した流量をもとに暴露評価を行う。

（ア）評価対象物質の PRTR 届出情報に記載されている公共水域名（河川名）と流量年表に記載されている河川の間に対応があるかどうかを確認する。

（イ）（ア）に関して対応が確認された場合、PRTR 届出事業所に一番近い流量観測地点の河川流量データを選び、２地点間の距離、流量測定地点が PRTR 届出地点よりも上流と下流どちらに位置するのかなど、流量測定地点と PRTR 届出情報に基づく地理的分布関係を確認する。

[1] 国土交通省河川局編 流量年表（刊行物）
[2] 国土交通省の水文水質データベース
(http://www1.river.go.jp/)

（ウ）（イ）に関して地理的分布関係に合理性が確認された場合、流量測定地点と PRTR 届出事業所地点との間に一、二級河川（もしくは支流）の合流があるかどうかを確認し、地点間に合流がなければ、その河川の流量情報を用いて河川排出シナリオの暴露評価を行う。

V.7.4 人の暴露量の推計

V.7.3 で求めた環境媒体中濃度に以下で設定する媒体別摂取量を乗じ、人の体重で除すことで、摂取媒体別の一日当たりの人の体重 1kg 当たりの暴露量を推計する。この摂取媒体別の暴露量を合計し、全摂取媒体からの人の暴露量を推計する。

以下では人の暴露量の推計に用いる食品摂取量等の値と、環境分配モデル適用物質（構造不定）に用いる人のデフォルト暴露量を示す。

V.7.4.1　暴露量の推計に用いる食品摂取量等

人の吸入経路の暴露に関しては屋外大気の吸入摂取を想定し、経口経路の暴露に関しては農作物（地上部農作物（Potected と Exposed）と地下部農作物）、畜産物（乳製品と牛肉）、魚介類(淡水域と海水域)及び飲料水からの経口摂取を想定しているため、それらの一日当たりの食品摂取量を以下の図表 V-40 のとおり設定した。図表 V-40 の値の設定根拠については V.7.5.5 で説明する。

図表 V-40　暴露量の推計に用いる食品摂取量等

説明	単位	値	出典･参照先
人の体重	[kg]	50	V.7.5.5 (2)①
人の吸入摂取量（大気）	[m^3/day]	20	V.7.5.5 (2)②
人の地下部農作物の摂取量	[g/day]	7.0	V.7.5.5 (2)③
人の地上部農作物(Protected)の摂取量	[g/day]	19.7	V.7.5.5 (2)③
人の地上部農作物(Exposed)の摂取量	[g/day]	16.8	V.7.5.5 (2)③
人の乳製品の摂取量	[g/day]	0.6	V.7.5.5 (2)④
人の牛肉の摂取量	[g/day]	0.2	V.7.5.5 (2)④
人の魚介類（淡水域）の摂取量	[g/day]	1.4	V.7.5.5 (2)⑤
人の魚介類（海水域）の摂取量	[g/day]	43.9	V.7.5.5 (2)⑤
人の飲水量	[L/day]	2	V.7.5.5 (2)⑥

V.7.4.2　構造不定用ワーストデフォルト暴露量

本編 V.3.6.1 で説明したように、環境分配モデル適用物質（構造不定）と分類された物質について、環境中濃度と人の摂取量の推計においては、大気経由の人の暴露量が最大とな

る物理化学的性状一式の組合せを見つけ、そのワーストデフォルト暴露量（単位排出量当たり）を暴露評価Ⅰに用いるとしている。

評価対象エリアが排出源を中心とする半径1[km]の円（中心から0.1[km]の円を差し引く）の時の大気排出量 1[t/year]に係るワーストデフォルト暴露量となる物理化学的性状と暴露量の値は以下のとおりである。なお、この物理化学的性状の値はモデル上の計算によって、暴露量がワーストになるようにして決めたものであり、実際にこのような物質が存在するわけではないことに注意されたい。これらの値の設定根拠は V.7.5.6 を参照されたい。

図表 V-41　ワーストデフォルト暴露量となる物理化学的性状と暴露量の値

パラメータ	単位	値
分子量	－	200
融点	[℃]	-35
logPow	－	1.5
蒸気圧	[Pa]	1.13×10^{-3}
水溶解度	[mg/L]	2.28×10^{4}
有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]	1.66×10^{2}
ヘンリー係数	[Pa・m³/mol]	9.95×10^{-6}

大気経由の暴露経路	暴露量（大気排出量 1[t/year]当たり）[mg/kg/day／(t/year)]
大気吸入	5.185×10^{-5}
地上部農作物摂取	1.366×10^{-3}
地下部農作物摂取	1.663×10^{-5}
乳製品摂取	1.154×10^{-8}
肉類摂取	2.155×10^{-10}
合計	1.435×10^{-3}

V.7.5 数理モデル及びデフォルト値設定の経緯等

V.7.5.1　大気中濃度と沈着量の推計式の経緯

ここでは、大気中濃度の推計に利用する大気中濃度換算係数の算出手順、粒子吸着態乾性沈着の推計式の挙動比較・粒子径の設定、沈着量の推計式に用いる補正係数の導出手順と補正係数の効果について順に説明する。

(1) 大気中濃度換算係数

① 算出方法とその結果

暴露評価では大気排出シナリオのリスク推計結果をリスク懸念の影響面積で表すために、仮想的な排出源を中心としたドーナツ状の評価対象エリアの大きさを 10 段階に設定して評価する。そのため、大気中濃度換算係数を評価対象エリアの大きさ（評価対象半径）ごと

に導出する。大気中濃度換算係数の導出には METI-LIS の計算エンジンを組み込んだ反復計算可能なプログラムを利用した[1]。

METI-LIS は、企業による有害大気汚染物質の自主管理計画策定の一助となることを目的に開発された大気中濃度推計のためのソフトウェアであり、国内で多くの使用実績がある。METI-LIS の詳細については取扱説明書[2]や文献[3]を参照されたい。METI-LIS は、煙突や排気口といった点煙源からの排出をモデル化するために、式 V-137 に示すような定常一様状態を仮定した次のガウス型プルーム式[4]を基本としている。

$$C(x,y,z)=\frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z u}\exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)\left\{\exp\left[-\frac{(H_e-z)^2}{2\sigma_z^2}\right]+\exp\left[-\frac{(H_e+z)^2}{2\sigma_z^2}\right]\right\} \qquad \text{式 V-137}$$

記号	説明	単位※1
$C(x,y,z)$	(x,y,z)地点における化学物質濃度	[mg/m³]
x	風下距離	[m]
y	水平方向距離	[m]
z	計算点高さ	[m]
Q	排出量	[mg/s]
u	風速	[m/s]
σ_y	水平方向拡散幅	[m]
σ_z	鉛直方向拡散幅	[m]
H_e	有効煙突高さ※2	[m]

※1 ここでは式の両辺の単位が合うように記載したが、ソフトウェア上では他の単位で入力・出力するものもある。
※2 有効煙突高さとは、排出源高さにスタックチップダウンウォッシュ[5]によ

[1] METI-LISver.2.03 には反復計算の機能（複数の計算ケースを自動計算する機能）は搭載されていないため、複数の地点、年、排出源を対象とする計算を効率的に行うためのプログラムを作成し利用した。このプログラムの入出力部分等は METI-LIS のものとは異なっているが、METI-LIS を使った計算結果と同じになるように計算エンジンは METI-LIS と同じものを用いている。

[2] 経済産業省（2003）経済産業省―低煙源工場拡散モデル　(Ministry of Ecoomy, Trade and Industry ― Low rise Industrial Source dispersion model) ＭＥＴＩ－ＬＩＳモデル　ver.2.03　取扱説明書.
(http://www.jemai.or.jp/CACHE/tech_details_detailobj1816.cfm)

[3] 中西準子，花井荘輔，東野晴行，吉門洋，吉田喜久雄（2005）『リスク評価の知恵袋シリーズ１　大気拡散から暴露まで　－ADMER･METI-LIS－』丸善株式会社.

[4] ただし、0.4m/s 以下は無風扱いでパフ式を用いて計算が行われる。
METI-LISver.2.03 予測手法マニュアル予測手法マニュアル　p.48
中西準子，花井荘輔，東野晴行，吉門洋，吉田喜久雄（2005）『リスク評価の知恵袋シリーズ１　大気拡散から暴露まで　－ADMER･METI-LIS－』p.208. 丸善株式会社

[5] 煙突の排出口における排出速度が風速に比べ小さい場合には、煙突の風下に渦が発生し空

る下降と浮力上昇を加味した高さのことである。

大気中濃度換算係数の算出に用いた気象データ、計算条件、計算手順及び計算結果を以下に示す。

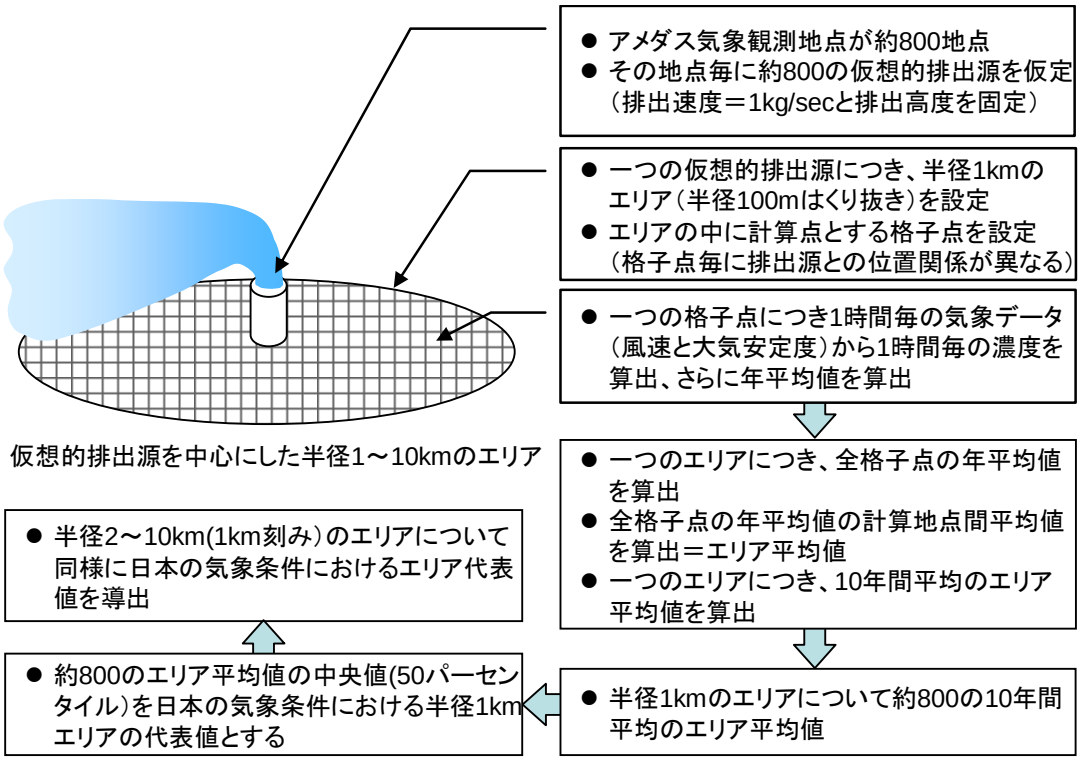
・気象データ：1994 年度から 2003 年度までの 10 年分の全国アメダス気象観測データ[1]
・計算条件：図表 V-42 に示す。

図表 V-42　大気中濃度計算条件

設定項目	設定内容等
排出源位置	METI-LIS が計算に用いる気象データを観測出来る装置（風速計、日照計）が設置されているアメダス気象観測地点に排出源があると仮定する。2005 年段階における仮想的な排出源の数は、全国で 843 地点となる。 本計算においては、1994 年度から 2003 年度までの 10 年間分を計算した（843 地点×10 年間＝8,125 データ ※欠測や 10 年間の間に移動や新設された観測地点があるため、8,430 データより少なくなっている）。
排出源高さ	本計算においては、fugitive[2]での設定ではなく、煙突より排出されるものと設定した。煙突高さについては、梶原ら[3、4]によると、アクロレイン及び塩化ビニルモノマーにおいて、排出源高さを 10[m]として METI-LIS による計算を行うのが妥当であるとの報告がある。また、労働安全衛生法の有機溶剤中毒予防規則第 15 条の 2 にある有機溶剤の排気口に関する規定（排気口の高さを屋根から 1.5m以上としなければならない）とある。 以上を勘案し本計算においては 10[m]と設定した。
濃度計算範囲	排出源を中心とした半径 1[km]、2[km]、3[km]、4[km]、7[km]、8[km]、9[km]及び 10[km]の円から 100[m]の円を除いたエリアの濃度を算出する。
格子間隔	排出源を中心に格子間隔に区切り、各格子点の濃度を算出する。本計算においては、濃度計算範囲内に約 2,000 個の格子点があるように設定した。
濃度算出高さ	各格子点において、地上面から 1.5[m]地点の濃度を算出する。
その他	排出量：1[kg/s]、スタックチップダウンウォッシュと浮力上昇を評価しないため有効煙突高さは 10[m]に固定、円内の煙源数：1、建屋：なし、稼働出力：1 年を通じて一定。

・計算手順：以上の計算条件をもとに本編にも記載した次図の手順で計算し導出した[5]。

気が巻き込まれ下降すること。
[1] 気象業務支援センター（2005）アメダス再統計値－気象観測所指針(2005)による－
[2] 事業所の換気口等から漏れ出ることにより排出されるというイメージ
[3] 梶原秀夫，高井淳，吉門洋（2008）METI-LIS モデルを用いた高濃度観測地点周辺での発生源逆解析，大気環境学会誌, 43(4), 238-244.
[4] 梶原秀夫，高井淳，吉門洋（2008）METI-LIS モデルを用いた大気汚染物質の発生源逆解析(2)：複数測定局から得られる解析精度，第 49 回大気環境学会年回講演要旨集, 424.
[5] 図の手順では、年平均値を一度計算した後に 10 年間のエリア平均値を求めているが、これは METI-LISve.2.03 の最大計算期間が 1 年間であるためである。



大気中濃度換算係数の導出方法（本編 V.3.3.2 (1)図表 V-13 の再掲）

・ 計算結果：以上で得られた 843 地点の年平均かつ年度間（1994 年度～2003 年度）平均の濃度（大気中濃度換算係数）の統計量を図表 V-43 に示す。各都道府県で異なる大気中濃度換算係数を用いることも考えられたが、半径によって異なるものの、95%ile と 5%ile で 2 倍程度の幅に収まっていることから、本スキームでは全国一律に 50%ile の値を採用した。

図表 V-43　大気中濃度換算係数の統計量

評価対象半径[km]	大気中濃度換算係数[mg/m³／(t/year)]						
	5%ile	10%ile	**50%ile**	90%ile	95%ile	平均	標準偏差.
1	1.1×10^{-4}	1.3×10^{-4}	**1.8×10^{-4}**	2.2×10^{-4}	2.3×10^{-4}	1.8×10^{-4}	3.5×10^{-5}
2	4.4×10^{-5}	5.4×10^{-5}	**7.5×10^{-5}**	8.6×10^{-5}	9.1×10^{-5}	7.2×10^{-5}	1.3×10^{-5}
3	2.5×10^{-5}	3.1×10^{-5}	**4.1×10^{-5}**	4.8×10^{-5}	5.1×10^{-5}	4.0×10^{-5}	7.4×10^{-6}
4	1.7×10^{-5}	2.1×10^{-5}	**2.9×10^{-5}**	3.4×10^{-5}	3.6×10^{-5}	2.8×10^{-5}	5.3×10^{-6}
5	1.2×10^{-5}	1.6×10^{-5}	**2.0×10^{-5}**	2.5×10^{-5}	2.6×10^{-5}	2.0×10^{-5}	3.9×10^{-6}
6	9.6×10^{-6}	1.2×10^{-5}	**1.6×10^{-5}**	1.9×10^{-5}	2.0×10^{-5}	1.5×10^{-5}	3.0×10^{-6}
7	7.7×10^{-6}	9.5×10^{-6}	**1.2×10^{-5}**	1.5×10^{-5}	1.6×10^{-5}	1.2×10^{-5}	2.4×10^{-6}
8	6.3×10^{-6}	7.8×10^{-6}	**1.0×10^{-5}**	1.3×10^{-5}	1.4×10^{-5}	1.0×10^{-5}	2.0×10^{-6}
9	5.3×10^{-6}	6.6×10^{-6}	**8.4×10^{-6}**	1.1×10^{-5}	1.1×10^{-5}	8.5×10^{-6}	1.7×10^{-6}

評価対象半径[km]	大気中濃度換算係数[mg/m³／(t/year)]						
	5%ile	10%ile	**50%ile**	90%ile	95%ile	平均	標準偏差.
10	4.5×10^{-6}	5.6×10^{-6}	**7.2×10^{-6}**	9.2×10^{-6}	9.9×10^{-6}	7.2×10^{-6}	1.5×10^{-6}

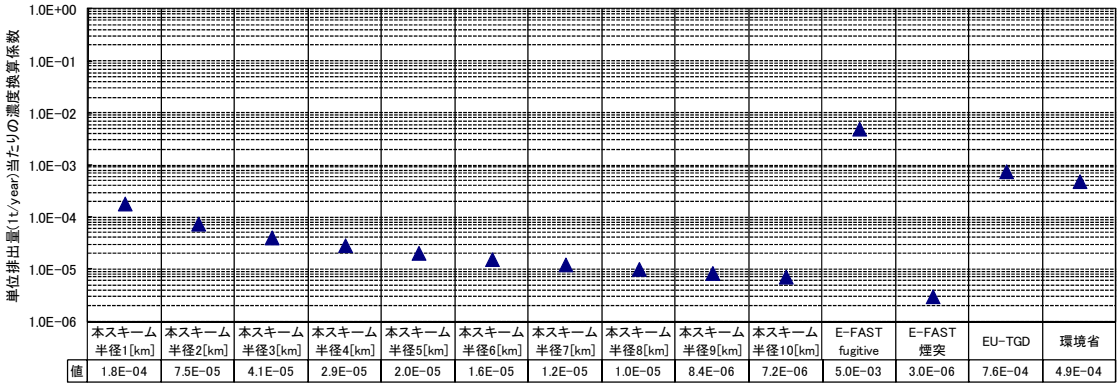
② 国内外における大気中濃度換算係数との比較

比較のため、本スキーム及び国内外で用いられている大気暴露評価モデルの設定パラメータと大気中濃度換算係数を図表 V-44 に示し、大気中濃度換算係数をグラフに表したものを図表 V-45 に示す。

図表 V-44　大気暴露評価モデルの設定パラメータの比較

Parameter	本スキーム	E-FAST		REACH-TGD	環境省[1]
排出条件	煙突	漏風※ (fugitive)	煙突	煙突	煙突
排出源高さ[m]	10	3	30	10	10
排出源からの距離[m]	1000[m]～10000[m] エリア平均 (100[m]以内を除く)	100	1,000	100	1,000
風速[m]	全国の10年間のアメダス気象観測データによる	5.5	5	オランダの 10 年間の気象データによる	1
風向頻度		0.25	明記無し		0.25
大気中濃度換算係数 [mg/m³／(t/year)]	1.8×10^{-4} ～7.2×10^{-6}	5.0×10^{-3}	3.0×10^{-6}	7.6×10^{-4}	4.9×10^{-4}

※事業所の換気口等から漏れ出ることによる排出されるイメージ。



図表 V-45　本スキーム及び国内外における大気中濃度換算係数の比較

[1] 環境省（2007）中央環境審議会大気環境部会健康リスク総合専門委員会（第７回）配付資料 3-2　有害性大気汚染物質に該当する可能性のある物質のリスク評価に用いるばく露情報について（案）.
(http://www.env.go.jp/council/07air/y073-07/mat03_2.pdf)

(2) 沈着量の推計式に用いる補正係数について

「V.7.3.1 (2)②i)総沈着量の推計」で述べたように総沈着量 DEP_{total}（式 V-49）の推計式には補正係数（K_{dep_r} と K_{dep_s}）を用いている。この係数は沈着量の過大評価を防ぐために考案した本手法独自のものであるため、以下ではこの補正係数の導出手順を詳しく示すことにする。また、どの程度過大評価を防ぐ効果があるのかも示す。

① 補正係数の必要性

各機序の沈着量（ガス態乾性沈着量、粒子吸着態乾性沈着量、ガス態湿性沈着量及び粒子吸着態湿性沈着量）の式を再掲する（V.7.3.1 (2)②ii)より）。

$$DEP_{dry_g_r} = C_0(1.5) \times FAA \times Rag$$ 式 V-57(再掲)

$$DEP_{dry_p_r} = C_0(1.5) \times FAP \times V_d$$ 式 V-58(再掲)

$$DEP_{dry_g_s} = C_0(1.5) \times (1 - FP) \times Rag$$ 式 V-59(再掲)

$$DEP_{dry_p_s} = C_0(1.5) \times FP \times V_d$$ 式 V-60(再掲)

$$DEP_{wet_g} = Cr_g \times TRF$$ 式 V-61(再掲)

$$DEP_{wet_p} = Cr_p \times TRF$$ 式 V-62(再掲)

前記の式に関係する雨水中濃度 Cr_g、Cr_p、大気柱中濃度 Ca_0、大気中濃度 $C_0(1.5)$の式も再掲する（V.7.3.1 (2)②iii)(c)より）。

$$Cr_g = Ca_0 \times FAA \times \frac{1}{HENRY}$$ 式 V-67(再掲)

$$Cr_p = Ca_0 \times FAP \times CEP$$ 式 V-68(再掲)

$$Ca_0 = \frac{C_0(1.5)}{Kc}$$ 式 V-69(再掲)

$$C_0(1.5) = a \times Q'$$ 式 V-38(再掲)

前記の式 V-57～式 V-60 はいずれも下記の式の形をしていることがわかる。

沈着量＝大気中濃度 $C_0(1.5)$×「物理化学的性状によって決まる値」　式 V-138

式 V-61 と式 V-62 の Cr_g と Cr_p に式 V-67 と式 V-68 を代入し、式 V-69 を用いれば、式 V-61 と式 V-62 も同じく式 V-138 の形をしていることがわかる。

ここで問題になるのは、本手法では前記の式 V-38 のように、大気中濃度換算係数 a（定数）を用いて大気中濃度を排出量の比例式としているため、大気中濃度が物理化学的性状によらないことである。式 V-138 の「物理化学的性状によって決まる値」が増加すると、沈着量も増加するが、実際には沈着した分だけ大気から化学物質が除去され、大気中濃度が減少する。その結果、式 V-138 で大気中濃度の減少と「物理化学的性状によって決まる

値」の増加が相殺されることになる。しかし、本手法では大気中濃度換算係数 a が定数であるため、式 V-138 の大気中濃度が減少せず沈着量が実際よりも過大に推計されてしまう。特に③で後述するようにヘンリー係数が非常に小さい物質は上記の式 V-67 から Cr_g が非常に大きくなり、このような計算法では、排出量を上回る沈着量が計算されてしまうことが生じる。

これは大気中濃度換算係数 a を用いた本手法特有の問題点であり、例えば AIST-ADMER[1] のように大気中濃度と沈着量を両方とも推計可能なモデルを用いれば解決できる。その場合、物理化学的性状によって大気中濃度と沈着量は異なるため、1 物質ごとにそのような大気中濃度推計モデルで計算することになる。また、平均的な気象条件を考慮するのであれば、V.7.5.1 (1)のように複数年の気象データを用いて 1 物質ごとに計算する必要があるが、相当な手間がかかる。本手法では、特に評価 I は、なるべく多数の物質を効率的に評価することを目指したので、1 物質ごとに大気中濃度推計モデルで計算するという方法をとらずに、大気中濃度換算係数 a を利用して求めた沈着量を後で補正するという方法をとった。

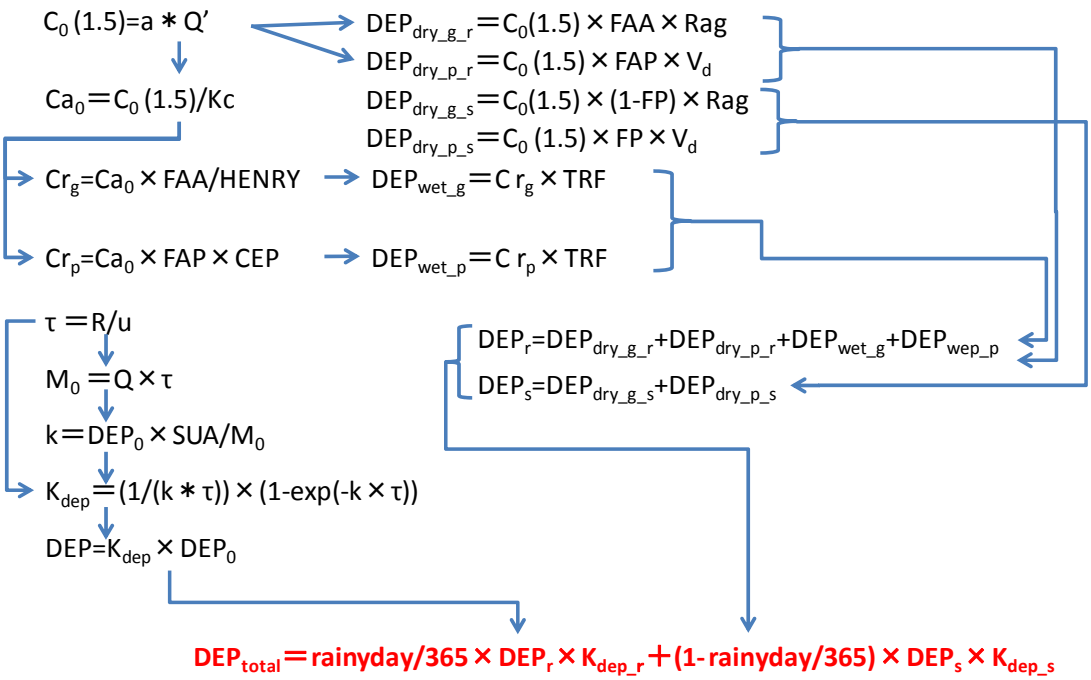
この補正係数の導出手順を下記②で説明する。

② 補正係数の導出手順

補正係数を導出する手順はやや複雑であるため、大気中濃度から補正係数を用いて沈着量を推計するまでに用いる変数の関係図を以下に示す（変数の意味は「V.7.3.1 (2)②沈着量の推計」又は、後述の四角枠内の説明を参照）。図では、矢印の根元の変数を矢印の先の変数に代入することを示している。最終的に求めるものは図の一番下にある DEP_{total} であり、これに用いる補正係数 K_{dep_r}、K_{dep_s} を導出する。

以下、順に説明する。

[1] AIST-ADMER ver.2.5（産業技術総合研究所）では、乾性沈着速度や洗浄比をユーザーが入力すれば大気中濃度だけでなく乾性沈着量や湿性沈着量を推計できる。なお、METI-LIS では粒子状物質の乾性沈着量を推計できるが、ガス態の沈着量や湿性沈着量を計算する機能はない（ver3.0 時点）。



図表 V-46　大気中濃度から沈着量を推計するまでに用いる変数の関係図

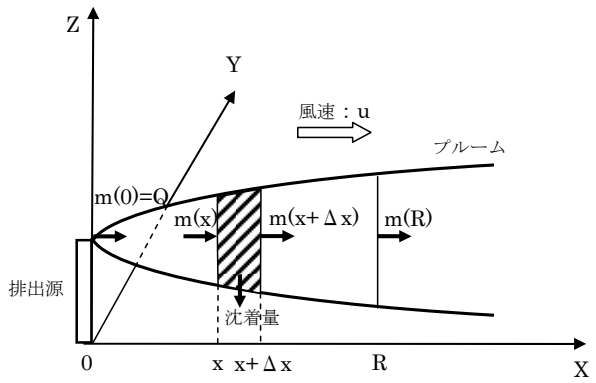
i) 大気中の総物質量

まず、大気から土壌への沈着が起きている状態で、大気中に残存する化学物質の総物質量を求める式を導く。ここでは、大気中濃度を求めるプルーム式（V.7.3.1 (1)）の前提と同じように、定常状態であること及び風速・風向が一定であることを仮定する。

この時、大気中の総物質量の求め方は以下の四角枠のとおりである。

なお、四角枠内での数式の表記は、行数の節約のため、$\frac{A}{B}$ を A/B と表す等、本章の他とは異なる表記の仕方をとっている（以下同じ）。

まず、次図に想定している状況と用いる記号を示す。



図表 V-47　大気中の総物質量と沈着量の物質収支

■仮定

- 定常状態
- 風速と風向は一定で、風が吹いていく方向を X 軸の正の方向にとる。
- 単位時間当たりの沈着量は上空に存在する物質量に比例するものとする（一次速度式を仮定）。

■記号

- m(x)：(x,0,0)を通り X 軸に垂直な平面（つまり、X=x)によるプルームの断面を考え、その断面を単位時間当たりに通過する物質量　mg/s
- Q：排出量　mg/s
- u：風速　m/s
- R：評価エリア半径 m
- M(R)：X 軸に垂直で x=0 を通る平面と x=R を通る平面で囲まれた領域に含まれる化学物質の総物質量　mg

■導出

Δx を微少距離とし、x 軸に垂直な平面 X＝x と X＝x+Δx で囲まれた領域を図表 V-47 のように斜線で表し、以下では斜線部の物質収支を考える。

まず、斜線部を大気が風に流されて通過する時間（s）は次式となる。

$\Delta x/u$　　式 V-139

Δx が十分小さいことから斜線部内では m(x)は一定と仮定できるため、斜線部における物質量（mg）は次式で表せる。

$m(x)\times\Delta x/u$　　式 V-140

これより、斜線部における単位時間当たりの沈着量（mg/s）は次式で表せる。

$k\ (m(x)\times\Delta x/u)$　　式 V-141

ただし、k：沈着速度係数　1/s である。

以上より、斜線部で物質収支を考えると次式を得る。

$m(x)= m(x+\Delta x) + k\ (m(x)\times\Delta x/u)$　　式 V-142

整理して両辺Δx で除すと次式となる。

$(m(x) - m(x+\Delta x)) / \Delta x = -k/u\times m(x)$　　式 V-143

Δx→0 とすると 次の微分方程式が導ける。

$dm(x)/dx = -k/u\times m(x)$　　式 V-144

これを解くと次式となる。

$m(x) = C\times\exp(-k/u\times x)$　C：積分定数　　式 V-145

原点では排出量 Q で物質が排出されているので m(0) ＝ Q　であり、これから次式となる。

$m(x) = Q\times\exp(-k/u\times x)$　　式 V-146

次に総物質量 M(R)を求める。

M(R)は x=0 から x=R で囲まれた領域を n 分割した微小領域が集まったものと考えれば式 V-140 より次式で表せる。

$$M(R) \fallingdotseq \Sigma_[i=0,n]\ m(x_i) \times (\Delta x_i / u) \qquad \text{式 V-147}$$

n→∞として、次式を得る。

$$M(R) = \int [x=0,R]\ m(x)/u\ dx \qquad \text{式 V-148}$$

式 V-146 を代入し積分を行う。

$$\begin{aligned} M(R) &= \int [x=0,R]\ Q/u \times \exp(-k/u \times x)\ dx \\ &= Q/k \times (1 - \exp(-k \times R/u)) \end{aligned} \qquad \text{式 V-149}$$

従って、

$$M(R) = Q/k \times (1 - \exp(-k \times R/u)) \qquad \text{式 V-150}$$

また、滞留時間（領域内を化学物質が移流によって通過する時間）を τ とし、τ ＝ R/u で置き換えて τ の関数で表すと次式となる。

$$M(\tau) = Q/k \times (1 - \exp(-k \times \tau)) \qquad \text{式 V-151}$$

注）導出過程から明らかなようにプルーム式がどういう形であるかは無関係である。定常状態という仮定、風速が一定という仮定、単位時間当たりの沈着量は上空の物質量に比例するという仮定以外は使っていない。

ii) 補正係数 K_{dep} の算出

補正係数の求め方は以下のとおりである。

補正係数 K_{dep} の定義は、M_0 を沈着がない場合の総物質量とすると

$$M = K_{dep} \times M_0 \qquad \text{式 V-152}$$

K_{dep} は無次元、これが補正係数 K_{dep} の定義である。

補正係数 K_{dep} は降雨時のもの（K_{dep_r}）と晴天時のもの（K_{dep_s}）が異なるが、ここでは両者を区別せず同じ記号で書く。後で区別して扱うものとする。

沈着を考慮しない場合の総物質量 M_0 は、排出量に滞留時間をかければ計算できる。

$$M_0 = Q \times \tau \qquad \text{式 V-153}$$

従って、

$$M = K_{dep} \times Q \times \tau \qquad \text{式 V-154}$$

式 V-151 と式 V-154 より

$$M = K_{dep} \times Q \times \tau = Q/k \times (1 - \exp(-k \times \tau)) \qquad \text{式 V-155}$$

これから

$$K_{dep} = (1/(k \times \tau)) \times (1 - \exp(-k \times \tau)) \qquad \text{式 V-156}$$

こうして補正係数 K_{dep} が導かれた。

1　iii) **補正係数 K_{dep} を用いた総沈着量の求め方**

2　補正係数 K_{dep} を用いた総沈着量の求め方は以下のとおりである。

(a) 大気中濃度の減少を考慮しない総沈着量 DEP_0 の求め方

各媒体中の物質の個別の沈着速度を求め、それを併せたものを初期総沈着量（大気中濃度の減少を考慮する前）DEP_0 mg/m²/day とする。

降雨時と晴天時で異なるが両者は後ほど区別することにして、ここでは同じ記号で書く。

例えば、降雨時の初期沈着量の場合は以下のようになる。

降雨時の初期沈着量＝大気中濃度×ガス態の存在比率×ガス態沈着速度
＋大気中濃度×粒子吸着態の存在比率×粒子吸着態沈着速度　式 V-157
＋雨水中濃度×降水量

得られた初期沈着量は、その時点の各濃度に対する沈着量であって、大気中濃度の減少を考慮した最終的な沈着量とは異なる。

(b) 大気中濃度の減少を考慮した後の総沈着量 DEP の求め方

(a)で求めた DEP_0 と、沈着を考慮しない場合の総物質量 M_0 を用いて、沈着速度定数 k は一次速度定数であることより以下の関係が成り立つ。

$$k \times M_0 = DEP_0 \times SUA \quad \text{式 V-158}$$

これより

$$k = DEP_0 \times SUA / M_0 \quad \text{式 V-159}$$

ここで、SUA：評価エリアの面積 m²

k×τを計算すると、式 V-153 より

$$\begin{aligned} k \times \tau &= (DEP_0 \times SUA / M0) \times \tau \\ &= (DEP_0 \times SUA / (Q \times \tau)) \times \tau \\ &= DEP_0 \times SUA / Q \end{aligned} \quad \text{式 V-160}$$

よって式 V-156 の補正係数 K_{dep} は次のように書き変えられる。

$$\begin{aligned} K_{dep} &= (1/(k \times \tau)) \times (1 - \exp(-k \times \tau)) \\ &= (Q / (DEP \times SUA)) \times (1 - \exp(-DEP \times SUA / Q)) \end{aligned} \quad \text{式 V-161}$$

これが補正係数 K_{dep} の最終的な形であり、V.7.3.1 (2)②i)総沈着量の推計での K_{dep_r}（式 V-50）と K_{dep_s}（式 V-51）と同じ形の式である。

補正後の沈着量 DEP（大気中濃度の減少を考慮した後の沈着量）の定義は、大気中濃度の減少を考慮した後の総物質量 M を用いて

$$DEP = k \times M / SUA \quad \text{式 V-162}$$

と表せる。式 V-159 より

$$\begin{aligned} DEP &= (DEP_0 \times SUA / M_0) \times M / SUA \\ &= DEP_0 \times (M / M_0) \end{aligned} \quad \text{式 V-163}$$

K_{dep} の定義　$K_{dep} = M / M_0$（式 V-152）を用いて書き直すと

$DEP = K_{dep} \times DEP_0$　　式 V-164

これが、補正後の総沈着量 DEP を求める式である。

沈着による減少を考慮した後の大気中濃度の補正は以下のとおり。

K_{dep} の定義　$K_{dep}=M/M_0$ より、$K_{dep}=C(1.5)/C(1.5)_0$ も成り立つものと仮定すれば、

$C(1.5) = C(1.5)_0 \times K_{dep}$　　式 V-165

となり、補正後の大気中濃度が求められる。

また、式 V-69 より $Ca_0 = C(1.5)_0 / Kc$ であるので、式 V-165 と合わせると

補正後の大気柱中平均濃度 Ca は、

$Ca = Ca_0 \times K_{dep}$　　式 V-166

として求められる。.

３．降雨日数を考慮

最後に降雨日数を考慮した沈着量や大気中濃度を求める。

補正係数と沈着量について、降雨の時を K_{dep_r} と $DEP_{_r}$、晴天時を K_{dep_s} と $DEP_{_s}$ と書き分ける。

式 V-164 の沈着量を年間の降雨日数 rainyday 日/年で加重平均をとると

$$DEP_{total} = rainyday/365 \times (K_{dep_r} \times DEP_{_r}) + (1 - rainyday/365) \times (K_{dep_s} \times DEP_{_s})$$　　式 V-167

となる。大気中濃度は、式 V-165 より

$$C(1.5) = rainyday/365 \times (K_{dep_r} \times C(1.5)_0) + (1 - rainyday/365) \times (K_{dep_s} \times C(1.5)_0) = K_{dep} \times C(1.5)_0$$　　式 V-168

となる。ただし、

$$K_{dep} = rainyday/365 \times K_{dep_r} + (1 - rainyday/365) \times K_{dep_s}$$　　式 V-169

と改めて定義し直した。

iv) *Ca₀*の計算方法

ここでは湿性沈着の推計に用いる大気柱中化学物質平均濃度 Ca_0 の計算方法を説明する。湿性沈着を考える場合、雨は地表面から十分に高い所から降ってくるため、湿性沈着量推計に用いる大気中濃度は $C_0(1.5)$ のような地表付近の濃度ではなく、十分に高い所までの平均濃度を用いることが適当である。本手法では拡散幅の 3 倍の高さに相当する高さを持つ大気の柱を考え、その中の平均濃度[1]を求めることにした。この濃度を大気柱中化学物質平

[1] 吉田喜久雄（2003）第６章　土壌中のダイオキシン類の解析．中西準子，益永茂樹，松田裕之編『演習　環境リスクを計算する』pp.105-117．岩波書店．の考え方の一部を参考にした。ただし、本書では、高度＝排出源の高さ＋2×σz 内の大気柱中のダイオキシンを

均濃度 Ca_0 と定義し、以下のような手順で求める。

METI-LIS の原型でもあるプルーム式では、鉛直方向、水平方向の濃度の分布を正規分布としている。拡散幅は正規分布の標準偏差に相当するパラメータである。ここでは地表付近の濃度 $C_0(1.5)$ と z=0 から $z=3\sigma_z$ までの平均濃度 Ca_0 の比 Kc を求める。

正規分布の式（平均 0、標準偏差 σz）は次のとおり。

$$f(z)=1/(\sqrt{(2\times\pi)}\times\sigma_z)\times\exp(-z^2/(2\times\sigma_z^2)) \quad \text{式 V-170}$$

ただし、ここでは計算を簡易に行うため、プルーム軸の高さ（＝排出源の高さ）をゼロとしている。

地表付近の濃度は、

$$C_0(1.5) \fallingdotseq f(0)=1/\sqrt{(2\pi)}/\sigma_z \fallingdotseq 0.3989/\sigma_z \quad \text{式 V-171}$$

であり、z=0 から $z=3\sigma_z$ の大気柱中平均濃度 Ca_0 は

$$Ca_0=(\int[0,3\sigma_z]f(x)dx)/3\sigma_z \fallingdotseq 0.4987/3\sigma_z \quad \text{式 V-172}$$

である。従って、濃度比 Kc は次のようになる。

$$Kc = C_0(1.5)/Ca_0 = (0.3989/\sigma_z)/(0.4987/3\sigma_z) \fallingdotseq 2.4 \quad \text{式 V-173}$$

以上より、大気柱中化学物質平均濃度 Ca_0 は Kc＝2.4 として、次のように簡易的に計算するものとする。

$$Ca_0 = C_0(1.5)/Kc \quad \text{式 V-174}$$

③ 補正係数の効果

ここでは補正係数を用いない沈着量と用いた沈着量を比較し、補正係数の効果を確認する。本手法では降雨日数を考慮しているので、これを考慮しない場合も比較する。また、REACH-TGD[1]で用いられているデフォルトの沈着量と比較し考察する。

i) 比較する手法

(a) 補正係数と降雨日数の考慮の有無

補正係数（K_{dep_r} と K_{dep_s}）を沈着量に乗じるかどうかと、降雨日数（*rainyday*）を考慮して降雨時の沈着量（DEP_r）と晴天時の沈着量（DEP_s）を区別するかどうかで以下の４つのパターンがある。なお、降雨日数を考慮しない場合の沈着量は１年間一様に降雨があるとして式 V-55 の DEP_r を用いる。

・ 補正係数なし、降雨日数を考慮しない場合

$$DEP_{total_nn} = DEP_r \quad \text{式 V-175}$$

対象として年間降下量（沈着量）を求めている。

[1] ECHA (2010) Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.16: environmental exposure estimation, version: 2.

・ 補正係数なし、降雨日数を考慮する場合

$$DEP_{total_ny} = \frac{rainyday}{365} \times DEP_r + (1 - \frac{rainyday}{365}) \times DEP_s$$ 式 V-176

・ 補正係数あり、降雨日数を考慮しない場合

$$DEP_{tota_yn} = DEP_r \times K_{dep_r}$$ 式 V-177

・ 本スキームの手法（補正係数あり、降雨日数を考慮する場合）

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
DEP_{total_nn}	補正係数なし、降雨日数を考慮しない総沈着量	[mg/day/m²]		
DEP_{total_ny}	補正係数なし、降雨日数を考慮する総沈着量	[mg/day/m²]		
DEP_{total_yn}	補正係数あり、降雨日数を考慮しない総沈着量	[mg/day/m²]		
DEP_{total}	本スキームの手法（補正係数あり、降雨日数を考慮する場合）	[mg/day/m²]		V.7.3.1 (2)②i) 式 V-49
$rainyday$	降雨日数	[day/year]	100	MNSEM UM デフォルト
DEP_r	降雨時の総沈着量	[mg/day/m²]		V.7.3.1 (2) ② ii)式 V-55
K_{dep_r}	降雨時の沈着による補正係数	—		V.7.3.1 (2)②i) 式 V-50
DEP_s	晴天時の総沈着量	[mg/day/m²]		V.7.3.1 (2) ② ii)式 V-56
K_{dep_s}	晴天時の沈着による補正係数	—		V.7.3.1 (2)②i) 式 V-51

(b) EU のデフォルトの沈着量

REACH-TGD[1]又はその元文献[2]に掲載されているガス態と粒子吸着態の沈着量（半径 1[km]の円内の平均値）は図表 V-48 のとおりである。これらは排出量が 1[t/year]の場合に換算した値である。ガス態の沈着量はヘンリー係数[Pa･m³/mol]によって異なっている。

図表 V-48　EU のデフォルト沈着量　（排出量 1[t/year]の場合の値に換算）

log Henry（Henry の単位は Pa･m³/mol）	半径 1[km]の円内における平均沈着量[mg/day/m²]	
	ガス態	粒子吸着態
<-2	1.4×10^{-3}	2.7×10^{-2}
-2～2	1.1×10^{-3}	

[1] ECHA (2010) R.16.6.6.1. Calculation of PEClocal for the atmosphere. In: ECHA, Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.16: environmental exposure estimation, version: 2, pp.68-61. の式 R.16-28

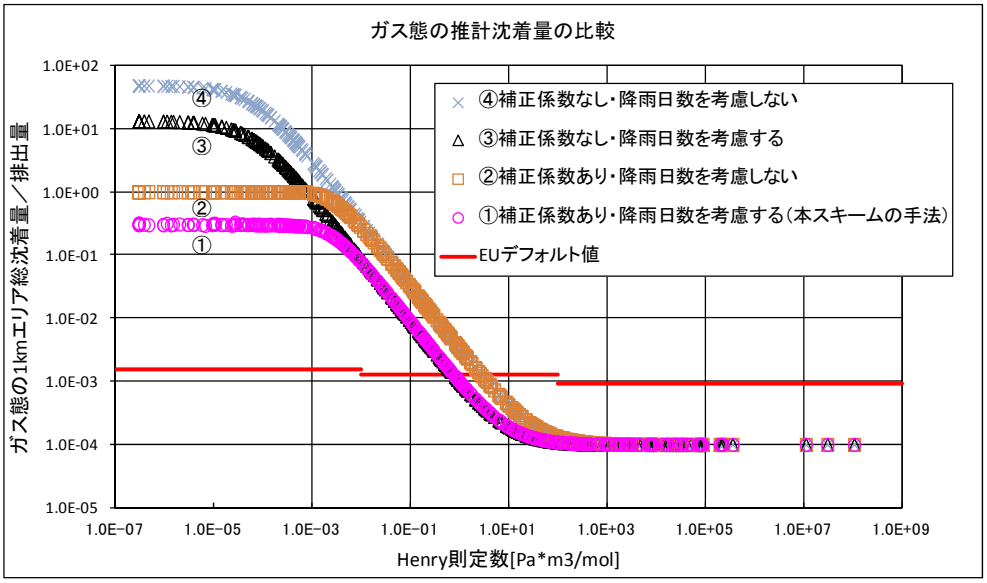
[2] RIVM（1992）Toet, C. and de Leeuw, F.A.A.M.,Risk assessment system for new chemical substances：implementation of atmospheric transport of organic compounds, Report679102008.

log Henry（Henry の単位は Pa・m³/mol）	半径 1[km]の円内における平均沈着量[mg/day/m²]	
	ガス態	粒子吸着態
>2	8.2×10^{-4}	

ii) **手法間の比較**

旧第二種監視化学物質及び旧第三種監視化学物質のうち沈着量推計に必要な物理化学的性状をそろえた物質（約 400 物質）を対象に、物理化学的性状に依存するガス態の推計沈着量について、本スキームの手法、i)の(a)及び(b)の手法を比較した結果を図表 V-49 に示す。横軸はヘンリー係数、縦軸はガス態の評価対象半径 1km エリアの総沈着量（＝評価対象半径 1km エリアの沈着量（単位面積・単位時間当たり）×半径 1km の円の面積）を排出量で除した値であり、「大気へ排出された物質の何割が土壌へ沈着するのか」を示している。

補正係数を用いない方法③と④では、ヘンリー係数が小さい場合、大気へ排出した以上の量が沈着しており（沈着割合が 1 以上）、物質収支に矛盾が生じているが、これは式 V-67 に示す雨水中ガス態濃度がヘンリー係数に単純に反比例する式であることが要因として考えられる。補正係数を用いた方法①と②では大気への排出量以上に沈着することはなく、この問題は改善されている。また、本スキームの手法である①では降雨日数 100 日を考慮したため、湿性沈着量が抑えられて②よりも沈着量が小さくなっている。本スキームの手法①と EU のデフォルト値を比較すると、ヘンリー係数の大小によって 1～2 オーダーの違いがある。この違いの要因として、本来は大気中濃度と沈着量を両方同時に推計すべきところ、本スキームでは大気中濃度を先に求めて後から沈着量を推計するという若干無理がある方法をとっていることや、EU のデフォルト値の算出に用いられた OPS モデルの計算条件、日本と EU の気象条件の違い等が考えられるが、詳細は不明である。EU のデフォルト値は前述の元文献からは導出の細部がたどれず、不明な点が多いため本スキームでは採用しなかった。



図表 V-49　ガス態の推計沈着量の比較

④ 本手法の限界

補正係数（K_{dep_r} と K_{dep_s}）は②で説明したように物質収支の式から理論的に導いたものである。この係数の妥当性を検証するためには、ヘンリー係数が非常に小さい物質について大気への排出量と沈着量の実測値が必要であるが、現在、そのようなデータを見つけられていないため検証できていない。したがって、図表 V-49 のように補正係数の効果が現れるようなヘンリー係数が非常に小さい物質に関して、沈着量やそれに基づく土壌中濃度や農作物中濃度の推計値はそのような面で不確かさを伴う値であることに留意が必要である[1]。

V.7.5.2　土壌中濃度の推計式の経緯

本暴露評価で採用した数理モデルは MNSEM の計算式をベースとしているが、国内外のリスク評価手法と比較し、本スキームでの利用を踏まえ改良や追加を行った。

土壌中濃度推計における土壌からの消失項の部分については MNSEM の他、次に示す文献も参考にして定めた。

①REACH-TGD[2]

②詳細リスク評価書:DEHP[3]

③演習　環境リスクを計算する[4]

④HHRAP[1]

---

[1] 評価Ⅱ以降では、ヘンリー係数が非常に小さい物質の沈着量については、より信頼できる実測値や推計値がある場合、それに置き換えることも選択肢として考えられる。

[2] ECHA (2010) R.16.6.6.6. Calculation of PEClocal for the soil sompartment. In: ECHA, Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.16: environmental exposure estimation, version: 2, pp.68-75.の式 R.16-46

[3] 中西準子，内藤航，吉田喜久雄（2005）『詳細リスク評価書シリーズ 1　フタル酸エステル』丸善株式会社.

[4] 中西，益永茂樹，松田裕之編（2003）『演習 環境リスクを計算する』岩波書店.

比較した手法間では、それぞれ用いている消失速度定数の種類は異なったが、土壌中から消失する分解速度定数は以下の 6 種が存在した（なお『環境リスクを計算する』では、消失速度定数を 1 つにまとめ、その計算に半減期を用いて総消失速度定数を求めている）。

各手法で利用している土壌消失速度定数一覧を図表 V-50 に示す。

図表 V-50　各手法で利用している土壌消失速度定数一覧

			MNSEM	REACH -TGD	詳細リスク評価書 DEHP	演習　環境リスクを計算する (dioxin の例)	HHRAP
土壌消失速度定数	(1) 揮発	Volatilization	○	○	○	半減期として総括	○
	(2) 巻き上げ	Wind up	○	×	○		×
	(3) 分解(生分解)	Biotic degradation	○	○	○※		○
	(3) 分解(非生物分解)	Abiotic degradation	○	×			○
	(4) 浸食	Erosion	○	×	○		○
	(5) 浸透	Leaching	○	○	○		○
	(6) 表面流出	Runoff	○	×	○		○

※　区別できる記載がない

REACH-TGD、HHRAP、詳細リスク評価書（DEHP）及び MNSEM では、用いている各デフォルト値などは異なるものの、各消失速度定数の概念は似ている。しかし、REACH 及び HHRAP は欧米の風土デフォルト値を用いており、HHRAP は蒸散や灌漑について米国の情報を用いて値を設定するパラメータが必要である点などがあり、これらは日本の土壌中濃度の推算には適していないと考えられた。また、REACH-TGD 及び HHRAP では、詳細リスク評価書（DEHP）や MNSEM の手法に比べ、多くの追加のデフォルト値が設定されている。メカニズムを考慮する推計モデルは経験則によるモデルよりも多くのパラメータが必要となり、それらに入力するデータが得られない限りはデフォルト値が設定され不確実性も増幅する。そこで、本暴露評価ではこれらの手法を比較した上で、不確実性が増す原因になりえるパラメータができるだけ少ない手法であり、かつ日本版の多媒体モデルである MNSEM の手法及びデフォルト値を採用した。なお、詳細リスク評価書（DEHP）は MNSEM とおおむね同じ手法であるが、生分解と非生物分解を明示的に区別している MNSEM を採用した。

V.7.5.3　農作物中濃度と畜産物中濃度の推計式の経緯

本暴露評価で採用した数理モデルは MNSEM[2]の計算式をベースとしているが、EUSES[3]

[1] U.S. EPA (2005) Human health risk assessment protocol for hazardous waste combustion facilities, EPA530-R05-006.
[2] 株式会社三菱化学安全科学研究所 (1998) Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model version 2.0 ユーザーズマニュアル.
[3] EC (2008) EUSES 2.1 background report: chapterIII model calculations. (http://ihcp.jrc.ec.europa.eu/our_activities/public-health/risk_assessment_of_Biocides/

や HHRAP[1]と比較し、以下の 2 つの観点から改良を加えて設定した。

- 過度な過大評価を制限する
- より新しい知見を取り入れる

ここではこれらの設定経緯について、地下部及び地上部農作物中濃度と畜産物中濃度の推定方法、数式の適用範囲、農作物及び牧草の栽培期間と補正係数の順に説明する。

(1) 地下部農作物中濃度

地下部農作物としては、可食部が地下にある農作物（例：じゃがいも、にんじん、大根）を考慮する。MNSEM と HHRAP では、根からの吸収を想定して、地下部農作物中濃度の計算に Briggs, G. (1982)[2]の濃縮係数（*RCF*）を用いている。また、HHRAP では、元文献における相関式を導くために用いた物質を考慮することにより、濃縮係数（*RCF*）の計算式の適用範囲を設定している。本スキームにおいても、Briggs, G. (1982)の濃縮係数（*RCF*）を用いて地下部農作物中濃度を計算する。また、多様な物質に対応することを想定し、V.7.5.3 (4)に後述のとおり HHRAP の適用範囲の考え方を採用する。また、V.7.5.3 (6)に後述のとおり過度な過大評価を避けるため、補正係数（*VG*）を導入した。

(2) 地上部農作物中濃度

MNSEM や HHRAP では、地上部農作物中濃度を計算する際に、大気相粒子吸着態の沈着とガス態からの移行及び根からの吸収を考慮している。本スキームでもこの 3 つの地上部農作物の暴露経路を考慮することとした。

また、HHRAP では対象とする農作物として、「exposed produces」と「protected produce」（エンドウマメ、トウモロコシ、メロンなど）を挙げ、暴露量の推計を行っており、protected produce は下記の暴露経路１．２．からは守られており、３．のみ考慮することとしている。一方、exposed produces は暴露経路１．２．及び３．を考慮している。

<u>暴露経路</u>

１．粒子吸着態の沈着
　大気相の粒子吸着態の化学物質→地上部農作物への沈着（湿性、乾性）
２．ガス態からの移行
　大気相のガス態の化学物質→地上部農作物へ移行
３．根からの吸収

---

euses/EUSES_2.1/EUSES_2.1_documentation/EUSES_2.1_Chapter_III_Model_Calculations.doc)

[1] U.S. EPA (2005) Human health risk assessment protocol for hazardous waste combustion facilities, EPA530-R05-006.

[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. Pectic. Sci., 13(5), 495-504.

土壌中化学物質→蒸散流によって根を経由した地上部への吸収

このため、過度な過大評価を避けるためにも、本スキームでも以下のように両者（exposed produces、protected produce）を区別して考慮することは重要と考え、地上部農作物の各暴露経路を HHRAP にならい推算することにした。ただし、後述するように地上部農作物モデルには、ガス態からの移行と根からの吸収などを併せて計算する Trapp and Matthies (1998)のモデルを採用したので、protected produce の暴露経路は、HHRAP と異なり、２．と３．を考慮している。

- 地上部農作物中濃度（Exposed）　可食部が地上にあり、葉菜等丸ごと食する農作物と牧草
  例：トマト、キャベツ、ほうれん草　等
  取込経路：根からの吸収と大気ガス態からの移行、大気粒子吸着態の沈着
- 地上部農作物中濃度（Protected）可食部が地上にあり、表皮は食しない農作物
  例：米、豆類、みかん　等
  取込経路：根からの吸収と大気ガス態からの移行

MNSEM では「１．粒子吸着態の沈着」の計算に、McKone and Ryan (1989) [1]を引用して、「吸着態物質の葉・茎部への濃縮倍率」の定数を用いて沈着量を計算している。この定数は、この粒子吸着態の農作物上への沈着量を計算する数式と MNSEM の大気からの沈着量計算式を用いて計算されたものと考えられる。HHRAP でも、地上部農作物への粒子吸着態の沈着量の計算には、McKone and Ryan (1989)の農作物上への沈着量を計算する数式を使用している。本スキームでは、V.7.3.1 (2)に示した大気からの沈着量の計算結果を用いることと V.7.5.3 (5)で説明する栽培期間を考慮するため、MNSEM における吸着態物質の葉・茎部への濃縮倍率の定数ではなく、その値を計算するために用いられた粒子吸着態の沈着を計算する式を採用することとした。

また、MNSEM では「２．ガス態からの移行」を農作物の空気、水及び脂質の容積比から求めた濃縮係数により計算し、「３．根からの吸収」を Briggs, G. (1982)[2]と Briggs, G. (1983)[3]で検討されている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）を用いて計算している。

一方、同様の考え方に基づいて開発された Trapp and Matthies (1998)[4]の地上部植物モ

[1] McKone, T.E. and Ryan P.B. (1989) Human exposures to chemicals through food chains: an uncertainty analysis. Environ. Sci. Technol., 23(9), 1154-1163.
[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. Pectic. Sci., 13(5), 495-504.
[3] Briggs, G.G., Bromilow, R.H., Evans, A.A. and Williams, M. (1983) Relationships between lipophilicity and the distribution of non-ionised chemicals in barley shoots following uptake by the roots, Pectic. Sci., 14(5), 492-500.
[4] Trapp, S. and Matthies, M. (1998) 9.3 PLANT Model. In: Trapp, S. and Matthies, M.,

デルは、「２．ガス態からの移行」と「３．根からの吸収」に加えて、植物からの揮発や代謝、植物の成長による植物中濃度の希釈などのマテリアルバランスを計算できるようにしたモデルであり、V.7.5.3 (5)で説明する栽培期間を考慮して計算することも可能である。このモデルは EUSES に採用されており、REACH-TGD でも人への環境からの間接暴露を考慮する際に、土壌や大気から農作物への生物移行の推定に用いることが提案されているほか、『詳細リスク評価書シリーズ１　フタル酸エステル』[1]でも改良を加えて使用されている。

そこで、ここではより新しい知見を取り入れることと V.7.5.3 (5)で説明する栽培期間を考慮して計算することを目的に、「２．ガス態からの移行」と「３．根からの吸収」には、Trapp and Matthies (1998)の式を用いることとする。なお、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*）については、V.7.5.3 (4)に後述のとおり EUSES で考慮されている適用範囲の物質に関する考え方を用いることとした。また、「２．ガス態からの移行」と「３．根からの吸収」の数式については、V.7.5.3 (6)に後述のとおり過度な過大評価を避けるため、補正係数（*VG*）を導入した。

(3) 畜産物中濃度

MNSEM では、Travis and Arms(1988)[2]による牛肉や乳製品への移行係数（*BTF*）を用いて、牛の牧草と土壌摂取及び大気吸入による化学物質への暴露量からその牛肉及び乳製品中濃度を計算している。本スキームでも、この手法を取り入れることとする。

なお、Travis and Arms(1988)では、実測値を用いて *BTF* の回帰式を求めているが、ここでは線形回帰を行う際の傾きを 1 と固定した場合（式 V-178 と式 V-179）としない場合（式 V-180 と式 V-181）の数式が示されている。傾きを 1 と固定しているのは、魚における BCF では傾きが 1 であるという説があることを理由としている。MNSEM では、傾きが 1 となる数式を引用しており、EUSES でも同じ数式を引用している。このため、本スキームでも式 V-119 及び式 V-122 として、傾きが 1 となる *BTF* の回帰式を引用することとした。

$$BTF_{meat} = 10^{-7.6+\log Pow} \qquad \text{式 V-178}$$

$$BTF_{milk} = 10^{-8.1+\log Pow} \qquad \text{式 V-179}$$

$$BTF_{meat} = 10^{-7.735+1.033\times\log Pow} \qquad \text{式 V-180}$$

$$BTF_{milk} = 10^{-8.056+0.992\times\log Pow} \qquad \text{式 V-181}$$

Chemodynamics and environmental modeling, Springer, pp.118-123.

[1] 中西準子，吉田喜久雄，内藤航（2005）『詳細リスク評価書シリーズ１　フタル酸エステル』丸善株式会社.

[2] Travis, C. and Arms, A. (1988) Bioconcentration of organics in beef, milk and vegetation, Environ. Sci. Technol. 22(3): 271-274.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
BTF_{meat}	牛肉への移行係数	[day/kg]		Travis and Arms(1988)
BTF_{milk}	牛乳への移行係数	[day/kg]		Travis and Arms(1988)
logPow	1-オクタノールと水との間の分配係数	—		化学物質情報

(4) 数式の適用範囲

実測データからの回帰式については、実測データの範囲外への外挿については不確実性が高いものと考えられる。このため、HHRAP や EUSES でもこのような場合には、回帰式の入力値となる logPow の範囲により、範囲外物質には logPow の上限・下限値を適用している。本スキームでも地下部農作物への濃縮係数（*RCF*）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*）、牛肉への移行係数（*BTFmeat*）、牛乳への移行係数（*BTFmilk*）について、HHRAP と EUSES で検討された適用範囲を考慮することとした。

(5) 農作物及び牧草の栽培期間

MNSEM では、定常状態に達した時点の農作物中濃度を計算している。しかし、物性によっては、定常状態に達するまで極めて長い時間がかかる可能性があり、農作物のライフサイクルからは考えられない長時間の蓄積を計算してしまう可能性がある。地上部農作物の栽培期間はレタスで 50 日、キャベツで 120 日程度と言われる[1]。また、HHRAP は収穫物の可食部への化学物質の取り込みの平均的な期間は 60 日として、農作物中濃度を算出している。よって、本スキームでも地上部農作物中濃度及び牧草中濃度は 60 日目での値を計算することとし、粒子吸着態の沈着及びガス態からの移行と根からの吸収それぞれの数式においてこの栽培期間を考慮することとした。

(6) 農作物及び牧草の補正係数（*VG*）の導入

HHRAP では、表皮により保護されていることや可食部の大きさや形などにより、かさの大きい農作物では、親油性の物質はおそらく中心部まで達しにくいとしており、親油性物質のこのような性質を考慮するため農作物中濃度の推計に補正係数（*VG*）を適用している。補正係数（*VG*）は、logPow が 4 以上の物質に対して 0.01 としており、地下部農作物及びガス態由来の地上部農作物を対象としている。ただし、牧草については、数式設定の根拠となっているデータが存在するツツジや芝と同様であるとし、1.0 が適用されている。なお、人が摂取する葉菜（ブロッコリー、芽キャベツ、カリフラワー、セロリ、レタスやほうれん草）は、牧草と比較してかさが大きいので 0.01 の方が妥当であるとしている。

0.01 は親油性の物質が表皮のみに移行することを想定し、にんじんやじゃがいもの表皮が全容積に占める割合を考慮し、さらに洗浄や皮むきなどによる減少を考慮して設定され

[1] Rikken, M.G.J. and Lijzen, J.P.A. (2004) Update of risk assessment models for the indirect Human exposure, RIVM report 6015160111.

た値である[1]。このため、この値は数式に依存する補正係数ではない。過度な過大評価を避けるためにも、本スキームでは logPow が 4 以上の物質に対して、地下部農作物中濃度の計算式とガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度に対して、補正係数（*VG*）0.01 を採用することとした。なお、HHRAP と同様に、牧草については 1.0 を採用することとした。

なお、地上部農作物について、HHRAP ではガス態からの移行に関する計算式のみへ補正係数（*VG*）を適用している。しかし、本スキームではガス態からの移行と根からの吸収について統合したモデルを採用しているため、ここではそのモデルによる計算結果に補正係数（*VG*）を適用することとした。

Ⅴ.7.5.4　水域濃度・魚介類中濃度・底質中濃度の推計の経緯

(1) 河川流量のデフォルト値の設定

水域濃度・魚介類中濃度・底質中濃度の推計（V.7.3.5 ）に用いる河川流量のデフォルト値のもとになった流量年表の河川流量の集計結果[2]を下図に示す。

化審法の届出情報を用いた評価には、長期平水流量の 50%ile 値である 20.85[m^3/sec]を人健康評価に用い、長期低水流量の 50%ile 値である 13.47[m^3/sec]を生態評価に用いる（小数第 3 位を四捨五入）。

PRTR 届出情報で水域への排出先が海域以外の場合の評価には、長期平水流量の 10%ile 値である 4.35[m^3/sec]を人健康評価に用い、長期低水流量の 10%ile 値である 2.51[m^3/sec]を生態評価に用いる（小数第 3 位を四捨五入）。

PRTR 届出情報で水域への排出先が海域の場合には、PRTR 届出排出量(海域以外)の場合に用いるデフォルト河川流量に海域への希釈率「10」を乗じた値を、海域への排出量に対する海域の希釈率として用いる。

[1] U.S. EPA (1994) Estimating exposure to dioxin-like compounds volumeIII: site-specific assessment procedures, EPA/600/6-88/005Cc.

[2] 製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター（2007）平成 18 年度　化学物質の暴露評価に資する河川等の希釈率等に関連する調査報告書.
(http://www.safe.nite.go.jp/risk/pdf/h18fy_kasen_kisyakuritsu.pdf)

図表 V-51　流量年表の河川流量の統計値　単位[m3/sec]

全地点中のパーセンタイル	地点の流量順での順位	長期平水流量 (50%ile)	長期低水流量 (25%ile)	長期渇水流量 (3%ile)
100%	1	387.260	296.810	205.370
95%	20	164.667	121.611	82.089
90%	38	115.740	84.400	52.507
85%	57	80.827	59.091	38.637
80%	75	67.390	45.608	27.164
75%	93	52.153	36.410	22.738
70%	111	45.476	29.729	18.500
65%	129	35.440	24.244	14.254
60%	147	30.984	19.984	10.708
55%	165	25.092	16.338	8.371
50%	183	20.850	13.465	7.135
45%	200	17.774	11.680	6.039
40%	218	15.590	9.970	5.230
35%	235	14.060	8.594	4.486
30%	252	11.698	7.447	3.808
25%	270	10.148	6.325	3.080
20%	287	7.820	4.776	2.450
15%	304	6.229	3.704	1.700
10%	321	4.345	2.510	1.189
5%	337	2.744	1.628	0.543
0%	354	0.400	0.200	0.040

化審法推計排出量の人評価用

化審法推計排出量の生態評価用

PRTR 届出排出量(海域以外)の人評価用

PRTR 届出排出量(海域以外)の生態評価用

(2) 海域の希釈率に関する補足情報

本手法では海域の希釈率については、NITE初期リスク評価で用いている希釈倍率「10」[1]を用いている。その他の既往の事例として、「土壌残留及び水質汚濁に係る農薬登録保留基準の改定」に適用された「5」[2]という希釈倍率がある。この値は、東京湾、伊勢湾、尾鷲湾及び瀬戸内海におけるデータから、当該湾等に流入する河川水域の物質の濃度と、調査河

[1] 小谷憲雄, 平井祐介, 常見知広, 高久正昭, 松崎寿, 飛松潤, 佐渡友秀夫, 横山泰一(2006) 化学物質の初期リスク評価手法の開発（１）－PRTR データを活用した暴露評価手法の開発―, 環境化学, 16(1), 1-17.
この文献では、以下の文献（鷲見と鋤崎(2001)）とその著者が公開していた詳細なデータを参照している。そのデータは現在閲覧できないが、以下の農薬専門委員会の参考資料にそのデータがある。
鷲見, 鋤崎(2001) 沿岸海域の懸濁態粒子の粒径分布の現地測定とデトリタス分布, 海岸工学論文集, 48(2), 1101-1105.
(http://library.jsce.or.jp/jsce/open/00008/2001/48-1101.pdf)
環境省（2004）中央環境審議会土壌農薬部会　農薬専門委員会（第１８回）　参考資料５　農薬工業会提出資料　塩分濃度の分布に基づく海域における河川希釈倍率の推定について.
(http://www.env.go.jp/council/10dojo/y101-18/ref_05.pdf)

[2] 農林水産省（2005）第１０回農業資材審議会農薬分科会　参考資料１　土壌残留及び水質汚濁に係る農薬登録保留基準の改正について.
(http://www.maff.go.jp/j/council/sizai/nouyaku/10/pdf/siryou5-sanko1.pdf)

川の河口沖における当該物質の濃度を比較することで求めた値である。また、REACH-TGDでは沿岸水域への排出の希釈率「100」[1]と設定されている。これは、海水への排出時に、排水と海水の濃度差による拡散による希釈10に追加して、海流（特に潮汐）による希釈を考慮した値である。なお、海流による希釈は場所によって異なるとされており、沿岸水域への排出の希釈率500という推計結果もあるが、100が現実的なワーストケースではないかと判断されている。なお、REACH-TGDのregional scaleの推計では、河川と沿岸の海水域との混合による希釈率10程度をデフォルト値としている。このため、排出源から河川への排出時の希釈率10×河川から海域への希釈率10=100と解釈することもできる。

Ⅴ.7.5.5　食品摂取量等の設定の経緯

以下では排出源ごとの暴露シナリオにおける人の暴露量の推計に必要になる食品摂取量等の設定の経緯を説明する。まず(1)では、人の摂取量の推計で対象としている食物の設定の経緯を示す。次に(2)では、摂取媒体別に設定した食品摂取量の値の出典等を示す。

(1) 対象とする食物の設定の経緯

本シナリオはおおむね EU の local-scale のシナリオをベースにしている（本編 V.2.8.2 (2)の脚注参照）。それは、化学物質の排出源周辺の土地で産出される農作物や畜産物を日常的に摂取するというものである。EU の標準的な設定では米の摂取は含まれておらず、畜産物の摂取量[2]が多い。しかし、EU と日本では土地利用、食生活（主食）及び食物需給事情等が異なるはずである。そこで、より現代の日本の実情に合わせた食物を人摂取量の推計の対象にするための検討を行った。

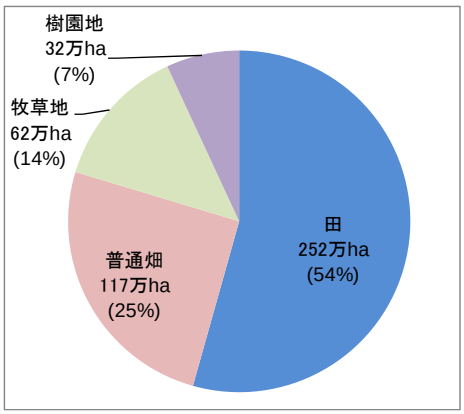
まず、日本国内の耕地面積の割合を調査した。その結果を図表 V-52 に示す[3]。同図より、日本の農地の過半数以上は田が占めており、日本の実情を反映させるには、米の摂取を考慮に入れるべきであることが示唆された。また、同図から牧草地は 1 割程度しか占めていないことが見てとれる。

---

[1] ECHA (2010) R.16.6.6.4. Calculation of PEClocal for the marine aquatic compartment. In: ECHA, Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter R.16: environmental exposure estimation, version: 2.の式 R.16-36

[2] EC(2008) III.5.2.5 Total daily intake for humans. In: EC, EUSES 2.1 background report: chapterIII model calculations.の Table III-89 Standard defaults for indirect exposure of humans ではデフォルトの摂取量は肉類 0.301kg/day、乳製品 0.561kg/day となっている。

[3] 農林水産省（2010）Ⅴ 農用地の部 1 耕地面積　耕地面積種類別面積.『農林水産省，第８４次農林水産省統計表（平成 20～21 年）』(http://www.maff.go.jp/j/tokei/kikaku/nenji/84nenji/index.html) より作成



図表 V-52　農林水産統計における平成 21 年耕地面積

次に、化学物質の排出源の周辺にこのような耕作地が近接しているかどうかの状況を把握するため、平成 17 年度届出の PRTR 事業所が分布している国土数値情報の 3 次メッシュ（1km メッシュ）データと、第 5 回調査(平成 6～10 年度)自然環境保全基礎調査植生調査における 3 次メッシュ（1km メッシュ）植生データ[1]とのつき合わせを行い、その結果を図表 V-53 に整理した。図表 V-53 は、横軸に 1kg 以上の化学物質を大気へ排出している PRTR 事業所が存在しているメッシュ数を、縦軸にその事業所が存在しているメッシュの土地利用区分（植生データ上は植生区分と呼ばれる）が、耕作地（田、普通畑＋樹園地又は牧草地）である割合を示している。この図で 1 プロットは 1 つの物質を表す。すなわち、1 つのプロットは、ある化学物質を排出している事業所を含むメッシュが横軸の数値だけ存在し、それらのメッシュの土地利用が耕作地（田、普通畑＋樹園地又は牧草地）である割合が縦軸の数値であることを表している。

化学物質を大気へ排出している事業所周辺の土地利用が耕作地である割合の指標として、以下の数値を求めた。この数値をここでは「農地近接率」と呼ぶこととする。

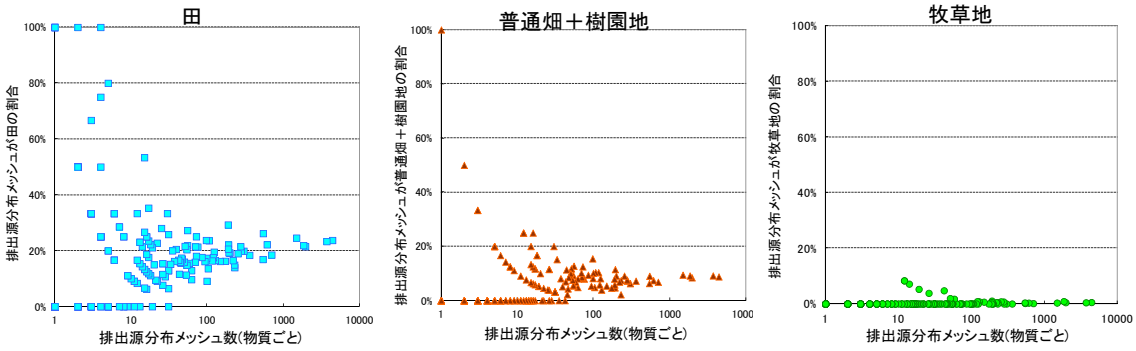
農地近接率＝Σ（1kg 以上大気排出がある PRTR 事業所が存在し、かつ該当の土地利用区分であるメッシュ数）／ Σ（1kg 以上大気排出がある PRTR 事業所が存在しているメッシュ数）　式 V-182

ただし、Σは全物質の合計をとることを示す。

その結果、農地近接率は田で約 21.4%、普通畑＋樹園地で約 8.2%、牧草地で約 0.4%程度であった。

これらに基づき、本シナリオの対象とする食物を以下のように設定することにした。

[1] 環境省（1998）植生調査，自然環境保全基礎調査　第５回調査　平成６～１０年度.
(http://www.biodic.go.jp/kiso/fnd_f.html)



図表 V-53　PRTR 事業所周辺の土地利用

■米の摂食について

1kg 以上化学物質の大気排出がある事業所に関する田の農地近接率は、約 21.4%となっている。また、農林水産省の統計情報[1]によると、米の主食用自給率は数値の記載がある平成 13 年度以降、100%となっている。

以上のことより、事業所等の排出源に近接している割合が最も高い農地は田であり、自給率も 100%であるため、米の摂取を人の摂取量推計に含めることにした。

■畜産物の摂食について

1kg 以上化学物質の大気排出がある事業所に関する牧草地の農地近接率は、0.4%となっている。前述の農林水産業の統計情報によると、平成 13 年度以降飼料の自給率は 23%～26%であり、その割合を踏まえない牛肉の自給率は 36%～44%、牛乳・乳製品の自給率は 66%～71%（飼料の自給率を考慮した値も記載されており、各々、約 10%～11%、約 27%~30%）で推移している。牧草地が事業所等の排出源に近接していることはまれと考えられ、自給率も加味すると更に低くなる。

以上のことより、人の摂取量推計の対象に日本では畜産物（牛肉、牛乳･乳製品）を考慮する必要性は低いことが考えられた。しかし、できるだけ安全側に推計すべきという考え方もあるため、本シナリオでは畜産物の摂取を人の摂取量推計に含めることにした[2]。

ただし、評価Ⅱや評価Ⅲで排出源周辺の土地利用が調べられ、排出源周辺で畜産物の生産がないことが判明すれば人摂取量の対象から除外することもある（これは米や野菜でも同様である。本編 V.4.5.5 や V.5.2 を参照）。

(2) 食品摂取量等

以下では食品摂取量等の値（V.7.4.1 図表 V-40）の出典等を摂取媒体別に説明する。統

[1] 農林水産業省 食料需給表
(http://www.maff.go.jp/j/zyukyu/fbs/index.html)

[2] 牧草地が近接することがまれなことは、食品別の摂取量を設定する際に、「近郊生産物摂取割合」として間接的に加味されている（後述の V.7.5.5 (2)④参照）。

計情報を加工して値を設定している場合はその加工方法も示す。なお、「Ⅶ章　様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」で用いる食品摂取量等の値についても併せて示す。

① 人の体重

対象は成人とし、体重を 50[kg] [1]とした。

② 大気の吸入量

大気の吸入量は、一日当たりの吸入量として 20[m^3/day][2]とした。

③ 農作物の摂取量

農作物への化学物質の取り込みに関しては、脂溶性の高い物質は農作物の表皮にとどまり内部には到達しないこと等を反映させるため、U.S.EPA の有害廃棄物焼却施設の人の健康リスク評価手法（HHRAP[3]）を参考に、以下の３つの可食部を定義した。

a.　地下部農作物：　可食部が地下にある農作物
　　例：じゃがいも、にんじん、大根　等
b.　地上部農作物 Exposed：　可食部が地上にあり、葉菜等丸ごと食する農作物
　　例：トマト、キャベツ、ほうれん草　等
c.　地上部農作物 Protected：　可食部が地上にあり、表皮は食しない農作物
　　例：米、豆類、みかん　等

農作物区分ごとの国産物摂取量は、「国民栄養調査[4]」をもとにした。対象は15才以上とした。図表 V-54及び図表 V-58を参照。詳細な手順は以下のとおりである。

(ア) まず、「国民栄養調査」（2000年（平成12年）実績）の食品群別摂取量（全国，年齢階級別）から15才以上の摂取量の平均値を求めた。
(イ) (ア)のデータは食品群（①：図表 V-54の項目の番号。以下同）が詳細な項目に分

[1] 中央環境審議会（2004）水質汚濁に係る人の健康の保護に関する環境基準等の見直しについて（第１次答申）　別紙２　環境基準項目等の設定根拠等.の指針値の導出方法等を参考に設定
(http://www.env.go.jp/council/toshin/t090-h1510.html)
[2] 安藤剛，吉田俊明，福原守雄（1998）生活空気環境中の化学物質とその人体暴露, J. Natl. Inst. Public Health, 47(4), 325-331.
(http://www.niph.go.jp/journal/data/47-4/199847040005.pdf)
この文献では、8 時間安静にして、残りの 16 時間を軽い活動をしている場合の呼吸量はほぼ 15m^3 となり、また、8 時間安静にして、8 時間をやや重い作業をして、残り 8 時間を軽い活動を行った場合はほぼ 20m^3 となると見積もられている。
[3] U.S. EPA (2005) Human health risk assessment protocol for hazardous waste combustion facilities, EPA530-R05-006.
[4] 厚生労働省（2002）国民栄養の現状　平成 12 年国民栄養調査結果.
(http://www.nih.go.jp/eiken/chosa/kokumin_eiyou/index.html)

かれていない（例： にんじん、ほうれん草、･･･と項目別でなく緑黄色野菜と一括り）。一方、同じ「国民栄養調査」でも食品群別栄養素等摂取量（全国）のデータは詳細な項目別である（③）。ただし、こちらは年齢別ではない。そこで、内訳の比率を後者のデータから求め（④）、その比率を(ア)の摂取量に乗じて15才以上の詳細な項目ごとの摂取量を求めた（⑤）。

(ウ) 詳細な項目ごとに「クッキング自給率[1]」の各材料の自給率（カロリーベース）を対応させた（⑥）。その自給率を乗じた摂取量を求めた（⑦）。ただし、１つの項目に複数の自給率が対応する場合は、最大の自給率を用いた。なお、農作物の自給率の統計データは他にもあるが、野菜の自給率が細かく掲載されているこのデータに統一した。

(エ) 各項目を本スキームでの推計区分に分類した（②）。「緑黄色野菜」と「その他の野菜」の詳細な項目を「Exposed」（葉菜等）と「地下部」（根菜等）に分けるにあたり、「暴露係数ハンドブック[2]」と同じ分け方にした。「緑黄色野菜」の「その他」に含まれる「Exposed」（葉菜）と「地下部」（根菜）の摂取量は、「緑黄色野菜」に含まれる「その他」以外の「Exposed」（葉菜）の合計摂取量と「地下部」（根菜）の合計摂取量の比率を用いて「その他」の摂取量を按分した。「その他の野菜類」の「その他の野菜」に含まれる「Exposed」（葉菜）と「地下部」（根菜）の摂取量も同様にして求めた。

(オ) (エ)の推計区分によって(ウ)の数値を地上部農作物（Protected）、地上部農作物（Exposed）、地下部農作物に統合した（図表 V-55）。

[1] クッキング自給率（農林水産省による料理自給率計算ソフト）の品目ごとの自給率
(http://www.maff.go.jp/j/zyukyu/zikyu_ritu/zikyu03.html)

[2] 暴露係数ハンドブック（産業技術総合研究所）
(http://unit.aist.go.jp/riss/crm/exposurefactors/)

図表 V-54　食品群ごとの摂取量と自給率

①食品群			②推計区分	③全年令の摂取量 [g/day]	④内訳の比率	⑤15才以上の摂取量 [g/day]	⑥自給率	⑦自給率を加味した摂取量 [g/day]
穀　類				256.8	100%	266.3		
	米　類			160.4	100%	169.7		
		米	Protected	157.6	98% ※1	166.7	100%	166.7
		米加工品	Protected	2.9	2% ※1	3.1	100%	3.1
	大　麦		Protected	0.1	0% ※2	0.1	79%	0.1
	小麦類			94.3	100%	94.6		
		小麦粉	Protected	7.2	8% ※3	7.2	13%	0.9
		パン	Protected	34.2	36% ※3	34.3	30%	10.3
		菓子パン	Protected	8.8	9% ※3	8.8	30%	2.6
		生めん，ゆでめん	Protected	34.9	37% ※3	35.0	22%	7.7
		乾めん，マカロニ	Protected	5.7	6% ※3	5.7	22%	1.2
		即席めん	Protected	3.5	4% ※3	3.5	22%	0.8
	その他の穀類		Protected	2.0	1% ※2	2.1	49%	1.0
いも類				64.7	100%	63.6		
	さつまいも		地下部	9.3	14%	9.1	92%	8.4
	じゃがいも		地下部	30.5	47%	30.0	61%	18.2
	その他のいも		地下部	11.6	18%	11.4	64%	7.3
	いも類加工品		地下部	13.3	21%	13.1	92%	12.1
豆類				70.2	100%	70.8		
	大豆，大豆製品			68.4	97%	69.0		
		味噌	Protected	13.0	19%	13.1	31%	4.1
		豆腐	Protected	38.6	55%	38.9	25%	9.7
		豆腐加工品	Protected	7.4	11%	7.5	25%	1.9
		大豆，その他	Protected	9.4	13%	9.5	25%	2.4
	その他の豆類		Exposed※4	1.9	3%	1.9	100%	1.9
果実類				117.4	100%	116.4		
	柑橘類		Protected	28.7	24%	28.5	100%	28.5
	りんご		Exposed	24.3	21%	24.1	56%	13.5
	バナナ		Protected	10.5	9%	10.4	0%	0.0
	いちご		Exposed	0.2	0%	0.2	85%	0.2
	その他の果実		Exposed	43.0	37%	42.6	100%	42.6
	果汁		Exposed	10.7	9%	10.6	100%	10.6
緑黄色野菜				95.9	100%	98.7		
	にんじん		地下部	21.8	23%	22.4	63%	14.2
	ほうれん草		Exposed	17.4	18%	17.9	91%	16.4
	ピーマン		Exposed	4.5	5%	4.6	86%	4.0
	トマト		Exposed	20.2	21%	20.8	49%	10.2
	その他			32.0				
	その他の内訳		Exposed	21.1	22%	21.7	100%	21.7
			地下部	10.9	11%	11.2	100%	11.2
その他の野菜類				180.1	100%	185.2		
	大根		地下部	36.7	20%	37.7	98%	37.0
	たまねぎ		地下部	27.7	15%	28.5	75%	21.4
	きゃべつ		Exposed	23.6	13%	24.3	98%	23.7
	きゅうり		Exposed	11.2	6%	11.5	93%	10.8
	はくさい		Exposed	22.6	13%	23.2	100%	23.2
	その他の野菜			39.4				
	その他の内訳		Exposed	18.6	10%	19.1	100%	19.1
			地下部	20.8	12%	21.4	100%	21.4
	葉類つけもの		Exposed	6.7	4%	6.9	100%	6.9
	たくあん，その他つけもの		地下部	12.1	7%	12.4	100%	12.4

※1　米類の摂取量を100%としたときの比率
※2　穀類の摂取量を100%としたときの比率
※3　小麦類の摂取量を100%としたときの比率
※4　両方考えられるため、安全側としてExposedとした

図表 V-55　農作物の国産物摂取量

（図表 V-54 を集計したもの。文章中の(エ)の結果が左表、(オ)の結果が右表。）

食品群	推計区分	自給率を加味した摂取量 [g/day]
米類	Protected	160.5
大麦	Protected	0.1
小麦類	Protected	23.5
その他の穀物	Protected	1.0
芋類	地下部	46.8
豆類	Protected	17.8
	Exposed	1.9
緑黄色野菜	地下部	24.7
	Exposed	50.8

『摂取量推計用』農作物区分		自給率を加味した摂取量 [g/day]
地上部農作物	Protected	240.8
	Exposed	204.7
地下部農作物		163.7

暴露量を推計する際には、仮想的排出源を中心とする一定のエリアに住む人が、そのエリアで栽培される農作物を摂取する割合（ここでは「近郊生産物摂取割合」という）を考慮する必要がある。現時点では国内でそのような情報が得られていないので、代替するデータとして、U.S.EPA の「Exposure Factors Handbook (EFH)[1]」に掲載されている自家消費の割合(intake rates for home-produced products)を近郊生産物摂取割合として用いることとした。

EFHでは、全国食品消費調査（NFCS）から、食品の自家消費率を集計し、年代、季節、都市型、人種等を統計的に整理している。図表 V-56は、欧米の各種の野菜と果物の自家消費割合の比較である。米国の人健康に係る各種のリスク評価に組み込まれている自家消費割合のデフォルト値の多くは、EFHから引用されている。

また、U.S.EPAのTSCAの新規物質の事前審査で使われているリスク評価システムE-FAST ver.2や欧州のEUSES[2]においても、様々な設定パラメータ（例：体重、飲水量、呼吸量、食品摂取量）にEFHの情報が使用もしくは参照されている。そこで、米国国民の一般人（general population）における地上部農作物（8.2%）、地下部農作物（4.3%）の自家消費割合を適用することとした。

なお、今後の調査によって、国内において近郊生産物摂取割合に関するデータが得られた場合には、新たに近郊生産物摂取割合の設定について検討する必要があると考えられる。

[1] U.S. EPA (2011) Exposure Factors Handbook: 2011Edition, EPA/600/R-090/052F. (http://cfpub.epa.gov/ncea/cfm/recordisplay.cfm?deid=20563)
の Table13-68 Fraction of Food Intake That Is Home-Produced

[2] EC (2008) EUSES 2.1 background report: chapterIII Model Calculations.

図表 V-56　野菜と果物の自家消費割合の設定パラメータの比較

	Risk assessment guidance for superfund[1]	Health consultation[2]		Human Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities[3]	ECETOC[4]
対象集団	農業従事者	全て	全て	農業従事者	全て
使用している野菜区分	全区分	地上部農作物	地下部農作物	全区分	全区分
野菜の自家消費割合(%)	40	8.2	4.3	59	3
果物の自家消費割合(%)	30	―		29	1.7

以上より、農作物の近郊農作物摂取割合と摂取量を図表 V-57と図表 V-58に示すように設定した。図表 V-58の排出源周辺の値は近郊生産物摂取割合を考慮した摂取量であり、一般環境の値は近郊生産物摂取割合を考慮しない値である。本シナリオの暴露量推計に用いるのは排出源周辺の値である。なお、一般環境の値はⅦ章で用いる。

図表 V-57　設定した農作物の近郊生産物摂取割合

『摂取量推計用』農作物区分		近郊生産物摂取割合[%]
地上部農作物	Protected	8.2
	Exposed	8.2
地下部農作物		4.3

[1] U.S. EPA (1991) Risk assessment guidance for superfund, volume I: human health evaluation manual, supplemental guidance, standard default exposure factors, OSWER Directive 9285.6-03, Interim Final.
(http://www.epa.gov/oswer/riskassessment/pdf/OSWERdirective9285.6-03.pdf)
汚染地域ごとの具体的な浄化対策を行うための詳細なリスク評価マニュアル。この巻はヒト健康の汚染地域浄化前の現状評価部分にあたる。ヒト健康の影響評価の中で農業従事者の自家摂取割合として EFH の野菜と果物の値を用いている。

[2] U.S. ATSDR (2006.05.24) Health consultation: palestine bioavailability study, arsenic and vanadium soil action levels, EPA No. TXN000605670.
(http://www.dshs.state.tx.us/epitox/consults/palestine_bioavail.pdf)
U.S. EPA がテキサス州の工場地域付近の土壌中の砒素とバナジウムが及ぼすヒト健康影響を評価した報告書。非発がん性に関わる様々な経路から人への暴露量推計が掲載されており、EFH の野菜の自家摂取割合が引用されている。

[3] U.S. EPA (2005) Human health risk assessment protocol for hazardous waste combustion facilities, EPA530-R05-006.

[4] ECETOC (2001) Exposure factors sourcebook for european populations (with focus on UK data), ECETOC Technical Report No.79.
ヨーロッパの人々の暴露係数のデータ集であり、1996 年の英国の健康調査の情報が用いられている。その中で、英国国民の購入及び自家生産した野菜及び果物の消費割合が掲載されている。また、Introduction では U.S. EPA の EFH が紹介されている。

図表 V-58　設定した農作物の摂取量（太枠内が本シナリオ対象）

『摂取量推計用』農作物区分		農作物摂取量[g/day]	
		排出源周辺	一般環境
地上部農作物	Protected	19.7	240.8
	Exposed	16.8	204.7
地下部農作物		7.0	163.7

※四捨五入を途中の計算では行わず最後に行っているため、端数は一致していない。
※一般環境の値は排出源周辺の値を内数として含んでいることに注意。

④ 畜産物の摂取量

畜産物として、牛肉及び乳製品を想定し、これらの摂取による人への暴露を考慮する。牧草（地上部農作物 Exposed）及び土壌の摂取、大気吸入により化学物質を取り込むと考えられる牛の肉及び牛由来の乳製品を想定した。なお、ここで想定している牛は、排出源の周辺領域で牧養され、同領域の牧草を 100%摂取していると仮定した。

人の畜産物摂取量に関しては、③の農作物と同様に、「国民栄養調査[1]」（2000 年（平成 12 年）実績）をもとにした。具体的には「国民栄養調査」の食品群別摂取量（全国，年齢階級別）から 15 才以上の牛肉摂取量の平均値と牛乳及び乳製品摂取量の平均値を算出し、平成 18 年度の日本の食料生産量・消費量[2]から求めた自給率（参照：図表 V-59）を乗じた（図表 V-60）。

図表 V-59　畜産物の自給率

	国内生産量[千トン]	国内消費仕向量[千トン]	自給率[%]
牛肉	495	1,145	43.2
牛乳及び乳製品	8,091	12,166	66.5

図表 V-60　畜産物の国産物摂取量

『摂取量推計用』畜産物区分	15 才以上の摂取量[g/day]	国内自給率[%]	採用摂取量※2 [g/day]
牛肉	21.7※1	43.2	9.4
牛乳及び乳製品	108.9	66.5	72.4

※1 食品群別摂取量（全国，年齢階級別）には牛肉摂取量の数値はないため、食品群別栄養素等摂取量（全国）から肉類摂取量に対する牛肉摂取量の比率（26.2%）を求め、15才以上の肉類摂取量（82.8[g/day]）に乗じて求めた。
※2 四捨五入を途中の計算では行わず最後に行っているため、端数は一致していない。

[1] 厚生労働省（2002）国民栄養の現状　平成 12 年国民栄養調査結果.
(http://www.nih.go.jp/eiken/chosa/kokumin_eiyou/index.html)
[2] 農林水産省（2009）日本の食料自給率　年度別食料需給表(2) 平成 18 年度食料需給表（確定値）
(http://www.e-stat.go.jp/SG1/estat/List.do?lid=000001052524)

また、排出源周辺における暴露量を推計する際には、農作物と同様に排出源周辺で牧養された牛由来の畜産物を摂取する割合を考慮するため、③と同様にU.S.EPA EFHに掲載されている自家消費割合（牛肉2.6%、乳製品0.8%）を適用することとした。なお、③と同様に、今後の調査によって、国内において近郊生産物摂取割合に関するデータが得られた場合には、新たに近郊生産物摂取割合の設定について検討する必要があると考えられる。

以上より、畜産物の近郊生産物摂取割合と摂取量を図表 V-61、図表 V-63に示すように設定した。本シナリオの暴露量推計に用いるのは排出源周辺の値である。なお、一般環境の値はⅦ章で用いる。

図表 V-62　設定した畜産物の近郊生産物摂取割合

『摂取量推計用』区分	近郊生産物摂取割合[%]
牛肉	2.6
乳製品	0.8

図表 V-63　設定した畜産物の摂取量（太枠内が本シナリオ対象）

『摂取量推計用』区分	畜産物摂取量[g/day]	
	排出源周辺	一般環境
牛肉	0.2	9.4
乳製品	0.6	72.4

※四捨五入を途中の計算では行わず最後に行っているため、端数は一致していない。
※一般環境の値は排出源周辺の値を内数として含んでいることに注意。

⑤ 魚介類の摂取量

魚介類の摂取に関して、仮想的排出源から化学物質が流入している河川に生息する淡水域の魚介類のみを摂取するというシナリオは現実的ではないため、海水域の魚介類も考慮した。

魚介類の摂取量は③の農作物や④の畜産物と同様に、「国民栄養調査[1]」（2000年（平成12年）実績）の15歳以上の数値をもとにした。15歳以上の平均摂取量は95.6[g/day]であった。なお、この魚介類の摂取量は「生魚（さけ・ます、まぐろ類、たい・かれい類、あじ・いわし類、その他の生魚）」、「いか・たこ・かに」、「貝類」、「魚（塩蔵）」、「魚介（生干し、乾物）」、「魚介缶詰め」、「魚介佃煮」、「魚介錬製品」及び「魚肉ハム・ソーセージ」からなる。

魚介類（淡水域）と魚介類（海水域）の摂取量比率は、土壌残留及び水質汚濁に係る農

[1] 厚生労働省（2002）国民栄養の現状　平成 12 年国民栄養調査結果.
(http://www.nih.go.jp/eiken/chosa/kokumin_eiyou/index.html)

薬登録保留基準に関連して検討された暴露評価対象魚介類の摂取量割合の導出方法[1]を参考にし、平成18年漁業・養殖業生産統計年表（平成18年度実績）[2]より遠洋沖合を除いた海面漁獲高比率45.9%及び内水（淡水）漁獲高比率1.4%を用い、魚介類（海水域）の摂取量を43.9[g/day]、魚介類（淡水域）の摂取量を1.4[g/day]とした。

以上より、魚介類の摂取量は図表 V-64に示すように設定した。

本シナリオでは図表 V-64の魚介類（淡水域）と魚介類（海水域）で別々の摂取量の数値を用いる。なお、魚介類合計値はⅦ章で用いる。

図表 V-64　設定した魚介類の摂取量（太枠内が本シナリオ対象）

『摂取量推計用』魚介類区分	魚介類摂取量[g/day]
魚介類（淡水域）	1.4
魚介類（海水域）	43.9
魚介類合計	45.3

⑥ 飲料水の摂取量

飲料水摂取量（飲水量）は、WHO が報告している一日当たりの飲水量[3]を参考にし、2[L/day]とした。

V.7.5.6　構造不定用ワーストデフォルト暴露量設定の経緯

以下では、V.7.4.2 で示した環境分配モデル適用物質（構造不定）のワーストデフォルト暴露量を求めた手順を説明する。目的、条件及び手順を下記に示す。

- 目的：大気への単位排出量当たりの大気経由の暴露量の物理化学的性状の組み合わせによる最大値を求めること。
- 条件：評価エリア半径 1km、大気排出量 1t/year で固定。
- 手順：次の 2 つの Step で求める。
  - Step1：いくつかの物理化学的性状の組み合わせの中から、暴露量が最大となる組み合わせを見つける。
  - Step2：Step 1 の暴露量が最大となる物理化学的性状の組み合わせを初期値として CrystalBall 11.1.2 の OptQuest 機能[4]で最大値を計算する。

---

[1] 農林水産省（2005）第１０回農業資材審議会農薬分科会　参考資料１　土壌残留及び水質汚濁に係る農薬登録保留基準の改正について.

[2] 農林水産省(2009)　平成 18 年漁業・養殖業生産統計年表（平成 18 年度実績）「第１　総括表　２　漁業・養殖業部門別統計　（１）生産量」(http://www.e-stat.go.jp/SG1/estat/List.do?lid=000001038613)

[3] WHO (1996), Guidelines for Drinking-Water Quality Vol.1 – Recommendations, 2nd edition, WHO, Geneva: reprint of 1993 edition.

[4] CrystalBall に搭載されている、シミュレーションモデルの最適解を自動的に探索するプ

上記のように2つのStepを経たのは、OptQuest機能の結果は初期値に依存するため、最大値に近いと考えられる初期値をセットしてからOptQuest機能を使った方が、より最大値に近づけると考えたためである。

Step1 では、図表 V-65 に示す 352 通り（=22 通り（logPow）×16 通り（蒸気圧））の物理化学的性状の組み合わせのデータセットから求められる暴露量のうち、最大となる組み合わせを見つけた。logPow 及び蒸気圧の上限と下限は、化審法の信頼性基準に関する文書「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」[1]において、信頼性ランク 1 になる試験法の測定範囲の上限と下限（試験法が複数あればそれらの最大と最小）から決定し、水溶解度、有機炭素補正土壌吸着係数及びヘンリー係数は回帰式により決定した。分子量及び融点は、ECETOC[2]において look-up table を作成する際の仮定を参考にした。

図表 V-65　ワーストデフォルト暴露量算出のためのパラメータ

パラメータ	単位	入力値	出典等
分子量	－	200	ECETOC
融点	[℃]	-35	ECETOC
logPow	－	-2.0、-1.5、-1.0、-0.5、0.0、0.5、1.0、1.5、2.0、2.5、3.0、3.5、4.0、4.5、5.0、5.5、6.0、6.5、7.0、7.5、8.0、8.5	測定範囲
蒸気圧	[Pa]	1×10^{-10}、1×10^{-9}、1×10^{-8}、1×10^{-7}、1×10^{-6}、1×10^{-5}、1×10^{-4}、1×10^{-3}、1×10^{-2}、1×10^{-1}、1×10^{0}、1×10^{1}、1×10^{2}、1×10^{3}、1×10^{4}、1×10^{5}	測定範囲
水溶解度	[mg/L]	式 V-183	推計式
有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]	式 V-184	推計式
ヘンリー係数	[Pa・m³/mol]	式 V-186	推計式

図表 V-65 の logPow と蒸気圧の入力値の上限と下限を設定する際に参考にした試験法の測定範囲は下図のとおり。logPow の測定範囲の上限は 8.2 であるが、広く取り 8.5 にした。

ログラム。

[1] 経済産業省（2011）化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について 平成 23 年 9 月 15 日.
(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/reliability_criteria02.pdf)

[2] ECETOC (2004) Appendix AA: Development of EUSES look-up table, In: Target Risk Assessment, ECETOC Technical Report No. 93, pp.171-180.
REACH における TRA（Targeted Risk Assessment）手法の開発時に、Tier 0 （スクリーニングレベル）の環境暴露評価において、「look-up table」を用いて、簡易的に環境暴露のレベルを評価する手法が検討されている。この評価開発においては、仮想的な物質を想定して EUSES を用いた環境中濃度の推定が行われているが、その際に用いた分子量及び融点をここでは参照している。

図表 V-66　logPow と蒸気圧の測定範囲

パラメータ	信頼性基準上、信頼性ランク 1 になる試験法	測定範囲 （下線は設定に用いた値）
logPow	① OECD TG 107（Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method） ②OECD TG 117（Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method） ③ OECD TG 123（Partition Coefficient (1-Octanol/Water): Slow-Stirring Method） ④ JIS Z 7260-107 (分配係数（1-オクタノール／水）の測定－フラスコ振とう法) ⑤ JIS Z 7260-117 (分配係数（1-オクタノール／水）の測定－高速液体クロマトグラフィー) ⑥ EPA OPPTS 830.7550（Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Shake Flask Method） ⑦ EPA OPPTS 830.7560（Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Generator ColumnMethod） ⑧ EPA OPPTS 830.7570（Partition Coefficient (n-Octanol/Water), Estimation By Liquid Chromatography）	①⑥<u>－2</u>～4 ②0～6（特殊な場合 10 まで） ③～<u>8.2</u>
蒸気圧	① OECD TG 104（Vapour Pressure Curve） ② JIS K 2258-1（原油及び石油製品－蒸気圧の求め方－第 1 部：リード法） ③ JIS K 2258-2（原油及び石油製品－蒸気圧の求め方－第 2 部：3 回膨張法） ④ ISO 3007（Petroleum products and crude petroleum - Determination of vapor pressure - Reid method） ⑤ EPA OPPTS 830.7950（Vapor Pressure）	① ・ 動的方法 10^{3}～<u>10^{5}</u> ・ 静的方法 10^{-2}～<u>10^{5}</u> ・ 蒸気圧計方法 10^{2}～<u>10^{5}</u> ・ 滲出法（蒸気圧天秤） 10^{-3}～1 ・ 滲出法（クヌーセンセル）<u>10^{-10}</u>～1 ・ 気体飽和法 <u>10^{-10}</u>～10^{3} ・ ｽﾋﾟﾆﾝｸﾞﾛｰﾀｰ法 10^{-4}～0.5

図表 V-65の各物理化学的性状の推計式は以下のものを用いた。

$$\log WS = -0.935 \times \log Pow + 0.978 - 0.0082 \times (MP - 25) - 0.00468 \times MW \qquad \text{式 V-183}$$

$$\log Koc = 0.544 \times \log Pow + 1.377 \qquad \text{式 V-184}$$

$$WS' = WS \times \exp\left\{\frac{H0solut}{R} \times \left(\frac{1}{T + 273.15} - \frac{1}{20 + 273.15}\right)\right\} \times MW \times 1000 \qquad \text{式 V-185}$$

$$Henry = \frac{VP}{\left(\frac{WS'}{MW}\right)} \qquad \text{式 V-186}$$

式 V-183は基本的に25℃での値を想定した式と考えられるため、式 V-185でT=25℃として20℃に換算した。

記号	説明	単位	値	備考
WS	水溶解度	[mol/L]		Meylan(1996)[1]
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]		Meylan(1992)[2]
WS'	水溶解度（20℃における値に補正後）	[mg/L]		REACH-TGD[3] Chapter R.7A .Appendix R.7.1-3 式(3)
Henry	ヘンリー係数	[Pa･m³/mol]		Meylan(1991)[4]
logPow	1-オクタノールと水との間の分配係数	―		化学物質情報
MP	融点	[℃]		化学物質情報
MW	分子量	―		化学物質情報
H0solut	溶解エンタルピー	[J/mol]	1×10^{4}	
R	気体定数	[Pa･m³/(mol･K)]	8.314	
T	測定温度	[℃]	25	
VP	蒸気圧	[Pa]		化学物質情報

Step 2では、意思決定変数にlogPowと蒸気圧を選び、logPowの下限を-2.0、上限を8.5、蒸気圧の下限を1×10^{-10}、上限を1×10^{5}と設定し、意思決定変数に分布は設定せず、大気経由暴露量の最大化を目的関数としてCrystalBall 11.1.2のOptQuest機能を用いた。その際、他の入力値及び推計式はStep1と同じとした。

Step1の結果とStep2の結果を以下に示す。Step2の結果はV.7.4.2 の図表 V-41で示したものと同じである。暴露量の合計について、Step2はStep1より僅かに大きいがほぼ同じ値となった。Step1の時点でワーストケースに近い値が計算されていたと考えられる。本スキームでは、より値の大きいStep2の結果を環境分配モデル適用物質（構造不定）のワーストデフォルト暴露量に用いることにした。

なお、この物理化学的性状の値はモデル上の計算によって、暴露量がワーストになるようにして決めたものであり、実際にこのような物質が存在するわけではないことに注意されたい。

[1] Meylan, W.M., Howard, P.H. and Boethling, R.S. (1996) Improved method for estimating water solubility from octanol/water partition coefficient, Environ. Toxicol. Chem.,15(2), 100-106.の式(9)を引用した。

[2] Meylan, W.M., Howard, P.H. and Boethling, R.S. (1992) Molecular topology/fragment contribution method for predicting soil sorption coefficients, Environ. Sci. Technol., 26(8), 1560-1567.の式(3)を引用した。

[3] ECHA (2008) Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.7a: endpoint specific guidance.

[4] Meylan, W.M. and Howard, P.H. (1991) Bond contribution method for estimating Henry's law constants, Environ. Toxicol. Chem., 10(10), 1283-1293.

1

2 **図表 V-67　ワーストケース暴露量の計算結果**

パラメータ	単位	値	
		Step1	Step2
分子量	－	200	200
融点	[℃]	-35	-35
logPow	－	1.5	1.5
蒸気圧	[Pa]	1.00×10^{-3}	1.13×10^{-3}
水溶解度	[mg/L]	2.53×10^{4}	2.28×10^{4}
有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]	1.56×10^{2}	1.66×10^{2}
ヘンリー係数	[Pa・m³/mol]	7.91×10^{-6}	9.95×10^{-6}

3

大気経由の暴露経路	暴露量（大気排出量 1[t/year]当たり）[mg/kg/day／(t/year)]	
	Step1	Step2
大気吸入	5.183×10^{-5}	5.185×10^{-5}
地上部農作物摂取	1.365×10^{-3}	1.366×10^{-3}
地下部農作物摂取	1.625×10^{-5}	1.663×10^{-5}
乳製品摂取	1.154×10^{-8}	1.154×10^{-8}
肉類摂取	1.927×10^{-10}	2.155×10^{-10}
合計	1.433×10^{-3}	1.435×10^{-3}

4

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

Ⅵ. 暴露評価

～用途等に応じた暴露シナリオ～

Ver.1.0

平成 26 年 6 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	平成 26 年 6 月	初版

目　次

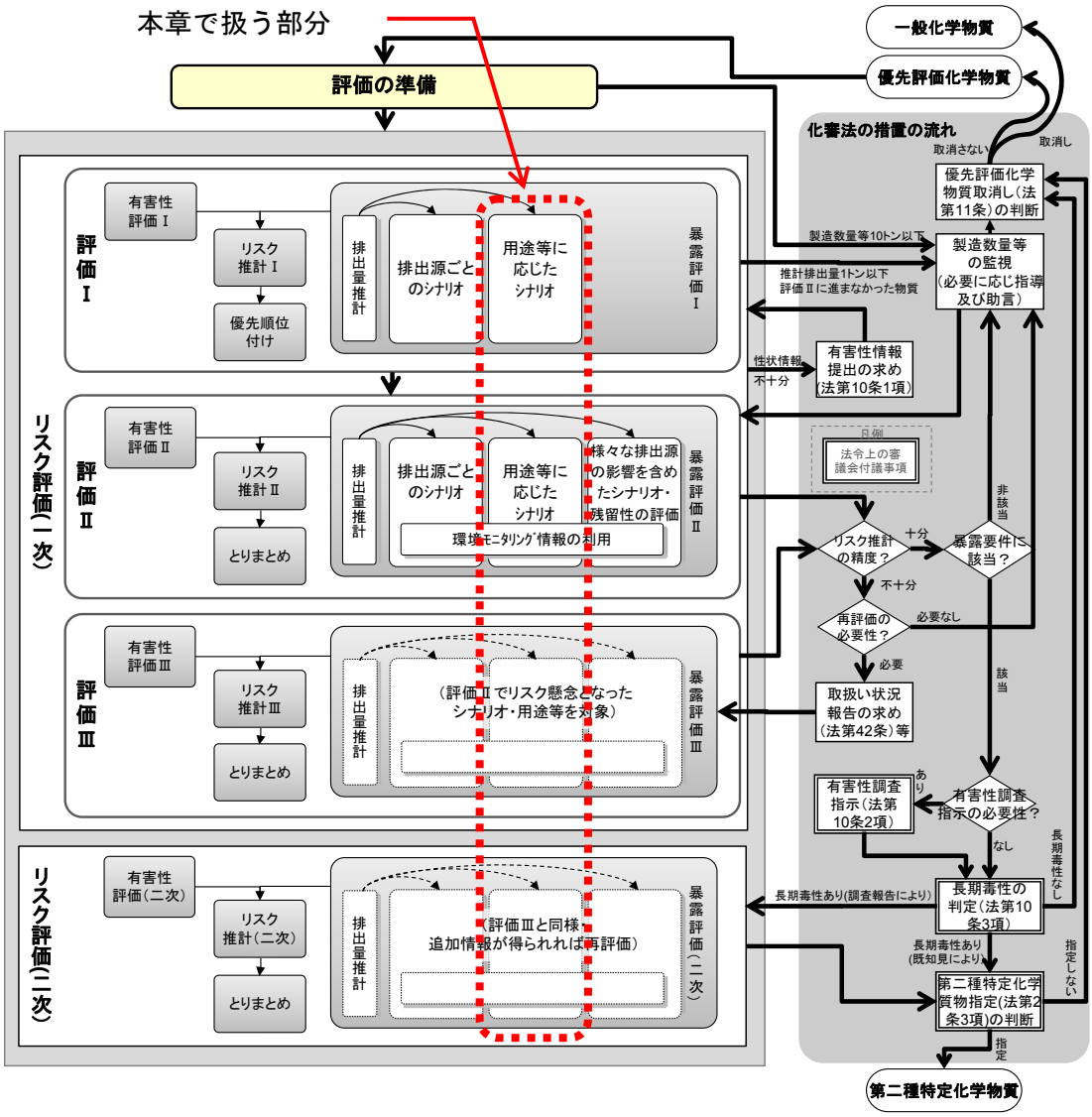
Ⅵ. 暴露評価～用途等に応じた暴露シナリオ～ 1
Ⅵ.1 はじめに 1
Ⅵ.1.1 本章の位置づけ 1
Ⅵ.1.2 用途等に応じた暴露シナリオの概要と他の章との関係 2
Ⅵ.2 水系の非点源シナリオ 4
Ⅵ.2.1 水系の非点源シナリオの暴露評価Ⅰ 4
Ⅵ.2.2 水系の非点源シナリオの暴露評価Ⅱ 13
Ⅵ.2.3 水系の非点源シナリオの暴露評価Ⅲ 15
Ⅵ.2.4 リスク評価（二次）における水系の非点源シナリオの暴露評価 15
Ⅵ.3 大気系の非点源シナリオ 16
Ⅵ.3.1 大気系の非点源シナリオの暴露評価Ⅰ 16
Ⅵ.3.2 大気系の非点源シナリオの暴露評価Ⅱ 21
Ⅵ.3.3 大気系の非点源シナリオの暴露評価Ⅲ 23
Ⅵ.3.4 リスク評価（二次）における大気系の非点源シナリオの暴露評価 23
Ⅵ.4 地下水汚染の可能性シナリオ 24
Ⅵ.4.1 経緯と考え方 24
Ⅵ.4.2 適用範囲 24
Ⅵ.4.3 手法の概念 25
Ⅵ.5 船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ 27
Ⅵ.5.1 評価Ⅰ 27
Ⅵ.5.2 評価Ⅱ 27
Ⅵ.6 付属資料 28
Ⅵ.6.1 はじめに 28
Ⅵ.6.2 水系の非点源シナリオ 28
Ⅵ.6.3 大気系の非点源シナリオ 39
Ⅵ.6.4 地下水汚染の可能性シナリオ 43

VI. 暴露評価～用途等に応じた暴露シナリオ～

VI.1 はじめに

VI.1.1 本章の位置づけ

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、「用途等に応じた暴露シナリオ」について記載する。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図表 VI-1 に示す。



図表 VI-1　リスク評価の手順フローにおける本章で扱う部分

「用途等に応じた暴露シナリオ」の目的は、排出源ごとの暴露シナリオのみでは環境への主要な排出に係る暴露をカバーできない用途等に関し、評価の準備（Ⅰ章）で得られた物理化学的性状と排出量推計（Ⅳ章）で求めた排出量を用いてシナリオ別に暴露量を推計

することである。

暴露評価Ⅰで推計したシナリオ別の暴露量は有害性評価Ⅰで導いた有害性評価値（Ⅱ章、Ⅳ章）とともに用いられ、リスク推計Ⅰが行われる。同様に、評価段階に応じたシナリオ別の暴露量によって、各段階のリスク推計が行われ、評価結果のとりまとめが行われる。[1]

Ⅵ.1.2 用途等に応じた暴露シナリオの概要と他の章との関係

排出源から排出された化学物質に人や生活環境動植物が暴露するまでの一連の仮定である暴露シナリオは、図表 Ⅵ-2 に示すように対応する用途ごとに複数設定している。正確には詳細用途に応じて設定しているが、図表 Ⅵ-2 には概要を示すため用途分類を記載している。対応する詳細用途は本章の各節を参照のこと。

図表 Ⅵ-2　用途等に応じた暴露シナリオの種類と概要

暴露シナリオ名		対応する用途分類	対象とするライフサイクルステージ					評価を行う段階		
			製造	調合	工業的使用	家庭用・業務用での使用	長期使用製品の使用	評価Ⅰ	評価Ⅱ	評価Ⅲ
用途等に応じた暴露シナリオ	水系の非点源シナリオ	・#13 水系洗浄剤 2《家庭用･業務用の用途》 ・#14 ワックス ・#20 殺生物剤 3《家庭用･業務用の用途》 ・#22 芳香剤、消臭剤 ・#47 燃料、燃料添加剤				○		○	※2	※2
	大気系の非点源シナリオ	・#13 水系洗浄剤 2《家庭用･業務用の用途》 ・#14 ワックス ・#20 殺生物剤 3《家庭用･業務用の用途》 ・#22 芳香剤、消臭剤 ・#47 燃料、燃料添加剤				○		○	※2	※2
	船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ	・#17 船底塗料用防汚剤、漁網用防汚剤					○	○	○	※2
	地下水汚染の可能性シナリオ	・#04 金属洗浄用溶剤 ・#05 ｸﾘｰﾆﾝｸﾞ洗浄用溶剤(他にも対応する用途あり。詳細は Ⅵ.4 参照)			○	○			○	※2

※1：「○」は対象とするの意
※2：前段階でリスクが懸念される場合に実施

[1] ただし、例外もあり、船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオの評価Ⅰと地下水汚染の可能性シナリオでは暴露量の推計やリスク推計を行わず[1]、物質間の相対的な順位付け等が目的となる（Ⅵ.5、Ⅵ.4 参照）。

基本となる暴露シナリオは、すべての用途に関して評価Ⅰから必ず実施し、製造から工業的使用までの 3 つのライフサイクルステージをカバーする「排出源ごとの暴露シナリオ」である。排出源ごとの暴露シナリオでカバーしていないライフサイクルステージ（家庭用・業務用での使用段階と長期使用製品の使用段階）での排出が主となる用途に関しては、「用途等に応じた暴露シナリオ」を追加し補足することとしている。

「排出源ごとの暴露シナリオ」は、サプライチェーンの川上及び川中にあたる事業所での製造、調合等に伴う排出（以下、「点源」という）を対象とし、それら点源である排出源周辺に着目したシナリオである。

「用途等に応じた暴露シナリオ」のうち、「水系の非点源シナリオ」、「大気系の非点源シナリオ」、「船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ」では、最終製品での排出が化学物質のライフサイクル全体での排出量の大半を占めることが想定される特定の用途に着目している。これらは、排出が主となるライフサイクルステージに着目したシナリオである[1]。

「地下水汚染の可能性シナリオ」は、土壌へ排出され、そこから地下水汚染につながる可能性がある用途に着目したシナリオである。

以上のように、製造数量等の届出における用途に応じて暴露シナリオが設定されるようになっている。

以降では、「用途等に応じた暴露シナリオ」をシナリオ別に各節にて説明する。

なお、環境中濃度や人の摂取量を推計する数理モデルについて、「排出源ごとの暴露シナリオ」で用いたものを「用途等に応じた暴露シナリオ」でも使うことがあり、本文中でも適宜引用するが、その数理モデルの詳細はⅤ章に記載しているのでそちらを参照されたい。

[1] 例えば、ある優先評価化学物質に水系の非点源シナリオの対象となる水系洗浄剤《家庭用･業務用の用途》の用途があった場合、当該用途の製造段階と調合段階の排出に関しては「排出源ごとの暴露シナリオ」で評価され、家庭用・業務用での使用段階の排出に関しては「水系の非点源シナリオ」で評価される。なお、当該用途に関しては、工業的使用段階での使用は想定しておらず、排出係数を設定していない。

Ⅵ.2 水系の非点源シナリオ

Ⅵ.2.1 水系の非点源シナリオの暴露評価Ⅰ

ここでは水系の非点源シナリオについて適用範囲、暴露シナリオ、暴露集団、排出量推計、環境中濃度の推計と人の摂取量推計等について順に説明する。

本項の詳細は付属資料 Ⅵ.6.2 を参照されたい。

Ⅵ.2.1.1 水系の非点源シナリオの適用範囲

本シナリオを適用するか否かは製造数量等の届出情報から得られる詳細用途から判別する。該当する詳細用途は「家庭用・業務用での使用段階」のライフサイクルステージでの使用が想定されるものとなる。具体的には排出係数一覧表（Ⅳ章を参照）のうち、「家庭用・業務用での使用段階」で排出係数が設定[1]されている図表 Ⅵ-3 の詳細用途が対象となる。

図表 Ⅵ-3　水系の非点源シナリオの対象となる詳細用途

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類
13	水系洗浄剤 2《家庭用・業務用の用途》	a	石鹸、洗剤、ウインドウォシャー液（界面活性剤）
		b	柔軟剤（界面活性剤）
		c	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤
		d	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（酵素、蛍光増白剤、紫外線吸収剤等）
		z	その他
14	ワックス（床用、自動車用、皮革用等）	a	ワックス
		b	乳化剤、分散剤
		z	その他
20	殺生物剤 3《家庭用・業務用の用途》	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）
		b※	繊維用・紙用防虫剤
		c	シロアリ駆除剤、防蟻剤
		d	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤、除菌剤
		e	非農耕地用除草剤
		f	展着剤、乳化剤
		z	その他
22	芳香剤、消臭剤	a	香料（洗浄剤用）[#22-ｂ,c を除く]
		b※	芳香剤
		c※	消臭剤
		d※	乳化剤、分散剤
		z	その他
47	燃料、燃料添加剤	a※	燃料

[1] 水域への排出係数がゼロの場合も含む。つまり、この場合でも本シナリオが設定されており、その上で排出係数がゼロであると解釈する。

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類
		b※	燃料添加剤（清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等）
		c※	燃焼改良剤（燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等）
		d※	氷結防止剤、着臭剤
		z※	その他

※　水域への排出係数はゼロである。

対象物質の出荷数量に対応する詳細用途が図表 VI-3 に該当すれば、製造段階、調合段階からの排出に対して適用した「排出源ごとの暴露シナリオ」と並行して、その物質の家庭用・業務用での使用段階からの排出に対して本シナリオを適用し暴露評価 I を行う。なお、図表 VI-3 の詳細用途に関しては、工業的使用段階での使用は想定しておらず、排出係数を設定していない。

VI.2.1.2　水系の非点源シナリオの暴露シナリオと全体の流れ

本シナリオの暴露評価 I の流れを図表 VI-4 に示す。ここでは、詳細用途が図表 VI-3 に該当する場合に、国民一人当たり排出量原単位ベースで環境中濃度や摂取量を推計する。すなわち、排出源ごとの暴露シナリオでの仮想的排出源ごとの環境中濃度等の推計と異なり、推計は物質ごとに代表的な 1 箇所（仮想的な河川）でだけ行われる。

この方法は、家庭等[1]で広範に使用・排出される場合に排出濃度や環境中濃度を概算する方法として適用される手法である[2]。

想定する暴露集団については以下のとおりである。

排出源ごとの暴露シナリオにおいて、暴露集団は一般工業化学品の製造・調合・工業的使用段階の排出源周辺の集団とした。それに対し、ここでは家庭等で使用され下水を通じて下水処理場に化学物質が集まり、そこから河川へ排出される化学物質に暴露する集団を設定する。つまり、下水処理場周辺の暴露評価という位置付けである。

全国には下水道が普及していない地域も存在するが、評価 I では家庭等から化学物質が下水道を経由し下水処理場から河川へ排出される暴露シナリオを設定して暴露評価を行う。

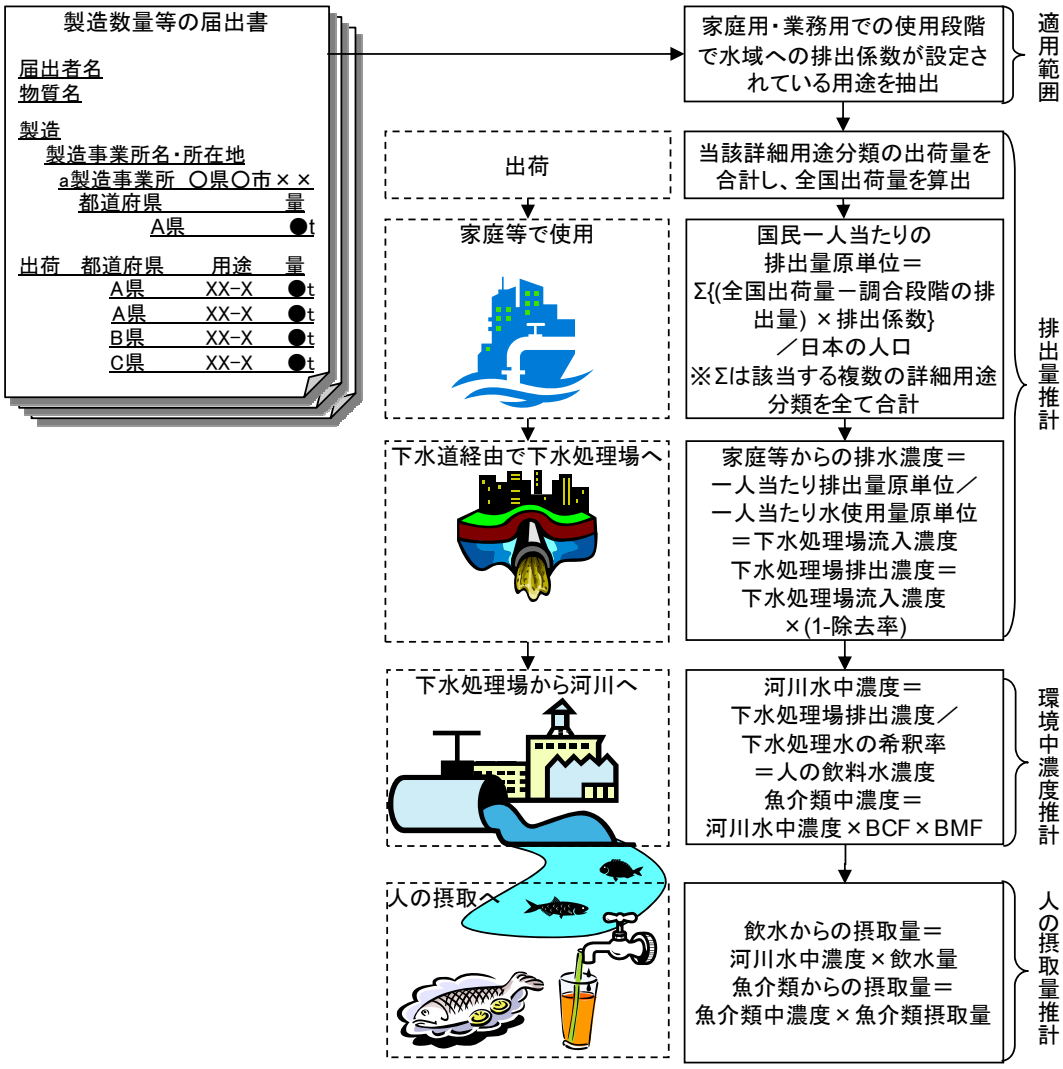
---

[1] 家庭等の「等」は、家庭用・業務用の使用段階における業務用の用途として使用される場所（オフィスビル、公園等）を指している（Ⅳ章の家庭用・業務用の用途を有する化学物質のライフサイクルに関する記載を参照）。以下、家庭等と言えばこの意味で用いる。

[2] 例えば以下の評価で適用されている。

- U.S. EPA の TSCA において、PMN（製造前届出）のリスク評価で使用されている暴露評価システム E-FAST の家庭排水（Down-the-Drain）モジュール。
  U.S. EPA (2007) Exposure and Fate Assessment Screening Tool (E-FAST) Version 2.0 Documentation Manual.
  (http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/efast2man.pdf)
- The Soap and Detergent Association (2005) Exposure and risk screening methods for consumer product ingredients.

このように設定したのは、評価Ⅰで用いる下水処理除去率と河川希釈率の場合、下水道を通らず直接河川に排出される地域よりも、下水道を通り下水処理場から排出される地域のの方が河川水中濃度の推計値が高くなり、このシナリオを用いればより安全側に評価されるためである。詳細は Ⅵ.2.1.8 で後述する。



図表 Ⅵ-4　水系の非点源シナリオの暴露評価Ⅰの全体の流れ

人に関しては以下のような暴露集団を仮定する。

(ア) 仮想的な下水処理場から排出される化学物質が流入する仮想的な河川から取水した水を摂取する。また、仮想的な下水処理場から排出される化学物質が流入する仮想的な河川水中及び海水中の化学物質を濃縮した魚介類を一定の割合で摂取する（図表 Ⅵ-4 参照）。

(イ) 仮想的な下水処理場に起因する化学物質に暴露する集団は、製造・調合・工業的使用段階の仮想的排出源とは近接せず、これらに起因する暴露はないとする。

(ウ) 暴露期間は長期間（数十年～生涯）とする。
(エ) 飲水量、魚介類摂取量は一般的な成人を想定する。

生活環境動植物に関しては以下のような暴露集団を仮定する。

(ア) 仮想的な下水処理場から排出される化学物質が流入した仮想的な河川の水にさらされる。
(イ) 仮想的な下水処理場からの排水が流入する河川と、製造・調合・工業的使用段階の仮想的排出源からの化学物質が流入する河川とは同じではないとする。
(ウ) 暴露期間は生活環境動植物にとって長期間（数十時間～数十日等、水生生物の寿命又は世代交代の期間程度）とする。

VI.2.1.3 水系の非点源シナリオの排出シナリオと排出量推計

水系の非点源シナリオの排出シナリオでは、家庭用・業務用の用途で化学物質が日本のどの地域でどの程度の量が使用されるかを仮定する必要がある。ここでは、製造数量等の届出制度による出荷先都道府県を最終消費地とはみなさず、最終的には消費者（国民）全体に行き渡るとする。全国にどのように行き渡るかについては、統計情報をもとに推計する。当該化学物質の「家庭用・業務用での使用段階」のライフサイクルステージにおける水域への排出は、全量が仮想的な下水処理場へ移動するものとし、仮想的な下水処理場では、良分解性の物質は除去され（除去率は評価 I ではスクリーニング評価と同じく『0.67』を用いる[1]）、難分解性又は分解性が不明の物質は分解等で除去されずに、下水処理場への流入濃度＝下水処理場からの排出濃度とする。なお、同じ化学物質の複数の詳細用途が VI.2.1.1 の図表 VI-3 に該当する場合は、それらを全部合計した排出量を用いる。

以上の排出シナリオに基づいた具体的な推計の手順は IV 章を参照されたい。

VI.2.1.4 水系の非点源シナリオの環境中濃度の推計

(1) 河川水中濃度

前述の VI.2.1.3 では下水処理場からの排出が排出濃度として推計されるため、下式で河川水中濃度を推計する。また、河川水中では溶存態と懸濁粒子への吸着態との分配を仮定する。

河川水中の溶存態濃度＝（1－懸濁粒子への吸着率）×河川水中濃度　　式 VI-1

[1] 厚生労働省、経済産業省、環境省（2010）スクリーニング評価手法の詳細（案），平成 22 年 10 月 8 日, pp.51-53 (http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/screening_detail.pdf)

河川水中濃度　　＝下水処理場排出濃度／下水処理水の希釈率　　式 VI-2

河川水中の溶存態濃度　：仮想的な下水処理場からの排出水が流入する仮想的な河川の溶存態濃度
懸濁粒子への吸着率　：化学物質の有機炭素補正土壌吸着係数、水中の懸濁粒子の濃度、懸濁粒子の有機炭素含有率を用いて推計
河川水中濃度　：仮想的な下水処理場から排出された化学物質が流入する河川の化学物質濃度（溶存態と懸濁粒子への吸着態の合計）
下水処理場排出濃度　：前述の VI.2.1.3 で推計する濃度
下水処理水の希釈率　：下水処理場の排出水が河川で希釈される倍率

(2) 魚介類中濃度

魚介類中濃度は、淡水魚と海産魚の別に推計する。それぞれ河川水中濃度（溶存態）と海水中濃度（溶存態）を使って求める。河川から海への希釈率や、淡水魚中濃度及び海産魚中濃度の推計式は、Ⅴ章の河川水中濃度と魚介類中濃度の推計に示したものと同じである。

VI.2.1.5　水系の非点源シナリオにおける人の摂取量推計

下水処理場から化学物質が排出され、それに人が暴露する経路は、排出源ごとの暴露シナリオの水域への排出による経路と同じとする。すなわち、下水処理場から排出された河川水を飲料水とし、その河川水から化学物質を濃縮した淡水魚と河川が流入した海域の海産魚を人が摂取すると仮定する。

人の摂取量の推計式はⅤ章の人の摂取量推計に示した式と同様であるが、水域への排出であるため、飲料水、淡水魚、海産魚からの摂取の推計式のみを用いる。また、人の体重や媒体別摂取量は排出源ごとの暴露シナリオと同じ値を用いる。

VI.2.1.6　水系の非点源シナリオにおける水生生物の暴露濃度推計

水生生物の評価では、河川水中の溶存態濃度を水生生物の暴露濃度、すなわち PEC とする。推計式は、既出の式 VI-1 を用いる。下水処理水の希釈率（式 VI-2 参照）は、人健康の評価では一級河川の長期平水流量[1]から設定したのに対し、水生生物の評価では長期低水

[1] 平水流量：流量の観測開始から欠測期間を除いた統計期間の「1 年を通じて 185 日はこれを下らない日流量」（国土交通省河川局編（2005）流量年表　第５５回（平成 14 年），日本河川協会.）

流量[1]から設定している。このようにした理由はⅤ章の水生生物の暴露濃度推計にも記載したように、人よりも寿命が短い水生生物への暴露期間を考慮するためである。

Ⅵ.2.1.7　水系の非点源シナリオにおける物質の分類に応じた扱い

本スキームの評価Ⅰでは、暴露評価を実施するときには、優先評価化学物質が 3 つの分類（「環境分配モデル適用物質（構造特定可能）」、「環境分配モデル適用物質（構造不定）」、「環境分配モデル適用外物質」）のどれに該当するかを識別し、それに対応する数理モデルや物理化学的性状を用いるものとしている（詳細はⅤ章の物質の分類に応じた暴露評価Ⅰでの扱いに関する記載を参照）。「環境分配モデル適用物質（構造特定可能）」の扱いはⅥ.2.1.6 までのとおりであるため、以下では「環境分配モデル適用物質（構造不定）」と「環境分配モデル適用外物質」について説明する。

(1) 環境分配モデル適用物質（構造不定）の暴露評価Ⅰ

① 排出量推計

排出係数の選択については、Ⅳ章の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で記載したとおりである。それ以外はⅥ.2.1.3 と同様である。

② 環境中濃度と人の摂取量の推計

ワーストデフォルト暴露量（詳細はⅤ章の環境分配モデル適用物質（構造不定）の暴露評価Ⅰに関する記載を参照）となる物理化学的性状[2]を用いて環境中濃度を推計する。水系の非点源シナリオで用いる物理化学的性状は、式 Ⅵ-1 で使う有機炭素補正土壌吸着係数だけである。なお、BCF は評価の準備段階のキースタディ選定によって選ばれた値を用いる。

③ 水生生物の暴露濃度推計

物理化学的性状は②と同じものを用い、推計式は式 Ⅵ-1 を用いる。

(2) 環境分配モデル適用外物質の暴露評価Ⅰ

① 排出量推計

Ⅵ.2.1.7 (1)①と同じ扱いとする。

---

[1] 低水流量：流量の観測開始から欠測期間を除いた統計期間の「1 年を通じて 275 日はこれを下らない日流量」（国土交通省河川局編（2005）流量年表　第５５回（平成 14 年），日本河川協会.）

[2] この物理化学的性状は大気経由の合計暴露量が最大になるように決めたものであるので水系の非点源シナリオに用いることは適切でないではないでない。ただ、有機炭素補正土壌吸着係数は非常に大きくない限り、河川水中の溶存態濃度の推計に大きな影響を及ぼさないため、評価Ⅰでは排出源ごとの暴露シナリオと同じ値を用いることにしている。

② 環境中濃度と人の摂取量の推計

希釈のみを考慮し懸濁粒子への吸着等は考慮しない。そのため、懸濁粒子への吸着補正項がない式 VI-2 を飲料水濃度、魚介類中濃度に用いる。なお、BCF は評価の準備段階のキースタディ選定によって選ばれた値を用いる。

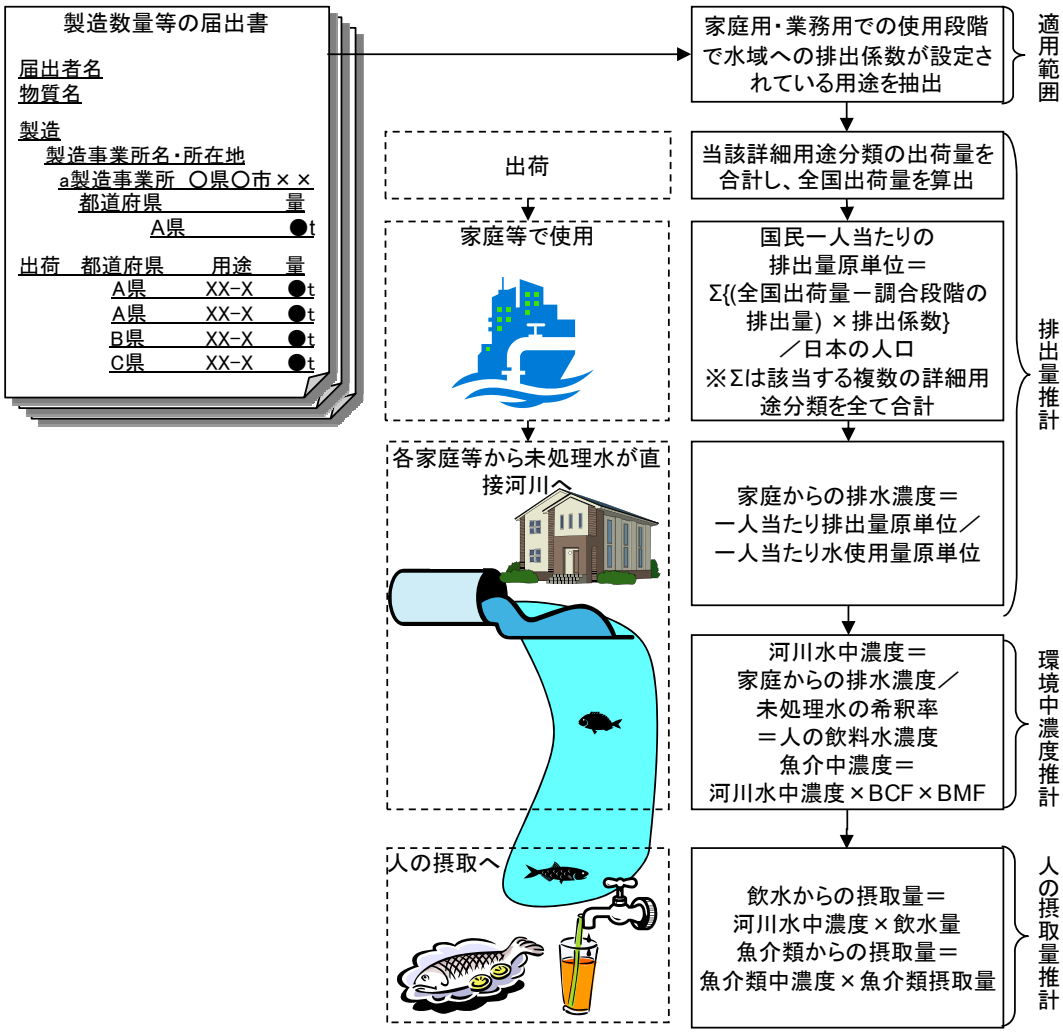
③ 水生生物の暴露濃度推計

②と同じく懸濁粒子への吸着補正項がない式 VI-2 を用いる。

VI.2.1.8　下水道の普及地域と未普及地域の比較

VI.2.1.2 でも述べたように評価 I では家庭等から使用された化学物質が下水道を通り、下水処理場から河川へ排出されるシナリオを設定する。しかし、全国には下水道や汚水処理設備が普及していない地域が存在する。スクリーニング評価においても下水処理場等の汚水処理が普及している割合（84.8%）と普及していない割合（15.2%）を用いて区別していた[1]。そのような地域では家庭等で使用された化学物質は特に汚水処理されることなく、直接、河川に排出されることになる。その場合に想定される暴露シナリオと環境中濃度推計と人の摂取量推計の手順を図表 VI-5 に示す。

[1] 経済産業省（2010）3.5（2）水域への排出量推計における考慮.『付属資料　スクリーニング評価手法の詳細(案）』平成 22 年 10 月 8 日, p.51.
(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/screening_detail.pdf)



図表 VI-5　下水道を経由しないで河川に直接排水するシナリオの流れ
（評価 I では対象としていないことに注意）

下水処理場を経由しないで河川に直接排出するシナリオの場合が、下水処理場を経由するシナリオの場合（VI.2.1.2 の図表 VI-4）と異なるのは、河川水中濃度を求める際に、下水処理場を経由しないために良分解性物質である場合でも下水処理場での除去率を乗じない点と、家庭等から河川へ直接排水のため希釈率が異なる点である。

まず、希釈率について整理する。

下水処理場を経由するシナリオの場合の希釈率（下水処理水の希釈率）は以下で定義される。

下水処理水の希釈率
＝下水処理場の排出濃度／河川水中濃度
＝(化学物質の質量／下水処理場の排出水量)／(化学物質の質量／河川流量)
＝河川流量／下水処理場の排出水量　　式 VI-3

同様に下水処理場を経由しないで河川に直接排出するシナリオの場合の希釈率（未処理水の希釈率）は以下で定義される。

未処理水の希釈率
＝家庭等からの排水濃度／河川水中濃度
＝(化学物質の質量／家庭等からの排出水量)／(化学物質の質量／河川流量)
＝河川流量／家庭等からの排出水量

式 VI-4

下水処理場の排出水量と家庭等からの排出水量を比べれば明らかに前者の方が大きい。仮に河川の流量が同じとすれば式 VI-3 と式 VI-4 から下水処理水の希釈率の方が小さいと考えられる。希釈率が小さいほど河川水中濃度は高くなるので、下水処理場での化学物質の除去を考慮しなければ、下水処理場を経由するシナリオの方が河川水中濃度は高く推計されることが予想される。しかし、良分解性物質の場合は、下水処理場での除去率として 0.67 を乗じることにより下水処理場を経由するシナリオの方が低く推計される可能性もある。また、下水道の普及地域と未普及地域で平均的な河川流量が異なる可能性もあり定性的な考察だけでは河川水中濃度の大小は不明である。

そこで、どちらのシナリオの河川中濃度が高く推定されるかを把握するため、具体的な希釈率の値を求めて比較した。下水処理水の希釈率には、流量年表の河川流量や下水道統計の下水処理量を基に算出された値を用いた[1]。未処理水の希釈率には、河川水中濃度を推計する数理モデルを用いて算出された値を用いた[2]。算出した希釈率を用いて比較検討した結果、下水処理場を経由するシナリオの方が河川水中濃度を高く推計することがわかった。比較結果の詳細は付属資料 VI.6.2.3 (2)を参照されたい。

なお、化学物質が河川に流入する地点の近傍（ただし完全混合した後の地点）を評価の対象地点と想定しているため、下水処理場からの排水と家庭等からの排水が混合することは、ここでは考慮していない。

以上の検討を踏まえ、評価Ⅰでは、多数の化学物質の評価を効率的に行うため、より安全側に評価できる下水処理場を経由して河川へ排出されるシナリオのみで暴露評価を行うこととした。なお、評価Ⅱ以降では、より詳細な暴露評価を行うため、下水処理場を経由しないシナリオも考慮する。[3]

---

[1] 製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター（2007）平成 18 年度　化学物質の暴露評価に資する河川等の希釈率等に関連する調査　報告書.
(http://www.safe.nite.go.jp/risk/pdf/h18fy_kasen_kisyakuritsu.pdf)

[2] 産業技術総合研究所 安全科学研究部門, 日水コン（2012）産総研－水系暴露解析モデル（AIST-SHANEL)を用いた河川流量および未処理水と放流水の河川希釈率に関する検討.
(http://www.aist-riss.jp/projects/AIST-SHANEL/paper/120528_kentou.pdf)

[3] 下水処理場の除去率が評価Ⅰと同じ値であっても、物理化学的性状や用途、有害性評価値を精査しリスク推計し直すことで、下水処理場を経由するシナリオでリスク懸念なしとなる場合がある。そのような場合は、下水処理場を経由するシナリオの方が安全側の評価であるため、下水処理場を経由しないシナリオの評価をわざわざ行う必要はないとも考えられる。

Ⅵ.2.2 水系の非点源シナリオの暴露評価Ⅱ

以下では水系の非点源シナリオの暴露評価Ⅱについて暴露評価Ⅰとの違いを中心に説明する。なお、評価Ⅱでは必要に応じて本シナリオを実施することになる[1]。

Ⅵ.2.2.1　暴露評価Ⅰとの違い

水系の非点源シナリオの排出量推計から人の摂取量を推計するまでの手法・手順は、基本的に Ⅵ.2.1 で示した暴露評価Ⅰと同じである。

暴露評価Ⅰと異なるのは、暴露関連の既存情報収集（Ⅴ章の暴露評価Ⅱで追加する情報等に関する記載を参照）によって情報が得られれば、以下のとおり評価Ⅰにおける設定を置き換え、暴露量を推計し直す点である。また、PRTR 情報が得られる場合は、下水処理場からの推計排出量を用いる。逆に言えば、これらの情報が得られなければ推計暴露量は評価Ⅰと同じである。

以下に暴露評価Ⅰと異なる部分について整理する。

■製造数量等の届出情報と PRTR 情報を適用する場合に共通する点

(ア) 有機炭素補正土壌吸着係数の採用値を精査し、変更した場合、数理モデルの入力データを置き換え、暴露量を推計し直す（Ⅵ.2.1.4 の式 Ⅵ-1 における懸濁粒子への吸着率に関係する）。

(イ) 評価Ⅰでは下水処理場を経由するシナリオに基づく暴露量のみを推計していたが、評価Ⅱでは、必要に応じて下水道未普及地域において家庭等から直接河川に排出するシナリオ（Ⅵ.2.1.8 図表 Ⅵ-5）に基づく暴露量も推計する。

(ウ) 評価Ⅰで用いた数理モデルよりも詳細な河川水中濃度モデル等[2]を必要に応じて用いて、評価ごとに 1 つの暴露量ではなく、全国のメッシュ（地図上の区画）ごとに暴露量を推計する。この場合は数理モデルにメッシュごとの排出量を入力する必要があり、家庭等での化学物質の使用量に比例すると考えられる統計情報（人口密度など）を用いて全国排出量をメッシュ単位に比例配分し、メッシュ単位の排出量を求める。この計算のことを「排出量をメッシュに割り振る」といい、用いる統計情報

---

[1] 評価Ⅰの本シナリオの結果がリスク懸念なしであった場合は、基本的には評価Ⅱで本シナリオを実施する必要がないと考えられる（ただし、用途分類「#98 その他」又は詳細用途分類「z その他」について、具体的用途が本シナリオの該当用途であると判明した場合（Ⅵ.2.2.1 (オ)参照）等、状況が変化すれば実施し直す必要がある）。

また、PRTR 情報等の地理的な情報を含む排出量情報が利用できる物質で、Ⅶ章の環境中濃度等の空間的分布の推計に用いられる環境多媒体モデル（G-CIEMS）によって包含される場合には、必ずしも本シナリオを実施する必要がないとも考えられる。

[2] 未処理水の希釈率検討（Ⅵ.2.1.8 参照）でも利用されていた SHANEL（正式名称：産総研－水系暴露解析モデル（AIST-SHANEL））などを使うことを想定している。このモデルでは全国 1 級 109 水系における 1 km メッシュ単位の月平均の化学物質の河川水中濃度を推計することができる。

を「割り振り指標」という。

■製造数量等の届出情報を適用する場合

(エ) 水溶解度の採用値を精査し、変更した場合（Ⅰ章を参照）、排出係数を選択し直す。排出係数に変更がある場合、排出量・暴露量を推計し直す。

(オ) 用途分類「#98 その他」又は詳細用途分類「z その他」について、具体的用途が得られた場合（Ⅳ章の製造数量等の届出情報における詳細用途の精査に関する記載を参照）、製造数量等の届出に付される詳細用途との対応付けを行い、本シナリオに該当する詳細用途であれば全国出荷数量と暴露量を推計し直す。

(カ) 分解性に係る新たな情報が得られた場合（例：分解度試験の情報がなく「難分解性」の扱いであったものについて分解度試験の情報が得られた等）、その情報を下水処理場経由での排出量推計に加味し、排出量・暴露量を推計し直す。

下水処理場での除去率に係るデータが得られた場合、下水処理場経由の排出量推計に加味する。下水処理場での除去率データが得られない場合、評価Ⅰにおけるデフォルトの除去率を、物質個別の物理化学的性状データを用いて、REACH 施行前の EU のリスク評価で用いられていた下水処理場モデル SimpleTreat[1]等で推測された値に置き換えて排出量推計に加味する（Ⅳ章の水系の非点源シナリオにおける排出量推計に関する記載を参照）。

■PRTR 情報を適用する場合

(キ) 下水処理場からの推計排出量が得られる場合（Ⅳ章の水系の非点源シナリオにおける排出量推計に関する記載を参照）、水域への排出量を利用し、必要に応じて前述の製造数量等の届出情報と同様に環境中濃度・暴露量を推計する。

VI.2.2.2　水系の非点源シナリオにおける水生生物及び底生生物の暴露濃度推計

水中濃度の推計に関しては暴露評価Ⅰの「VI.2.1.6 水系の非点源シナリオにおける水生生物の暴露濃度推計」と同様である。logPow が 3 以上の場合底質への残留が考えられるため、評価Ⅱでは底生生物も評価対象とし（Ⅲ章を参照）、この場合は、Ⅴ章の底質中濃度の推計に示す方法で式 VI-1 で求めた河川水中の溶存態濃度から底質中濃度(乾燥重量当たり)を推計する。

なお、これらに暴露評価Ⅱで追加する情報等を加味するのは「VI.2.2.1 暴露評価Ⅰとの違い」と同様である（ただし、人の暴露量推計に係る部分は除く）。

[1] RIVM (1996) SimpleTreat 3.0: a model to predict the distribution and elimination of chemicals by sewage treatment plants.

Ⅵ.2.2.3 水系の非点源シナリオにおける物質の分類に応じた暴露評価Ⅱの扱い

環境分配モデル適用物質（構造不定）や環境分配モデル適用外物質に分類された化学物質について、暴露評価Ⅱでは物質の性状を確認し個別に評価方法を検討するのは、排出源ごとの暴露シナリオの場合と同様である（Ⅴ章の環境分配モデル適用外物質の暴露評価Ⅱに関する記載を参照)。水系の非点源シナリオにおいて一般的な有機化合物とは異なる挙動をすることから、その暴露評価方法について検討が必要と考えられる物質の 1 つに、水中でイオンに解離する物質がある。このような物質に対しては、例えば、水中で想定される pH と評価対象物質の pKa の値により、物理化学的性状や環境中濃度推計式を必要に応じて補正して用いること等を検討する。

Ⅵ.2.3 水系の非点源シナリオの暴露評価Ⅲ

評価Ⅱで水系の非点源シナリオでリスク懸念があれば、評価Ⅲでは必要に応じて、該当する用途について化審法第 42 条に基づいた取扱いの状況に関する情報を取扱事業者に対して求めることになる。得られた情報をもとにメッシュ単位で暴露量を推計する場合は物質ごとに割り振り指標（Ⅵ.2.2(ウ)参照）を再度検討し、より妥当だと考えられる情報があればそれを用いてメッシュへの割り振りを行う。また、より詳細な用途に関する情報が産業界から得られた場合、水系の非点源シナリオを適用することが望ましいと考えられる用途があれば、その用途について水系の非点源シナリオの暴露評価Ⅲを行う。

Ⅵ.2.4 リスク評価（二次）における水系の非点源シナリオの暴露評価

この段階では、新たに得られた長期毒性情報を用いて、暴露要件該当性の確認を行うための再評価を行う。

リスク評価（二次）の有害性評価については、化審法第 10 条第 2 項の有害性調査指示に基づき事業者から報告された長期毒性に係る有害性情報を用いて有害性評価値を導出する。暴露評価については評価Ⅲと同様の方法を基本とするが、新たに情報が得られた場合には、それらを踏まえて、排出係数の見直しや暴露シナリオの見直しを行うなどの改善、精緻化を図ることにする。

Ⅵ.3 大気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

ここでは大気系の非点源シナリオについて適用範囲、暴露シナリオと暴露集団、排出量推計、環境中濃度の推計と人の摂取量推計等について順に説明する。

本項の詳細は付属資料 Ⅵ.6.3 を参照されたい。

Ⅵ.3.1.1 大気系の非点源シナリオの適用範囲

本シナリオを適用するか否かは製造数量等の届出情報から得られる詳細用途から判別する。該当する詳細用途は「家庭用・業務用での使用段階」のライフサイクルステージでの使用が想定されるものとなる。具体的には排出係数一覧表（Ⅳ章を参照）のうち、「家庭用・業務用での使用段階」で排出係数が設定[1]されている図表 Ⅵ-6 の詳細用途が対象となる。

図表 Ⅵ-6　大気系の非点源シナリオの対象となる詳細用途

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類
13	水系洗浄剤 2《家庭用・業務用の用途》	a※	石鹸、洗剤、ウインドウォシャー液（界面活性剤）
		b※	柔軟剤（界面活性剤）
		c※	無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤
		d※	ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（酵素、蛍光増白剤、紫外線吸収剤等）
		z※	その他
14	ワックス（床用、自動車用、皮革用等）	a※	ワックス
		b※	乳化剤、分散剤
		z※	その他
20	殺生物剤 3《家庭用・業務用の用途》	a	不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤）
		b	繊維用・紙用防虫剤
		c	シロアリ駆除剤、防蟻剤
		d	殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤、除菌剤
		e	非農耕地用除草剤
		f	展着剤、乳化剤
		z	その他
22	芳香剤、消臭剤	a※	香料（洗浄剤用）[#22-ｂ,c を除く]
		b	芳香剤
		c	消臭剤
		d	乳化剤、分散剤
		z	その他
47	燃料、燃料添加剤	a	燃料

[1] 大気への排出係数がゼロの場合も含む。つまり、この場合でも本シナリオが設定されており、その上で排出係数がゼロであると解釈する。

用途番号(#)	用途分類	詳細用途番号	詳細用途分類
		b	燃料添加剤（清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等）
		c	燃焼改良剤（燃焼促進剤、セタン価向上剤、アンチノック剤等）
		d	氷結防止剤、着臭剤
		z	その他

※　大気への排出係数はゼロである。

対象物質の出荷数量に対応する詳細用途が図表 VI-6 に該当すれば、製造段階、調合段階からの排出に対して適用した排出源ごとの暴露シナリオと並行して、その物質の家庭用・業務用での使用段階からの排出に対して本シナリオを適用し暴露評価 I を行う。なお、図表 VI-6 の詳細用途に関しては、工業的使用段階での使用は想定しておらず、排出係数を設定していない。

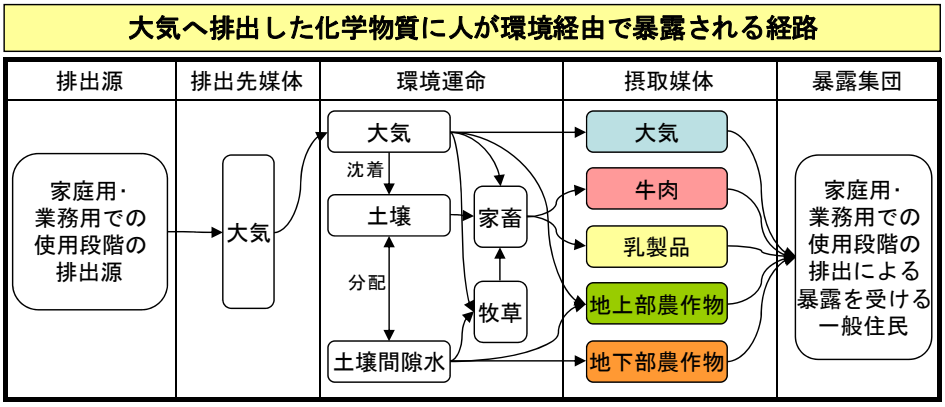
VI.3.1.2　大気系の非点源シナリオの暴露シナリオと暴露集団

本シナリオで仮定する暴露評価 I での暴露シナリオを図表 VI-7 に示す。ここでは、前述のとおり詳細用途が図表 VI-6 に該当する場合に、環境中濃度や摂取量を推計する。

想定する暴露集団については以下のとおりである。

排出源ごとの暴露シナリオにおいて、暴露集団は一般工業化学品の製造・調合・工業的使用段階の排出源周辺の集団とした。それに対し、ここでは家庭用・業務用での使用段階における非点源の排出源（家庭・オフィスや移動体等）から大気へ排出される化学物質に暴露する集団を設定する。環境運命や摂取媒体は排出源ごとの暴露シナリオと同じとする。

なお、排出源ごとの暴露シナリオと同じく、大気へ排出される化学物質に起因する生活環境動植物（水生生物と底生生物）の暴露は考慮していない。



図表 VI-7　大気系の非点源シナリオの暴露評価 I の全体の流れ

人に関して以下のような暴露集団を仮定する。

(ア) 家庭用・業務用での使用段階における大気への排出により汚染された大気を吸入する。
(イ) 家庭用・業務用での使用段階における大気への排出により暴露された農作物と畜産物を一定の割合で摂取する。
(ウ) 家庭用・業務用での使用段階における大気への排出に起因する暴露と、製造・調合・工業的使用段階の仮想的排出源に起因する暴露とは別々に評価することを仮定する。
(エ) 暴露期間は長期間（数十年～生涯）とする。
(オ) 空気吸入量、食物摂取量は一般的な成人を想定する。

Ⅵ.3.1.3 大気系の非点源シナリオの排出シナリオと排出量推計

大気系の非点源シナリオの排出シナリオでは、家庭用・業務用での用途で化学物質が日本のどの地域でどの程度の量が使用されるかを仮定する必要がある。ここでは、製造数量等の届出制度による出荷先都道府県を最終消費地とはみなさず、最終的には消費者（国民）全体に行き渡るとする。全国にどのように行き渡るかについては、統計情報をもとに推計する。推計手順の概要は以下のとおりである。

まず、家庭用・業務用での使用段階における大気への排出量を全国合計した排出量を求める。次に、全国排出量を人口等の割り振り指標を用いてメッシュ（地図上の区画）単位の排出量に案分する。割り振り指標とは、家庭用・業務用での使用段階における化学物質の使用量に比例すると考えられる統計情報のことである。この割り振り指標は用途に応じて設定しており、評価Ⅰでは図表 Ⅵ-8 のとおりである。また、メッシュ単位の排出量のうち、異なる用途で届けられている場合であっても同じ割り振り指標を用いたものは合算するものとする。したがって、評価Ⅰでは物質ごとに最大で 2 種類（人口と交通量）のメッシュ単位の排出量が求められる。

評価Ⅰでは割り振りに用いる指標に合わせて、メッシュサイズは 5km×5km メッシュとする[1]。なお、全国排出量を推計するまでの手順はⅣ章の大気系の非点源シナリオにおける排出量推計に関する箇所でより具体的に記載しているので参照されたい。

[1] メッシュへの割り振り係数（式 Ⅵ-5 参照）の算出には、産総研－曝露・リスク評価大気拡散モデル（AIST-ADMER）の Version2.5.0 に搭載されている人口及び交通量の各指標を用いて 5km グリッドの排出量を求める機能を用いたためである。付属資料 Ⅵ.6.3.3 参照。
産業技術総合研究所　安全科学研究部門　ADMER のホームページ
(http://www.aist-riss.jp/software/admer/ja/index_ja.html)

図表 Ⅵ-8　大気系の非点源シナリオで用いる割り振り指標

用途番号(#)	用途分類	割り振り指標
13	水系洗浄剤 2《家庭用･業務用の用途》※	人口
14	ワックス ※	人口
20	殺生物剤 3《家庭用・業務用の用途》	人口
22	芳香剤、消臭剤 ※※	人口
47	燃料、燃料添加剤	交通量

※どの詳細用途分類も大気への排出係数はゼロである。
※※詳細用途分類のうち詳細用途番号 a の大気への排出係数はゼロである。

以上の手順によりメッシュ単位の排出量が算出されるが、より効率的に評価を行うため、大気への全国排出量が単位排出量（1[kg/year]）である時のメッシュ単位の大気排出量をあらかじめ求めておく。これをメッシュへの割り振り係数と呼ぶこととする。下式のように、メッシュへの割り振り係数に大気への全国排出量を乗じることでメッシュ単位の大気排出量を推計するものとする。

メッシュ単位の大気排出量
＝大気への全国排出量×メッシュへの割り振り係数　　式 Ⅵ-5

メッシュ単位の大気排出量　：家庭用・業務用での使用段階の大気への排出量をメッシュ単位に割り振った値
[kg/year]

大気への全国排出量　：家庭用・業務用での使用段階の大気への排出量の全国合計値。なお、同じ割り振り指標を用いる用途は合算する。
[kg/year]

メッシュへの割り振り係数　：大気への全国排出量をメッシュ単位の排出量に換算する係数。係数は割り振り指標別に設定されている。
[無次元]（=[kg/year／(kg/year)]）

メッシュへの割り振り係数は全国のメッシュごとに異なる値をとるため、評価 I では、メッシュへの割り振り係数を大きい順に並べ替えて、パーセンタイル値が 100%ile（排出量が最大となるメッシュ）、95%ile、50%ile、5%ile となる 4 通りの値を代表値とみなしてデフォルト値として設定した。従ってメッシュ単位の大気排出量も 4 通りの値が推計されることになる。メッシュへの割り振り係数の導出方法や具体的な値は付属資料 Ⅵ.6.3.3 を参照。

VI.3.1.4 大気系の非点源シナリオの環境中濃度の推計

人が暴露する経路は、図表 VI-7 で前述したように排出源ごとの暴露シナリオの大気への排出による経路と同じとする。メッシュ単位の排出量を排出源ごとの暴露シナリオと同じ数理モデルに入力して環境中濃度を推計する。排出源ごとの暴露シナリオに用いる数理モデルの詳細はⅤ章の環境中濃度推計に関する記載を参照されたい。

排出源ごとの暴露シナリオでは、製造段階、調合段階、工業的使用段階の各事業所を想定した排出源（点源）を中心とする半径 1km から半径 10km まで 1km 刻みで 10 通りの評価エリアを設定し、評価エリア内の平均暴露量を推計している。それに対して、大気系の非点源シナリオでは家庭用・業務用での使用段階の排出という非点源（家庭・オフィスや移動体等が排出源となる）を想定しているため、点源周辺を対象とした排出源ごとの暴露シナリオの暴露評価手法とは本来異なるものであるが、評価Ⅰでは簡易に評価できるように排出源ごとの暴露シナリオ同様の数理モデルを用いることにした。この際、安全側の評価となるよう、評価エリア半径は最小設定値である 1km と設定する。

排出量を推計するメッシュサイズは 5km メッシュなので、計算上は 5km メッシュ内に存在する排出量が全てメッシュの中心に集まり、メッシュの中心に仮想的排出源を設定して半径 1km の評価エリア内の平均暴露量を推計するという仮定を置いていることになる。5km メッシュ（面積 25 km^2）内の排出量を、半径 1km の評価エリア（面積約 3.14 km^2）で評価するため、約 8 倍暴露量を安全側に推計していることになる。

VI.3.1.5 大気系の非点源シナリオにおける人の摂取量推計

人の摂取量の推計式はⅤ章の人の摂取量推計に示した式と同様であるが、大気への排出であるため、大気・農作物・肉類・乳製品からの摂取の推計式のみを用いる。また、人の体重や媒体別摂取量は排出源ごとの暴露シナリオと同じ値を用いる。

VI.3.1.6 大気系の非点源シナリオにおける物質の分類に応じた扱い

本スキームの評価Ⅰでは、暴露評価を実施するときには、優先評価化学物質が 3 つの分類（「環境分配モデル適用物質（構造特定可能）」、「環境分配モデル適用物質（構造不定）」、「環境分配モデル適用外物質」）のどれに該当するかを識別し、それに対応する数理モデルや物理化学的性状を用いるものとしている（詳細はⅤ章の物質の分類に応じた暴露評価Ⅰでの扱いに関する記載を参照）。「環境分配モデル適用物質（構造特定可能）」の扱いは VI.3.1.5 までのとおりであるため、以下では「環境分配モデル適用物質（構造不定）」と「環境分配モデル適用外物質」について説明する。

(1) 環境分配モデル適用物質（構造不定）の暴露評価Ⅰ

① 排出量推計

排出係数の選択については、Ⅳ章の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で記載したとおりである。それ以外は VI.3.1.3 と同様である。

② 環境中濃度と人の摂取量の推計

ワーストデフォルト暴露量（詳細はⅤ章の環境分配モデル適用物質（構造不定）の暴露評価Ⅰに関する記載を参照）となる物理化学的性状を用いて環境中濃度を推計する。

(2) 環境分配モデル適用外物質の暴露評価Ⅰ

① 排出量推計

VI.3.1.6 (1)①と同じ扱いとする。

② 環境中濃度と人の摂取量の推計

排出源ごとの暴露シナリオにおける環境分配モデル適用外物質の扱いと同じ（Ⅴ章の環境中濃度と人の摂取量の推計に関する記載を参照)。つまり、大気から土壌への沈着以降の経路を考えないで吸入暴露量のみ推計する。

VI.3.2 大気系の非点源シナリオの暴露評価Ⅱ

以下では大気系の非点源シナリオの暴露評価Ⅱについて暴露評価Ⅰとの違いを中心に説明する。評価Ⅱでは必要に応じて本シナリオを実施することになる[1]。

VI.3.2.1　暴露評価Ⅰとの違い

大気系の非点源シナリオの排出量推計から人の摂取量を推計するまでの手法・手順は、基本的に VI.3.1 で示した暴露評価Ⅰと同じである。

暴露評価Ⅰと異なるのは、暴露関連の既存情報収集（Ⅴ章の暴露評価Ⅱで追加する情報等に関する記載を参照）によって情報が得られれば、以下のとおり評価Ⅰにおける設定を置き換え、暴露量を推計し直す点である。逆に言えば、これらの情報が得られなければ推計暴露量は評価Ⅰと同じである。

---

[1] 評価Ⅰの本シナリオの結果がリスク懸念なしであった場合は、基本的には評価Ⅱで本シナリオを実施する必要がないと考えられる（ただし、用途分類「#98 その他」又は詳細用途分類「z その他」について、具体的用途が本シナリオの該当用途であると判明した場合（VI.3.2.1 (エ)参照）等、状況が変化すれば実施し直す必要がある）。
　また、PRTR 情報等の地理的な情報を含む排出量情報が利用できる物質で、Ⅶ章の環境中濃度等の空間的分布の推計に用いられる環境多媒体モデル P（G-CIEMS）によって包含される場合には、必ずしも本シナリオを実施する必要がないとも考えられる。

以下に暴露評価Ⅰと異なる部分について整理する。

■製造数量等の届出情報と PRTR 情報を適用する場合に共通する点

(ア) 物理化学的性状の採用値を精査し、変更した場合、数理モデルの入力データを置き換え、暴露量を推計し直す。

(イ) 評価Ⅰで用いた数理モデルよりも詳細な大気中濃度モデル等[1]を必要に応じて用いて、全国のメッシュ（地図上の区画）ごとに暴露量を推計する。

■製造数量等の届出情報を適用する場合

(ウ) 蒸気圧の採用値を精査し、変更した場合（Ⅰ章を参照）、排出係数を選択し直す。排出係数に変更がある場合、排出量・暴露量を推計し直す。

(エ) 用途分類「#98 その他」又は詳細用途分類「z その他」について、具体的用途が得られた場合（Ⅳ章の製造数量等の届出情報における詳細用途の精査に関する記載を参照）、製造数量等の届出に付される詳細用途との対応付けを行い、本シナリオに該当する用途であれば全国出荷数量と暴露量を推計し直す。

■PRTR 情報を適用する場合

(オ) PRTR 届出外データにおいて、大気系の非点源シナリオに対応する家庭や移動体等からの排出について、一部の物質については国による推計が行われている。これらの PRTR 届出外推計排出量を当該シナリオの排出量として利用する（Ⅳ章を参照）。PRTR 届出外推計排出量を利用する場合は、大気への排出量を全国合計し、それを用いて、製造数量等の届出情報と同様に、人口等の統計情報を指標にしてメッシュ単位に割り振り、割り振った排出量を用いて暴露評価を行う。

VI.3.2.2 大気系の非点源シナリオにおける環境中濃度の推計と人の摂取量推計

環境中の濃度の推計と人の摂取量推計は、暴露評価Ⅰと基本的に同様である（「VI.3.1.4 大気系の非点源シナリオの環境中濃度の推計」、「VI.3.1.5 大気系の非点源シナリオにおける人の摂取量推計」参照）。なお、これらに暴露評価Ⅱで追加する情報等を加味するのは「VI.3.2.1 暴露評価Ⅰとの違い」と同様である。

[1] 具体的には ADMER（正式名称：産総研－曝露・リスク評価大気拡散モデル（AIST-ADMER））などを使うことを想定している。暴露評価Ⅰでは ADMER に搭載されている指標のデータと排出量の割り振り機能を利用してメッシュ単位の割り振り係数を導出し、環境中濃度の推計には排出源ごとの暴露シナリオの数理モデルを使っていた。暴露評価Ⅱでは直接 ADMER を使い大気中濃度を推計することも必要に応じて検討する。

Ⅵ.3.2.3 大気系の非点源シナリオにおける物質の分類に応じた暴露評価Ⅱの扱い

環境分配モデル適用物質（構造不定）や環境分配モデル適用外物質に分類された化学物質について、暴露評価Ⅱでは物質の性状を確認し個別に評価方法を検討するのは、排出源ごとの暴露シナリオの場合と同様である（Ⅴ章の環境分配モデル適用外物質の暴露評価Ⅱに関する記載を参照)。

Ⅵ.3.3 大気系の非点源シナリオの暴露評価Ⅲ

評価Ⅱで大気系の非点源シナリオでリスク懸念があれば、評価Ⅲでは必要に応じて、該当する用途について化審法第 42 条に基づいた取扱いの状況に関する情報を取扱事業者から集めることになる。得られた情報をもとに物質ごとに割り振り指標を再度検討し、より妥当だと考えられる情報があればそれを用いてメッシュへの割り振りを行う。また、より詳細な用途に関する情報が取扱事業者から得られた場合、大気系の非点源シナリオを適用することが望ましいと考えられる用途があれば、その用途について大気系の非点源シナリオの暴露評価Ⅲを行う。

Ⅵ.3.4 リスク評価（二次）における大気系の非点源シナリオの暴露評価

この段階では、新たに得られた長期毒性情報を用いて、暴露要件該当性の確認を行うための再評価を行う。

リスク評価（二次）の有害性評価については、化審法第 10 条第 2 項の有害性調査指示に基づき事業者から報告された長期毒性に係る有害性情報を用いて有害性評価値を導出することとし、暴露評価については評価Ⅲと同様の方法を基本とするが、新たに情報が得られた場合には、それらを踏まえて、排出係数の見直しや暴露シナリオの見直しを行うなどの改善、精緻化を図ることにする。

Ⅵ.4 地下水汚染の可能性シナリオ

本スキームでは以下のような経緯・考え方により、暴露評価Ⅱでは地下水汚染の可能性について評価を行い、必要に応じ人の健康に係る評価Ⅱのリスク評価書等の中で地下水汚染監視の必要性等に係る提言に繋げるものとする。ここでの評価は物質間の相対比較であり、暴露量の算出やリスク推計を行うものではない。

本節に係る詳細は付属資料 Ⅵ.6.4 に記載している。

Ⅵ.4.1 経緯と考え方

第二種特定化学物質の中には、地下水汚染が契機となって指定されたものがある。これは、昭和 50 年代後半から有機塩素系溶剤などによる地下水汚染が社会問題化し、昭和 61 年に化審法が改正され、第二種特定化学物質、指定化学物質の枠組みが創設された経緯とつながっている[1]。

一方、これまでの PRTR 届出データを概観すると、地下水汚染の原因になると想定される化学物質の土壌への排出は、大気への排出や水域への排出に比べて特定の物質・用途・業種に限られているなど特殊な場合と考えられる。このため、すべての優先評価化学物質について「土壌へ排出され地下水へ移行し、地下水を飲料水として摂取する」という土壌排出のシナリオを設定するのは、化学物質の使用等の実態とかけ離れるおそれがある。また、過去の地下水汚染問題以降は、化審法以外にも、地下水質汚濁の防止のため水質汚濁防止法において地下への水の浸透に対する制限や排水基準が設けられるなど、法整備が進んでいる。

以上のことから、優先評価化学物質(人健康)の評価Ⅱ対象物質に対して、用途や物質の性状が特定の分類に当てはまる場合に限り、土壌へ優先評価化学物質(人健康)が排出される場合を仮定し、モデル推計により地下水への移行し易さについて相対的な評価を行うことにする。

Ⅵ.4.2 適用範囲

本評価は環境分配モデル適用物質（環境媒体間の分配の予測に必要な物理化学的性状が測定もしくは推計可能な化学物質。Ⅴ章参照）を対象に適用する。さらに、本評価を適用するか否かは用途と logKoc から判別する。

該当する用途は洗浄溶剤や作動油等の事業所等における工程内で使用される用途と、建

[1] 第 1 回厚生科学審議会化学物質制度改正検討部会　化学物質審査規制制度の見直しに関する専門委員会　議事録　平成 14 年 10 月 28 日
http://www.mhlw.go.jp/shingi/2002/10/dl/s1028-11a.pdf

築現場等で使用される接着剤、凍結防止剤等の屋外で使用される用途とする。これらは、過去の地下水汚染、土壌汚染もしくは土壌排出についての各種の公的機関の報告を調査・整理して抽出・設定した。この調査や設定の経緯と、具体的に用途分類表の中のいずれが該当するかは、付属資料 VI.6.4.1 を参照されたい。

logKoc は、化学物質の土壌中の固相への吸着しやすさの目安となる。logKoc は E-FAST[1] における地下水汚染の尺度に使われていることから、これを適用することにした。E-FAST では、仮想的な化学物質の地下水汚染のシミュレーションに基づき[2]、logKoc が 4.5 以上では「地下水に移行する可能性がほとんどない」と類別している。

以上より、優先評価化学物質ごとの用途分類・詳細用途分類が上記に該当し、logKoc が 4.5 未満であれば、次の VI.4.3 に示す手法で評価を行う。

VI.4.3 手法の概念

地下水汚染の可能性は、土壌に優先評価化学物質が排出された場合を仮定し、その土壌間隙水中濃度をモデル推計し、その濃度を複数の物質間で相対化し順位を付けるものとする。順位が高い優先評価化学物質は、地下水汚染の可能性が相対的に高いとみなす。

地下水中濃度ではなく土壌間隙水中濃度を推計するのは、以下の理由による。環境基本法に基づく地下水の水質汚濁に係る環境基準と土壌環境基準（溶出基準項目）、土壌汚染対策法の指定基準値[3]、水道法の水道水質基準は、いずれも項目がほぼ同じであり、項目別の基準濃度が同じである。これは、「土壌間隙水中濃度≧溶出水中濃度≧地下水質」であるとして、土壌間隙水中濃度で地下水質の指標とするのは妥当という考え方に基づいていると考えられる。これら地下水質に関連する各種基準値設定の考え方より、本スキームにおいても土壌間隙水中濃度を地下水質の指標とすることにした[4]。

土壌間隙水中濃度はⅤ章の「排出源ごとの暴露シナリオ」に示した手法に準じて推計する。ここで、土壌への化学物質の投入量は大気からの沈着ではなく、VI.4.2 で前述した該当用途に係る出荷数量から求めるものとする。ただし、地下水汚染に繋がると想定される

[1] E-FAST（Exposure and Fate Assessment Screening Tool）：U.S. EPA で TSCA の新規化学物質の上市前届出(PMN)の審査において使用されている暴露・リスク評価システムで、複数の濃度推計モデルを搭載している。以下は E-FAST のマニュアルのサイト。
http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/efast2man.pdf

[2] General Sciences Corporation (1987) Groundwater Scenarios for Screening Level Assessments of Compounds Released to Land. Report prepared for U.S. EPA, Office of Toxic Substances. EPA Contract No. 68-02-3970.
http://www.epa.gov/opptintr/exposure/presentations/efast/gsc_1987_groundwater_scenarios_for_screening.pdf

[3] 環境省 第６回土壌環境施策に関するあり方懇談会資料、指定基準値の設定の考え方、平成 20 年 1 月.　http://www.env.go.jp/water/dojo/sesaku_kondan/06/mat02.pdf

[4] EU-TGD においても、地下水濃度として土壌間隙水中濃度を推計している。
ECB (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. Part II. 2.3.8.6 Calculation of concentration in groundwater.

土壌への排出について、「化学物質の排出係数一覧表」では排出係数を設定していない[1]ため、（Ⅳ章「排出量推計」参照）、大気と水域への排出係数の合計値を「環境への排出されやすさ」の指標として代替させるものとした。この方法による土壌間隙水中濃度は絶対値としての意味はなく、物質間で比較するための相対値である。

土壌間隙水中濃度の推計手法の詳細は付属資料 VI.6.4.3 を参照されたい。

[1] EU-TGD の A-table には土壌への排出係数の設定があるものの、日本においてはこれまでの PRTR 情報等の概観から土壌への排出はきわめて限定的であること、PRTR 情報以外には日本での排出実態の情報がなく A-table の排出係数の裏付けが不可能であるという、二つの理由からである。

Ⅵ.5 船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ

Ⅵ.5.1　評価Ⅰ

船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオは評価Ⅰでは下記のような扱いとなる。評価Ⅰでは長期使用製品の使用段階での推計排出量の算出方法はⅣ章を参照されたい。

図表 Ⅵ-9　評価Ⅰでの船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ

対応する主な用途	対応するﾗｲﾌｻｲｸﾙｽﾃｰｼﾞ	概要
･船底塗料用防汚剤 ･漁網用防汚剤	長期使用製品の使用段階	船底塗料用防汚剤や漁網用防汚剤は、長期使用製品の使用段階において海域へ排出されることから別シナリオで扱う。評価Ⅰでは該当用途の長期使用製品の使用段階の推計排出量で順位付けを行う。

Ⅵ.5.2 評価Ⅱ

船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオは評価Ⅱでは下記のような扱いとなる。海域中濃度の推計には OECD の ESD でも船底塗料用防汚剤の環境中濃度推計として推奨されている数理モデル MAMPEC を用いる。詳細な手法は現在検討しているところである。

図表 Ⅵ-10　評価Ⅱでの船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ

主に対応する用途	主に対応するライフサイクルステージ	概要
･船底塗料用防汚剤 ･漁網用防汚剤	長期使用製品の使用段階	船底塗料用、漁網用の防汚剤が船底塗膜や漁網から海域に排出されることを想定し、評価Ⅱでは該当用途の全国出荷数量から代表的な日本の使用場所（海域）における排出量を算出し、海域中濃度を推計する。

Ⅵ.6 付属資料

Ⅵ.6.1 はじめに

この付属資料では、「用途等に応じた暴露シナリオ」における暴露評価で環境中濃度や人摂取量を推計するために使用する数理モデルに関して、具体的な数式やパラメーター式、それらの数式やパラメータを選択した経緯等を収載する。

本編（Ⅵ.4 までのこと）には数理モデルの概要をなるべく数式を使わない形で記載していたが、この付属資料では数式を用いて数理モデルを正確な形で記載している。

必要に応じて本編と同じ説明を繰り返している箇所もあるが、全ての内容を再度説明しているわけではない。読者が本編の該当箇所に目を通していることを前提にして記載している点に留意されたい。

Ⅵ.6.2 水系の非点源シナリオ

Ⅵ.6.2.1 水域濃度・魚介類中濃度・底質中濃度の推計

本編の Ⅵ.2 に対応しており、水系の非点源シナリオにおいて、2 つの区分（河川水と海水）の水域中濃度を全国一律に原単位ベースで推計する方法について、具体的な数式やパラメータを示す。なお、評価Ⅱ以降ではメッシュ単位で全国の河川水中濃度を推計するモデル（産総研－水系暴露解析モデル（AIST-SHANEL））等を必要に応じて用いるが、そちらの詳細は関連文献等[1]を参照されたい。

- 河川水中濃度
- 海水中濃度
- 魚介類（淡水域）中濃度
- 魚介類（海水域）中濃度
- 底質中濃度

これらの濃度を推計するために、以下の数値が入力値となる。

- 水域への排出量　　（排出量推計（Ⅳ章）により全国排出量を推計）
- 化学物質の物理化学的性状　　（有機炭素補正土壌吸着係数、（場合によってはlogPow、

[1] 石川百合子，東海明宏（2006）「河川流域における化学物質リスク評価のための産総研-水系暴露解析モデルの開発」水環境学会誌, 29(12), 797-807.
産業技術総合研究所安全科学研究部門 AIST-SHANEL のホームページ
(http://www.aist-riss.jp/projects/AIST-SHANEL/index.html)

ヘンリー係数も必要）[1)]

・ 魚類への生物濃縮係数　（評価の準備（Ⅰ章）で収集するデータ）

(1) 河川水中濃度（人の健康に係る評価）

以下に、人の健康に係る評価で用いる家庭等での使用段階からの排出による河川水中濃度の推計式を示す。評価Ⅰでは下水処理場を経由して河川へ排出されるシナリオを考える。下水処理場からの排出先は河川を想定し、この河川での希釈についてはデフォルト値を設定する。式 VI-8 によって溶存態と懸濁粒子への吸着態の分配を考慮し、飲料水濃度と魚への濃縮の計算には溶存態濃度を用いる。

$$C_{river_domest_man} = \frac{TEMW_{domest_total} \times 10^6 [kg \rightarrow mg]}{D_{year} \times N_{total} \times VL \times 1000 \left[m^3 \rightarrow L\right]} \times (1 - STR) \times \frac{1}{DILUTION_{domest_man}}$$ 式 VI-6

$$C_{sea_domest_man} = \frac{C_{river_domest_man}}{DILUTION_{sea}}$$ 式 VI-7

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{river_domest_man}$	家庭等からの排出による河川水中濃度（人評価用）	[mg/L]		E-FAST[2], 3.2.2.3 式 3-21
$C_{sea_domest_man}$	家庭等からの排出による海域濃度（人評価用）	[mg/L]		
$TEMW_{domest_total}$	家庭等からの全国排出量	[kg/year]		VI.2.1.3
D_{year}	年間日数	[day/year]	365	
N_{total}	国内総人口	[人]	127,770,000	総務省統計局[3]
$DILUTION_{domest_man}$	下水処理水の希釈率（人評価用）	—	10※1	報告書[4]、VI.6.2.3
VL	生活排水量	[m³/人/day]	0.3	日本下水道協会[5]
STR	下水処理場での除去率	—	0 又は 0.67、又は個別の値※2	VI.2.1.3
$DILUTION_{sea}$	海域希釈率	—	10	小谷ら[6]

[1] 評価Ⅱで SimpleTreat を用いて下水処理場での除去率を推計する場合
[2] US. EPA (2007) Exposure and Fate Assessment Screening Tool (E-FAST) Version 2.0 Documentation Manual. (http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/efast2man.pdf)
[3] 総務省統計局（2007）平成 18 年 10 月 1 日現在総人口. (http://www.e-stat.go.jp/SG1/estat/List.do?lid=000001010879)
[4] 製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター（2007）平成 18 年度化学物質の暴露評価に資する河川等の希釈率等に関連する調査報告書.
[5] 日本下水道協会（1999）流域別下水道整備総合計画調査「指針と解説」，建設省監修
[6] 小谷憲雄，平井祐介，常見知広，高久正昭，松崎寿，飛松潤，佐渡友秀夫，横山泰一

※1　評価Ⅱで下水処理場を経由しないシナリオで評価する場合は、未処理水の希釈率の値を用いる((2)VI.6.2.3 (2))。
※2　評価Ⅰでは良分解性の物質では 0.67、難分解性又は分解性が不明の物質では 0 とする。評価Ⅱでは、実測値又は下水処理場モデル SimpleTreat[1]等での推計値が得られれば、それを用いる。また、評価Ⅱで下水処理場を経由しないシナリオで評価する場合は 0 とする。

$$C_{waterbody_domest_man_ww} = C_{waterbody_domest_man} \times (1 - fwp_{waterbody})$$ 式 VI-8

記号※1	説明※2	単位	値	出典・参照先
$C_{waterbody_domest_man_ww}$	家庭等からの排出による水域の溶存態濃度（人評価用）※3	[mg/L]		
$C_{waterbody_domest_man}$	家庭等からの排出による水域濃度（人評価用）	[mg/L]		式 VI-6
$fwp_{waterbody}$	懸濁粒子への吸着率（水域）	—		V.7.3.5(1)

※1　waterbody：river もしくは sea
※2　水域：河川もしくは海域
※3　化学物質の水溶解度を超えた場合は水溶解度を用いる。

$$C_{domest_dwater} = C_{river_domest_man_ww}$$ 式 VI-9

記号	説明	単位	値	出典・参照先
C_{domest_dwater}	家庭等からの排出による飲料水濃度	[mg/L]		
$C_{river_domest_man_ww}$	家庭等からの排出による河川水中の溶存態濃度（人評価用）	[mg/L]		式 VI-8

(2) 魚介類中濃度

水域へ排出された化学物質が河川に生息する魚へ濃縮する場合と、海域に生息する魚へ濃縮する場合のシナリオを想定し、排出源ごとの暴露シナリオと同様の式を用いて魚介類中濃度の推計を行う。

$$C_{domest_fish_fresh} = C_{river_domest_man_ww} \times BCF \times BMF$$ 式 VI-10

$$C_{domest_fish_sea} = C_{sea_domest_man_ww} \times BCF \times BMF$$ 式 VI-11

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{domest_fish_fresh}$	家庭等からの排出による魚介類中濃度（淡水域）	[mg/kg]		REACH-TGD　Chapter R.16.6.7.2.式(R.16-70)

(2006) 「化学物質の初期リスク評価手法の開発（１）－PRTR データを活用した暴露評価手法の開発―,」 環境化学, 16(1), 1-17.

[1] RIVM (1996) SimpleTreat 3.0: a model to predict the distribution and elimination of chemicals by sewage treatment plants.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{river_domest_man_ww}$	家庭等からの排出による河川水中の溶存態濃度（人評価用）	[mg/L]		式 VI-8
$C_{sea_domest_man_ww}$	家庭等からの排出による海域の溶存態濃度（人評価用）	[mg/L]		式 VI-8
BCF	生物濃縮係数	[L/kg]		化学物質情報
BMF	生物蓄積係数	[―]		V.7.3.5(2)
$C_{domest_fish_sea}$	家庭等からの排出による魚介類中濃度（海水域）	[mg/kg]		

(3) 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では、水生生物及び底生生物を評価対象として、排出源近傍の水域（河川または海域）における化学物質濃度を推計して評価を行う。

① 水生生物の暴露濃度推計

以下に水生生物の評価で用いる家庭等での使用段階からの排出による河川水中濃度の推計式を示す。下水処理場での除去率の扱いは人の健康に係る評価と同様である。人の健康に係る評価との相違点は下水処理水の希釈率の値である。

$$C_{river_domest_env} = \frac{TEMW_{domest_total} \times 10^6 [kg \rightarrow mg]}{D_{year} \times N_{total} \times VL \times 1000 [m^3 \rightarrow L]} \times (1 - STR) \times \frac{1}{DILUTION_{domest_env}}$$ 式 VI-12

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{river_domest_env}$	家庭等からの排出による河川水中濃度（生態評価用）	[mg/L]		E-FAST[1], 3.2.2.3 式 3-21
$TEMW_{domest_total}$	家庭等からの全国排出量	[kg/year]		VI.2.1.3
D_{year}	年間日数	[day/year]	365	
N_{tatal}	国内総人口	[人]	127,770,000	総務省統計局[2]
$DILUTION_{domest_env}$	下水処理水の希釈率（生態評価用）	―	7※1	報告書[3]

[1] US. EPA (2007) Exposure and Fate Assessment Screening Tool (E-FAST) Version 2.0 Documentation Manual. (http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/efast2man.pdf)
[2] 総務省統計局（2007）平成 18 年 10 月 1 日現在総人口. (http://www.e-stat.go.jp/SG1/estat/List.do?lid=000001010879)
[3] 製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター（2007）平成 18 年度　化学物質の暴露評価に資する河川等の希釈率等に関連する調査　報告書.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
VL	生活排水量	[m³/人/day]	0.3	日本下水道協会[1]
STR	下水処理場での除去率	—	0 又は 0.67、又は個別の値※2	VI.2.1.3

※1　評価Ⅱで下水処理場を経由しないシナリオで評価する場合は、未処理水の希釈率の値を用いる（VI.6.2.3 (2)）。
※2　評価Ⅰでは良分解性の物質で 0.67、難分解性又は分解性が不明の物質で 0 とする。評価Ⅱでは、実測値又は下水処理場モデル SimpleTreat[2]等での推計値が得られれば、それを用いる。また、評価Ⅱで下水処理場を経由しないシナリオで評価する場合は 0 とする。

$$C_{river_domest_env_ww} = C_{river_domest_env} \times (1 - fwp_{river})$$ 式 VI-13

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{river_domest_env_ww}$	家庭等からの排出による河川水中の溶存態濃度（生態評価用）	[mg/L]		
$C_{river_domest_env}$	家庭等からの排出による河川水中濃度（生態評価用）	[mg/L]		式 VI-12
fwp_{river}	懸濁粒子への吸着率（河川）	—		V.7.3.5(1)

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以降で考慮する。logPow が 3 以上の物質は底質に残留しやすいと判定し、評価Ⅱ以降で底生生物の評価を行うこととする。排出源ごとの暴露シナリオと同様の式を用いて河川の底質中濃度を推計する。

底質中濃度（湿潤重量当たり）は以下の式で推計される。

$$C_{domest_sed_wet} = \frac{K_{susp-water}}{RHO_{susp}} \times C_{river_domest_env_ww} \times 1000$$ 式 VI-14

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{domest_sed_wet}$	家庭等からの排出による底質中濃度（湿潤重量当たり）	[mg/kg]		REACH-TGD Chapter R.16.6.6.3.式(R.16-35)
$K_{susp\text{-}water}$	懸濁物質-水分配係数	—		式 VI-15
RHO_{susp}	懸濁物質のバルク密度	[kg/m³]	1150	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. 式 (R.16-16) で計算した値
$C_{river_domest_env_ww}$	家庭等からの排出による河川水中の溶存態濃度（生態評価用）	[mg/L]		式 VI-13

$$K_{susp-water} = Fwater_{susp} + Fsolid_{susp} \times \frac{FOC_{susp} \times Koc}{1000} \times RHO_{solid}$$ 式 VI-15

[1] 日本下水道協会（1999）流域別下水道整備総合計画調査「指針と解説」，建設省監修.
[2] RIVM (1996) SimpleTreat 3.0: a model to predict the distribution and elimination of chemicals by sewage treatment plants.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{susp\text{-}water}$	懸濁物質-水分配係数	—		REACH-TGD Chapter R.16.5.3.3.式(R.16-7)
$Fwater_{susp}$	懸濁物質中の水の容積比率	—	0.9	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9
$Fsolid_{susp}$	懸濁物質中の懸濁粒子の容積比率	—	0.1	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9
FOC_{susp}	懸濁物質中の懸濁粒子に対する有機炭素比率	—	0.1	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]		化学物質情報
RHO_{solid}	懸濁粒子の密度	[kg/m^3]	2500	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9

PNEC$_{sed}$ が乾燥重量当たりの濃度で表されるため（V 章参照）、底質中濃度も乾燥重量当たりの濃度に換算し、これを実際の評価（PNEC$_{sed}$ との比較）に用いる。

$$C_{domest_sed_dry} = C_{domest_sed_wet} \times conv_{susp}$$ 式 VI-16

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$C_{domest_sed_dry}$	家庭等からの排出による底質中濃度（乾燥重量当たり）	[mg/kg]		EUSES III.4.1.2.を参考
$C_{domest_sed_wet}$	家庭等からの排出による底質中濃度（湿潤重量当たり）	[mg/kg]		式 VI-14
$conv_{susp}$	懸濁物質中の濃度の換算係数(湿潤重量→乾燥重量)	—		式 VI-17

$$conv_{susp} = \frac{RHO_{susp}}{Fsolid_{susp} \times RHO_{solid}}$$ 式 VI-17

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$conv_{susp}$	懸濁物質中の濃度の換算係数(湿潤重量→乾燥重量)	—		EUSES III.4.1.2.式(622)
RHO_{susp}	懸濁物質のバルク密度	[kg/m^3]	1150	REACH-TGD Chapter R.16.6.4.式(R.16-16)で計算した値
$Fsolid_{susp}$	懸濁物質中の懸濁粒子の容積比率	—	0.1	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9
RHO_{solid}	懸濁粒子の密度	[kg/m^3]	2500	REACH-TGD Chapter R.16.6.4. Table R.16-9

VI.6.2.2 人の暴露量の推計

人の暴露量の推計では、V 章の人の摂取量推計と同じ式を用いて、飲料水（式 VI-9）、淡水魚（式 VI-10）、海産魚（式 VI-11）のみから摂取すると仮定する。人の体重や媒体別摂取量は、V 章の暴露量の推計に用いる食品摂取量等に関する記載と同じ値を用いる。

Ⅵ.6.2.3 水系の非点源シナリオにおける推計式等の経緯

(1) 下水処理水の希釈率

下水処理水の希釈率（式 Ⅵ-6 の $DILUTION_{domest_man}$ 又は式 Ⅵ-12 の $DILUTION_{domest_env}$）の設定方法について、以下では利用した報告書[1]を基に説明する。

① 人健康評価

人健康評価に用いる下水処理水の希釈率（＝下水処理場から最も近い流量測定地点の平水流量／晴天時の日平均下水放流水量）は、下水処理場からの放流水が河川で何倍に希釈されるかという倍率であり、本スキームでは河川の流量としては平水流量を用いている。報告書では、下水処理場から最も近い地点の定義については、下水処理場の位置と流量測定地点の距離が緯度経度±2 分以内、緯度経度±1 分以内、2km 以内、5km 以内、10km 以内、15km 以内の 6 つの場合が検討されており、暴露評価において過小評価しないように、希釈率として 5%ile、10%ile に着目したとき、小さい希釈率となった緯度経度±2 分以内のデータが提案されている（図表 Ⅵ-11 参照）。本スキームにおける人健康評価に用いる下水処理水の希釈率『10』は、5%ile『10.8』の少数第一位を切り捨てた値である（図表 Ⅵ-11 参照）。

[1] 製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター（2007）平成 18 年度　化学物質の暴露評価に資する河川等の希釈率等に関連する調査　報告書
(http://www.safe.nite.go.jp/risk/pdf/h18fy_kasen_kisyakuritsu.pdf)

図表 Ⅵ-11 下水道業における希釈率のパーセンタイル値：流量年表の河川流量（平水流量ベース）の統計値

ﾊﾟｰｾﾝﾀｲﾙ	緯度経度 ±2 分以内	緯度経度 ±1 分以内	2km 以内	5km 以内	10km 以内	15km 以内
0%	1.3	2.3	2.3	1.3	1.3	1.3
1%	2.3	2.4	2.4	2.3	2.4	2.9
2%	3.4	2.6	2.6	7.4	7.3	7.4
3%	8.6	6.0	6.0	9.3	8.8	9.6
4%	9.4	9.2	9.2	11.3	12.1	12.1
5%	10.8	10.8	10.8	12.5	16.1	14.9
6%	12.1	12.6	12.6	19.6	19.1	18.8
7%	16.0	16.1	16.1	24.7	23.2	21.0
8%	19.8	20.1	20.1	25.8	25.7	25.9
9%	23.9	26.9	26.9	27.7	27.8	31.5
10%	25.6	32.5	32.5	32.4	33.6	34.6
11%	26.0	33.7	33.7	34.0	38.1	40.5
12%	32.0	35.4	35.4	41.3	42.9	43.6
13%	34.8	39.2	39.2	49.9	47.3	51.3
14%	43.8	45.6	45.6	56.8	52.8	57.1
15%	59.9	58.8	58.8	67.1	58.5	67.6
20%	77.7	82.6	101.8	82.0	99.6	102.5
25%	111.0	106.6	118.5	113.5	144.9	167.2
30%	149.1	154.3	190.9	157.7	212.4	248.4
35%	245.3	253.0	266.8	228.3	288.2	321.9
40%	300.9	304.2	339.3	306.1	438.7	536.7
45%	460.0	395.7	412.2	462.1	661.2	799.2
50%	684.9	474.4	578.0	693.3	831.5	1,042.3
55%	832.5	688.3	766.8	892.8	1,101.6	1,308.6
60%	1,011.6	836.1	904.3	1,197.9	1,502.9	1,763.3
65%	1,365.3	953.5	988.8	1,627.2	1,978.1	2,634.9
70%	1,941.5	1,170.6	1,482.7	2,425.8	3,227.5	3,642.8
75%	3,480.1	1,590.4	2,238.1	4,385.7	4,564.1	4,928.3
80%	5,037.6	3,406.5	4,533.5	5,342.0	5,951.2	6,518.6
85%	7,296.0	5,004.0	5,482.1	7,763.7	8,133.8	8,224.8
90%	10,749.1	7,625.0	7,917.6	13,455.4	18,768.1	15,207.0
95%	31,500.8	46,633.3	48,683.5	35,330.3	32,300.5	31,649.9
100%	189,977.1	189,977.1	189,977.1	221,582.8	221,582.8	366,756.3
データ数	109	52	52	142	253	332

② 生態評価

本スキームでは、生態評価に用いる下水処理水の希釈率の計算には、低水流量を用いており、人評価用の『10』とは異なり『7』とする。この希釈率は、全国の下水処理場の位置と流量測定地点のデータの中で、両地点の距離が緯度経度で 2 分以内にあった下水処理場の排出量と排水先河川流量を解析した結果を用いて得られた低水流量における希釈率の 5%ile『7.2』の少数第一位を切り捨てた値である（図表 Ⅵ-12 参照）。

図表 VI-12 下水道業における希釈率のパーセンタイル値
流量年表の河川流量（低水流量ベース）の統計値

ﾊﾟｰｾﾝﾀｲﾙ	緯度経度 ±2 分以内	緯度経度 ±1 分以内	2km 以内	5km 以内	10km 以内	15km 以内
0%	0.6	1.9	1.9	0.6	0.6	0.6
1%	1.9	1.9	1.9	1.9	1.9	2.3
2%	2.2	1.9	1.9	3.8	3.5	4.8
3%	4.5	3.1	3.1	5.6	5.2	6.1
4%	5.7	4.5	4.5	7.7	8.6	10.0
5%	7.2	7.7	7.7	10.7	11.0	11.3
6%	9.5	10.8	10.8	13.4	13.1	12.9
7%	12.0	12.4	12.4	15.6	14.4	13.9
8%	13.5	14.3	14.3	17.3	17.2	17.4
9%	15.3	17.9	17.9	18.9	19.2	20.5
10%	17.4	21.5	21.5	20.9	22.6	24.9
11%	19.2	25.0	25.0	25.0	26.8	27.4
12%	20.7	28.0	28.0	29.4	28.4	29.1
13%	27.9	28.9	28.9	31.9	31.6	34.0
14%	30.3	32.5	32.5	35.9	35.9	37.1
15%	37.0	43.3	43.3	41.9	38.2	42.4
20%	52.5	54.1	58.4	53.2	57.0	68.5
25%	79.9	66.7	81.2	81.3	99.9	107.6
30%	104.8	102.7	139.9	104.8	145.3	156.8
35%	154.4	158.4	179.4	152.1	187.9	212.7
40%	189.1	191.9	205.5	202.0	291.0	383.5
45%	286.8	224.6	271.5	307.6	462.4	524.6
50%	462.2	311.9	385.8	470.5	533.6	695.9
55%	526.0	458.9	463.0	540.4	719.3	859.9
60%	670.7	506.3	526.4	794.7	932.4	1,169.6
65%	920.4	545.7	631.2	1,150.9	1,323.0	1,500.7
70%	1,314.0	839.3	1,153.0	1,395.1	2,097.7	2,335.3
75%	2,392.7	1,278.0	1,452.8	2,857.6	3,083.4	3,318.2
80%	3,443.7	2,286.9	2,829.2	3,669.0	3,936.2	4,210.0
85%	4,633.9	3,439.0	3,647.7	5,191.2	6,037.1	5,980.1
90%	7,631.8	4,245.0	5,871.3	9,445.3	12,912.4	11,014.7
95%	23,113.3	32,952.1	33,536.3	24,551.4	23,530.1	22,770.4
100%	146,993.1	146,993.1	146,993.1	146,993.1	146,993.1	254,261.2
データ数	109	52	52	142	253	332

(2) 未処理水と下水処理水の比較検討

本編の VI.2.1.8 でも説明したように、下水処理場を経由するシナリオと下水道処理場を経由しないシナリオのどちらの河川中濃度が高く推定されるかを把握するため、具体的な希釈率の値を求めて比較した。以下ではその内容を具体的に説明する。

下水処理水の希釈率には、流量年表の河川流量や下水道統計の下水処理量を基に算出さ

れた値を用い[1]、未処理水の希釈率には、河川水中濃度を推計する数理モデルを用いて算出された値を用いた[2]。下水処理水の希釈率は VI.6.2.3 で前述したように人健康評価用で『10』（平水時の 5%ile 値）、生態評価用で『７』（低水時の 5%ile 値）である。一方、未処理水の希釈率は図表 VI-13 に示す値である。なお、未処理水の希釈率推計に用いた AIST-SHANEL は河川水中濃度の月平均値を推計するモデルであり、平水時、低水時という区別はできないため、AIST-SHANEL を用いた検討では月平均値の年間最小値を渇水時相当と見なしている。これによると未処理水の希釈率は、渇水時相当の 5%ile 値で『96』[3]である。

図表 VI-13 未処理水の希釈率[4]

パーセンタイル	昇順順位	希釈倍率
0.05	8282	9.60×10
0.10	16565	1.20×10^{3}
0.25	41414	9.20×10^{4}

また、下水処理場での除去率は、評価Ⅰではスクリーニング評価と同じく、対象物質の分解性が「難分解性」または分解性不明の場合はデフォルトでは『0』とし、「良分解性」の場合は『0.67』として扱う。

---

[1] 製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター（2007）平成 18 年度　化学物質の暴露評価に資する河川等の希釈率等に関連する調査　報告書 (http://www.safe.nite.go.jp/risk/pdf/h18fy_kasen_kisyakuritsu.pdf)

[2] 産業技術総合研究所 安全科学研究部門,株式会社　日水コン（2012）産総研－水系暴露解析モデル(AIST-SHANEL)を用いた河川流量および未処理水と放流水の河川希釈率に関する検討.（以下「AIST—SHANEL を用いた検討」という）(http://www.aist-riss.jp/projects/AIST-SHANEL/paper/120528_kentou.pdf)

[3] 正確には希釈率の定義が AIST-SHANEL のものと、本シナリオのものとでは異なる。AIST-SHANEL では下水道を経由しない地先排水に対する希釈率 D を求めている。

$$D=\frac{Q}{(q_1+q_2+q_3)},\qquad q_2=0.35\times q_1$$

ここに、q_1：生活排水量、q_2：都市活動排水量(生活排水量の 35%を設定)、q_3：工業排水量、Q：河川流量、D：希釈率である。

一方、本シナリオでは「仮想的な下水処理場に起因する化学物質に暴露する集団は、製造・調合・工業的使用段階の仮想的排出源とは近接せず、これらに起因する暴露はないとする」という仮定（本編 VI.2.1.2 参照）があるため、都市活動排水量と工業排水量を加味しない希釈率 D**を求めている。

$$D^{**}=\frac{(Q-q_2-q_3)}{q_1}$$

D**>D であることが示されている（AIST-SHANEL を用いた検討の「Appendix AIST-SHANEL による希釈率と各種定義による希釈率との比較」参照）ので、AIST-SHANEL で求めた希釈率 D の方が小さく、安全側の値であると言える。

[4] AIST-SHANEL を用いた検討の「3.2　渇水時相当を対象にした場合の生活排水の河川水希釈率」より作成。全 165,657 個のデータから求めた各パーセンタイルの希釈率。

河川水中濃度を求める推計式を次に再掲する。上式が人健康評価用、下式が生態評価用である。

$$C_{river_domest_man} = \frac{TEMW_{domest_total} \times 10^6 [kg \rightarrow mg]}{D_{year} \times N_{total} \times VL \times 1000 \left[m^3 \rightarrow L\right]} \times (1 - STR) \times \frac{1}{DILUTION_{domest_man}}$$

式 VI-6（再掲）

$$C_{river_domest_env} = \frac{TEMW_{domest_total} \times 10^6 [kg \rightarrow mg]}{D_{year} \times N_{total} \times VL \times 1000 \left[m^3 \rightarrow L\right]} \times (1 - STR) \times \frac{1}{DILUTION_{domest_env}}$$

式 VI-12（再掲）

河川水中濃度は「$(1-STR)\times\frac{1}{DILUTION_{domest_man}}$」または「$(1-STR)\times\frac{1}{DILUTION_{domest_env}}$」に比例することがわかる（*STR*は下水処理場での除去率、*DILUTION*は希釈率）。そこで前述した数値をこの部分に代入して比較する。

(ア) 下水処理場を経由する場合

- 難解性物質または分解性不明物質（*STR*＝0）
  - 人健康　(1-0)/10＝0.1
  - 生態　　(1-0)/7≒0.14
- 良分解性物質（*STR*＝0.67）
  - 人健康(1-0.67)/10＝0.033
  - 生態　(1-0.67)/7≒0.047

(イ) 下水処理場を経由しない場合（*STR*＝0）

(1-0)/96≒0.0104

となり、いずれの場合でも(ア)＞(イ)である。

なお、(イ)は渇水時相当の値であるが、平水時や低水時はこれよりも更に値が小さくなると考えられる（未処理水の希釈率＝河川流量/家庭等からの排出水量であり、河川流量が大きいほど未処理水の希釈率が大きくなり、(イ)の値は小さくなる）。

以上より(ア)の下水処理場を経由する場合の方が計算上は河川水中濃度が高くなると言える。したがって評価Ⅰはより安全側となる下水処理場を経由するシナリオで評価を行うものとする。

しかし、評価Ⅱにおいて良分解性物質に用いる下水処理場での除去率が実測値や推計値を用いて 0.67 より大きい値になれば、良分解性物質に関しては(ア)と(イ)の大小関係が逆転する可能性があり、下水処理場を経由しない場合の河川水中濃度が高く推計される可能性があるため、評価Ⅰのように下水処理場を経由して河川へ排出されるシナリオのみで暴

露評価を行うわけにはいかない。よって、評価Ⅱ以降では下水処理場経由と経由しない場合の両方を考慮した暴露シナリオも考慮することにする。

VI.6.3 大気系の非点源シナリオ

VI.6.3.1 環境中濃度の推計

本編の VI.3 に対応しており、大気系の非点源シナリオにおいて、評価Ⅰにおける排出量の割り振り方法を中心に数式やパラメータを示す。なお、評価Ⅱ以降ではメッシュ単位で全国の大気中濃度を推計するモデル（産総研－曝露・リスク評価大気拡散モデル（AIST-ADMER））等を必要に応じて用いるが、そちらの詳細は関連文献等[1]を参照されたい。大気系の非点源シナリオでは以下の濃度等を推計する。

- 大気中濃度
- 大気から土壌への沈着量
- 土壌中濃度
- 土壌間隙水中濃度
- 地下部農作物中濃度
- 地上部農作物中濃度（Exposed）
- 地上部農作物中濃度（Protected）
- 牛肉中濃度
- 乳製品中濃度

これらの濃度を推計するために、以下の数値が入力値となる。

- 大気への排出量　（排出量推計（Ⅳ章）により全国排出量を推計）
- 化学物質の物理化学的性状　（分子量、融点、蒸気圧、ヘンリー係数、有機炭素補正土壌吸着係数、logPow）

(1) 評価Ⅰでの排出量の割り振り

評価Ⅰでの大気系の非点源シナリオでは、家庭用・業務用での使用段階の大気への全国排出量を人口または交通量に比例するように 5km メッシュ単位に割り振りした排出量を用いる。具体的には、式 VI-18 を用いてメッシュ単位の排出量を求める。式 VI-18 のメッシュへの割り振り係数は全国のメッシュごとに異なる値をとるため、評価Ⅰでは、メッシュへの割り振り係数を大きい順に並べ替えて、パーセンタイル値が 100%ile（排出量が最大となるメッシュ）、95%ile、50%ile、5%ile となる図表 VI-14 の４通りの値を代表値とする。

[1] 産業技術総合研究所安全科学研究部門　ADMER のホームページ
（http://www.aist-riss.jp/software/admer/ja/index_ja.html）

この値の導出については VI.6.3.3 を参照。

$$Emission_{air} = Emission_{total-air} \times R_{mesh}$$ 式 VI-18

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$Emission_{air}$	メッシュ単位の大気への排出量 ※	[kg/year]		
$Emission_{total\text{-}air}$	大気への全国排出量 ※	[kg/year]		Ⅳ章
R_{mesh}	メッシュへの割り振り係数	—	図表 VI-14	ADMERver.2.5.0 内蔵の指標データから算出

※家庭用・業務用等の使用段階での大気への排出量が対象。

メッシュへの割り振り係数 R_{mesh} は割り振り指標（人口又は交通量）やパーセンタイルによって異なり、評価Ⅰでは以下の値を使う。

図表 VI-14　メッシュへの割り振り係数 R_{mesh}

パーセンタイル	人口 [無次元]	交通量 [無次元]
100	3.89×10^{-3}	3.48×10^{-3}
95	3.24×10^{-4}	3.02×10^{-4}
50	8.28×10^{-6}	1.48×10^{-5}
5	1.17×10^{-7}	1.65×10^{-7}

(2) 評価Ⅰでの環境中濃度の推計

上記で求めた排出量を用いて大気中濃度を以下のように求める。これはⅤ章の大気中濃度の式に対応するものである。評価Ⅰでは簡易に評価できるように排出源ごとの暴露シナリオ同様の数理モデルを用いることにする。この際、なるべく安全側の評価となるよう、評価エリア半径は最小設定値である 1km と設定している。

$$C_0(1.5) = a \times Q'$$ 式 VI-19

$$Q' = Emission_{air} \times 10^{-3}$$ 式 VI-20

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）	[mg/m³]		
Q'	排出量（t/year）	[t/year]		
$Emission_{air}$	メッシュ単位の大気への排出量	[kg/year]		式 VI-18
a	大気中濃度換算係数	[mg/m³/(t/year)]	1.8×10^{-4} ※	

※　評価エリア半径が 1km の時の値。

ここから先の環境中濃度の推計でも排出源ごとの暴露シナリオと同じ数理モデルを用い、推計式の大気への排出量の部分にメッシュ単位の大気への排出量 $Emission_{air}$ を入力して計算を行う。具体的な推計式はⅤ章の環境中濃度推計に用いる数理モデルを参照。

VI.6.3.2　人の暴露量の推計

人の暴露量推計では、Ⅴ章の人の摂取量推計と同じ式を用いて、大気を吸入し、農作物、肉類及び乳製品を摂取すると仮定する。人の体重や媒体別摂取量は、Ⅴ章の暴露量の推計に用いる食品摂取量等と同じ値を用いる。

VI.6.3.3　大気系の非点源シナリオにおける推計式等の経緯

ここでは大気系の非点源シナリオの評価Ⅰで用いる割り振り係数 R_{mesh}（VI.6.3.1 (1)図表 VI-14 に示した値）の導出方法として、利用した ADMERver.2.5.0 の機能と指標データ及び R_{mesh} の計算条件と計算結果を説明する。

まずは、ADMER を利用して、R_{mesh} の基データとなる日本全国の総排出量が 1[t/year] の時のグリッド（5km メッシュ）排出量を計算した。利用した ADMER の機能、指標データ及び計算条件は以下のとおり。

- グリッド排出量データ作成機能を使用
  （ADMER ではグリッドは 5 km×5km の領域となる）
- 元データの種類には『総排出量』を選択し、総排出量には 1[t/year]を入力
  （日本全国の総排出量を 1[t/year]と設定したことになる）
- 利用する指標データ[1]は、次の通り。いずれも世界測地系のデータ
  人口（平成 17 年度）：夜間人口
  交通量（平成 17 年度）：乗用車、D 乗用車、バス、D バス、普通貨物車、D 普通貨物車、小型貨物車、D 小型貨物車、二輪車

[1] 各指標データの元になっている統計情報等は以下のとおり。『 』内は ADMER のホームページの説明からの抜粋である。
(http://www.aist-riss.jp/software/admer/ja/index_ja.html)
「ADMER データアップデートについて」より。
人口：「H17 夜間及び昼間人口のデータソースは、「平成 17 年度国勢調査、平成 18 年度事業所・企業統計調査等のリンクによる地域メッシュ統計(世界測地系)（総務省統計局調査、（財）統計情報研究開発センターから販売）」からの、夜間人口と昼間人口を用いています」
交通量：「移動発生源推計に用いる交通量データは、自動車輸送統計と道路交通センサス（国土交通省調査）をベースに 2005 年を基準に独自に作成したものです。幹線道路と細街路での交通量を対象としています」

・ 時間帯ごとの比率はすべて 1 と設定
（排出量は時間によらず一定と設定したことになる）

以上の条件で、日本全国の総排出量が 1[t/year]の時のグリッド排出量を計算した。割り振られた全グリッド（人口は 13,904 グリッド、交通量は 14,713 グリッド）の排出量をもとにしたパーセンタイル値は図表 VI-15 のようになった。

図表 VI-15　グリッド排出量[g/sec]の各パーセンタイル値
（総排出量 1[t/year]に対する値）

パーセンタイル	人口 [g/sec]	交通量 [g/sec]
100	1.23×10^{-4}	1.10×10^{-4}
95	1.03×10^{-5}	9.59×10^{-6}
90	4.80×10^{-6}	5.38×10^{-6}
85	2.75×10^{-6}	3.50×10^{-6}
80	1.72×10^{-6}	2.43×10^{-6}
75	1.20×10^{-6}	1.76×10^{-6}
70	8.47×10^{-7}	1.32×10^{-6}
65	6.22×10^{-7}	1.01×10^{-6}
60	4.58×10^{-7}	7.81×10^{-7}
55	3.46×10^{-7}	6.04×10^{-7}
50	2.63×10^{-7}	4.71×10^{-7}
45	1.96×10^{-7}	3.66×10^{-7}
40	1.47×10^{-7}	2.84×10^{-7}
35	1.08×10^{-7}	2.21×10^{-7}
30	7.84×10^{-8}	1.65×10^{-7}
25	5.39×10^{-8}	1.19×10^{-7}
20	3.57×10^{-8}	8.11×10^{-8}
15	2.16×10^{-8}	4.76×10^{-8}
10	1.12×10^{-8}	2.39×10^{-8}
5	3.72×10^{-9}	5.24×10^{-9}
0	2.48×10^{-10}	2.75×10^{-11}

図表 VI-15 の数値を単位換算し、総排出量 1[kg/year]に対するグリッド排出量[kg/year]を求めると本シナリオで用いるメッシュへの割り振り係数 R_{mesh}[無次元]（＝[kg/year／(kg/year)]）になる。つまり、図表 VI-16 のグリッド排出量の値を E_{mesh} とすると、式 VI-21 のように計算できる。

R_{mesh} [無次元]（＝[kg/year／(kg/year)] ）
$\quad = E_{mesh}$ [g/sec／(t/year)]×(60×60×24×365)/1000/1000　　式 VI-21

単位換算の結果は図表 VI-16 のとおりであり、評価 I ではこのうち 100%ile、95%ile、

50%ile、5%ile の値を用いることにする。

図表 VI-16　メッシュへの割振り係数 R
評価 I では 100%ile、95%ile、50%ile、5%ile の値を利用

パーセンタイル	人口 [無次元]	交通量 [無次元]
100	3.89×10^{-3}	3.48×10^{-3}
95	3.24×10^{-4}	3.02×10^{-4}
90	1.51×10^{-4}	1.70×10^{-4}
85	8.67×10^{-5}	1.10×10^{-4}
80	5.43×10^{-5}	7.67×10^{-5}
75	3.77×10^{-5}	5.56×10^{-5}
70	2.67×10^{-5}	4.15×10^{-5}
65	1.96×10^{-5}	3.18×10^{-5}
60	1.45×10^{-5}	2.46×10^{-5}
55	1.09×10^{-5}	1.91×10^{-5}
50	8.28×10^{-6}	1.48×10^{-5}
45	6.19×10^{-6}	1.15×10^{-5}
40	4.64×10^{-6}	8.95×10^{-6}
35	3.42×10^{-6}	6.97×10^{-6}
30	2.47×10^{-6}	5.19×10^{-6}
25	1.70×10^{-6}	3.76×10^{-6}
20	1.13×10^{-6}	2.56×10^{-6}
15	6.81×10^{-7}	1.50×10^{-6}
10	3.52×10^{-7}	7.55×10^{-7}
5	1.17×10^{-7}	1.65×10^{-7}
0	7.83×10^{-9}	8.66×10^{-10}

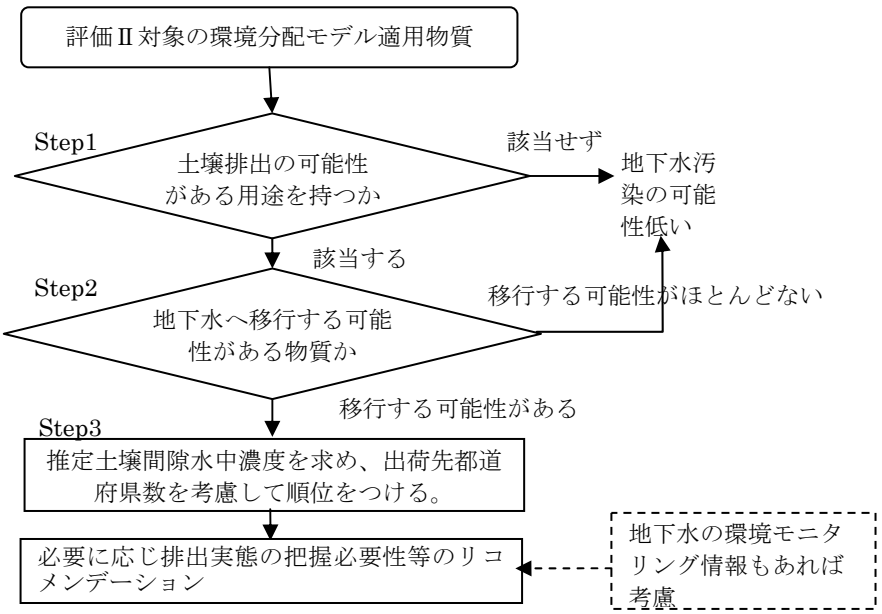
VI.6.4 地下水汚染の可能性シナリオ

土壌排出・地下水経由暴露の扱いについては概略を本編で説明したが、本項では手順等について詳述する。図表 VI-17 は、土壌及び地下水汚染の可能性のある物質を評価する手順である。各手順を Step1、Step2 及び Step3 と名付けた。

なお、この手順を適用するのは評価Ⅱ対象化学物質のうち、環境分配モデル適用物質（環境媒体間の分配の予測に必要な物理化学的性状が測定もしくは推計可能な化学物質。Ⅴ章参照）に対してである。

まず、土壌排出の可能性がある用途を持つ物質を抽出する（Step1)。次に、土壌排出後、地下水へ移行する可能性がある物質を抽出する（Step2)。最後に地下水中濃度と土壌間隙水中濃度には相関があるとみなして推定土壌間隙水中濃度を求め、推定土壌間隙水中濃度と出荷先都道府県数により物質間で相対比較して順位をつける（Step3)。その結果、順位が高くなった物質に対しては地下水汚染が起こり得る可能性が高いとみなし、必要に応じ排出実態の把握の必要性等の提言を行うこととした。以下では各 Step について説明し、最後に

土壌汚染・地下水汚染が顕在化した場合のリスク評価について補足する。



図表 VI-17　土壌及び地下水汚染の可能性のある物質の評価手順

VI.6.4.1　土壌排出の可能性がある用途の設定

この VI.6.4.1 では、Step1 に関連する事項について述べる。

(1) 土壌排出を考慮する場合の前提

土壌排出の可能性のある用途を設定するにあたり以下の前提を置いた。

- 事故、誤操作による排出は本スキームの対象外とする。
- PRTR 排出量推算マニュアルにおいて、大部分の工業会で土壌排出はないとしているものでも、環境省、国土交通省のモニタリング調査でかなりの種類の物質が地下水中に検出されている。このことから、工程内では、事故等ではなく土壌排出の対象となる日常的な漏れ、こぼれ等があるとする。
- ガソリンスタンドからの漏洩は事故によるものと考え、対象外とする。

(2) 土壌排出の可能性のある用途の設定

「化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表」から土壌排出の可能性のある用途を図表 VI-18 にまとめた。この用途に優先評価化学物質が該当するか否かを Step1 で調べる。

1

2 図表 VI-18　土壌排出の可能性のある用途

用途番号(#)	用途分類	詳細用途分類※	土壌排出のある用途として指摘した根拠
04	金属洗浄用溶剤	All a）金属洗浄用溶剤（塩素系） z）その他	工程内使用 （有機塩素系溶剤、エチルベンゼン等の検出）
05	クリーニング洗浄用溶剤 《洗濯業での用途》	All a）ドライクリーニング溶剤 b）染み抜き剤、ドライクリーニング溶剤抽出剤 z）その他	塩素系溶剤、エチルベンゼン等の検出
12	水系洗浄剤 1 《工業用途》 [#25,26 を除く]	All a）石鹸、洗剤（界面活性剤） b）無機アルカリ、有機アルカリ、無機酸、有機酸、漂白剤 c）ビルダー（キレート剤、再付着防止剤等）、添加（補助）剤（消泡剤等） d）防錆剤 z）その他	工程内使用 （界面活性剤、EDTA 等の検出）
19	殺生物剤 2 [工程内使用で成形品に含まれないもの] 《工業用途》	c）殺菌剤、消毒剤、防腐剤、抗菌剤 d）展着剤、乳化剤 z）その他	工程内使用
20	殺生物剤 3 《家庭用・業務用の用途》	a）不快害虫用殺虫剤（害虫駆除剤、昆虫誘引剤、共力剤） c）シロアリ駆除剤、防蟻剤 d）殺菌剤、消毒剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤、除菌剤 e）非農耕地用除草剤 f）展着剤、乳化剤 z）その他	しろあり防除剤、非農耕地用除草剤等の屋外土壌施用
36	作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤（エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等） [#37 を除く]	All a）作動油の基油、潤滑油剤の基油 b）絶縁油の基油 c）プロセス油の基油 d）グリース増ちょう剤 e）作動油添加剤、潤滑油剤添加剤 f）絶縁油添加剤 g）プロセス油添加剤 z）その他	工程内使用
37	金属加工油（切削油、圧延油、プレス油、熱処理油等）、防錆油	All a）水溶性金属加工油の基油 b）不水溶性金属加工油の基油、防錆油の基油 c）水溶性金属加工油添加剤 d）不水溶性金属加工油添加剤、防錆油添加剤 z）その他	工程内使用

用途番号(#)	用途分類	詳細用途分類※	土壌排出のある用途として指摘した根拠
40	水処理剤	a）腐食防止剤、防錆剤、防食剤、防スケール剤、防藻剤 b）金属イオン捕捉剤、金属イオン封鎖剤、硬水軟化剤 d）酸化剤、還元剤、ｐＨ調節剤 e）消泡剤、凝集剤、濾過助剤、脱水助剤、イオン交換樹脂再生剤 z）その他	工程内使用（ヒドラジン等の検出）
42	熱媒体	All a）冷媒、冷却剤 b）熱媒、加熱剤 z）その他	工程内使用
44	建設資材添加物（コンクリート混和剤、木材補強含浸剤等）	b）コンクリート混和剤（強化剤、減水剤） d）木材補強含浸剤、木質板添加剤 z）その他	コンクリート混和剤、木材補強含浸剤使用製品（酢酸ビニル等の検出）
45	散布剤、埋立処分前処理薬剤（融雪剤、土壌改良剤、消火剤等）	All a）凍結防止剤（融雪剤等） b）土壌改良剤、地盤改良剤 c）消火剤 d）人工降雨剤 e）油処理剤 f）粉塵結合剤、粉塵防止剤、煤塵処理剤 z）その他	エチレングリコール、（ポリ）アクリルアミド等の土壌施用

※詳細用途分類欄で All と表示されているところは、詳細用途分類全てが該当していることを意味する。

VI.6.4.2　土壌排出の可能性がある用途を設定した経緯等

この VI.6.4.2 では、図表 VI-18 で示した用途が土壌排出の可能性があると用途であると考えた経緯等について説明する。

(1) 公的機関の報告のまとめ

公的機関の報告をまとめ、土壌排出あるいはそれに続く地下水汚染の可能性のある用途について考察した。

① PRTR データ[1]

5 年間（平成 13～17 年度）の PRTR 届出データのうち、土壌排出及び敷地内埋め立て処分の件数を抽出した。その結果、土壌排出は 118～132 件/年、敷地内埋め立て処分は 364～462 件/年で、全届出件数に対してそれぞれ 0.05～0.10%、0.16～0.25%と非常に小さな割合であった。

化審法では元素は対象外であることを考慮して、有機化合物のみに注目すると、平成 17

[1] 「PRTR 制度　PRTR 個別事業所データ」（NITE）
http://www.prtr.nite.go.jp/prtr/prtr-kaizi.html

年度では土壌排出が届け出られた物質は 25 物質であった。そのうち土壌排出量が 100kg 以上の物質は、最大はエチレングリコール、次いでスチレンであった。3 番目はビスフェノール A 型エポキシ樹脂（液状）で 2 事業所から届出があったが、排出量は 150kg 及び 10kg と少なかった。スチレンは金属鉱業から毎年届け出られているが、これは特殊なケースと思われ、船舶製造・修理業、船用機関製造業から平成 13 及び 14 年度にそれぞれ 42,000kg 及び 37,000kg が届け出られているが、その後は届出がなかった。後述のモニタリングデータを合わせ考えて、エチレングリコールの用途である凍結防止剤が土壌排出の可能性があると考えた。

② 環境省「平成 16 年度　土壌汚染対策法の施行状況及び土壌汚染調査・対策事例などに関する調査結果」[1]

この調査は土壌汚染対策法に基づくもので、調査対象物質は同法の第一種特定有害物質（VOC 類 11 物質：有機塩素系 10 物質及びベンゼン）、第二種特定有害物質（重金属 10 物質）及び第三種特定有害物質（農薬類 5 物質）である。この調査ではアンケート調査に基づく土壌汚染原因行為が示されており、「不適切な取り扱い」、「施設の破損等」、「汚水の地下浸透」の順となっている。

また、上記調査報告書から、製造工程内で使用される VOC 類が土壌排出されていることが判った。土壌汚染の原因については、アンケート調査では操作ミスや事故ともとれる回答になっているが、モニタリングでも検出されていることを考慮して、通常の作業の中でも製造工程内で使用される VOC 類が土壌排出されていると考えた。

③ 環境省「平成 17 年度　地下水質測定結果」[2]

この報告書は水質汚濁防止法に基づく地下水質の測定結果をまとめたものである。環境基準が定められている 26 項目（物質）のうち VOC 類 11 物質（有機塩素系 10 物質及びベンゼン）についての汚染原因と汚染原因者の業種が示されている。この報告書の結果から、土壌排出の可能性のある用途として次のように考えた。

- VOC 類 11 物質中、ベンゼン以外の有機塩素系 10 物質の用途は洗浄溶剤と推定され、洗濯業及び広範囲な業種にわたる工程内の機械洗浄などの用途がある。

④ 国土交通省「土壌・地下水汚染が水域に及ぼす影響に関する研究」[3]

この報告書は、東京都多摩川中流部 4 地点及び茨城県谷田川流域で行われた河川水と地下水 4 地点の調査結果である。対象物質は環境基本法に基づく人の健康の保護に関する環

[1] 「平成 16 年度　土壌汚染対策法の施行状況及び土壌汚染調査・対策事例などに関する調査結果」（平成 18 年 11 月　環境省　水・大気環境局）
http://www.env.go.jp/water/report/h18-06/index.html

[2] 「平成 17 年度　地下水質測定結果」（平成 18 年 12 月　環境省　水・大気環境局）
http://www.env.go.jp/water/trport/h18-08/index.html

[3] 国総研プロジェクト研究報告 12 号「土壌・地下水汚染が水域に及ぼす影響に関する研究」（平成 18 年 12 月 国土交通省　国土技術政策総合研究所）

境基準物質（地下水の水質汚濁に係る環境基準物質と同じ 26 物質）、土壌汚染対策法における溶出量基準物質（25 物質）、水生生物保全に関する環境基準として平成 15 年に指定された全亜鉛、13 年度の PRTR 届出データにおいて土壌への排出及び敷地内での埋め立て処分の届出排出量が上位のエチレングリコール、その他にペルフルオロオクタンスルホン酸（以下、「PFOS」という。）、ヒドラジン、ポリ（オキシエチレン）アルキルエーテル（C=12-15）及び硝化による硝酸性窒素へ変化する人畜廃水に含まれるアンモニア性窒素であった。平成 16 年度の中間報告時には農薬の 1,3-ジクロロプロペンも加えられた。全ての箇所で定量された物質はエチレングリコール、全亜鉛、硝酸性窒素、ヒドラジン及び PFOS であった。

以上の調査結果から、全ての箇所で定量された物質のうち、エチレングリコール、ヒドラジン及び PFOS について、土壌排出の可能性のある用途として以下のように考えた。

- エチレングリコールは主に凍結防止剤、ポリエステル繊維やポリエチレンフタレート、農薬、塗料の原料として使用されている。これらの内、土壌排出が考えられる用途は凍結防止剤である。
- ヒドラジンは無水物がロケット燃料、水和物として合成樹脂発泡剤の原料や脱酸素剤、除草剤や医薬品の原料などとして使用されている。これらの内、土壌排出が考えられる用途は、工程内で清缶剤として使用されていると考えられる脱酸素剤である。
- PFOS は主に界面活性剤として用いられており、微量ながら広範囲での使用実績があると推定されるが、土壌排出との関連については不明である。

⑤ 環境省　要調査項目の存在状況調査結果[1]

この調査は、環境省の平成 11 年度から 16 年度までの「要調査項目」の地下水モニタリング結果である。「要調査項目」は、環境中の検出状況や複合影響の観点から見て、「水環境リスク」に関する知見の集積が必要な物質として選定された 300 の物質群である。

このモニタリング調査で定量下限値を超えた物質は 21 物質で、そのうち 2 地点以上で超えた物質について整理した。化審法対象外の金属及び農薬と、前項までで既に土壌排出の可能性がある有機塩素系化合物及び洗浄溶剤用途の物質を除くと、エチルベンゼン、酢酸ビニル、二硫化炭素及びエチレンジアミン四酢酸（以下、「EDTA」という。）が土壌排出を経て地下水に移行した可能性があると考えた。これらの物質について土壌排出の可能性のある用途について以下のように考えた。

- エチルベンゼンは溶剤としての用途の他に燃料添加剤の用途があり、ガソリンスタン

[1] 環境省　要調査項目　存在状況調査結果
平成 11 年度　http://www.env.go.jp/water/chousa/h11.pdf
平成 12 年度　http://www.env.go.jp/water/chousa/h12.pdf
平成 13 年度　http://www.env.go.jp/water/chousa/h13.pdf
平成 14 年度（水質）　http://www.env.go.jp/water/chousa/h14.pdf
平成 15 年度（水質）　http://www.env.go.jp/water/chousa/h15.pdf
平成 16 年度　http://www.env.go.jp/water/chousa/h16.pdf

ドのガソリンタンクから土壌への漏洩の可能性がある。

- 酢酸ビニルはポリマーの原料として用いられており、屋外で使用される建築資材であるポリマーコンクリート（コンクリートに接着剤としてエチレン酢酸ビニル共重合体を混合）中に存在する未反応モノマーが土壌に浸出する可能性がある。
- EDTA はキレート化剤として洗浄剤に用いられており、工程内の使用時に土壌排出の可能性がある。
- 二硫化炭素はセルロースの溶剤として使用されるが、他にジチオカーバメート系の農薬（殺菌剤）や焼却炉の飛灰処理用のキレート化剤の分解生成物の可能性もあり[1]、土壌汚染と用途の関連性については更に調査が必要である。

(2) 土壌排出の可能性のある使用場面

前項の調査結果を踏まえて、土壌排出の可能性のある使用場面として以下の二つのケースを考えた。

- 屋外で使用されるもの：建築・土木現場で使用の接着剤、農薬、凍結防止剤など
- 製造工程内で使用されるもの：洗浄溶剤、作動油、清缶剤、殺生物剤など

ここで、屋外での使用は非点源の排出であり、製造工程内での使用は点源の排出に相当する。

(3) 土壌排出の可能性がある工程内用途の抽出

PRTR 排出量等算出マニュアルである業種別・工程別　化学物質排出量、移動量算出マニュアル（平成 14 年 3 月改訂）の記載から、土壌排出の可能性が考えられる工程内用途を抽出した。その結果を図表 VI-19 に示す。

これを踏まえて土壌排出のある用途を設定した。

---

[1] 廃棄物焼却炉から発生する飛灰中に重金属が含まれているため、埋め立て処分する際は飛灰にキレート剤を添加・混練し、重金属が溶出しないように処理することがある。この目的にジチオカルバミン酸系化合物が用いられる。この化合物は不安定で、加熱または酸の添加により二硫化炭素を発生する可能性があることが知られている。

$$(R1)(R2)N\,C\overset{S}{\diagup\!\!\!\diagdown}SM \xrightarrow{H+} (R1)(R2)\,NH \quad + \quad CS2 \quad + \quad M+$$

なお、「廃棄物焼却施設における飛灰処理剤による二硫化炭素の発生について」（厚生労働省　平成 14 年 2 月 18 日付け，　基安化発第 0218001 号の 2）という通達でキレート化剤から二硫化炭素が発生するという実験結果を付して、作業者の二硫化炭素暴露防止を要請している。

図表 VI-19　PRTR 排出量等算出マニュアルから抽出した工程内用途と対象化合物

工程内用途	化学物質例（参考：マニュアル記載業種）
1. 洗浄溶剤	ジクロロメタン（製紙、軽金属製品、金属熱処理、電気めっき、ダイカスト、バルブ製造、産業洗浄、強化プラスチック製造、鍛造品製造）；トリクロロエチレン（軽金属製品、金属熱処理、電気めっき、ダイカスト、産業洗浄、航空機整備、鍛造品製造）；テトラクロロエチレン（金属熱処理、電気めっき、クリーニング、産業洗浄、鍛造品製造）；1,1,1-トリクロロエタン（クリーニング）；エチルベンゼン（クリーニング）
2. 洗浄剤	直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩（電気めっき、産業洗浄）；界面活性剤類（クリーニング、産業洗剤、航空機整備）；エチレングリコール、エチレンジアミン四酢酸、ニトリロ三酢酸、種々の添加剤（産業洗浄）
3. 酸洗液	5-15%の塩酸または硫酸（溶融亜鉛めっき）
4. 凝集剤	アクリルアミド（セメントファイバーボード）
5. 防錆剤	2-アミノエタノール（製紙、ダンボール）；ポリ（オキシエチレン）アルキルエーテル（産業洗浄）；ヒドラジン（ダンボール）
6. 脱酸素剤	ヒドラジン（製紙、軽金属、電気めっき）
7. 殺生物剤	ホルムアルデヒド[防腐剤]（製紙）；[スライムコントロール剤]（製紙）
8. 冷却剤	エチレングリコール（自動車整備）
9. 不凍液	エチレングリコール（自動車用ケミカル製品製造）
10. 作動油・潤滑油・離型剤	アルキルベンゼンスルホン酸・塩、エチレンオキサイド、エチレングリコール、1,2-エポキシプロパン、2-（ジエチルアミノ）エタノールアミン、トルエン、ノニルフェノール、界面活性剤（ダイカスト）；リン酸トリ-n-ブチル[作動油]（航空機整備）；潤滑油添加剤（鍛造品製造）

VI.6.4.3　地下水へ移行の可能性のある物質の抽出と順位付け

この VI.6.4.3 では、Step2 及び Step3 に関連する事項について述べる。

本スキームにおいては、地下水中濃度を推定したリスク評価を行わない。代わりに、数理モデルを用いた考え方を利用し、地下水へ移行する可能性があるかどうかで対象物質をふるい分けする。その後、地下水の濃度と相関性があると考えられる推定土壌間隙水中濃度を指標として対象物質を順位付けし、土壌・地下水汚染の起こりやすさを物質間で相対評価することとした。

(1) 地下水へ移行する可能性のある物質の抽出

① E-FAST の地下水中濃度推計式

土壌排出の可能性のある用途をもつ物質を対象に、地下水へ移行する可能性がある物質の抽出（言い換えると地下水へ移行する可能性がほとんどない物質の除外）を行なう。これには、TSCA の新規化学物質の事前審査のスクリーニング評価で用いられているリスク評価システム E-FAST の地下水中濃度推計式の migration factor（移行係数）を利用する。

E-FAST で使われている地下水中濃度推計式は、式 VI-22 に示すように 1 サイト当たりの排出量に、logKoc によって決まる 4 つに区分された移行係数の値を乗じたものである。

式 VI-22 から明らかなように地下水中推計濃度は logKoc によって決まる migration factor（移行係数）と排出量の積によって表される。これは排出量が同じ場合には地下水中

推計濃度は logKoc が大きいほど地下水への移行が遅く、地下水中推計濃度はより低くなることを示している。

$$GWC = \frac{Q \times (migration\ \ factor)}{N}$$ 式 VI-22

記号	説明	単位	値	出典・参照先
GWC	70 年間平均地下水推計濃度	[mg/L]		E-FAST BeteVersion[1], (Eqn. 2-12)
Q	化学物質の埋め立て排出量	[kg/y]		
N	サイト数	－		
migration factor	移行係数	[mg/L/kg]	※	

※ *migration factor* の値を 4 段階に分類している。E-FAST Version 2.0 ,(Eqn. 3-12)
3.21×10^{-6} (log Koc≧ 4.5)：「negligible to slow(地下水への移行が無視できるほど遅い)」
2.67×10^{-5} (log Koc≧ 3.5 and < 4.5)：「slow（地下水への移行が遅い）」
5.95×10^{-5} (log Koc≧2.5 and < 3.5)：「moderate（地下水への移行が普通の早さ）」
7.55×10^{-5} (log Koc < 2.5) ：「rapid（地下水への移行が早い）」

② logKoc を用いた地下水へ移行する可能性がある物質の抽出

上記①に示したとおり、logKoc が小さい物質は土壌粒子に吸着せずに地下水へ移行する可能性が高いと考えられる。そこで、Step2 において、対象物質を logKoc の値でふるい分けることとし、logKoc≧4.5 となる物質は地下水へ移行する可能性がほとんどないとみなして、それ以外の物質（logKoc＜4.5 となる物質）について、Step3 に進むものとした。

なお、地下水汚染が問題となったトリクロロエチレンの logKoc は 1.8（Koc は 68）、テトラクロロエチレンの logKoc は 2.2～2.5（Koc は 177～350）である[2]。

(2) 推定土壌間隙水中濃度による物質間の順位付け

① 推定土壌間隙水中濃度による相対的な指標

Step 3 において、相対比較による物質間の順位付けを行うため、土壌間隙水中化学物質濃度の指標 $Index_C_{porewater}$ を以下のとおり設定した。

$Index_C_{porewater}$ を求めるためにⅤ章「排出源ごとの暴露シナリオ」の「Ⅴ.7.3.2 土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計」を基本にして、土壌中に含まれる化学物質が大気沈着由来でなく土壌への排出由来となる様に、該当する部分を変更した。変更した計算式を式 VI-23、式 VI-24 及び式 VI-25 に示す。

なお、下記の計算式で記号に「*Index*」と付いているものは実際の濃度や物質量ではなく、

[1] Versar Inc. (2005) Exposure and Fate Assessment Screening Tool (E-FAST) Version 2.0 Documentation Manual. Prepared for U.S. EPA OPPT. (1999 年の Bete Version の Manual の方が数式は辿りやすい。)
http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/efast.htm
[2] NITE 初期リスク評価書「トリクロロエチレン」、「テトラクロロエチレン」

物質間で相対比較を行なうための指標であることを示している。

$$Index_C_{porewater} = \frac{Index_C_{soil} \times \frac{BD_{soil}}{1000}}{K_{soil_water}}$$ 式 VI-23

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$Index_C_{porewater}$	土壌間隙水中化学物質濃度の指標	—		V.7.3.2(3) 式 V-96
$Index_C_{soil}$	土壌中化学物質濃度の指標	—		V.7.3.2(1) 式 V-73
BD_{soil}	土壌バルク密度	[kg/m^3]		V.7.3.2(1) 式 V-75
K_{soil_water}	土壌―水分配係数	—		V.7.3.2(3) 式 V-97

$$Index_C_{soil} = \frac{Index_D_{soil}}{k_{soil}} - \frac{Index_D_{soil} \times (1 - e^{-k_{soil} \times T})}{k_{soil}^2 \times T}$$ 式 VI-24

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$Index_C_{soil}$	土壌中濃度の指標※	—	※	V.7.3.2(1) 式 V-73
$Index_D_{soil}$	土壌への単位面積・単位時間当たりの排出量の指標	—		V.7.3.2(1) 式 V-74
k_{soil}	土壌における消失の総 1 次速度定数	[1/day]		V.7.3.2(1) 式 V-76
T	平均化時間	[day]	3650	本シナリオの設定

※ 化学物質の水溶解度を超えた場合であっても、そのまま用いる。この点はV.7.3.2(1) 式 V-73 とは異なる点に注意（1 箇所に全国分を排出するという仮定での計算のため、計算上、すぐ水溶解度に達してしまう可能性があるため）。

$$Index_D_{soil} = \frac{Index_M_{soil}}{BD_{soil} \times DEP_{so}}$$ 式 VI-25

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$Index_D_{soill}$	土壌への単位面積・単位時間当たりの排出量の指標	—		V.7.3.2(1) 式 V-74
$Index_M_{soil}$	土壌への排出量に係る指標	—		下記の説明参照
BD_{soil}	土壌バルク密度	[kg/m^3]		V.7.3.2(1) 式 V-75
DEP_{so}	土壌深さ	[m]	0.2	MNSEM UM デフォルト※

※ 株式会社三菱化学安全科学研究所（1998）Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model version 2.0 ユーザーズマニュアル.

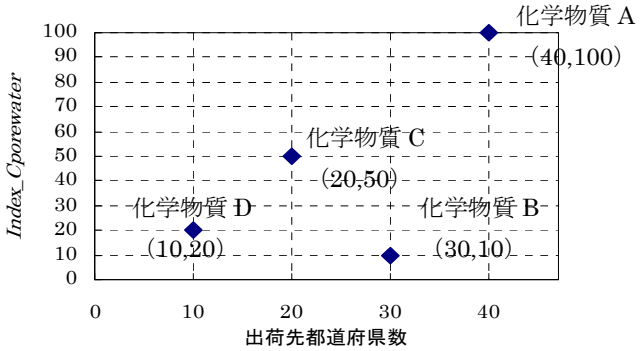
式 VI-25 の土壌への排出量に係る指標 $Index_M_{soil}$ とは、土壌への排出量の大小を相対比較するための指標である。この指標は、化学物質の詳細用途別の全国出荷数量に「環境へ

の出やすさを相対的に表す係数」を乗じることにより求める。「環境への出やすさを相対的に表す係数」として、詳細用途別の大気への排出係数と水域への排出係数の和を用いる。これは、大気や水域へ排出されやすいものは土壌へも排出されやすいであろうという仮定を置いたためである。

また、大気及び水域の排出係数は詳細用途に応じた家庭用途等での使用（Household/Institutional Use）または工業的使用（Industrial Use）の値を用いる。これは VI.6.4.2 (2)で述べたように、土壌排出の可能性のある場面は、屋外で使用されるものと製造工程内で使用されるものの 2 つのケースがあり、前者が Household/Institutional Use、後者が Industrial Use に相当すると考えたためである。なお、1 つの物質が複数の詳細用途で出荷している場合は、それぞれの詳細用途について「環境への出やすさを相対的に表す係数」に全国出荷数量を乗じて土壌への排出量を表す指標 *Index_Msoil* を求め、*Index_Msoil* を全詳細用途で合計し、式 VI-25 の右辺分子に代入する。

② 相対比較による物質間の順位付け

各物質について土壌間隙水中化学物質濃度の指標 $Index_C_{porewater}$ と出荷先の都道府県数の積を求め、物質間で比較し、大きいものほど順位が高く、土壌及び地下水汚染が広範に生じる可能性が高いとみなすこととする。そのイメージを図表 VI-20 に示す。図表 VI-20 の場合、化学物質 A～D の間の順位は[　]内に上述の積の値を表すと、化学物質 A[4000]＞化学物質 C[1000] ＞ 化学物質 B[300] ＞ 化学物質 D[200]という順位になる。



※（　）内の数値は出荷先都道府県数と Index_Cporewater の値をこの順で示す。

図表 VI-20　出荷先都道府県数と Index_Cporewater のイメージ

VI.6.4.4 土壌汚染・地下水汚染が顕在化した場合のリスク評価

図表 VI-17 の Step1～Step3 の手順は地下水汚染の「可能性」を評価し、「可能性」について物質間の相対的な順位付けを行うものである。実際に土壌汚染・地下水汚染が発見された場合には、人の健康に対するリスクの有無を知るためには暴露評価と有害性評価に基づくリスク推計を行う必要がある。地下水中濃度はモニタリング調査により知ることができるが、空間的・時間的な汚染状況の分布も含めて評価するためには数理モデルを利用して地下水中濃度を推計することが考えられる。そのような数理モデルは国内外でいくつか存在するが、国内であれば「GERAS-3」[1]等がある。例えば「GERAS-3」の場合、『土壌層から地下水層に至る汚染物質の移動現象を数値モデル化するとともに、揮発・拡散、地下水への溶解、さらには土壌への吸着など、汚染物質自体の組成変化をも考慮した流動解析に基づき、複合成分の汚染リスクの時間的・空間的な変化を定量化できる』とされている。このような数理モデルを用いる場合、地質や汚染状況等に関する詳細な情報が必要となるため、詳細なリスク評価が必要かどうかを検討したうえで、必要があれば実際の汚染サイトについてこれらの情報を調査することが考えられる。

[1] 独立行政法人 産業技術総合研究所　地圏資源環境研究部門(2009)地球圏環境リスク評価システム（GERAS：Geo-environmental Risk AssessmentSystem）の詳細モデル

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

Ⅶ. 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～

Ver.1.1

令和４年７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	平成 26 年 6 月	初版
Ver. 1.1	令和 4 年 7 月	G-CIEMS の改訂（v0.9→v1.2）に伴う記載内容の追加修正

目　次

VII. 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～ 1

VII.1 はじめに 1
VII.1.1 本章の位置づけ 1
VII.1.2 他の章との関係 3

VII.2 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計 3
VII.2.1 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計の位置づけ 3
VII.2.2 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計に用いる数理モデルの概念 6

VII.3 環境中濃度等の空間的分布の推計 12
VII.3.1 多媒体環境動態予測モデル G-CIEMS 12
VII.3.2 モデルの特徴 16

VII.4 残留性の評価 22
VII.4.1 目的等 22
VII.4.2 多媒体モデルの利用 22

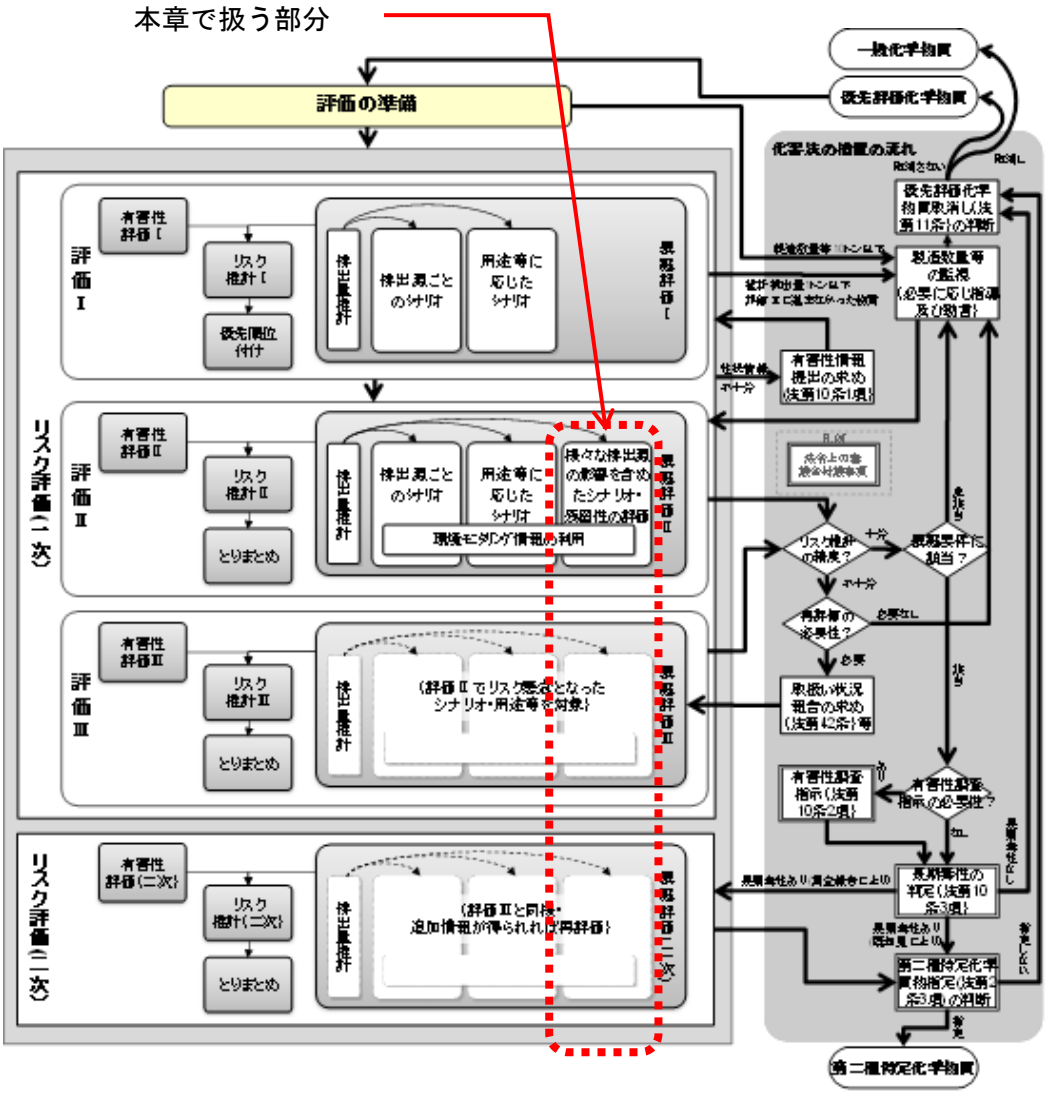
VII.5 付属資料 25
VII.5.1 はじめに 25
VII.5.2 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計と残留性の推計に用いる数理モデル 25
VII.5.3 G-CIEMS モデルの解説 39
VII.5.4 環境中濃度等の空間的分布の推計における人の摂取量 50

VII. 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～

VII.1 はじめに

VII.1.1 本章の位置づけ

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、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ついて解説する。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図表 VII.1 に示す。



図表 VII.1　リスク評価の手順フローにおける本章で扱う部分

暴露評価Ⅱでは、「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」に基づく評価を実施する。

このシナリオでは用いる情報によって実施する内容が異なり、概要は以下のとおりである。

(ア) 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計

（用いる情報：製造数量等の届出情報、PRTR 情報）

本シナリオでは、多媒体モデル[1]を用いて、広域的（日本全域を想定）・長期的[2]（定常状態を想定）な暴露状況の推計を行う。製造数量等の届出情報を用いて推計する場合は、製造段階、調合段階、工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階、長期使用製品の使用段階、全てのライフサイクルステージでの推計排出量を合計して用いる。PRTR 情報が利用できる場合は、別途、届出排出量と届出外排出量を合計して用いる。

(イ) 環境中濃度等の空間的分布の推計

（用いる情報： PRTR 情報等）

PRTR 情報等の地理的な情報を含む排出量情報が得られる場合には、面的な排出源（家庭、移動体等）を含めた全国の排出源からの排出量を基に、地図上の区画（メッシュや小流域等）ごとに環境中濃度を推計するモデルを用いて、環境中濃度の空間的分布を全国レベルで推計した上で、暴露量（又は暴露濃度）（人健康の場合は摂取量、生態の場合は環境中濃度）を推計する。この際、化審法の規制対象の範囲外の排出量の影響について可能な限り解析するため、例えば、明らかに化審法の規制対象の範囲外となる PRTR 情報については除外したケースについても推計を行う。

暴露評価Ⅱでは、「残留性の評価」も行う。その概要は以下のとおりである。

(ウ) 優先評価化学物質の環境中での残留性の指標として、多媒体モデルを用い、環境中の総括残留性（Pov）等を推計する。

(エ) 複数年の環境モニタリング情報が得られる場合には、環境媒体ごとの経年的な検出状況について整理する。

本章では残留性の評価のうち、多媒体モデルを用いる(ウ)についても記述する。本章にこれを含める理由は、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオの前述の「(ア)広域的・長期的スケールの暴露状況の推計」と同じモデルを用いるためである。環境モニタリング情報を用いる(エ)は「第Ⅷ章　環境モニタリング情報を用いた暴露評価」に記述する[3]。

---

[1] 多媒体モデル：環境中に排出された化学物質が、大気、水、土壌、底質などの環境媒体間において、輸送・移動、分配され、また化学的または生物学的に分解される等の環境中の化学物質の動態を同時に評価するための数理モデル。

[2] この「長期的」という言葉は、長期暴露や長期使用製品の使用段階の「長期」とは意味が異なる。環境中濃度が定常状態に到達するまで排出開始から長い年月がかかる化学物質もあるため「長期的」という表現を用いている。

[3] 環境モニタリング情報を用いるのは残留性の評価だけではない。各暴露シナリオに対応するとみなせる環境モニタリング情報があれば、当該暴露シナリオに対応する環境中濃

VII.1.2 他の章との関係

前項のとおり、製造数量等の届出情報や PRTR 情報を数理モデルに用いる部分は本章に記述し、環境モニタリング情報を用いる部分はⅧ章に記述している。

人の摂取量の推計に用いる計算式は「Ⅴ章　排出源ごとの暴露シナリオ」と基本的には同じである。ただし、「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」の数理モデルを用いる部分で想定している環境スケールが「排出源ごとの暴露シナリオ」とは違うため、暴露係数（食品摂取量等）が一部異なる。適宜、Ⅴ章を引用するので詳細はそちらを参照されたい。

VII.2 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計

ここでは「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」のうち、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計について説明する。製造数量等の届出情報や PRTR 情報（得られる場合）を多媒体モデルに入力して推計を行う。

本節では、位置づけを VII.2.1 で述べ、評価に使用する数理モデルの特徴、概念と適用方法を VII.2.2 で説明する。

VII.2.1 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計の位置づけ

本節では、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計の位置づけとして、役割及び推計項目について解説する。

VII.2.1.1 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計の役割

広域的・長期的スケールの暴露状況の推計を行う目的は、評価Ⅰで実施した「排出源ごとの暴露シナリオ」や「用途等に応じた暴露シナリオ」とは異なる空間と時間のスケールで、対象物質の環境中の分配状況等を概観し、暴露状況の解釈に利用することである。

評価Ⅱにおいて、「排出源ごとの暴露シナリオ」で PRTR 情報を用いる場合は 24 の届出対象業種からの届出排出量が用いられる。一方で、移動体の排ガス、家庭、非対象業種等の届出外排出量等は評価には含まれない。「用途等に応じたシナリオ」では、化審法の製造数量等の届出情報で得られる詳細用途分類に係る推計が PRTR 情報に含まれていれば評価に用いる場合があるが、すべての届出外排出量を用いるわけではない。すなわち、「排出源ごとの暴露シナリオ」や「用途等に応じたシナリオ」で対象としていない排出源からの排出量が総排出量の多くを占めるような優先評価化学物質の場合は、排出源ごとの暴露シナリオ等では化学物質の暴露状況の全ては捉えていないということになる。このため、広域的・長

度等として利用する。第Ⅷ章を参照のこと。

期的スケールの暴露状況の推計においては、非点源（線源・面源と言われることもある）に分類される排出源からの排出も考慮した暴露状況を推計し、他の暴露シナリオを補足する必要がある。

具体的には、例えば「排出源ごとの暴露シナリオ」であれば特定の排出源の影響を受ける範囲（大気への排出の場合では排出源から半径 1km～10km までの評価エリア）を対象としていたが、ここでは特定の排出源の影響下ではない日本全域の一般環境を対象とする。また、製造数量等の届出情報を用いて推計では、製造段階、調合段階、工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階、長期使用製品の使用段階、全てのライフサイクルステージでの推計排出量を合計して用い、PRTR 情報が利用できる場合は、別途、届出排出量と届出外排出量を合計して用いる[1]。利用する排出量の詳細は、Ⅳ章の様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおける排出量推計に関する記載を参照されたい。

また、排出源ごとの暴露シナリオでは、必ずしも環境中濃度等が一定となる定常状態を仮定していないが、ここでは十分に長い時間が経って定常状態に到達した時の状況を対象とする。このように地理的に広大で時間的に長期的なスケールにおける化学物質の環境中の動態を推計する。

以上の役割のため、本スキームでは多媒体モデルを用いて、以下の推計を行う。各項目の具体的な内容は本節の VII.2.1.2 で後述し、モデルについては次節 VII.2.2 と付属資料で説明する。

- 環境媒体間の分配比率（広域・定常状態における）
- 人の摂取量の摂取媒体別比率（広域・定常状態における）

VII.2.1.2 推計項目

広域的・長期的スケールの暴露状況の推計では、日本全体という広大な環境をいくつかの環境媒体から成る箱（コンパートメント）と捉え、これに対象物質の日本国内の総排出量を入力し、その排出量が継続するものと仮定した場合に長期的に到達する定常状態における環境媒体間の分配比率等を推計する。このような推計モデルは多媒体モデル（マルチメディアモデルともいう）といい、このタイプの数理モデルによる環境媒体間の分配比率は OECD の SIDS 項目の１つでもあり[2]、環境動態を考察するうえで国際的に重要な情報の１つとみ

[1] 後述するように、非点源等の影響を考察するため「排出源ごとの暴露シナリオ」で用いている排出量の総量（製造数量の届出情報の場合は製造段階、調合段階、工業的使用段階の排出量の全国合計値。PRTR 情報の場合は届出排出量の全国合計値。）を使って計算した結果と比較する。

[2] SIDS 項目である Transport and Distribution の Transport and Distribution between Environmental Compartments に該当する。
OECD (last update 2012) Manual for assessment of chemicals. Chapter 2. Data gathering and testing.
（http://www.oecd.org/env/ehs/testing/49944183.pdf）

られている（モデルについては次節 VII.2.2 と付属書で説明）。

多媒体モデルを用いて VII.2.1.1 で記したように以下の項目を推計する。

- 環境媒体間の分配比率（広域・定常状態における）
- 人の摂取量の摂取媒体別比率（広域・定常状態における）

以下、順に説明する。

(1) 環境媒体間の分配比率

化学物質が長期的には環境媒体のいずれに分配される傾向があるかを予測するものである。この結果は、環境モニタリング調査を行う場合に着目すべき媒体の見当をつけること等にも役立つ。

(2) 人の摂取量の摂取媒体別比率

本項目は(1)の延長線上で、化学物質の環境媒体別の存在量を人の摂取量の摂取媒体別比率に外挿したものである。モデルにより予測した環境媒体別の存在量から環境媒体別濃度を推計し、そこから食物（魚介類、農作物、畜産物）中の濃度を推計する（環境中濃度から食物中濃度を推計する数式は「排出源ごとの暴露シナリオ」で用いているものと同様）。それらの一定量を摂取すると仮定し、全経路からの摂取量（大気吸入、飲料水摂取、魚介類摂取、地上部農作物摂取、地下部農作物摂取、牛肉摂取、乳製品摂取の 7 経路）を摂取媒体別比率にしたものである。これは特定の排出源の影響下ではない広域的・長期的な人の暴露状況を表しているといえる。

この結果は、例えば以下のように解釈に用いる。

ある化学物質は、排出源ごとの暴露シナリオの評価ではほとんどが大気に排出され、人の暴露経路も大気吸入が主体であったとする。一方、物質の特性としては大気から水域への沈着や土壌から水域への移行も起こり、長期的には水域に溜まり広域的・長期的スケールの暴露状況の推計では魚介類摂取の経路の寄与が大きいことが計算されたとする[1]。このような場合は、人の健康へのリスクの懸念については「排出源ごとの暴露シナリオ」の結果のみで判断せず、一般環境（特定の排出源の影響を受けていない地域）の魚介類の濃度レベルも確認した上で判断すべき、といった解釈につながる。逆に、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計でも、「排出源ごとの暴露シナリオ」の評価と同じ媒体からの摂取経路が主体であれば、排出源周辺の濃度は必ず一般環境中濃度よりも高いため、排出源ごとの暴露シナリオの評価結果をもってリスクが懸念されるか否かの判断を支持すると考えられる。

(1)の「環境媒体間の分配比率」と(2)の「人の摂取量の摂取媒体別比率」については、「排

[1] 排出源ごとの暴露シナリオで用いている推計モデルでは大気と水域間の環境中の分配・移行を考慮していないため、このような評価はできない（図表 VII.3 参照）。

出源ごとの暴露シナリオ」で用いている排出量の総量（すなわち点源の総量）で推計した場合と、それに加えて、製造数量等の届出情報を用いる場合であれば家庭用・業務用での使用段階や長期使用製品の使用段階からの排出も加味した排出量の総量で推計した場合の比較を行い、後者の非点源からの寄与の影響度についても考察する。同様に PRTR 排出量を用いる場合は、届出排出量に届出外排出量を加味した場合とそうでない場合を比較し考察する。

以上のように、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計を加えることによって、化学物質の暴露状況を様々な視点から眺め、「暴露要件」への該当性を多面的に判断できるようにすることを意図している。これらは環境中での動態の概略把握、化学物質の暴露状況を重層的に理解するために重要である。

ただし、このような評価を行うのは本来、入力する物理化学的性状等のデータが適切であるのが前提であるため、推計結果の利用・解釈には入力データの信頼性の評価も併せ行うことが重要となる[1,2]。このことについてはⅨ章で説明する。また、たとえ適切な物理化学的性状等のデータを用いても排出量の媒体間分配やモデル自体の不確実性等の様々な要因が推計結果に影響を及ぼしていることに留意が必要である。

VII.2.2 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計に用いる数理モデルの概念

本節では、広域的・長期的スケールの暴露状況に用いる数理モデル（多媒体モデル）について、（VII.2.2.1 ）多媒体モデルの種類等、（VII.2.2.2 ）排出源ごとの暴露シナリオとの比較、（VII.2.2.3 ）本スキームで用いる数理モデル、（VII.2.2.4 ）数理モデルの概念及び（VII.2.2.5 ）数理モデルの適用について解説する。本節に係る詳細は付属資料 VII.5.2 に記載している。

---

[1] 広域的・長期的スケールの暴露状況に限らず、数理モデルを用いた暴露評価であればどれも同じである。EU-TGD に基づく推計モデルの説明書でも以下のように述べられている。
「たとえ完璧なモデルであっても、入力データの品質管理を無視したりおざなりにすれば、信頼できない結果しか得られない」
Lijzen, J.P.A and Rikken, M.G.J. eds. (2004) European Union System for the Evaluation of Substances. EUSES 2.0 Background Report. 1.8 System Limitasions.

[2] U.S. EPA は、高生産量（HPV）化学物質を含む既存化学物質の環境媒体間の分配を評価するため、レベルⅢタイプの多媒体モデル（本スキームの推計で使用しているものと同等）の適用を強く推奨している。ただし、それは HPV 物質のようにモデルに入力する物理化学的性状や環境中半減期の大部分の実測データが得られる場合に使用するのが適切であるとしている。また、U.S. EPA は「このタイプのモデルは PBT 物質の環境残留性や長距離移動性の評価に有用であり、推定環境中濃度を定量的な暴露評価に使うには適さない」という見解を示している。
U.S. EPA, OPPT (2006) Recommendations for Estimating Transport Between Environmental Compartment (Fugacity) for Existing chemicals, including HPV chemicals.
(http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/eqchpv.htm)

VII.2.2.1 多媒体モデルの種類等

化学物質の長期間にわたる環境中での動態を評価するには、コンパートメントモデルが適している。コンパートメントモデルの１つである多媒体モデルは、化学物質の環境中での移流、拡散、分解、他の環境媒体への移行といった様々なメカニズムを考慮し、環境媒体（大気、水域、土壌、底質等）間の分配や残留量を算定する。多媒体モデルの多くはこのような4つの環境媒体（大気、水域、土壌、底質）で構成され、環境に排出された後の化学物質の長期的、広大な空間での環境媒体間の分配や残留程度を評価するのに適しており、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計でも適用することとした。

多媒体モデルは、前提としている条件・複雑さから下表のようにレベルⅠ～Ⅳの 4 段階に分類されている[1]。平衡／非平衡（環境媒体間で平衡状態を仮定する／仮定しない）、定常／非定常（無限時間後に到達する状態を仮定する／仮定しない）、反応・消失過程（分解等の化学的、生物学的な化学物質の変化・消失の有無）、閉鎖系／開放系（化学物質の連続的な系外からの流入・系外への流出を考慮しない／考慮する）の条件の違いで特徴づけられている。

図表 VII.2　多媒体モデルのレベルと前提条件の対応

レベル	主な前提条件			
	平衡／非平衡	定常／非定常	反応･消失過程	閉鎖系／開放系
Ⅰ	平衡	（定常）	なし	閉鎖系
Ⅱ	平衡	定常	あり	開放系
Ⅲ	非平衡	定常	あり	開放系
Ⅳ	非平衡	非定常	あり	開放系

当時の OECD の HPV プログラムの文書[2]では、ポスト SIDS のステージ[3]において、各国が初期レベルの環境経由暴露を評価するのに適用できるモデルとして推奨されているモデル群（CHEMCAN、CHEMFRAN、MNSEM 等。MNSEM は VII.2.2.3 で後述するように本スキームで用いる MNSEM3βNITE 版の元である）はいずれも図表 VII.2 のレベルⅢに相当し、EU のリスク評価で使用されているリスク評価システム EUSES に含まれる多媒体

[1] Mackay, D. (1972) Finding Fugacity Feasible. Environ. Sci. & Technol., 13(10), 1218-1223.

[2] OECD (1994) Provisional Guidance for the Initial Assessment of Environmental Exposure.
(http://www.oecd.org/env/ehs/risk-assessment/1947565.pdf)
ただし、この文書は当時の HPV プログラムのものであり、後継の CoCAM（Cooperative Chemicals Assessment Programme）で使用されておらず参考としての扱いである。

[3] SIAM の結果、追加作業の候補として特定された場合、SIDS 提出後の（post-SIDS）作業に詳細な暴露情報の収集と評価およびリスク評価が含められている。大半のケースでは、暴露評価は各国内（または地域内）で実施される。

モデル Simple Box もレベルⅢである。

VII.2.2.2 排出源ごとの暴露シナリオとの比較

広域的・長期的スケールの暴露状況の推計では、広域環境を４つの媒体（大気・水域・土壌・底質）から成る４つの箱（コンパートメント）と捉え、媒体内は均一濃度と仮定した多媒体モデルを用いる[1]。排出源ごとの暴露シナリオと広域的・長期的スケールの暴露状況の推計とで空間スケールや推計内容等を対比したものを図表 VII.3 に示す。

広域的・長期的スケールの暴露状況の推計では、日本全域という広域・巨大な媒体内を均一・完全混合という簡略化をして推計を行っている点に留意が必要である[2]。

図表 VII.3　排出源ごとの暴露シナリオと広域的・長期的スケールの暴露状況の推計における評価スケールや推計内容等の比較

	排出源ごとの暴露シナリオ	広域的・長期的スケールの暴露状況の推計
評価空間スケール	排出源の周辺半径 1～10km のエリア	日本全域
推計に必要な化学物質の情報	・ 物理化学的性状一式 ・ 排出源ごとの排出量（大気、水域の媒体別） ・ 土壌中の分解速度（又は半減期）	・ 物理化学的性状一式 ・ 日本国内の総排出量（大気、水域、土壌の媒体別） ・ 媒体ごと（大気、水域、土壌、底質）の分解速度（又は半減期）
推計する内容	以下の項目について排出源周辺のエリア内平均値を推計 ・ 媒体別の環境中濃度 ・ 人の摂取量	広域環境を４つの媒体から成る箱（コンパートメント）と捉えた時の以下を推計 ・ 媒体間の分配比率 ・ 人の摂取量の摂取媒体別比率
長所	・ 推計濃度は暴露シナリオの設定次第で排出源近傍の高濃度や高暴露集団の把握に適する	・ 化学物質のトータルの物性からの環境中における分配・動態の概略把握に適する ・ ４つの媒体すべての半減期を考慮 ・ ４つの媒体間の分配・移動を考慮
短所又は留意点	・ 大気への排出と水域への排出でシナリオが分かれ、媒体間移動の考慮は限定的	・ 広域・巨大な媒体内は均一・完全混合という単純化 ・ 媒体別の物質量を媒体の体積で除し

[1] １媒体を１つの箱（コンパートメント）と仮定するのではなく、より詳細な空間に分解して濃度の地理的な分布を推計する多媒体モデルも存在する（「VII.3 環境中濃度等の空間的分布の推計」を参照）。

[2] 海外の多媒体モデル（Simple Box、ChemCAN）を扱った文献には以下のものがある。本スキームで用いるモデル MNSEM については、この後の VII.2.2.3 の脚注を参照。

- Kawamoto, K., Macleod, M. and Mackay, D. (2001) Evaluation and comparison of multimedia mass balance models of chemical fate: application of EUSES and ChemCAN to 68 chemicals in Japan. Chemosphere Vol. 44. 599-612.
- Jager, T. ed. (1998) Evaluation of EUSES: inventory of experiences and validation activities. RIVM report 679102 048.

	排出源ごとの暴露シナリオ	広域的・長期的スケールの暴露状況の推計
	・ 環境中での分解の半減期の考慮は土壌のみ	た推計濃度は、排出源近傍の高濃度や高暴露集団を把握するには適さない

VII.2.2.3 本スキームで用いる数理モデル

広域的・長期的スケールの暴露状況の推計において、本スキームでは MNSEM[1]という日本版の多媒体モデルをベースにし、一部改良を加えたものを MNSEM3β NITE 版として使用する。前述したように MNSEM は OECD の HPV プログラムの文書において、ポスト SIDS のステージにおいて各国が初期レベルの環境経由暴露を評価するのに適用できるモデルとして推奨されているものの１つになっている。また、化学物質審議会安全対策部会安全対策小委員会のリスク評価の中でも利用実績がある[2]。

VII.2.2.4 数理モデルの概念

MNSEM は大気、水域、土壌、底質の 4 つの環境媒体から構成され、この 4 つの媒体間の化学物質の出入等を表現した約 100 の数式から成り立っている。それぞれの環境媒体の中では、化学物質の存在状態（水域であれば溶存態と懸濁粒子への吸着態）を分配平衡で考慮している。また、それぞれの環境中濃度から農作物や畜産物中濃度を推計する式も組み込まれ、人の摂取量まで推計できるようになっている。環境の大きさや温度、各媒体における懸濁粒子等の濃度や密度、降雨量や平均風速等の各種の環境パラメータはデフォルトで設定されている（詳細は付属資料 VII.5.2.1 (1)参照）。

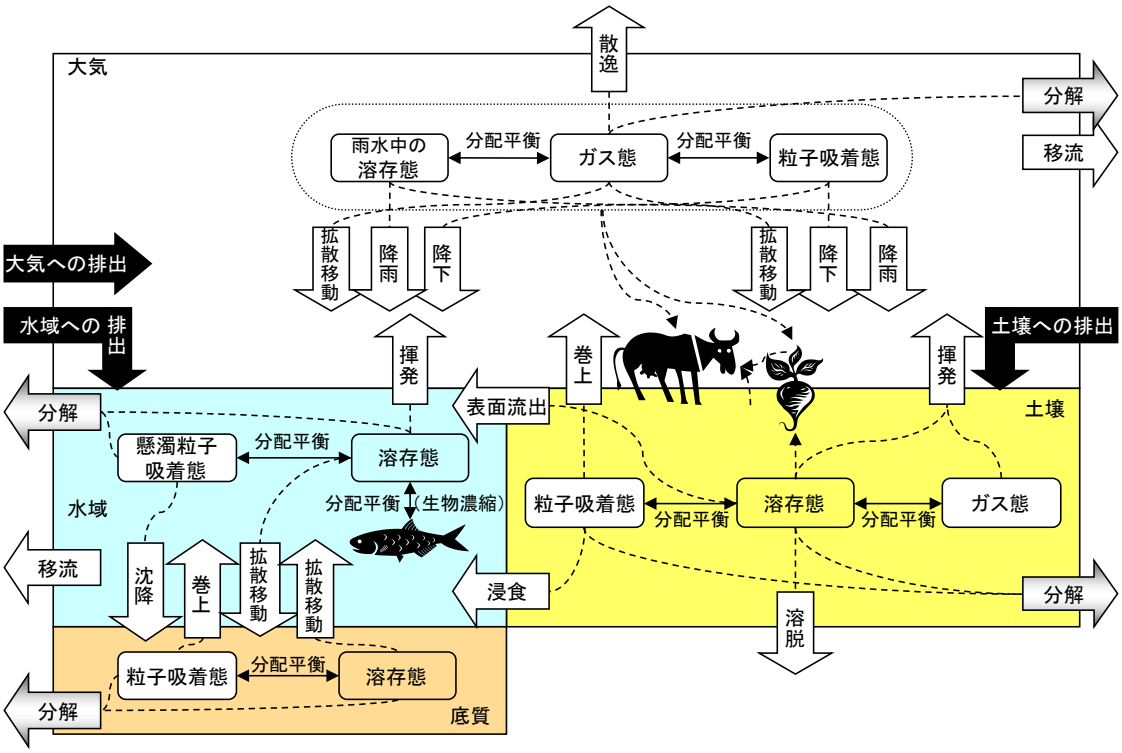
MNSEM の全体構成を図表 VII.4 に示す。

---

[1] MNSEM の開発者である吉田喜久雄氏より MNSEM3β（MNSEM2（version 2.0）の改良版）の提供を NITE が受け、本スキームの中で一部変更を加えて使用している。変更箇所については付属資料 VII.5.2.1 (2)に記載している。MNSEM に係る資料は以下のとおり。

- 株式会社三菱化学安全科学研究所（1998) Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model version 2.0 ユーザーズマニュアル.
- 国立環境研究所が公開している MNSEM のページ http://w-chemdb.nies.go.jp/mnsem2/MNSEM.htm
- Yoshida, K., T. Shigeoka and F. Yamauchi. (1987) Multi-Phase Non-steady State Equilibrium Model for Evaluation of Environmental Fate of Organic Chemicals, Toxicol. Environ. Chem. 15(3), 159-183.

[2] 例えば、化学物質審議会安全対策部会第３回安全対策小委員会（2003）参考資料２ 指定化学物質 100 トンを環境中に放出した場合のリスクの推定 (https://warp.da.ndl.go.jp/info:ndljp/pid/10191128/www.meti.go.jp/report/downloadfiles/g31009i20j.pdf)



図表 VII.4　MNSEM の全体構成－広域環境中の化学物質の挙動と物質収支－

図の中で、角丸の四角は化学物質の存在形態を表している。文字付きの矢印は速度論的に扱っている化学物質の動態を表し、このうち分解は物質自体の消失プロセスを、それ以外の白い矢印は媒体間もしくは系外（対象区画外）への輸送プロセスを表している。点線は化学物質の存在形態と分解・輸送のプロセスとの関係を示す。例えば土壌からの浸食（降水による土壌粒子の水域への輸送）は土壌中の粒子吸着態に係る輸送プロセスである。黒い矢印は各環境媒体への化学物質の排出を表す。

このモデルの主な仮定は以下のとおりである。

- 各媒体は均一で化学物質は完全混合している。
- 各媒体内の化学物質は存在形態間で分配平衡にある。

このようなモデルでは、以下のような物質収支式が基本となる。左辺は媒体 i 中における化学物質量 M_i の時間変化を示している。

$$\frac{dM_i}{dt} = Q + \left(\sum_j I_{j,i} - \sum_j A_{i,j} - k_i\right) \cdot M_i \qquad \text{式 VII-1}$$

M_i　：媒体 i 中の化学物質量［kg など］

Q_i　：媒体 i への化学物質の排出量［kg/year など］

$I_{j,i}$　：隣接する媒体 j から媒体 i への化学物質の輸送流入速度定数[1/year など]

$A_{i,j}$　：媒体 i から隣接する媒体 j への化学物質の輸送流出速度定数［1/year など]

k_i　：媒体 i における化学物質の分解の１次速度定数[1/year など]

式 VII-1 の式を 4 つの媒体ごとに１つずつ作成する。定常状態では左辺＝0 と仮定することになり、化学物質量 M_i は 4 元連立方程式を解くことにより求めることができる。各媒体中の化学物質量 M_i を媒体の体積 V_i で除すことにより媒体中濃度が求められる。また、連立微分方程式を解析的に解くことにより、非定常状態における化学物質量を時間の関数として求めることができる。非定常状態の式は残留性の評価（VII.4）で利用する。

VII.2.2.5 数理モデルの適用

式 VII-1 の Q_i に対象化学物質の媒体別の排出量を入力することになる。製造数量等の届出情報に基づく場合はⅣ章で推計した媒体別排出量を、PRTR 情報に基づく場合はⅣ.4.6 で集計した媒体別排出量を入力する。

$A_{i,j}$、$I_{j,i}$ 及び k_i の推計に対象化学物質の物理化学的性状データと環境中の分解速度定数を用いる。前節 VII.2.1.2 で述べた①環境媒体間の分配比率、②人の摂取量の摂取媒体別比率は定常状態の仮定から推計する。人の摂取量の推計に関しては以下の点が排出源ごとの暴露シナリオと異なる。人の摂取量の推計に用いる１人当たりの摂取量の数値は VII.5.2.1 (1)③を参照されたい。

- 本シナリオでは特定の排出源の影響下でない国内の一般環境を推計の対象としているため、農作物、牛肉、乳製品の１人当たりの摂取量[g/day]に対し、自給率は加味するが「近郊生産物摂取割合（排出源を中心とする一定の領域に住む人が、その領域で栽培される農作物等を摂取する割合)」を加味しないこととする。
- 河川と海域を区別せずに水域としてまとめて扱っているため、魚介類（淡水域）の１人当たりの摂取量[g/day]と魚介類（海水域）の１人当たりの摂取量[g/day]を合計した値を水域中の化学物質濃度に乗じて、魚介類経由の人の化学物質摂取量を推計する。
- 暴露推定に用いるモデルには技術的な限界があり、推定結果には大きな不確実性があることに留意する必要がある

VII.3 環境中濃度等の空間的分布の推計

ここでは様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオに適用する、地理情報を活用した数理モデルを用いた環境中濃度等の全国的な空間分布の推計方法を説明する。

VII.3.1 多媒体環境動態予測モデル G-CIEMS

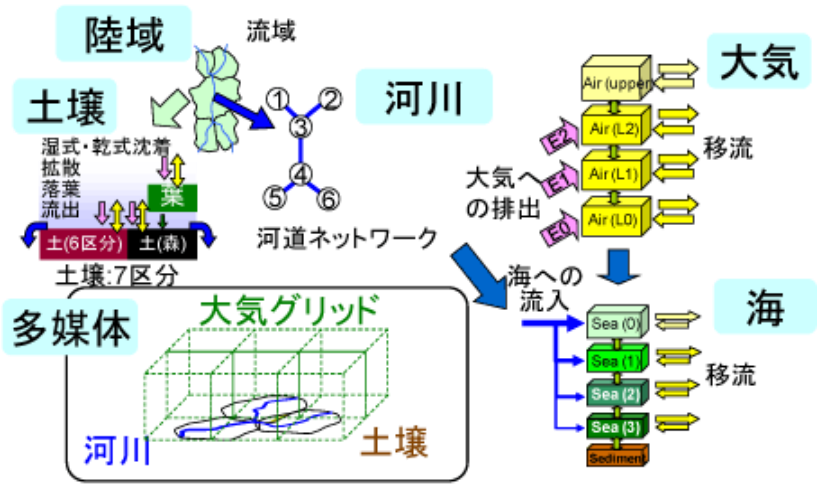
本節では、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおいて環境中濃度等の空間的分布を推計するために用いられる、G-CIEMS（Grid-Catchment Integrated Environmental Modeling System）[1,2,3]について解説する。

VII.3.1.1 多媒体環境動態予測モデル G-CIEMS に基づく環境中濃度等の空間的分布の推計

G-CIEMS は、国立環境研究所で開発された、詳細な空間分解能を持つ多媒体環境動態予測モデルである。環境中に放出された化学物質は、大気、水、土壌、底質等の媒体間を移動あるいは分配され、大気に放出したものが粒子に吸着して地表面に沈着したり、あるいは河川に排出された物質が揮発して大気に移動したりする。同時に、大気中の化学物質は風に乗って移動することもあり、河川水中の化学物質は川の流れに乗って下流へ移動し、また他の流域からの流れと合流して希釈される。

本モデルは、GIS（地理情報システム）で用いる地理データに基づき、このような多媒体の媒体間の輸送と、大気、河川等での輸送との両方を同時に計算して、媒体間の輸送や分配と地点間の輸送と同時に推定する環境モデルである。

[1] 国立環境研究所 環境リスク・健康領域 リスク管理戦略研究室、曝露評価関連シミュレーションモデル＆ツール　https://www.nies.go.jp/rcer_expoass/gciems/gciems.html
[2] Suzuki N, Murasawa K, Sakurai T, Nansai K, Matsuhashi K, Moriguchi Y, Tanabe K, Nakasugi O, Morita M., Geo-Referenced Multimedia Environmental Fate Model (G-CIEMS). Model formulation and comparison to the generic model and monitoring approaches, *Environ. Sci. Technol.* 2004, 38, 5682-5693 (2004)
[3] 鈴木規之、村澤香織、松橋啓介、南齋規介、桜井健郎、森口祐一、田邊潔、中杉修身、森田昌敏、全国河川の河道構造データに基づく化学物質の GIS 河川動態モデル（G-CIEMS）の開発と空間分布評価の試み、環境化学、15, 385-395 (2005)



図表 VII.5　多媒体環境動態予測モデル G-CIEMS の構造模式図

評価Ⅱでは、評価Ⅰと比べて評価対象物質が有する情報の多寡に応じて、複数の情報源や複数の推計手法を用いることとしている。

暴露評価Ⅱでは、地理的な情報を含む排出量情報が得られる場合、その情報を用いて、より詳細な数理モデルを用いた暴露評価を行うこととしている。この地理的な情報を含む排出量情報として「メッシュ排出量データ」が作成できる場合には、G-CIEMS を用いて大気、水域、土壌、底質及び植生の環境中濃度の推計を行う。

G-CIEMS では、日本全国の大気メッシュ（3 次メッシュ又は 2.5 次（5 倍地域メッシュ））や河川・土壌の小流域単位への排出量を入力とし、それを図表 VII.5 に示すような環境中動態を考慮したモデルで評価することで、多媒体間の分配も考慮した空間的な濃度分布を推計する。メッシュ排出量データは、排出量推計（IV 章を参照。）に示すように、例えば、対象物質の PRTR 情報の届出排出量や届出外排出量をもとに、媒体間の排出量の按分を考慮し、地図上の区画（メッシュ）ごとに割り振ることで作成することができる。利用する排出量の詳細は、Ⅳ章の様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおける排出量推計に関する記載を参照されたい。

この数理モデルの特徴は、広範な地域における非点源排出（線源・面源）に分類される排出源であっても、その大気中の移流拡散や河川の上流から下流への移動等の空間的スケールと、長期的な水質・底質間の分配、土壌や植生への蓄積等の時間的スケールを含めた動態を評価できることである。この数理モデルで、十分に長い時間が経過し定常状態に到達した時の濃度を推計することにより、全国の各媒体への排出量を同時に考慮した濃度を評価することができる。

ここでは G-CIEMS を用いて、以下の推計を行う。各項目の具体的な内容は本節の VII.3.1.2 以降で後述し、モデルについては次節 VII.3.2 と付属資料 VII.5.3 で説明する。

・　環境媒体中のメッシュ単位での濃度（大気）及び流域単位での濃度（水域、土壌、底

質、植生）
- 環境媒体中の流域又はメッシュ単位での人の摂取量
- 環境媒体中の流域単位での水生生物・底生生物の暴露濃度
- 環境媒体間の分配比率

VII.3.1.2 モデルの概要

(1) モデルの概要

本モデルは、標準的には別途既に公表されている G-CIEMS 用河道等構造データベース[1]に基づき、日本全国を

- 大気は約 5km グリッド（2.5 次メッシュ）又は約 1km のグリッド（3 次メッシュ）
- 地表面は平均 9.3km^2 ほどの小流域
- 河川は平均河道長 5.7km の河道

などとして扱う。化審法リスク評価ではこれら陸域環境及び海域環境のうち、陸域環境を利用する。

モデル内で計算する陸域における主な動態過程として

1. 大気については、大気グリッド間の移動と沈着、分解、地表面との交換などの過程。
2. 河川（湖沼）については、河道の水の流れにしたがっての流下と、水中における分解、粒子状物質との分配、底質への沈降、大気との交換などの過程。
3. 土壌については、小流域から対応する河道への流出、土壌内での分解、地下水への移行、大気との交換などの過程。
4. 底質については、河川や湖沼の水との交換。

を記述している。大気グリッド毎の大気中の濃度及び河道毎の河川水中の濃度、小流域における土壌中の濃度、底質の濃度等を出力する。

(2) 数理モデルの概念

G-CIEMS の基礎的なモデルの考え方[2]は、Mackay のフガシティに基づく定式化を用いている。本モデルのうち陸域については、環境コンパートメントを大気、水質（河川、湖沼

[1] 鈴木規之、村澤香織、南齋規介、桜井健郎、森口祐一、田邊潔、中杉修身、森田昌敏、環境動態モデル用河道構造データベース、国立環境研究所研究報告第 179 号 R-179(CD)-2003、国立環境研究所（2003）

[2] Suzuki N, Murasawa K, Sakurai T, Nansai K, Matsuhashi K, Moriguchi Y, Tanabe K, Nakasugi O, Morita M., Geo-referenced multimedia environmental fate model(G-CIEMS): Model formulation and comparison to the generic model and monitoring approaches, *Environ. Sci. Technol.* 2004, 38, 5682-5693

及び海域)、底質（河川及び湖沼)、土壌（土地利用区分別）及び植生とで構成している。

本モデルは、Mackay のフガシティモデルのレベル IV 相当（非平衡・非定常・開放系）のダイナミック（時間変化も考慮する）モデルとして、排出量に基づく環境中濃度を計算することが可能であるが、時間変化に対するフガシティの変量が一定以下になるような擬定常状態[1]として解くことにより、Mackay のフガシティモデルのレベル III 相当（非平衡・定常・開放系）を解くことができる。このレベル III とは、化学物質の排出量が一定のときに無限時間後に到達する濃度に相当し、局所的な平衡と大域的な非平衡・定常の仮定によって得られるものである。このレベル III 相当の結果は、化審法における継続的な環境への化学物質の排出に対する環境中濃度の評価に適していると考えられることから、このレベル III 相当の結果を評価に用いる。

VII.3.1.3 モデル入力データ

モデルに対する入力値としては

a. 環境への化学物質の排出量として、大気グリッド、小流域単位での土壌、小流域単位での河道それぞれへの排出量、及び下水道への移動量の入力。
b. 化学物質の物理化学的性状値、下水処理施設での大気揮散割合・下水除去率、合併浄化槽での除去率、流達率。
c. 小流域、河道などの地理データ。
d. 気象、水文等のデータ。

が必要である。これらの入力値のうち、c、d については標準的なデータ[2]が用意されている。a、b の排出量と物理化学的性状値等については基本的に物質別に用意する。

VII.3.1.4 排出源ごとの暴露シナリオとの比較

G-CIEMS を用いた環境中濃度等の全国的な空間分布の推計では、約 5km グリッド（2.5 次メッシュ)、約 1km のグリッド（3 次メッシュ）又は小流域単位に区分し、区分ごとに多媒体の媒体間の輸送と、大気、河川等での輸送との両方を同時に計算し環境中濃度を推定している。排出源ごとの暴露シナリオと空間分解能を持つモデルでの暴露状況の推計とで空間スケールや推計内容等を対比したものを図表 VII.6 に示す。

[1] pseudo-steady-state
[2] 鈴木規之ら、環境動態モデル用河道構造データベース、国立環境研究所研究報告第 179 号 R-179(CD)-2003、国立環境研究所 (2003)に収載されてるものを利用している。

図表 VII.6　排出源ごとの暴露シナリオと空間分解能を持つモデルでの暴露状況の推計における評価スケールや推計内容等の比較

項目	排出源ごとの暴露シナリオ	空間分解能を持つモデルでの暴露状況の推計
評価空間スケール	排出源の周辺半径 1～10km のエリア	5km メッシュ（1km メッシュも選択可能）、小流域単位
推計に必要な化学物質の情報	・ 物理化学的性状一式 ・ 排出源ごとの排出量（大気、水域の媒体別） ・ 土壌中の分解速度（又は半減期）	・ 物理化学的性状一式 ・ 下水処理率、流達率 ・ メッシュや小流域ごとの排出量（大気、水域、土壌の媒体別） ・ 媒体ごと（大気、水域、土壌、底質）の分解速度（又は半減期）
推計する内容	以下の項目について排出源周辺のエリア内平均値を推計 ・ 媒体別の環境中濃度 ・ 人の摂取量	評価空間スケール別に以下の項目について推計 ・ 媒体別の環境中濃度 ・ 人の摂取量
長所	・ 推計濃度は暴露シナリオの設定次第で排出源近傍の高濃度や高暴露集団の把握に適する	・ 推計濃度は各媒体で濃度の空間分布の把握に適する。 ・ モニタリング濃度との比較による、実態と推定の整合性を踏まえた評価に適する。
短所又は留意点	・ 大気への排出と水域への排出でシナリオが分かれ、媒体間移動の考慮は限定的 ・ 環境中での分解の半減期の考慮は土壌のみ	・ 他のモデルと比較して、計算が複雑である。

VII.3.2 モデルの特徴

VII.3.2.1 考慮する動態過程

本モデルでは、Mackay Multimedia Environmental Models – The Fugacity Approach で考慮されている動態過程を参考としてモデルを構築している[1]。

本モデルにおいて考慮する動態過程を図表 VII.7～図表 VII.14 に示す。

(1) 大気メッシュ

大気は一定の区画がグリッド状に連なるメッシュとして定義しており、さらにそのメッシュが図表 VII.8 に示すような複数の層を持つ構造としている。

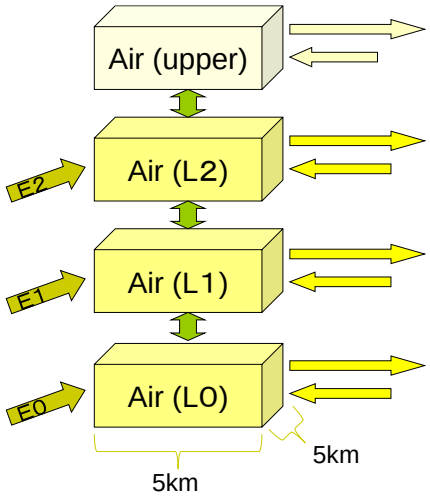
化学物質は下層に排出されるものとし、気温、降水量等の気象条件を用い、移流・拡散項としてメッシュ間の移流をメッシュ境界における年間平均風速をもとに移動量を計算するほか、河川、土壌等の地上区画との間での分配や沈着等の媒体間輸送を考慮する

大気メッシュにおいて考慮している動態過程を図表 VII.7 に示す。

[1] Donald Mackay, Multimedia Environmental Models – The Fugacity Approach, Second Edition (CRC Press LLC, 2001)

図表 VII.7　大気メッシュにおいて考慮している動態過程

種類	考慮している動態過程
生成・投入項	化学物質の大気への排出 （境界外からの流入）
平衡分配項	粒子・蒸気分配
移流・拡散項	周辺の大気メッシュとの移流交換 大気の複数層間の交換 水区画との交換（乾性沈着、湿性沈着、揮発、溶解） 土壌区画との交換（揮発、巻き上げ、乾性沈着、湿性沈着）
分解・消失項	大気中（蒸気相、粒子相）での分解 （境界外への流出）



図表 VII.8 大気区画の構造

(2) 水区画（河道）

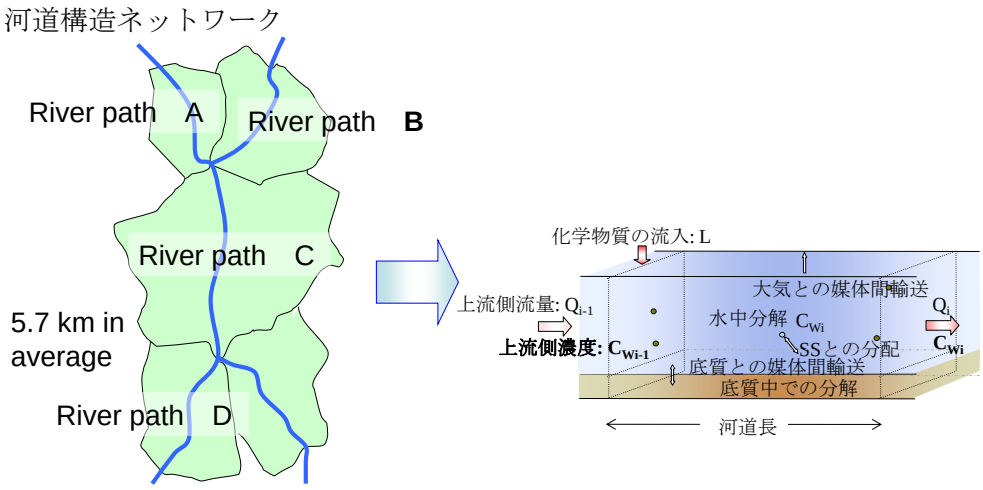
水区画（河道）は、図表 VII.10 に示すような G-CIEMS 用河道等構造データベースの河道ネットワーク情報を用いて、上流から下流に至るまでの流路における計算等を行う。湖沼も面積をもつ河道として扱う。モデルでは単位流域を、河道と周囲の流域（土壌）の組み合わせで表しており、河道とその周囲の流域は、ほぼ 1 対 1 の対応となっている。

化学物質は河川水中に排出されるものとし、GIS 上の河道ネットワーク上における移流・拡散と、水界内での平衡分配、底質及び大気からの沈着や分配等の媒体間輸送、土壌区画からの表面流出による流入等を考慮する。

水区画において考慮している動態過程を図表 VII.9 に示す。

図表 VII.9　水区画において考慮している動態過程

種類	考慮している動態過程
生成・投入項	化学物質の水域への排出
平衡分配項	浮遊状粒子・溶解分配
移流・拡散項	大気メッシュとの交換（乾性沈着、湿性沈着、揮発、溶解） 上流からの流入・合流 下流への流出・分流 土壌区画からの流入 底質区画との交換
分解・消失項	水中（溶存態、粒子態）での分解



図表 VII.10　水区画（河道）の構造

(3) 土壌区画及び植生区画

土壌区画は、土地利用区分別に 6 種類（水田、畑地、果樹園等、荒地、市街地、競技場等）の土壌区画及び森林植生土壌区画で表されている。

また、森林植生区画は、森林植生土壌区画の上部にあるものとして表されている。

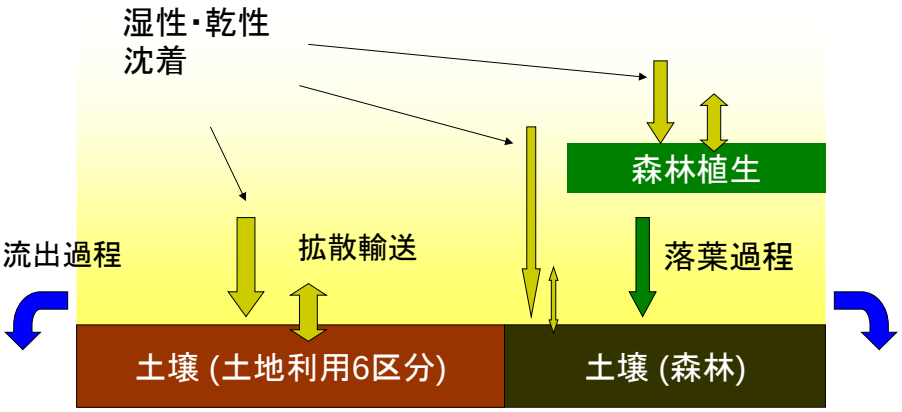
化学物質は土壌に排出されるものとし、土壌内での平衡分配、大気や植生との沈着や分配等の媒体間輸送、土壌区画からの表面流出による流出等を考慮する。土壌区画において考慮している動態過程を図表 VII.11 に、植生区画において考慮している動態過程を図表 VII.12 に示す。

図表 VII.11　土壌区画において考慮している動態過程

種類	考慮している動態過程
生成・投入項	化学物質の土壌への排出
平衡分配項	土壌粒子・間隙水／空気分配
移流・拡散項	大気メッシュとの交換（揮発、巻き上げ、乾性沈着、湿性沈着、植生との直接交換、植生（葉上）への乾性沈着、湿性沈着） 水区画への輸送（表土流出（runoff）、溶脱(leaching)、侵食(erosion)） 植生からの輸送（落葉）
分解・消失項	土壌バルク中での分解

図表 VII.12　植生区画において考慮している動態過程

種類	考慮している動態過程
生成・投入項	なし
平衡分配項	水／空気／有機炭素分配
移流・拡散項	大気メッシュとの交換（植生との直接交換、植生（葉上）への乾性沈着、湿性沈着） 土壌への輸送（落葉）
分解・消失項	植生バルク中での分解



図表 VII.13　土壌区画の構造

(4) 底質区画

底質区画は、水区画（河道）の下部にあるものとして表している。

底質区画において考慮している動態過程を図表 VII.14 に示す。

図表 VII.14　底質区画において考慮している動態過程

種類	考慮している動態過程
生成・投入項	なし
平衡分配項	粒子・間隙水分配
移流・拡散項	水区画との交換 地下水への溶出
分解・消失項	底質の埋没 底質バルク中での分解

(5) パラメータの設定

① 河道ネットワーク構造

国立環境研究所の G-CIEMS 用河道等構造データベースを更新したものを用いる。河道ネットワーク構造は、国土交通省において整備された国土数値情報に基づき整理したものである。

また、湖沼は面積をもつ河道として扱う。

② 環境パラメータ

水文学的パラメータについては、国立環境研究所の G-CIEMS 用河道等構造データベースを用いる。このデータベースでは、50m メッシュ標高データより推定した河道勾配、流量年報等から推定したデフォルト流量等を設定している。

気象条件については、大気メッシュ間の移流交換等を考慮する上で、各メッシュに風速の年間平均値を設定している。

③ 温度依存性パラメータ

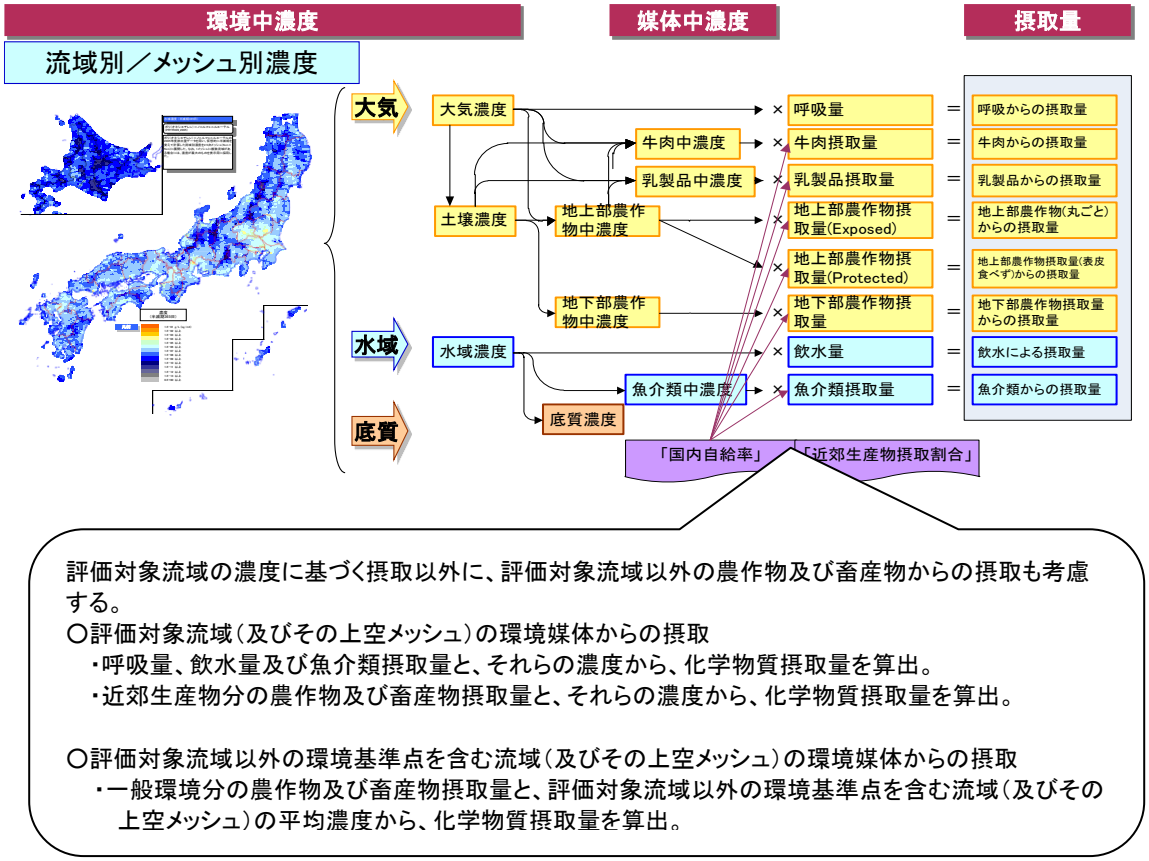
G-CIEMS では蒸気圧、ヘンリー係数、オクタノール／水分配係数、各種分解速度定数について、計算する地点における気温を考慮した温度依存性の補正をした上で計算している。G-CIEMS では、気温 25℃における値を設定し、次章に示す温度依存性のパラメータを設定して計算するものとする。

VII.3.2.2 モデル推計結果からの人の摂取量の算出

G-CIEMS によりメッシュごと・流域ごとの媒体別濃度が推定されるが、人への暴露量を推定するためには、媒体別濃度から人の摂取量を算出する必要がある。モデルにより推計された濃度から摂取媒体別の濃度を算出する手法の多くはⅤ章と同様である。ただし、Ⅴ章の排出源ごとの暴露評価のモデルと異なり全国的な空間分布の推計が可能であるため、当該流域における水域とその上空のメッシュ大気（流域上空にある複数メッシュにおける最大濃度を示す大気）を経由した摂取（局所摂取量合計）以外に、その人が他の地域からの媒体から化学物質を摂取する量の合計（広域摂取量合計）について考慮することができる。広域摂取量を考慮可能な摂取媒体は、他の地域から当該摂取媒体を摂取することが想定される摂取媒体である農作物及び畜産物であり、排出源周辺の摂取（近郊生産物の摂取）以外の摂取（一般環境）を用いる必要がある。このため、当該流域以外の流域の農作物や畜産物について、流域面積に比例して平均的に摂取することを想定して、農作物（地上部農作物、地下部農作物）及び畜産物（牛肉、乳製品）からの摂取量を算出する。計算の詳細については、付属資料 VII.5.4 に記述する

環境中濃度と摂取媒体中濃度、摂取量との関係について、図表 VII.15 にまとめた。なお、環境中濃度から媒体中濃度への推定や媒体摂取量による摂取量の算出などについては、

様々な仮定をおいた計算となっており、モデルに技術的な限界があることから推定結果には大きな不確実性があり、例えば個別地点の実態を必ずしも反映していない。



評価対象流域の濃度に基づく摂取以外に、評価対象流域以外の農作物及び畜産物からの摂取も考慮する。

○評価対象流域（及びその上空メッシュ）の環境媒体からの摂取
- 呼吸量、飲水量及び魚介類摂取量と、それらの濃度から、化学物質摂取量を算出。
- 近郊生産物分の農作物及び畜産物摂取量と、それらの濃度から、化学物質摂取量を算出。

○評価対象流域以外の環境基準点を含む流域（及びその上空メッシュ）の環境媒体からの摂取
- 一般環境分の農作物及び畜産物摂取量と、評価対象流域以外の環境基準点を含む流域（及びその上空メッシュ）の平均濃度から、化学物質摂取量を算出。

図表 VII.15　環境中濃度と摂取媒体中濃度、摂取量との関係

VII.4 残留性の評価

VII.4.1 目的等

リスク推計を目的として環境中濃度等の推計や人の摂取量を推計する暴露評価とは別に、暴露評価Ⅱでは残留性の評価と呼ばれる評価も行う。これは化学物質の環境中での残留性を評価することを目的とする。

化審法制定の契機となったポリ塩化ビフェニル（PCB）や残留性有機汚染物質（POPs: Persistent Organic Pollutants）のような難分解性の化学物質が大量に使用され環境中に放出されると、環境中に長期間残留し環境汚染が長期間継続する。化審法においては、難分解性かつ高濃縮性を有する化学物質は監視化学物質に指定され、優先評価化学物質から第二種特定化学物質へのルートとは別途管理される。しかし、高濃縮性を有しない難分解性の優先評価化学物質に対しても環境中の残留性を把握しておくことは、POPs のような環境汚染を引き起こす可能性がある物質を見い出したり、環境中濃度の将来のトレンドを予測するうえ等で役立つものと考えられる。

環境中の残留性を評価するには環境モニタリング情報を収集し媒体中の経年的な実際の検出状況を確認する方法や、モデルを用いて残留性に関わる指標を推計する方法等がある。

以下では多媒体モデルを用いた環境中での残留性の評価手法について説明する。

VII.4.2 多媒体モデルの利用

OECD は環境残留性のある化学物質である POPs や難分解性・生物蓄積性・有害性物質（PBT 物質：Persistent,Bio-accumulative and Toxic 物質）の環境中残留性と長距離移動性を評価するためにも多媒体モデルの利用を推奨しており、その際に利用できるモデルを図表 VII.16 のように 5 種類（一般的レベルⅡから大規模動的シミュレーション）に分類している。本スキームでは、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計（VII.2.2.3 ）と同じく、MNSEM3βNITE 版（図表 VII.16 ではサイト特異的レベルⅢに該当する）を用いて残留性を評価する。

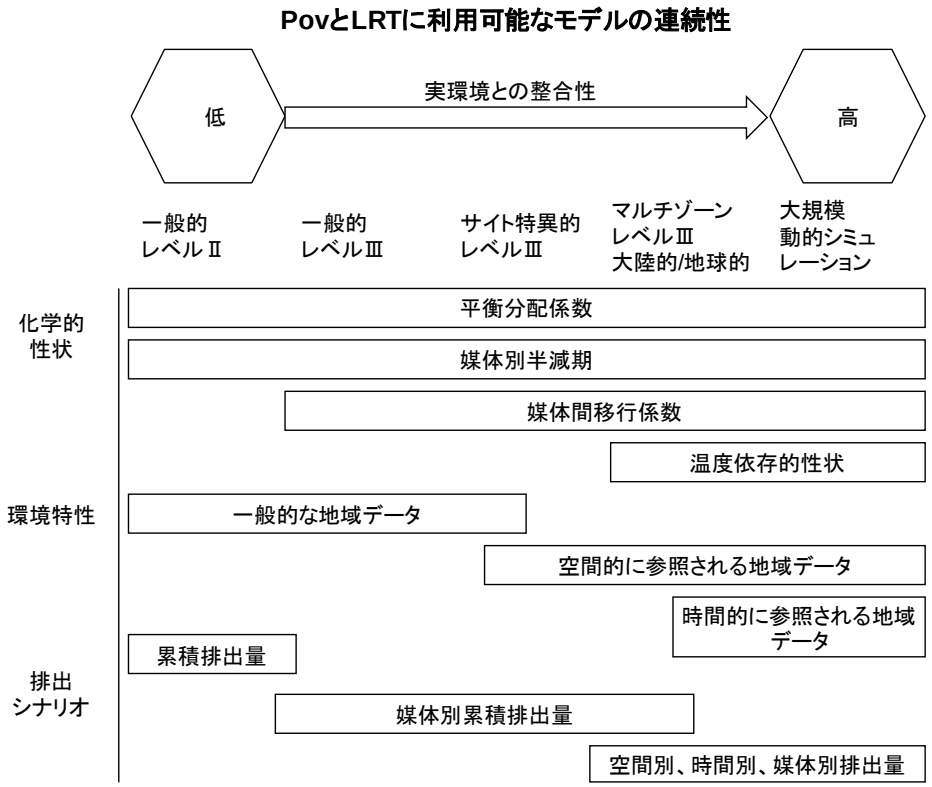


図3-1.PovとLRTPの推計に利用可能な多媒体環境運命モデルの連続性の説明

図表 VII.16　環境残留性(Pov)及び長距離移動性(LRTP)を評価するためのモデルタイプ[1]

VII.4.2.1 推計項目

残留性の評価では、MNSEM3βNITE 版を使って次の項目を残留性の指標として推計する。

- 環境中での総括残留性 Pov（広域・定常状態における）
- 定常状態到達時間

以下、順に説明する。

(1) 環境中での総括残留性

環境中での残留性の指標として総括残留性 Pov（overall persistence の略）というものを用いる。OECD の文書[2]において、Pov を用いて POPs の残留性を評価する方法が解説

[1] OECD (2004) Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environment Persistance and Long-Range Transport. OECD Series on Testing and Assessment No. 45. 3.2.3. Selecting the Appropriate Model

[2] OECD (2004) Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistance and Long-Range Transport. OECD Series on Testing and Assessment No. 45. 4.1.1 Persistence.

されている。ここでは、OECD の文書において提示されている計算式[1]のうちの１つを、本スキームで用いている多媒体モデル MNSEM3βNITE 版に当てはめる。Pov の値が大きいほど環境残留性が高いとみなせる。

Pov は、POPs と POPs ではない物質（non-POPs）といった比較対照となる複数の Reference chemical（対照物質）の数値と、評価対象物質の数値とを相対比較することによって評価する。POPs として第一種特定化学物質、non-POPs として第二種特定化学物質や良分解性物質といったように、本スキームでは対照物質に分解性・蓄積性の観点から化審法上の異なる区分の物質から複数選定する。これら対照物質の Pov と評価対象物質の Pov とを比較することにより、残留性としてはいずれの区分の物質に類似するのかを概観できる。

(2) 定常状態到達時間

本項目では化学物質が定常状態（ある媒体への化学物質の流入速度と消失速度がつりあった状態で、その流入速度の下では存在量に変化がない状態）に達する時間を媒体別に推計する。本スキームでは定常時の化学物質の存在量の 99%に達する時間として計算する[2]。

VII.4.2.2 数理モデルの適用

総括残留性 Pov の値を求めるには、式 VII-2 のように、各媒体での定常状態の化学物質量と各媒体での化学物質の減少速度を用いて計算する。ここで、VII.2.2.4 での式 VII-1 で右辺＝0 と仮定し、各媒体での定常状態の化学物質量 M_i を求め、$A_{i,j}$、$I_{j,i}$ 及び k_i から各媒体での化学物質の減少速度を求める。

総括残留性 Pov＝Σ各媒体での定常状態の化学物質量／｛Σ（各媒体での定常状態の化学物質量×各媒体での化学物質の減少速度）｝

式 VII-2

Σは全媒体（大気相、水域相、土壌相、底質相）についての合計とする。

一方、定常状態到達時間を求めるには、VII.2.2.4 での式 VII-1 を時間の関数として解いた式を用い、定常状態の化学物質の存在量の 99%に到達する時間を推計する。

---

[1] 上記の OECD の文書では Pov の計算上の定義として、定常状態における総残留時間と、クリアランス時間の２つが記載されているが、ここでは定常状態における総残留時間を用いる。なお、クリアランス時間に対しては VII.5.2.6 (2)を参照。

[2] 定常状態到達時間は残留性と正確に同一の指標ではないと考えられるが、対象物質に適用された多媒体モデルの時定数を反映することにより、対象物質を長期間環境に排出した場合のトレンドに関連する予測意義を持つと考えられる。

VII.5 付属資料

VII.5.1　はじめに

この付属資料では、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオで使用する数理モデルに関して、具体的な数式やパラメータ一式、それらの数式やパラメータを選択した経緯等を収載する。

本編（VII.4 までのこと）では数理モデルの概要をなるべく数式を使わない形で記載していたが、この付属資料では数理モデルを出来る限り数式を用いて正確な形で記載している。

必要に応じて本編と同じ説明を繰り返している箇所もあるが、全ての内容を再度説明しているわけではない。読者が本編の該当箇所に目を通していることを前提にして記載している点に留意されたい。

VII.5.2　広域的・長期的スケールの暴露状況の推計と残留性の推計に用いる数理モデル

ここでは、本編 VII.2 の広域的・長期的スケールの暴露状況の推計と、本編 VII.4 の残留性の推計に用いる数理モデル MNSEM3βNITE 版[1]を説明する。

VII.5.2.1 数理モデルの概要

(1) モデル推計に用いる情報

MNSEM3βNITE 版を用いたモデル推計に必要な情報と数値を以下に示す。

① 化学物質の情報

MNSEM3βNITE 版で使用する化学物質の情報を図表 VII.17 に示す。

[1] MNSEM の開発者である吉田喜久雄氏より MNSEM3β（MNSEM2（version 2.0）の改良版）の提供を NITE が受け、本スキームの中で一部変更を加えて使用している。変更箇所については後述の VII.5.2.1 (2)に記載している。MNSEM に係る資料等は以下のとおり。

- 株式会社三菱化学安全科学研究所（1998) Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model version 2.0 ユーザーズマニュアル.
- 国立環境研究所が公開している MNSEM のページ http://w-chemdb.nies.go.jp/mnsem2/MNSEM.htm
- Yoshida, K., T. Shigeoka and F. Yamauchi. (1987) Multi-Phase Non-steady State Equilibrium Model for Evaluation of Environmental Fate of Organic Chemicals, Toxicol. Environ. Chem. 15(3) 159-183.

図表 VII.17　MNSEM3βNITE 版で用いる化学物質の情報

記号	説明	単位	出典・参照先※
MW	分子量	—	
WS	水溶解度	[mg/L]	
VP	蒸気圧	[Pa]	
MP	融点	[℃]	
logPow	1-オクタノールと水との間の分配係数	—	
Henry	ヘンリー係数	[Pa・m^3/mol]	
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]	
BCF	生物濃縮係数	[L/kg]	
	大気中分解速度定数	[1/day]	
	水域中分解速度定数	[1/day]	
	土壌中分解速度定数	[1/day]	
	底質中分解速度定数	[1/day]	

※　いずれの情報も評価の準備（Ⅰ章）で選定された数値を用いる。

② 環境条件の情報

MNSEM3βNITE 版で使用する環境条件の情報を図表 VII.18 に示す。

図表 VII.18　MNSEM3βNITE 版で用いる環境条件情報

記号	説明	単位	値	出典･参照先
SUA	評価環境面積	[m^2]	3.8×10^{11}	日本の陸地面積[1]
TEMP	環境温度	[℃]	20	MNSEM UM[2]デフォルト
LLS	陸地面積比	—	0.8	MNSEM UM デフォルト
大気コンパートメント				
AFR	風速	[m/sec]	2.0	※1
TRF	降水量(年間)	[mm/year]	1500	MNSEM UM デフォルト
DEP_A	大気コンパートメントの高さ	[m]	200	MNSEM UM デフォルト
CAER	浮遊粒子濃度	[mg/m^3]	0.03	MNSEM UM デフォルト
DEN_{AER}	浮遊粒子密度	[kg/m^3]	1500	MNSEM UM デフォルト
DAER	浮遊粒子径	[μm]	10	MNSEM UM デフォルト
水域コンパートメント※2				
DEP_W	水域深度	[m]	10	MNSEM UM デフォルト
CWSS	懸濁粒子の濃度	[mg/L]	50	MNSEM UM デフォルト
CWB	水生生物の濃度	[mg/L]	5	MNSEM UM デフォルト
OC_{SS}	懸濁粒子有機炭素含有率	—	0.1	REACH-TGD[3] Chapter R.16.6.4. Table R.16-9　※3
KWAD	水域移流速度定数	[1/day]	0.1	MNSEM UM デフォルト
KSV	懸濁粒子沈降速度	[m/day]	0.5	MNSEM UM デフォルト

[1] 総務省統計局「日本の統計 2009」(http://www.stat.go.jp/data/nihon/index.htm)
[2] 三菱化学安全科学研究所(1998) Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model version 2.0 ユーザーズマニュアル　（以下 MNSEM UM と呼ぶ）
[3] ECHA (2010) Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.16: environmental exposure estimation, version: 2

記号	説明	単位	値	出典･参照先
土壌コンパートメント				
DEP_{SO}	土壌相深度	[m]	0.2	MNSEM UM デフォルト
SOAF	土壌空気容積比	—	0.2	MNSEM UM デフォルト
SOWF	土壌水容積比	—	0.3	MNSEM UM デフォルト
OC_{SOS}	土壌粒子有機炭素含有率	—	0.04	MNSEM UM デフォルト
DEN_{SOS}	土壌粒子密度	[kg/L]	1.5	MNSEM UM デフォルト
ETP	土壌水分蒸散率	—	0.35	MNSEM UM デフォルト
ERS	土壌侵蝕速度	[m/year]	0.0002	MNSEM UM デフォルト
底質コンパートメント				
DEP_{SE}	底質相深度	[m]	0.05	MNSEM UM デフォルト
POSE	底質水容積比	—	0.75	MNSEM UM デフォルト
OC_{SES}	底質粒子有機炭素含有率	—	0.1	REACH-TGD デフォルト※3
DEN_{SES}	底質粒子密度	[kg/L]	2	MNSEM UM デフォルト

※1　1994 年度から 2003 年度までの全国約 800 地点のアメダス気象観測データの中央値を求めた。
※2　MNSEM UM のマニュアルでは表層水と呼んでいるが、ここでは水域という表現で統一する。
※3　排出源ごとの暴露シナリオ（Ｖ章参照）では底質中濃度を推計する際に懸濁粒子の性状を用いる REACH-TGD の手法を利用している。ここでの懸濁粒子有機炭素含有率の値もそれに合わせた。

③ 食品摂取量の情報

MNSEM3βNITE 版で使用する食品摂取量等の情報を図表 VII.19 に示す。これらの値の設定の経緯等についてはＶ章の食品摂取量等の設定の経緯に関する記載を参照のこと。

図表 VII.19　MNSEM3βNITE 版で用いる食品摂取量等の情報

説明	単位	値	出典･参照先
人の体重	[kg]	50	V.7.5.5 (2)①
人の吸入摂取量（大気）	[m^3/day]	20	V.7.5.5 (2)②
人の地下部農作物の摂取量	[g/day]	163.7	V.7.5.5 (2)③
人の地上部農作物(Protected)の摂取量	[g/day]	240.8	V.7.5.5 (2)③
人の地上部農作物(Exposed)の摂取量	[g/day]	204.7	V.7.5.5 (2)③
人の乳製品の摂取量	[g/day]	72.4	V.7.5.5 (2)④
人の牛肉の摂取量	[g/day]	9.4	V.7.5.5 (2)④
人の魚介類の摂取量	[g/day]	45.3	V.7.5.5 (2)⑤
人の飲水量	[L/day]	2	V.7.5.5 (2)⑥

(2) MNSEM3βNITE 版の変更点

MNSEM3βNITE 版において、オリジナルの MNSEM2 から変更した箇所は以下のとおりである。

①環境条件及び食品摂取量等

前述したように環境条件と食品摂取量等は図表 VII.18 と図表 VII.19 の値を用いる。

②農作物中濃度の推計

暴露評価と同じく、農作物を地下部農作物、地上部農作物（Exposed）、地上部農作物（Protected）に分けて、農作物中濃度推計式を排出源ごとの暴露シナリオで示した推計式（Ⅴ章の農作物中濃度の推計に関する記載を参照）に変更した。この結果、地上部農作物（Exposed）でのガス態の化学物質の取り込み期間は排出源ごとの暴露シナリオと同じく 60 日に制限していることになる。

ただし、媒体中濃度等（大気中濃度、大気中における粒子吸着態とガス態存在割合、大気からの沈着量、土壌間隙水中濃度）の推計は MNSEM2 と同じである。

③分解速度定数

分解速度定数は MNSEM2 に組み込まれている推計式を用いるのではなく、物質ごとに文献等から収集した値を用いることとした。分解速度の収集・選定の方法等は I 章を参照。

④牛肉及び乳製品の生物移動係数

牛肉及び乳製品の生物移動係数は logPow の関数であるが、排出源ごとの暴露シナリオと同じく、EUSES III.5.2.3.を参考に牛肉は「1.5＜logPow＜6.5」、乳製品は「3＜logPow＜6.5」という制限を設けた（「Ⅴ.7.3.4　畜産物中濃度の推計」参照）。制限を超えた場合は上限値または下限値に置き換えた。

⑤飲料水中濃度の推計

飲料水中濃度の推計に用いる水域中濃度は排出源ごとの暴露シナリオと同じく、溶存態濃度とした（「Ⅴ.7.3.5（1）河川水中濃度（人の健康評価）)。

⑥魚介類中濃度の推計

排出源ごとの暴露シナリオと同様に BMF（「Ⅴ.7.3.5（2）魚介類中濃度」参照）を考慮して推計することとした。

⑦土壌の非意図的摂取

土壌の非意図的摂取は本スキームの暴露シナリオに含まないため考慮しなかった。

VII.5.2.2 推計方法

MNSEM3βNITE 版を用いて推計する項目は以下の 4 種類である。

・　環境媒体間の分配比率（広域・定常状態における）（本編 VII.2）
・　人の摂取量の摂取媒体別比率（広域・定常状態における）（本編 VII.2）
・　環境中での総括残留性（広域・定常状態における）（本編 VII.4）
・　定常状態到達時間（本編 VII.4）

これらを推計する目的等については本編の該当箇所を参照されたい。以下では上記推計項目について MNSEM3βNITE 版を用いた具体的な推計方法について順に説明する。

VII.5.2.3 環境媒体間の分配比率（広域・定常状態における）

MNSEM3βNITE 版では、大気、水域、土壌及び底質の 4 種類の相（環境媒体）で構成される環境中での化学物質の物質収支は式 VII-3 の 4 元連立 1 次微分方程式で表される。上から順に大気相、水域相、土壌相、底質相の物質収支を表している。

係数 A(1,1)～A(4,4)は 1 が大気相、2 が水域相、3 が土壌相、4 が底質相を示すものとし、A(i,j)は j 相から i 相へ化学物質が移行する際の 1 次速度定数に相当する。また、i と j が同じ相の場合には、その相における損失の 1 次速度定数に相当する。時間 t に依存するのは式 VII-3 の *MSA*、*MSW*、*MSSO*、*MSSE* であり、係数 A(1,1)～A(4,4)や排出量 *TEMA*、*TEMW*、*TEMW* は定数である。また、係数 A(1,1)～A(4,4)は排出量 *TEMA*、*TEMW*、*TEMS* に依存しない。

$$\begin{cases} \dfrac{dMSA}{dt} = TEMA + A(1,1) \times MSA + A(1,2) \times MSW + A(1,3) \times MSSO + A(1,4) \times MSSE \\ \dfrac{dMSW}{dt} = TEMW + A(2,1) \times MSA + A(2,2) \times MSW + A(2,3) \times MSSO + A(2,4) \times MSSE \\ \dfrac{dMSSO}{dt} = TEMS + A(3,1) \times MSA + A(3,2) \times MSW + A(3,3) \times MSSO + A(3,4) \times MSSE \\ \dfrac{dMSSE}{dt} = A(4,1) \times MSA + A(4,2) \times MSW + A(4,3) \times MSSO + A(4,4) \times MSSE \end{cases}$$

式 VII-3

式 VII-3 は行列を使って書き直すと以下のようになる。

$$\frac{d}{dt}M = I + A \cdot M$$

式 VII-4

ただし、$M = \begin{pmatrix} MSA \\ MSW \\ MSSO \\ MSSE \end{pmatrix}$、$I = \begin{pmatrix} TEMA \\ TEMW \\ TEMS \\ 0 \end{pmatrix}$、$A = \left(A(i,j)\right)_{i=1\cdots4,\, j=1\cdots4}$ である。

記号	説明	単位	値	出典・参照先
MSA	大気相中の化学物質量	g		MNSEM UM 3.5
MSW	水域相中の化学物質量	g		MNSEM UM 3.5
MSSO	土壌相中の化学物質量	g		MNSEM UM 3.5
MSSE	底質相中の化学物質量	g		MNSEM UM 3.5
TEMA	大気相への化学物質排出量	g/day		Ⅳ章
TEMW	水域相への化学物質排出量	g/day		Ⅳ章
TEMS	土壌相への化学物質排出量	g/day		Ⅳ章
M	化学物質量ベクトル	—		
I	排出量ベクトル	—		
A	媒体間の移行を表す遷移行列	—		

係数 A(i,j)が表す媒体内・媒体間の具体的な内容は図表 VII.20 の示すとおりである。なお、内容が「なし」となっているものはその媒体間の移行等を考えていないことを示す。係数 A(1,1)～A(4,4)の具体的な数式は MNSEM UM を参照されたい。

図表 VII.20　各係数が表す媒体内・媒体間の内容

係数	内容
A(1,1)	大気相ガス態：移流、分解、水域相への拡散、土壌相への拡散、散逸 大気相溶存態：移流、水域相への降雨、土壌相への降雨 大気相粒子吸着態：移流、水域相への降下、土壌相への降下
A(1,2)	水域相溶存態：大気相への揮発
A(1,3)	土壌相ガス態：大気相への拡散 土壌相溶存態：大気相への揮発 土壌相粒子吸着態：大気相への巻上げ
A(1,4)	なし
A(2,1)	大気相ガス態：水域相への拡散 大気相溶存態：水域相への降雨 大気相粒子吸着態：水域相への降下
A(2,2)	水域相溶存態：移流、分解、大気相への揮発、底質相への拡散 水域相粒子吸着態：移流、底質相への沈降
A(2,3)	土壌相溶存態：水域相への表面流出 土壌相粒子吸着態：水域相への侵食
A(2,4)	底質相溶存態：水域相への拡散 底質相粒子吸着態：水域相への巻上げ
A(3,1)	大気相ガス態：土壌相への拡散 大気相溶存態：土壌相への降雨 大気相粒子吸着態：土壌相への降下
A(3,2)	なし
A(3,3)	土壌相ガス態：大気相への揮発

係数	内容
	土壌相溶存態：大気相への揮発、分解、水域相への表面流出、溶脱 土壌相粒子吸着態：分解、大気相への巻上げ、水域相への侵食
A(3,4)	なし
A(4,1)	なし
A(4,2)	水域相溶存態：底質相への拡散 水域相粒子吸着態：底質相への沈降
A(4,3)	なし
A(4,4)	底質相溶存態：分解、水域相への拡散 底質相粒子吸着態：分解、水域相への巻上げ

定常状態における化学物質量は、式 VII-3 において $dMSA / dt = dMSW / dt = dMSSO / dt = dMSSE / dt = 0$（または式 VII-4 で $0=I+A\cdot M$）とした 4 元連立 1 次方程式を解くことで求められる。したがって、大気・水域・土壌それぞれの排出量が決まれば、MSA : MSW : $MSSO$: $MSSE$ の比、即ち媒体間の分配比率を求められる。

$0=I+AM$ の両辺を k 倍すると $0=kI+A(kM)$ となり、I と M を各々 k 倍しても式が成立することから、MSA : MSW : $MSSO$: $MSSE$ の比は媒体別の排出量の比である $TEMA$: $TEMW$: $TEMS$ に依存し、媒体別の排出量の比が同じであれば排出量の大きさ自体には依存しないことがわかる。

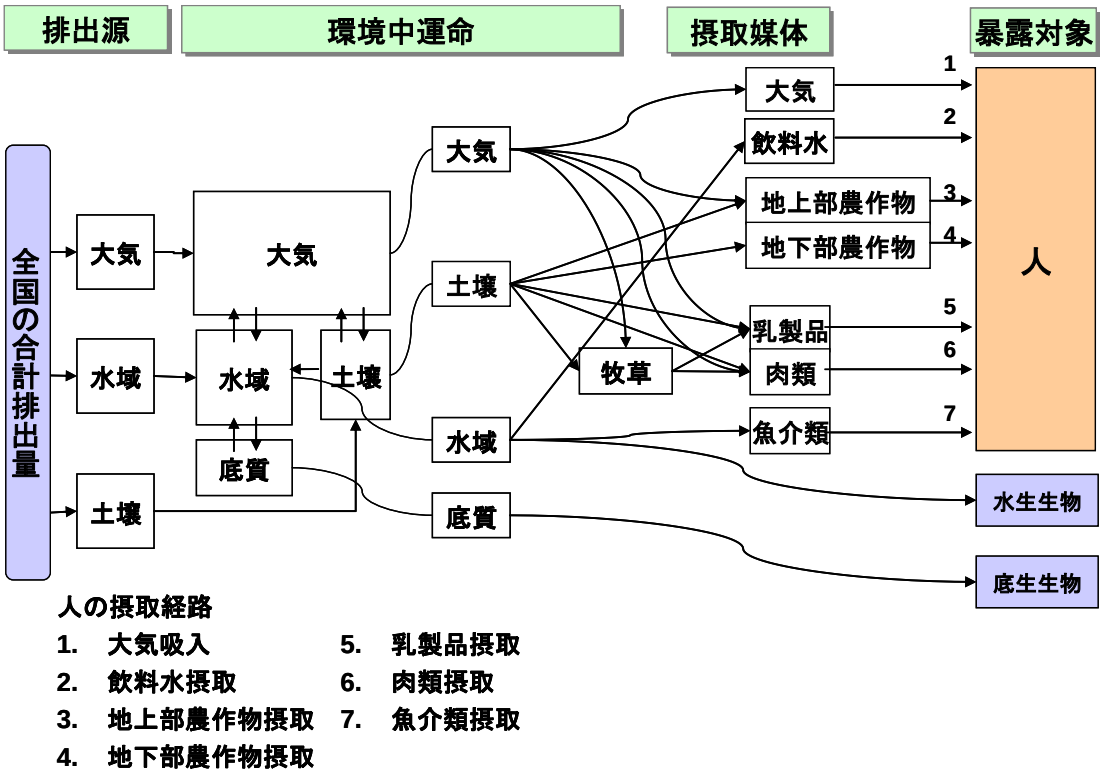
VII.5.2.4 人の摂取量の摂取媒体別比率（広域・定常状態における）

VII.5.2.3 で求めた媒体中の存在量を媒体の体積で除することにより、媒体中濃度を求められる。あとは、排出源ごとの暴露シナリオ（Ⅴ章）と同じ農作物や畜産物の濃度推計式や人摂取量推計式を用いることで摂取媒体別に摂取量を求めることができる。

人の摂取媒体別の摂取量比率を推定するにあたり、設定した暴露シナリオを図表 VII.21 に示す。摂取経路は排出源ごとの暴露シナリオの場合と基本的には同じである。排出源ごとの暴露シナリオと異なる点は、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計では大気と水域の間における物質の移動を考慮するため、水域にのみ排出があった場合でも大気吸入や農作物摂取等がある点と、水域は河川と海域を区別せずまとめて扱っている点がある。

また、人の摂取量の推計に関しては、農作物、牛肉、乳製品の１人当たりの摂取量[g/day]に自給率は加味するが「近郊生産物摂取割合（排出源を中心とする一定の領域に住む人が、その領域で栽培される農作物や畜産物を摂取する割合）」を加味しない点や、淡水魚の１人当たりの摂取量[g/day]と海水魚の１人当たりの摂取量[g/day]を合計した値を用いる点が排出源ごとの暴露シナリオと異なる。それらの点を考慮した１人当たりの摂取量の具体的な値[g/day]は前述の図表 VII.19 を参照。

なお、環境媒体間の分配比率と同様に、摂取量比率についても媒体別の排出量の比である $TEMA$: $TEMW$: $TEMS$ に依存し、媒体別の排出量の比が同じであれば排出量の大きさ自体には依存しない。



図表 VII.21　MNSEM3βNITE 版における人の摂取経路

VII.5.2.5 環境中での総括残留性（広域・定常状態における）

環境中での残留性を評価するため、OECD の文書[1]で残留性有機汚染物質（POPs）の残留性評価の指標として用いられている総括残留性 Pov（overall persistence の略）を求める。OECD の文書で提示されている Pov の計算式（総残留時間の式）を MNSEM3βNITE 版に当てはめると式 VII-5 のようになる。A(1,1)、A(2,2)、A(3,3)、A(4,4)は式 VII-3 と同じである。

$MSA : MSW : MSSO : MSSE$ の比は媒体別の排出量の比である $TEMA : TEMW : TEMS$ に依存する（VII.5.2.4 参照）から、式 VII-5 からも明らかなように Pov も媒体別の排出量の比である $TEMA : TEMW : TEMS$ に依存し、媒体別の排出量の比が同じであれば排出量の大きさ自体には依存しない。

$$Pov = -\frac{MSA + MSW + MSSO + MSSE}{MSA \times A(1,1) + MSW \times A(2,2) + MSSO \times A(3,3) + MSSE \times A(4,4)} \quad \text{式 VII-5}$$

[1] OECD (2004) Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistance and Long-Range Transport. OECD Series on Testing and Assessment No. 45.

記号	説明	単位	値	出典・参照先
Pov	総括残留性	[day]		文献[1]
MSA	定常状態の大気相中の化学物質量	[g]		VII.5.2.3
MSW	定常状態の水域相中の化学物質量	[g]		VII.5.2.3
MSSO	定常状態の土壌相中の化学物質量	[g]		VII.5.2.3
MSSE	定常状態の底質相中の化学物質量	[g]		VII.5.2.3
A(1,1)	大気相における減少速度※	[1/day]		式 VII-3
A(2,2)	水域相における減少速度※	[1/day]		式 VII-3
A(3,3)	土壌相における減少速度※	[1/day]		式 VII-3
A(4,4)	底質相における減少速度※	[1/day]		式 VII-3

※　負の値であるため、式 VII-5 の右辺にマイナスを乗じている。

VII.5.2.6 定常状態到達時間

(1) 定常状態到達時間の推計方法

① 手順

定常状態の化学物質の存在量の 99%に到達する時間（定常状態到達時間）を推計する手順は以下のとおりである。

まず、任意の時刻 t における化学物質量を式 VII-3 の微分方程式を解いて求める。式 VII-3 は 1 階 1 次連立微分方程式なので、微分方程式の理論によると解を解析的に求めることができる（後述の②を参照）。したがって、i 相における定常状態における化学物質量を M_i、微分方程式を解いて求めた時刻 t における化学物質量を $M_i(t)$とする（時刻 0 では化学物質量は 0、すなわち $M_i(0)=0$ とする）。定常状態の化学物質量に対する時間 t における化学物質量の比は $M_i(t)／M_i$ となる。この比が 0.99 になる時の時刻 t を数値計算的に逆算する。

なお、$M_i(t)／M_i$ の値は時間 t が同じであれば、排出量の比である *TEMA*：*TEMW*：*TEMS* に依存し、排出量の大きさ自体には依存しない。この理由は以下のとおりである。

式 VII-4 の $dM／dt=I+A・M$ の両辺を k 倍すると $d(kM)／dt=kI+A(kM)$ が成り立つことから、媒体別の排出量の比を保ったまま排出量を k 倍した場合、時間 t における化学物質量 $M_i(t)$は k 倍になる。また、定常状態の化学物質量 M_i も同じく k 倍となる（VII.5.2.3 参照）。したがって$(k M_i(t))／(kM_i)=M_i(t)／M_i$ となり、排出量を k 倍する前と同じである。

[1] Frank Wania and Donald Mackay (2000) A Comparison of Overall Persistence Values and Atmospheric Travel Distancs Calculated by Various Multi-Media Fate Models. WECC Wania

②（参考）任意の時刻 t における化学物質量の導出

以下では参考までに微分方程式を解析的に解いて任意の時刻 t における化学物質量を導出する方法を説明する。

■次の微分方程式を解く（M を時刻 t の式で表す）

$$\frac{d}{dt}M = I + A \cdot M$$

M ：化学物質量ベクトル、I ：排出量ベクトル、A ：媒体間の移行を表す遷移行列
詳しくは VII.5.2.4 の式 VII-3、式 VII-4、図表 VII.20 を参照。

ただし、簡単にするために VII.5.2.4 と違い、$M = \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \\ M_4 \end{pmatrix}$、$I = \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{pmatrix}$ と表記する。

$A = UA'U^{-1}$ なる行列 U が存在する場合を考える（U の算出方法は後述）。

A'は対角行列、$UU^{-1} = E$ とする。

ここで、 $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $A' = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix}$

このことを用いて、行列 A を対角化し、微分方程式を解く。

$$\frac{d}{dt}M = I + UA'U^{-1}M$$

左から U^{-1} を乗じる。

$$\frac{d}{dt}U^{-1}M = U^{-1}I + A'U^{-1}M$$

ここで、$U^{-1}M \equiv M', U^{-1}I \equiv I'$ とする。

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}M' = I' + A'M'$$

この微分方程式の右辺の行列の要素は対角成分のみであるので、成分ごとに独立した微分方程式となる。

$$\begin{pmatrix} \frac{d}{dt}M'_1 \\ \frac{d}{dt}M'_2 \\ \frac{d}{dt}M'_3 \\ \frac{d}{dt}M'_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I'_1+\lambda_1 M'_1 \\ I'_2+\lambda_2 M'_2 \\ I'_4+\lambda_3 M'_3 \\ I'_3+\lambda_4 M'_4 \end{pmatrix}$$

ただし、M'_i、I'_i（i=1,2,3,4）はそれぞれ$\boldsymbol{M'}$、$\boldsymbol{I'}$の成分

各成分の微分方程式

$\frac{d}{dt}M'_i = I'_i + \lambda_i M'_i$　（i=1,2,3,4）　を解く。

どの成分でも解き方は同様なので、簡単にするために「'」と「i」を省略すると

$$\frac{d}{dt}M = I + \lambda M \qquad \text{式 VII-6}$$

$I + \lambda M \equiv \overline{M}$ と置くと、$M = \frac{-I+\overline{M}}{\lambda}$

式 VII-6 に代入すると、$\frac{d}{dt}\left(\frac{-I+\overline{M}}{\lambda}\right) = \overline{M}$

よって、$\frac{1}{\lambda}\frac{d\overline{M}}{dt} = \overline{M}$

$\Rightarrow \int \frac{d\overline{M}}{\overline{M}} = \lambda \int dt + cons.$　（cons.は積分定数）

$\Rightarrow \ln\overline{M} = \lambda t + cons.$

$\Rightarrow \overline{M} = cons. \times \exp(\lambda t)$

$$\Rightarrow M = \frac{-(I - cons. \times \exp(\lambda t))}{\lambda} \qquad \text{式 VII-7}$$

初期値条件を考えると、

$M|_{t=0} = \frac{-(I - cons.)}{\lambda} = 0 \;\Rightarrow\; cons. = I$

$\therefore M = -(1-\exp(\lambda t))\frac{I}{\lambda}$

したがって、各成分を並べると

$$M' = \begin{pmatrix} -(1-\exp(\lambda_1 t))\dfrac{I'_1}{\lambda_1} \\ -(1-\exp(\lambda_2 t))\dfrac{I'_2}{\lambda_2} \\ -(1-\exp(\lambda_3 t))\dfrac{I'_3}{\lambda_3} \\ -(1-\exp(\lambda_4 t))\dfrac{I'_4}{\lambda_4} \end{pmatrix}$$ 式 VII-8

最後に M' を U で戻す必要がある。

$M = UM'$　これを計算すれば最終的に M が求められる。

■次に、具体的な $U(,U^{-1})$ の算出方法について説明する。

$A = UA'U^{-1} \left(\Leftrightarrow A' = U^{-1}AU\right)$　A' は対角行列で、U^{-1} は U の逆行列

これらは、以下のように固有値、固有ベクトルから求めることができる。

$$\begin{cases} Av_1 = \lambda_1 v_1 \\ Av_2 = \lambda_2 v_2 \\ Av_3 = \lambda_3 v_3 \\ Av_4 = \lambda_4 v_4 \end{cases}$$

λ_i は固有値、v_i は A の固有ベクトルである。(i=1,2,3,4)

ここでは λ_1、λ_2、λ_3、λ_4 は相異なる固有値[1]とする。

U は固有ベクトルを並べたものとすればよい。

$$U = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 \end{pmatrix}$$ 式 VII-9

最後に $U^{-1}AU$ が確かに対角行列になることを示しておく。

[1] このとき４つの固有ベクトルは１次独立となるため、U は逆行列 U^{-1} を持ち、A は必ず対角行列にできる。４つの固有ベクトルが１次独立にならない場合の扱いは線形代数学の教科書等を参照されたい。

$$
\begin{aligned}
AU &= A\begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} Av_1 & Av_2 & Av_3 & Av_4 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \lambda_1 v_1 & \lambda_2 v_2 & \lambda_3 v_3 & \lambda_4 v_4 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$$
\therefore AU = U \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix}
$$

よって、$U^{-1}AU = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix}$ となり、対角行列となる。

(2) （参考）環境媒体別の残存比率の時系列変化（汚染からの回復時間）

以下では、参考までに、VII.5.2.6 (1)で推計した時刻 t における媒体 i の $M_i(t)／M_i$ を用いて環境中での残留性を時系列的に視覚化した例を示す。これは環境中での残留性が特に高い物質に対し、今後の環境中での動態を予測するうえで有効な方法である[1]。

全ての排出源から環境中への排出を止めた場合、環境中濃度は徐々に減少していく。しかし、排出停止から十分時間が経った時刻 t に対しても $M_i(t)／M_i$ が大きければ、汚染からの回復は遅く、その化学物質は環境中での残留性が高いと考えられる。以下では $M_i(t)／M_i$ を「残存比率」と呼ぶ。

残存比率を用いて、例えば図表 VII.22 のような表し方により物質の残留性を視覚的に把握できる。これは、横軸は排出開始時からの時間を、縦軸は残存比率である。この例では、0～10 年は一定量で排出が行われ、10～20 年は排出ゼロという条件で推計したものである。最初の 10 年間は定常に到達するまでの様子を、後半の 10 年間は汚染からの回復の様子を表す。なお、10 年後の各媒体の化学物質量を初期条件として、式 VII-3 を改めて解くことで、10～20 年の残存比率を推計できる。参考に計算式を次に示す。

[1] 下記の OECD の文書では「クリアランス時間」と呼ばれているものに相当する。
OECD (2004) Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistance and Long-Range Transport. OECD Series on Testing and Assessment No. 45.

$t = T$ 以降は排出量 $I = 0$ とする（前記の例であれば $T = 10$ 年）。

$t = T$ の時の化学物質量を $M\big|_{t=T}$ で表す。

VII.5.2.6 (1)②の式 VII-7 に $I = 0$ を代入すれば、

$$M = \frac{cons. \times \exp(\lambda t)}{\lambda}$$

初期値条件を考えると、

$$M\big|_{t=T} = \frac{cons. \times \exp(\lambda T)}{\lambda} \Rightarrow cons. = M\big|_{t=T} \times \lambda \times \exp(\lambda T)$$

$$\therefore M = M\big|_{t=T} \times \exp\left(\lambda (t - T)\right)$$

$t - T = t'$（排出停止以降の経過時間）と置き換えれば、

$$M = M\big|_{t=T} \times \exp(\lambda t')$$

したがって、各成分を並べると VII.5.2.6 (1)②の式 VII-8 に対応する式は

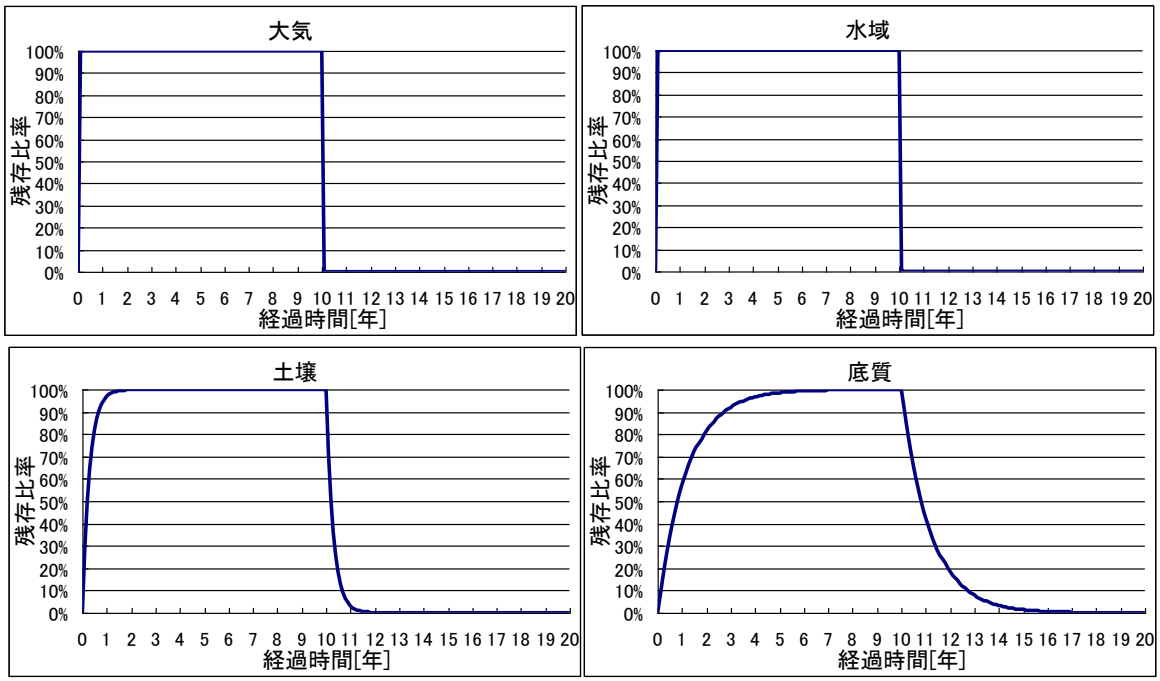
$$M' = \begin{pmatrix} M_1\big|_{t=T} \times \exp(\lambda_1 t') \\ M_2\big|_{t=T} \times \exp(\lambda_2 t') \\ M_3\big|_{t=T} \times \exp(\lambda_3 t') \\ M_4\big|_{t=T} \times \exp(\lambda_4 t') \end{pmatrix}$$

VII.5.2.6 (1)②と同じく最後に M' を U で戻す必要がある。

$M = UM'$　これを計算すれば最終的に M が求められる。

図表 VII.22 は、残存比率の時系列変化を図示化した例である。

この例では排出が始まると大気と水域は短時間で定常状態に達するが、土壌と底質は定常状態に達する（残存比率 99%）までに 1 年から数年程度の時間を要する。排出がなくなってからは大気と水域は速やかに媒体から消失するが、土壌と底質では、残存比率が 1 %になるまでに、1 年から数年程度の時間を要する。このように定常状態到達時間と消失に要する時間は裏表の関係がある。



図表 VII.22　各媒体の環境中残存比率の時系列変化の推定の例

VII.5.3 G-CIEMS モデルの解説

VII.5.3.1 モデルの入力項目

化学物質に関する主要な入力データの一覧を図表 VII.23 に示す。PRTR 情報のメッシュデータについては、環境省が委託事業で作成したデータを活用する。なお、G-CIEMS では 25℃における入力を想定しているため、あらかじめ 25℃相当における値に換算した物性値等を入力するものとする。ヘンリー係数及び蒸気圧については、モデルに内蔵されている温度依存性を考慮した補正[1]を行うようにパラメータを設定することとする。

図表 VII.23　G-CIEMS への主要な入力データ及びデフォルト値

変数	説明	単位（基本的に SI 単位系）	入力値
ChemDat テーブル			
Name	物質名称（英数文字）	－	物質個別
CasNo	CAS 番号	－	物質個別
MW	分子量	g/mol	物質個別
HenrysCnstnt	ヘンリー係数	Pa･m^3/mol	物質個別
Slblty	水に対する溶解度	kg/m^3	物質個別

[1] G-CIEMS では、ヘンリー係数、蒸気圧、水溶解度、Kow、Koa を温度依存性がある変数として取扱い、モデル内部で地点の気温に応じた補正をすることが可能である。

変数	説明	単位（基本的に SI 単位系）	入力値
VaporPrssr	蒸気圧	Pa	物質個別
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	物質個別
Kow	1-オクタノールと水との間の分配係数	－	物質個別
DgrdtnRate_Air_gas	大気中分解速度定数（ガス）	s^{-1}	物質個別
DgrdtnRate_Air_prtcl	大気中分解速度定数（粒子）	s^{-1}	物質個別
DgrdtnRate_Water_sol	水中分解速度定数（溶液）	s^{-1}	物質個別
DgrdtnRate_Water_SS	水中分解速度定数（粒子）	s^{-1}	物質個別
DgrdtnRate_Soil0-6	土壌中分解速度定数（土壌 0～土壌 6）	s^{-1}	物質個別
DgrdtnRate_Sdmnt	底質中分解速度定数	s^{-1}	物質個別
DgrdtnRate_Canopy	植生中分解速度定数	s^{-1}	物質個別
DgrdtnRate_SeaWater_sol	海域水中分解速度定数（溶液）	s^{-1}	物質個別
DgrdtnRate_SeaWater_SS	海域水中分解速度定数（粒子）	s^{-1}	物質個別
DgrdtnRate_SeaSdmnt	海域底質中分解速度定数	s^{-1}	物質個別
Koa	大気－オクタノール分配係数	－	－1
Tboil	沸点	K	物質個別
Tmelt	融点	K	物質個別
deltaHenry	蒸気から溶液へのエンタルピー変化	J/mol	40000/8.314
deltaKoa	Koa の温度依存係数	K	－1
deltaEair	大気中分解速度の温度依存係数	J/mol	0
deltaEriver	河川水中分解速の温度依存係数	J/mol	0
deltaEsoil	土壌中分解速度の温度依存係数	J/mol	0
deltaEsed	底質（陸上）中分解速度の温度依存係数	J/mol	0
deltaEsea	海水中分解速度の温度依存係数	J/mol	0
deltaEseased	海域底質中分解速度の温度依存係数	J/mol	0
deltaKow	Kow の温度依存係数	J/mol	－1
deltaVaporPrssr	蒸気圧の温度依存係数	J/mol	50000/8.314
BCF	生物濃縮係数	－	物質個別
STPTreatRate_～テーブル			
STPTransferToAir	下水処理揮散割合（下水処理場到達分のうち大気へ揮発する割合）	－	物質個別
STPRemovalRateWater	下水処理除去率（下水処理過程における大気揮発後の残量に対する除去率）	－	物質個別
Fraction_TransferRate_STP_0	排出区分 0 の各下水処理場への流達率（負荷量のうち下水処理場へ流入する割合）	－	物質個別
BsnLoad_～テーブル			
AreaLoad_RunoffRate_0	非点源排出源区分 0 の流域から河道への流達率（負荷量のうち河道へ流入する割合）	－	物質個別
PointLoad_TreatRate_0	点源排出源区分 0（合併浄化槽）の処理後残留率（1－除去率）	－	物質個別
PointLoad_RunoffRate_0	点源排出源区分 0（合併浄化槽）の流域から河道への流達率（負荷量のうち河道へ流入する割合）	－	物質個別

図表 VII.23 中の入力値の欄において、「物質個別」、「0」又は「－1」を入力することとしている。これらについて以下で説明する。

・「物質個別」の場合の入力値

「物質個別」と記載している変数については、評価対象化学物質の物理化学的性状値等を入力することが必須である。入力する物理化学的性状等に関する変数（分子量、ヘンリー係数、水溶解度、蒸気圧、有機炭素補正土壌吸着係数、1-オクタノールと水との間の分配係数、融点、沸点、各種速度定数。）の値には、物理化学的

性状の信頼性基準で定められている方法に基づき選定したキースタディを用いるものとする。

DgrdtnRate_Air_gas、DgrdtnRate_Air_prtcl、DgrdtnRate_Canopy には大気中分解速度定数、DgrdtnRate_Water_sol、DgrdtnRate_Water_SS には水中分解速度定数、DgrdtnRate_Soil、DgrdtnRate_Soil0、DgrdtnRate_Soil1、DgrdtnRate_Soil2、DgrdtnRate_Soil3、DgrdtnRate_Soil4、DgrdtnRate_Soil5、DgrdtnRate_Soil6 には土壌中分解速度定数、DgrdtnRate_Sdmnt には底質中分解速度定数を入力することとする。なお、DgrdtnRate_SeaWater_sol、DgrdtnRate_SeaWater_SS、DgrdtnRate_SeaSdmnt は水中のものと同じ値を設定する。

STPTransferToAir、STPRemovalRateWater、PointLoad_TreatRate_0 には PRTR 届出外排出量推計の値、モデル（Simple Treat 等）の計算結果、既存知見（諸外国のリスク評価書等）の値等を総合的に勘案して設定する。なお、流域負荷量からの下水処理場への移動は、PointLoadFlg、AreaLoadFlg で流域ごとに設定できる[1]。

Fraction_TransferRate_STP_0、PointLoad_RunoffRate_0 にはアミンオキシド[2]や硫酸アルキル[3]等の流達率に関する既存知見や根拠が得られている場合に設定し、それ以外はデフォルトを１とする。

・「－1」の場合の入力値

「－1」と記載している変数は、－1 を固定値として設定することで、モデル中で「他の物性値から計算する」又は「モデル中の各地点の気温に応じた温度依存性を考慮しない」という設定とするために入力する。

具体的には、大気－オクタノール分配係数 Koa については他の物性値からの計算値を用いるために「－1」を設定する。また、本評価では、分解速度定数や Kow に対してモデルに内蔵されている温度依存性を考慮した補正を用いないため、各地点の気温に応じた温度依存性を考慮するための項目である deltaKoa、deltaKow には、「－1」を入力することで実質的に補正を行わないようにする。

・ヘンリー係数と蒸気圧の温度変化に対する係数（エンタルピー／気体定数）の入力値

化審法リスク評価ガイダンスⅠ．評価の準備における、下記の蒸気圧の温度変化に対する補正式と、水溶解度の温度変化に対する補正式を考慮して、deltaHenry＝40000/8.314、を deltaVaporPrssr＝50000/8.314 を用いることとする。

＜蒸気圧の温度変化に対する補正式＞

[1] 1：下水処理場への移動を考慮、2：下水処理場への移動なし
[2] OECD SIDS Initial Assessment Report for SIAM 22, Amine Oxides (2006)
[3] OECD SIDS Initial Assessment Report for SIAM 25, Alkyl sulfates, Alkane sulfonates and α-Olefin sulfonates (2007)

$$VP_{target} = VP_{temp} \exp\left(\frac{\Delta H_{vap}}{R} \times \left(\frac{1}{T_{temp}} - \frac{1}{T_{target}}\right)\right)$$

ただし、ΔH_{vap}=50000J/mol、気体定数 R は 8.314 J/K・mol、T_{temp} は補正前の蒸気圧 VP_{temp} における温度、T_{target} は補正後の蒸気圧 VP_{target} における温度を表す。

＜水溶解度の温度変化に対する補正式＞

$$WS_{target} = WS_{temp} \exp\left(\frac{\Delta H_{sup}}{R} \times \left(\frac{1}{T_{temp}} - \frac{1}{T_{target}}\right)\right)$$

ただし、ΔH_{sup}=10000J/mol、気体定数 R は 8.314 J/K・mol、T_{temp} は補正前の水溶解度 WS_{temp} における温度、T_{target} は補正後の水溶解度 WS_{target} における温度を表す。

ヘンリー係数 H は、H=VP/WS として推定可能であることと、上記 2 つの式を考慮し、

$$H_{target} = H_{temp} \exp\left(\frac{\Delta H_{vap} - \Delta H_{sup}}{R} \times \left(\frac{1}{T_{temp}} - \frac{1}{T_{target}}\right)\right)$$

で補正することができると考えられる。

以上より、

$$\text{deltaHenry} = \frac{\Delta H_{vap} - \Delta H_{sup}}{R} = \frac{(50000 - 10000)}{8.314}$$

$$\text{deltaVaporPrssr} = \frac{\Delta H_{vap}}{R} = \frac{50000}{8.314}$$

を用いる。

・「0」の場合の入力値（分解速度の温度依存係数）

deltaEair、deltaEriver、deltaEsoil、deltaEsed、deltaEsea、deltaEseased については、モデル中の各地点の気温に応じた温度依存性を考慮しない設定とするため、「0」を設定する。

VII.5.3.2 モデルの出力項目

モデルの出力項目では、各媒体中の濃度やその内訳、フラックス等の情報が得られる。それらのうち、暴露量の評価に主に使用する河川、大気の濃度に関する情報部分について、図表 VII.24 に示す。また、直接暴露量の評価の際に用いることはないが、別途暴露量評価モデルで算出する魚類中濃度等と G-CIEMS 内での濃度とを比較する際に参照する項目につ

いて図表 VII.25 に示す。

図表 VII.24　モデルの出力項目のうち暴露量評価に使用する可能性のある項目

評価に用いる主要項目	テーブル※	フィールド名	単位
河川水質バルク濃度	River_～_div	Cw	kg/m³
河川底質濃度	River_～_div	Cse	kg/kg
河川水質懸濁態粒子濃度	River_～_div	Css	kg/kg
河川水質溶存態濃度	River_～_div	Cw_sol	kg/m³
大気中濃度	Air_～	Cair	kg/m³

※テーブル名は計算対象物質名称や計算条件等により異なるため、ここではテーブル名の先頭部分のみを示す。

図表 VII.25　モデルの出力項目のうち暴露量評価で参考とする可能性のある項目

参考とする可能性のある項目	テーブル※	フィールド名	単位
河川魚類中濃度	River_～_div	Cfish	kg/kg
エアロゾル中濃度	Air_～	Caerosol	kg/m³
土壌中濃度	Soil_～	Csoil	kg/kg

※テーブル名は計算対象物質名称や計算条件等により異なるため、ここではテーブル名の先頭部分のみを示す。

VII.5.3.3 モデルの適用範囲

(1) 対象とする物質

評価対象とする物質は基本的に有機化学物質とする。

(2) モデルの検証事例

① ノニルフェノールの河川水中濃度の推定

ノニルフェノール（NP）について、PRTR による排出量推定データを用いた G-CIEMS による動態モデル計算を行い、河川水中濃度を推定した[1]。

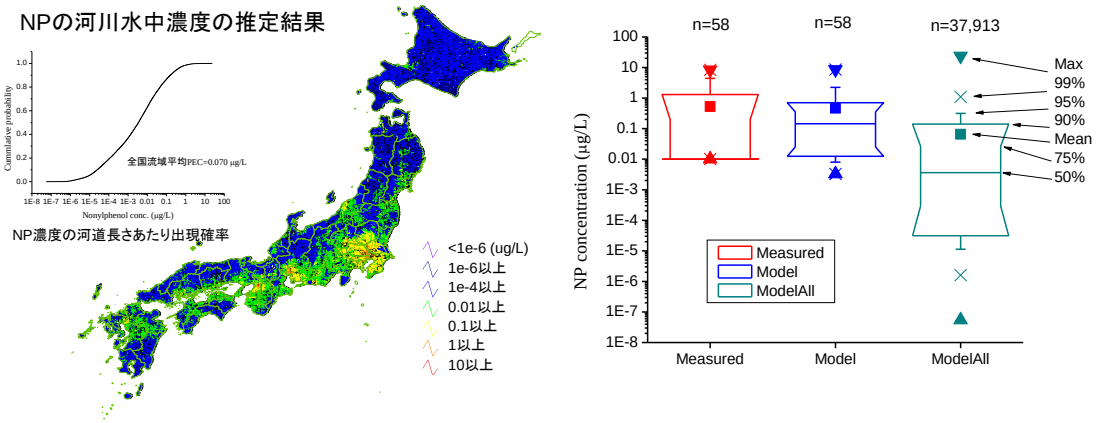
なお、ノニルフェノールの河川水中濃度の推定を行うにあたって、

$$\mathrm{NPnEO} \xrightarrow{k_1} \mathrm{NP1EO} \xrightarrow{k_1} \mathrm{NP}$$

というように、ノニルフェノールエトキシレート(NPnEO、NP1EO)からの化学種の変換を考慮することとし、PRTR による排出量推定データとして、ノニルフェノールエトキシレートの排出量も合わせて利用して推定を行い、観測値の分布とモデル計算の結果は概ね近いところにあるとされている[2]。なお箱ひげ図は左から観測値の分布、中央は全国流域のうち観測値の存在する流域のモデル推定値の分布、右は全国全流域のモデル推定値の分布を示す。

[1] 鈴木規之、化学物質の環境動態とリスク評価、日本薬学会 薬学雑誌 127 (3) 437-447 (2007)

[2] 鈴木規之、李文淳、桜井健郎、森口祐一、田邊潔、白石寛明、森田昌敏：GIS 多媒体モデルによる空間平均 PEC（予測環境濃度）を用いた人および生態暴露評価手法、第 14 回環境化学討論会講演要旨集、172-173 (2005)



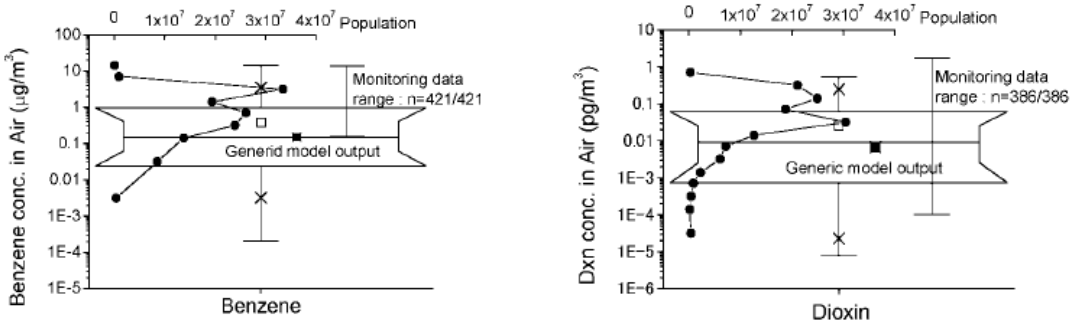
図表 VII.26　ノニルフェノールの河川水中濃度の推定値と実測値の比較[1]

[1] 鈴木規之、李文淳、桜井健郎、森口祐一、田邊潔、白石寛明、森田昌敏：GIS 多媒体モデルによる空間平均 PEC（予測環境濃度）を用いた人および生態暴露評価手法、第 14 回環境化学討論会講演要旨集、172-173 (2005)

② ベンゼン及びダイオキシンの大気中濃度に関する Generic 多媒体モデルとの比較

環境中濃度に関する G-CIEMS の推定値と、これまで多媒体モデルとして広く用いられているボックスモデルのような Generic 多媒体モデルとの比較により、環境中濃度の統計的分布とヒトへの暴露状況の関連の考察を行った。

図表 VII.27 に、ベンゼンとダイオキシン類の G-CIEMS による全国の推定濃度分布と、これまで広く用いられている Generic 多媒体モデル（ここでは EUSES/SimpleBox）の点推定値、モニタリングデータの範囲及び GIS モデルの推定濃度域に居住する人口の分布を重ねた結果を示す。その結果、従来の Generic 多媒体モデルが、詳細な分解能を持つ動態モデルの推定分布の中でおよそ中央値を与えること、動態モデルにより推定した空間濃度の分布はほぼ対数正規的であり、また、人口は当該物質の濃度分布の 95 パーセンタイル程度以上の高濃度域に大部分が居住していること等が示された。



図表 VII.27　G-CIEMS の大気中濃度推定値分布、モデル推定濃度域に居住する人口分布及び Generic 多媒体環境運命モデル（EUSES/Simple Box）での大気中濃度の点推定値の比較[1]

さらに、ベンゼン、1,3-ブタジエン及びダイオキシンについて、G-CIEMS、Generic 多媒体モデル及び観測値の結果を用い、環境中濃度と人口分布の関連を考慮して求めた暴露加重平均濃度（EWAC）を比較した結果を図表 VII.28 に示す。ただし、大気中の EWAC は

$$\mathrm{EWAC}_{\mathrm{Generic}} = \text{広域大気コンパートメントの大気中濃度}$$

$$\mathrm{EWAC}_{\mathrm{G-CIEMS}} = \frac{\Sigma\{(\text{各グリッドの大気中濃度}) \times (\text{グリッド内の人口})\}}{\text{総人口}}$$

$$\mathrm{EWAC}_{\text{モニタリング}} = \frac{\Sigma\{(\text{人口密度分類別の平均大気中濃度}) \times (\text{人口密度分布での人口})\}}{\text{総人口}}$$

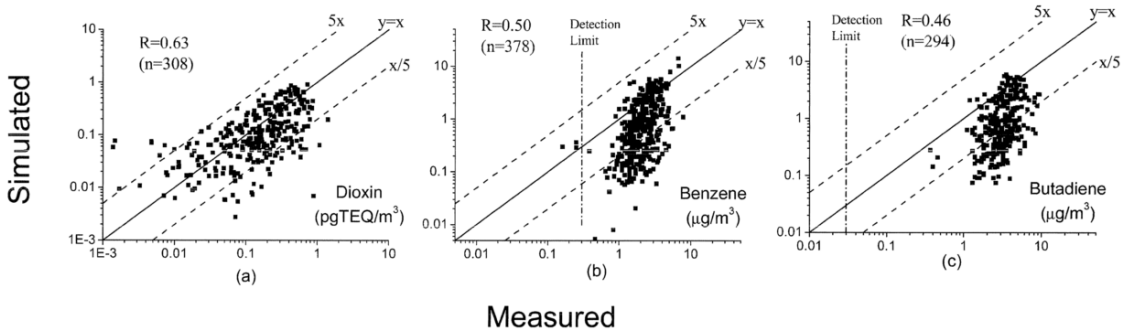
として計算したものである。

[1] Suzuki N, Murasawa K, Sakurai T, Nansai K, Matsuhashi K, Moriguchi Y, Tanabe K, Nakasugi O, Morita M., Geo-referenced multimedia environmental fate model(G-CIEMS): Model formulation and comparison to the generic model and monitoring approaches, *Environ. Sci. Technol.* 2004, 38, 5682-5693

また、各物質の大気中濃度に関するモニタリングデータと G-CIEMS 推定値の比較を図表 VII.29 に示す。図中の斜めの実線及び点線は、G-CIEMS 推定濃度とモニタリング濃度とが同じ濃度、5 倍、1/5 倍の濃度を表している。ダイオキシン類については、推定濃度の大部分がモニタリング濃度のファクター5 (1/5～5 倍)に含まれている。ベンゼンと 1,3-ブタジエンについては、わずかに推定濃度がモニタリング濃度を下回るものが見られた。しかし、推定濃度／モニタリング濃度の比を見た場合には、いずれの物質もファクター2～5 におさまっている。

図表 VII.28　G-CIEMS、Generic 多媒体モデル及び観測地の暴露加重平均濃度の比較

	Generic 多媒体モデル	G-CIEMS	モニタリング
ベンゼンの大気中の EWAC [μg/m³]	0.15	1.4	2.3
ダイオキシン類の大気中の EWAC [pgTEQ/m³]	0.0067	0.20	0.23
1,3-ブタジエンの大気中の EWAC [μg/m³]	0.0071	0.14	0.32



図表 VII.29　大気中濃度のモニタリングデータと推定値の比較：(a)ダイオキシン類 (b)ベンゼン (c)1,3-ブタジエン（ダイオキシン類については TEQ 換算のため明確な検出下限がなく、図中で示していない。)[1]

[1] Suzuki N, Murasawa K, Sakurai T, Nansai K, Matsuhashi K, Moriguchi Y, Tanabe K, Nakasugi O, Morita M., Geo-referenced multimedia environmental fate model(G-CIEMS): Model formulation and comparison to the generic model and monitoring approaches, *Environ. Sci. Technol.* 2004, 38, 5682-5693

図表 VII.30 にダイオキシン類のモニタリングデータと G-CIEMS 推定値間での大気、河川水質、底質及び土壌中平均濃度の比較結果を、図表 VII.31 に河川水質、底質及び土壌中濃度のモニタリングデータと G-CIEMS 推定値の比較結果を示す（大気については、前述の図表 VII.29 において、既に示している。）。

河川、底質および土壌については、モデル推定の技術的困難がより大きいため大気と比較してやや一致度が低くなったが、全体としてはファクター10 程度に入る地点が多かったと考えられる。

図表 VII.30 に示した媒体別の平均濃度の比較においては、G-CIEMS の推定濃度がすべての媒体においてモニタリング濃度とファクター2 以内の一致をしている。Generic 多媒体モデルについては、大気を除けばファクター10 以内の一致をしている。

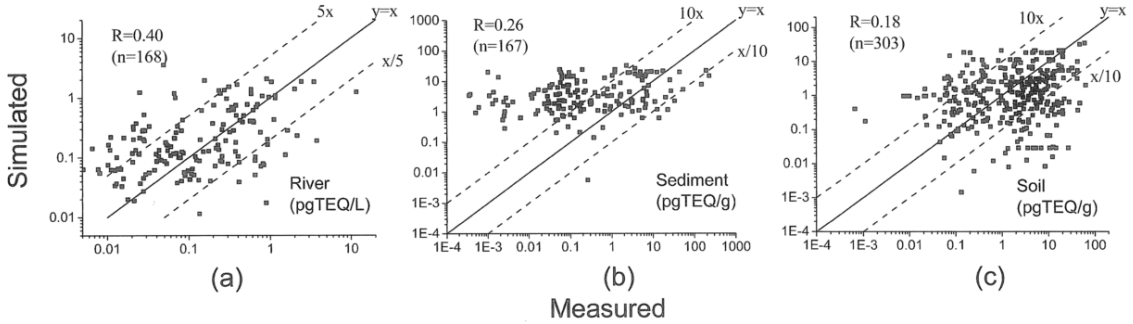
図表 VII.32 にベンゼン、ダイオキシン類、1,3-ブタジエン及びフタル酸ビス（２－エチルヘキシル）についての G-CIEMS の推定濃度の分布とモニタリング濃度との比較を示す。図中には、モニタリングデータの範囲と検出地点数／地点数についても示した。この結果から、1,3-ブタジエンの底質の結果を除く各データにおいて、Generic 多媒体モデルでの濃度は G-CIEMS の 50%ile に近い濃度となり、両モデルで同程度の結果を得ることができることが分かる。

図表 VII.33 に河道長を考慮した河川水質中のダイオキシン濃度推定値とモニタリング濃度の累積分布の比較を示す。この結果から、推定濃度の累積分布とモニタリング濃度の累積分布とが全体的に一致することがわかり、G-CIEMS の推定濃度の結果を地理的特性も考慮して評価に用いることのできる可能性を示している。

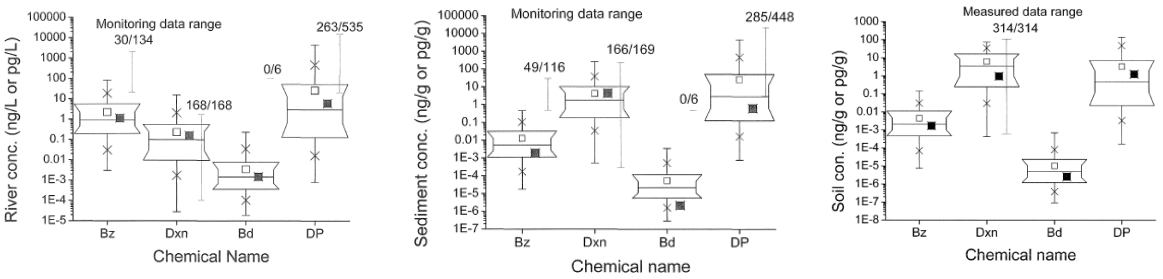
図表 VII.30　G-CIEMS、Generic 多媒体モデル及び観測地の媒体別平均濃度の比較[1]

	Generic 多媒体モデル	G-CIEMS	モニタリング
大気［pg/m^3］	0.0067	0.16	0.22
河川水質［pg/L］	0.15	0.35	0.39
土壌［pg/g］	4.4	6.4	6.4
底質［pg/g］	0.97	4.8	6.1

[1] Suzuki N, Murasawa K, Sakurai T, Nansai K, Matsuhashi K, Moriguchi Y, Tanabe K, Nakasugi O, Morita M., Geo-referenced multimedia environmental fate model(G-CIEMS): Model formulation and comparison to the generic model and monitoring approaches, *Environ. Sci. Technol.* 2004, 38, 5682-5693

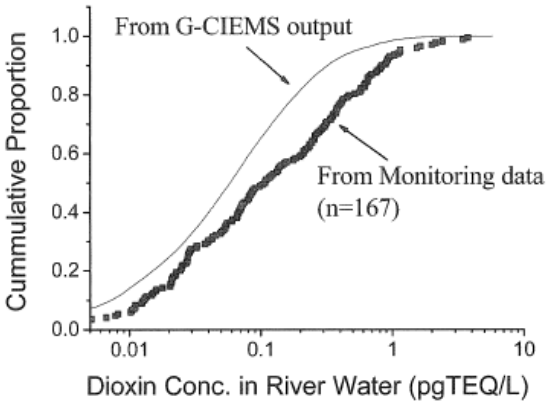


図表 VII.31　ダイオキシン類の河川水質、底質及び土壌中濃度のモニタリングデータと推定値の比較：(a)河川水質 (b)底質 (c)土壌[1]



図表 VII.32　G-CIEMS と generic 多媒体モデル及びモニタリングデータの河川水質濃度、底質中濃度及び土壌中濃度の範囲の比較

（Bz：ベンゼン、Dxn：ダイオキシン類、Bd：1,3-ブタジエン、DP：フタル酸ビス（2-エチルヘキシル）。箱ひげ図の端点、横線、×点、箱は G-CIEMS の推定濃度の統計値を表し、それぞれ 1、10、25、50、75、90、99 パーセンタイルと最小値、最大値を表している。黒四角（■）は generic 多媒体モデルの結果を示す。）[2]



図表 VII.33　河道長を考慮した河川水質中のダイオキシン濃度推定値とモニタリング濃度の累積分布の比較[3]

---

[1] 同上

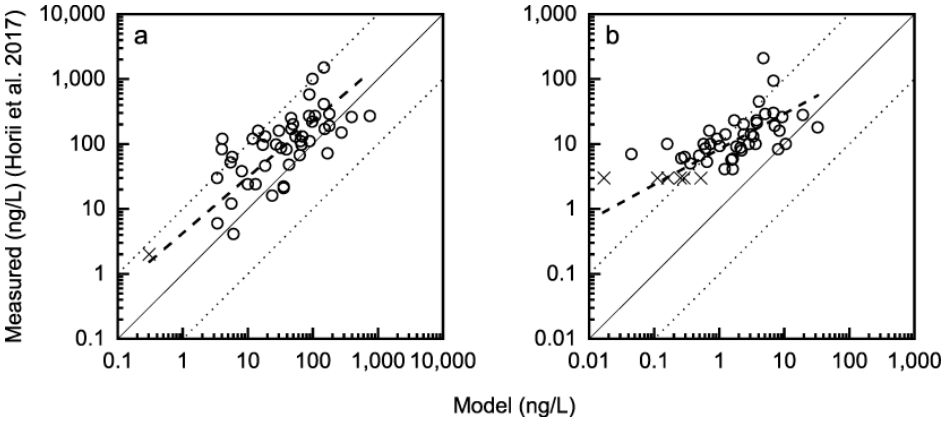
[2] 同上

[3] Suzuki N, Murasawa K, Sakurai T, Nansai K, Matsuhashi K, Moriguchi Y, Tanabe K, Nakasugi O, Morita M., Geo-referenced multimedia environmental fate model(G-CIEMS): Model formulation and comparison to the generic model and monitoring

③ シロキサン（D5、D6）の河川水中濃度の推定

揮発性が高く大気コンパートメントへの排出量が多いものの、環境中運命としては水中コンパートメントの割合も大きいデカメチルシクロペンタシロキサン（D5）、ドデカメチルシクロヘキサシロキサン（D6）について、1 日 1 人あたり排出量を推定した上で、90%が大気排出され、10%が下水移動したと設定して G-CIEMS による環境中濃度予測を実施した[1]。

その結果、実測データが得られた河川水中濃度について、実測された地点の予測濃度をプロットしたところ、D5、D6 共にファクター10 内での良好な結果が得られたが、D6 については低濃度域で実測値よりも予測値の方が高めになる傾向があった（図表 VII.34）。



図表 VII.34　東京湾流域の河川における D5、D6 の G-CIEMS 予測濃度と実測濃度の比較（×：検出下限以下データを検出下限値にプロット）

上記のモデルで D5、D6 の環境中分配の状況を確認したところ、大気コンパートメントに約 60%が、水域コンパートメント（底質）に約 40%が分布し、また、東京湾の D5、D6 負荷量の約 1/4 が下水処理場からの排水が占めていることが分かった。

④ 水田除草剤の日変動を考慮した河川水中濃度の推定

25 種類の水田除草剤について、都道府県別の除草剤別出荷量や農薬使用記録等からいくつかの仮定を設定して都道府県別農薬別 1 日使用量を推定し、そこから環境排出量の日変動を計算する方法を構築した上で、G-CIEMS を用いて河川水中濃度の空間的・時間的変動を予測した[2]。

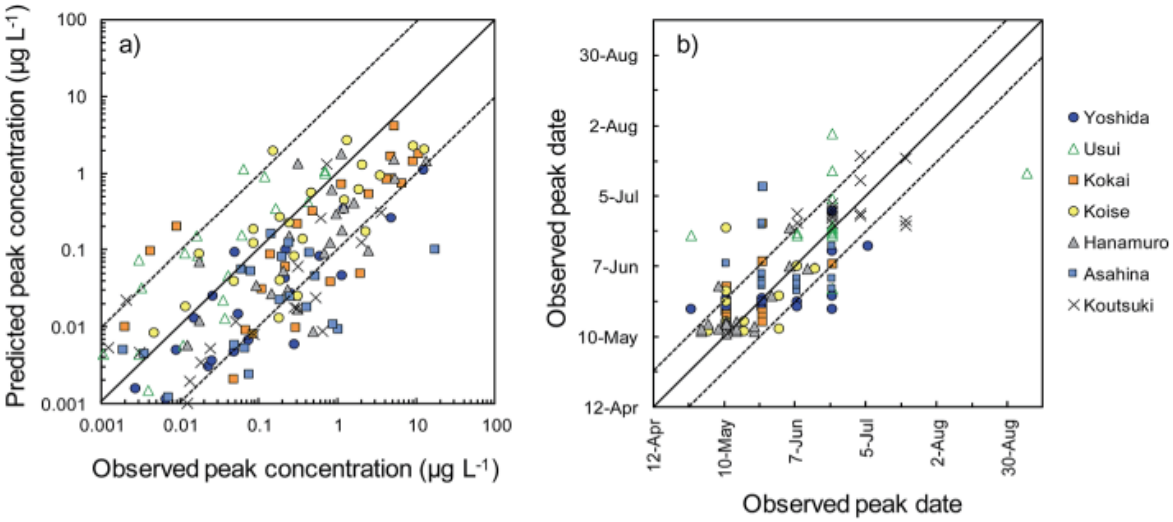
---

approaches, *Environ. Sci. Technol.* 2004, 38, 5682-5693

[1] Sakurai, T., Imaizumi, Y., Kuroda, K., Hayashi, T., Suzuki, N. Georeferenced multimedia environmental fate of volatile methylsiloxanes modeled in the populous Tokyo Bay catchment basin. Sci. Total Environ., 689, 843-853 (2019)

[2] Imaizumi, Y., Suzuki, N., Shiraishi, F., Nakajima, D., Serizawa, S., Sakurai, T., Shiraishi, H. Development and validation of a simulation method, PeCHREM, for evaluating spatio-temporal concentration changes of paddy herbicides in rivers. Environ. Sci.: Process. Impacts, 20, 120-132 (2018)

その結果、ピーク濃度の実測値と予測値の比較はおおよそファクター10 内で、ピーク濃度が実測された日と予測日との比較ではおおよそ 2 週間内で整合する結果が得られた（図表 VII.35）。



図表 VII.35　測定地点（河川名）別除草剤別の河川水中ピーク濃度の実測値と予測値の比較（左図）、ピーク濃度が実測された日と予測日との比較（右図）

VII.5.4 環境中濃度等の空間的分布の推計における人の摂取量

ここでは、本編Ⅶ.3 の環境中濃度等の空間的分布の推計における人の摂取量について、特にⅤ章と推計手法が異なる農作物や畜産物について説明する。

VII.5.4.1 食品摂取量等の情報

環境中濃度等の空間的分布の推計における人の摂取量で使用する食品摂取量等の情報を図表 VII.36 に示す。これらの値の設定の経緯等についてはⅤ章の食品摂取量等の設定の経緯に関する記載を参照のこと。

図表 VII.36　環境中濃度等の空間的分布の推計で用いる食品摂取量等の情報

説明	単位	値	(うち排出源周辺)	出典・参照先
人の体重	[kg]	50	-	V.7.5.5 (2)①
人の吸入摂取量（大気）	[m³/day]	20	-	V.7.5.5 (2)②
人の地下部農作物の摂取量	[g/day]	163.7	(7.0)	V.7.5.5 (2)③
人の地上部農作物(Protected)の摂取量	[g/day]	240.8	(19.7)	V.7.5.5 (2)③
人の地上部農作物(Exposed)の摂取量	[g/day]	204.7	(16.8)	V.7.5.5 (2)③
人の乳製品の摂取量	[g/day]	72.4	(0.6)	V.7.5.5 (2)④

説明	単位	値	(うち排出源周辺)	出典・参照先
人の牛肉の摂取量	[g/day]	9.4	(0.2)	V.7.5.5 (2)④
人の魚介類の摂取量	[g/day]	45.3	-	V.7.5.5 (2)⑤
人の飲水量	[L/day]	2	-	V.7.5.5 (2)⑥

VII.5.4.2 農作物からの摂取量

農作物（地上部農作物（Exposed、Protected）、地下部農作物）からの摂取量については当該流域の農作物からの摂取量については、当該流域の環境中濃度から当該流域の農作物中濃度を推計し、図表 VII.36 の排出源周辺の農作物摂取量を乗じることにより算出する。また当該流域以外の農作物からの摂取量については、当該流域以外の環境中濃度（流域面積による重み付けを考慮した平均値）から当該流域以外の農作物中濃度を推計し、図表 VII.36 のそれぞれの摂取量から排出源周辺の農作物摂取量を減じたもの乗じることにより算出する。当該流域における農作物からの摂取量としては、当該流域の農作物からの摂取量と当該流域以外の農作物からの摂取量を合計して算出する。なお、環境中濃度から各農作物中濃度を推計する方法についてはⅤ章と同様である。

VII.5.4.3 畜産物からの摂取量

畜産物（牛肉、乳製品）からの摂取量については当該流域の農作物からの摂取量については、当該流域の環境中濃度から当該流域の畜産物中濃度を推計し、図表 VII.36 の排出源周辺の畜産物摂取量を乗じることにより算出する。また当該流域以外の畜産物からの摂取量については、当該流域以外の環境中濃度（流域面積による重み付けを考慮した平均値）から当該流域以外の畜産物中濃度を推計し、図表 VII.36 のそれぞれの摂取量から排出源周辺の畜産物摂取量を減じたもの乗じることにより算出する。当該流域における畜産物からの摂取量としては、当該流域の畜産物からの摂取量と当該流域以外の畜産物からの摂取量を合計して算出する。なお、環境中濃度から各畜産物中濃度を推計する方法についてはⅤ章と同様である。

VII.5.4.4 農作物及び畜産物以外からの摂取量

農作物（地上部農作物（Exposed、Protected）、地下部農作物）及び畜産物（牛肉、乳製品）以外からの摂取量についてはⅤ章と同様である。

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

Ⅷ. 環境モニタリング情報を用いた暴露評価

Ver.1.0

平成 26 年 6 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	平成 26 年 6 月	初版

目　次

VIII. 環境モニタリング情報を用いた暴露評価 1
VIII.1 はじめに 1
VIII.1.1 本章の位置づけ 1
VIII.1.2 他の章との関係 2
VIII.2 環境モニタリング情報の利用目的と役割 4
VIII.2.1 環境モニタリング情報を利用する目的 4
VIII.2.2 環境モニタリング情報の役割 4
VIII.2.3 環境モニタリング情報と数理モデルによる推計結果との関係 6
VIII.3 環境モニタリング情報の特徴と利用において考慮する点 7
VIII.3.1 環境モニタリング情報の特徴 8
VIII.3.2 環境モニタリング情報を暴露評価に利用する場合に考慮する点 10
VIII.4 環境モニタリング情報の利用方法 14
VIII.4.1 環境中の検出状況の経年変化の概観 15
VIII.4.2 暴露シナリオごとの環境中濃度の把握 16
VIII.5 追加モニタリング調査 24
VIII.5.1 追加モニタリング 24
VIII.5.2 事業者が自主的に行う環境モニタリング調査等 25
VIII.6 付属資料 26
VIII.6.1 収集する環境モニタリング情報と整理方法 26
VIII.6.2 排出源との近接性の判断方法 31
VIII.6.3 数理モデルによる推計値との比較における留意点 33

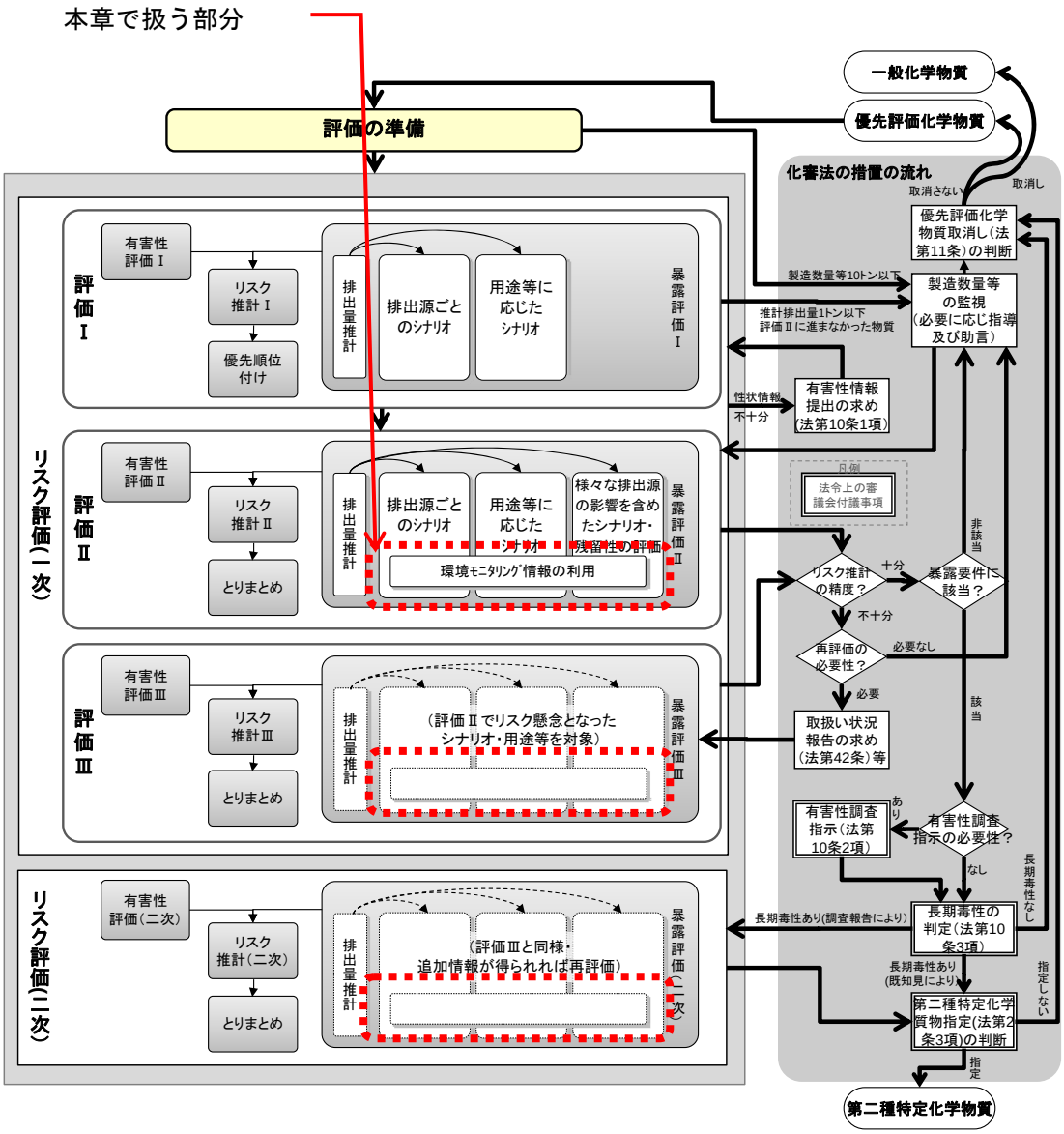
VIII. 環境モニタリング情報を用いた暴露評価

VIII.1 はじめに

VIII.1.1 本章の位置づけ

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、環境モニタリング情報を用いた暴露評価について記載する。リスク評価スキーム全体における本章で扱う部分を図表 VIII-1 に示す。

環境モニタリング情報は評価Ⅱ以降で利用する。



図表 VIII-1　リスク評価スキームにおける本章で扱う部分

なお、本章全体にわたって、「環境モニタリングデータ」と記載するときは測定値もしくは測定値の集合とその統計量を指し、「環境モニタリング情報」と記載するときは測定値も含め、より広義に測定地点等の関連情報も包含するというように概ね区別している。

また、本章では「長期平均値」や「年平均値」という用語を使用するが、これらは基本的に算術平均をさすものとする。

VIII.1.2 他の章との関係

本リスク評価スキームでは、以下に挙げる複数の暴露シナリオが設定されている。

- 排出源ごとの暴露シナリオ
- 用途等に応じた暴露シナリオ
  - 大気系の非点源シナリオ
  - 水系の非点源シナリオ
  - 船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ
  - 地下水汚染の可能性シナリオ
- 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ

それぞれのシナリオの中で暴露評価に利用する情報源としては以下の 3 つがある。

- 化審法の製造数量等の届出情報
- PRTR 情報
- 環境モニタリング情報

前節で述べた通り、各シナリオの環境モニタリング情報を用いる部分は本章に記述し、数理モデルを用いる部分は排出源ごとの暴露シナリオについては技術ガイダンスⅤ章、用途等に応じた暴露シナリオについては同Ⅵ章、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオについては同Ⅶ章に記述している。

以上の関係を図表 VIII-2 に示す。

図表 VIII-2　暴露シナリオの種類と他の章との関係及び本章で記述する部分[1]

[1]「優先評価化学物質のリスク評価手法について」（平成 24 年 1 月）の「図表 28　暴露評価の情報源別の推計ステップの違い」を抜粋し、加筆。
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/riskassess.pdf

VIII.2 環境モニタリング情報の利用目的と役割

本節では、環境モニタリング情報の利用の位置づけとして、VIII.2.1 で目的、VIII.2.2 で役割、VIII.2.3 で数理モデルの推計結果との関係について述べる。

VIII.2.1 環境モニタリング情報を利用する目的

本スキームでは環境モニタリング情報を以下の 3 つの目的で利用する。

(ア) 環境中での検出状況の経年的な概観
(イ) 暴露シナリオごとの環境中濃度の把握とリスク推計
(ウ) 暴露評価に適用している環境中濃度を推計する数理モデルの推計精度の確認

このうち、(ア)、(イ)については対象物質ごとに検討し評価Ⅱ以降のリスク評価書に整理する内容であり、本章では主にこれらについて解説する。
(ウ)については、個別の物質ごとというより複数の物質を併せて比較することにより、推計手法の精度や限界、推計精度と物質の特徴との関係等を知るためのものである[1]。(ウ)についての留意点は、付属資料 VIII.6.3 に記載した。
(ア)と(イ)の利用方法は VIII.4 で後述する。

VIII.2.2 環境モニタリング情報の役割

暴露評価における環境モニタリング情報の重要な役割には以下の 3 つがある。いずれも環境モニタリング情報にしか担えない側面である。

(ア) 化学物質の環境中での実態に基づくリスク推計を行う。
(イ) 数理モデルによる推計値に対してより精度・確度の高い実測値による裏付けが可能となる。
(ウ) 排出量が把握できない又は未知の排出源からの寄与も含めた暴露状況の手がかりとなり得る。

(ア) については以下のとおりである。環境モニタリング情報は、排出量や環境中濃度の推計を行わずに、環境中での化学物質の存在実態を得ているものであり、人の化学物質摂取量や動植物の暴露濃度として精度・確度が高い。ただし、自然環境中に化学物質が存在する状況となる要因として、化審法対象用途における環境中への排出以外に、化審法対象用途以外における排出や自然環境中での生成等、様々な可能性があることも考慮しなけれ

[1] 評価に用いる数理モデルの推計精度等の確認は、推計結果の解釈をする評価者の知見の一つとなり得る。

ばならない。

(イ)については以下のとおりである。評価Ⅱにおいて暴露評価に利用する 3 つの情報源（製造数量等の届出情報、PRTR 情報、環境モニタリング情報）のうち、環境モニタリング情報だけが環境中濃度の実測値である。本スキームでは、暴露評価に利用する場合に考慮する点（VIII.3.2 で後述）を満たしている環境モニタリング情報を暴露濃度として利用する。

(ウ)については以下のとおりである。数理モデルによる暴露評価では入力した排出量に係る結果のみが出力される。逆に言えば、結果は排出量の推計精度に依存し、排出量が把握できない排出源に関しては評価を行うことができない。以下に、製造数量等の届出情報と PRTR 情報で捕捉している排出源の範囲と、環境モニタリング情報との関係を図表 VIII-3 を使って説明する。

図表 VIII-3　暴露評価に用いる情報源別の対象とし得る排出源の違い

化審法の製造数量等の届出情報を用いる場合に対象となる排出源

		排出源の種類				
		化審法対象用途	化審法対象除外用途	その他の排出源（例）		
				移動体	自然発生源	越境汚染
ライフサイクルステージ	製造段階	○				
	調合・工業的使用段階	○				
	家庭等使用段階	○				
	長期使用製品の使用段階	○				
	廃棄段階					

PRTR情報を用いる場合に対象としうる排出源

ライフサイクルステージ	製造段階	○	○	○		
	調合・工業的使用段階	○	○			
	家庭等使用段階	○	○			
	長期使用製品の使用段階					
	廃棄段階					

環境モニタリング情報を用いる場合に含まれうる排出源

ライフサイクルステージ	製造段階	○	○
	調合・工業的使用段階		
	家庭等使用段階		
	長期使用製品の使用段階		
	廃棄段階		

図表 VIII-3 には、横方向に排出源の種類、縦方向に化学物質のライフサイクルステージを示し、一つ目の表で製造数量等の届出情報を用いる場合に対象となる排出源を示し、二つ目の表で PRTR 情報を用いる場合に対象としうる（届出排出量と届出外排出量を含む）排出源を示している。三つ目の表で環境モニタリング情報を用いる場合に含まれうる排出源を示しており、自然発生源、越境汚染等については、製造数量等の届出情報、PRTR 情

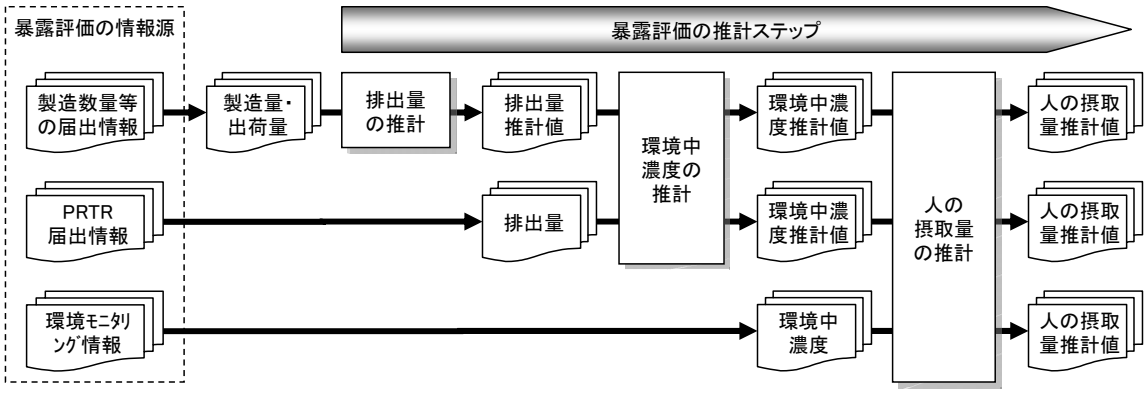
報[1]のいずれでも排出量が把握できない部分である。このような、量を把握していない又は未知の排出源からの寄与も含めた暴露状況を知るには、環境モニタリング情報は唯一の手立てとなる。

例えば、以下のような例が挙げられる。PRTR 届出事業所のいずれからも寄与がないと想定される環境モニタリングデータで、リスクが懸念されるような環境中濃度が検出されるような場合、PRTR 届出外排出量で推計対象の排出源もしくはそれ以外の排出源の寄与が考えられる。暴露要件に合致するような状況が見込まれる際には、その排出源を推定し化審法の製造、輸入、使用等によるものなのかの解析が必要となる。環境モニタリング情報はそのような次のステップへのきっかけとなりうる。

したがって、環境モニタリング情報が利用できる場合には、そのような手がかりを見逃さない姿勢が重要となる。

VIII.2.3 環境モニタリング情報と数理モデルによる推計結果との関係

前節で述べたように、環境モニタリング情報は、精度・確度の高いリスク推計を実施し、数理モデルによる推計値に対してより精度・確度の高い実測値による裏付けが可能となるため、リスク評価の重要な情報となる[2]。



図表 VIII-4　暴露評価の情報源別の推計ステップの違い

各暴露評価方法には長所と短所／留意点があり（VIII.3.1 参照）、それらを評価方法間で相互補完し、実態とモデル評価における推定の整合性を踏まえて利用することが、リスク評価をより適切に実施するのに有効である。

[1] PRTR 届出外データには一部、他の物質からの生成が含まれる。
[2] ただし、一部の優先評価化学物質では環境モニタリング情報は利用できない。行うことができない理由は、財政上の制約のみならず技術的にも測定手法が確立していない場合や、測定が不可能な物質（構造不定物質等）があるためである。また、対象物質の想定される暴露経路（大気、飲料水、食物等）を網羅する実測データを得ることも通常は困難である。

一方で、環境モニタリング情報単独では優先評価化学物質についてのリスク評価の結論を導くことは通常困難である。

理由は環境モニタリング情報単独では測定濃度と排出源との関連付けや解釈が困難であるためである。それは、仮に環境汚染が示唆されても、その原因が化審法に係る化学物質の製造、輸入、使用等に関連があり、それを規制することによる環境汚染の低減の効果が予見されることが伴わなければ、第二種特定化学物質への指定等の行政上の判断は困難であることに関連する。例えば、化審法の規制対象外の排出源（化審法の適用除外用途に係る排出、自然発生源等）が環境汚染の主要因であるような場合に、それを認識せずに化審法で規制を行っても環境汚染の低減には効果がない。

環境汚染の状況を認定する際の考え方として、逐条解説に以下のような記述がある。ここでは化学物質の製造、輸入、使用等の状況と環境汚染との因果関係が科学的に裏付けられることの重要性が述べられている。

> 例えば、ある地域でその化学物質が検出されたことのみをもって第二種特定化学物質として指定することはできず、その検出されたという事実が偶然の結果ではなく、当該化学物質の製造、輸入、使用等の状況から総合的に判断して、検出されることが当然であると認められるものでなければならない。また、このことは、逆に、たとえ当該化学物質の環境モニタリングデータがなくても、当該化学物質の製造、輸入、使用等の状況から判断して、相当程度、環境を汚染していると推定されるときには、第二種特定化学物質として指定しうることを意味している。

したがって、環境モニタリング情報が利用でき、それにより環境汚染が示唆されても、その原因を解釈するために製造数量等の届出情報や PRTR 情報に基づく数理モデルによる推計結果と補足し合って総合的に評価をすることが求められている。

以上より、本スキームにおいて環境モニタリング情報は、数理モデルによる推計結果と相補的に用いる。

VIII.3 環境モニタリング情報の特徴と利用において考慮する点

本節では、環境モニタリング情報の特徴を整理するとともに（VIII.3.1）、それを踏まえ、暴露評価に利用する場合に考慮する点（VIII.3.2）について述べる。

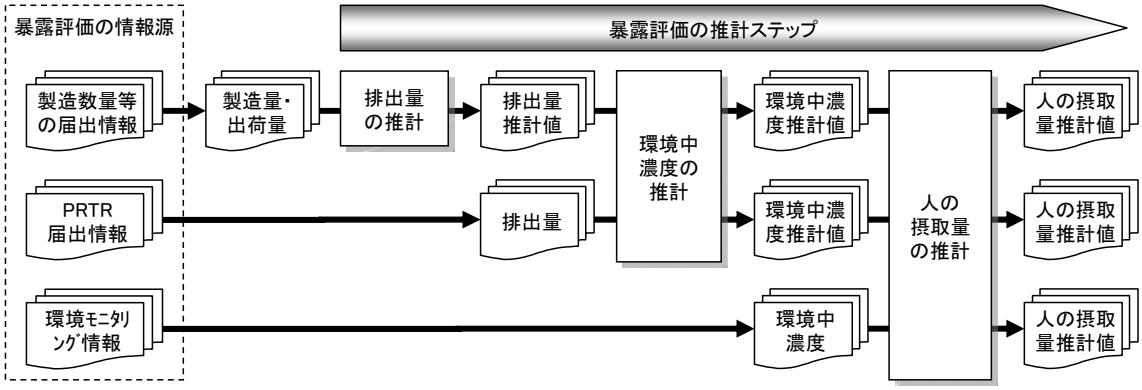
VIII.3.1 環境モニタリング情報の特徴

VIII.3.1.1　全般的な特徴

評価Ⅱにおいて暴露評価の基となる情報源には図表 VIII-5 及び図表 VIII-6 に示す 3 種類がある。情報源別の概要と特徴を図表 VIII-5 に、暴露評価における推計ステップの違いを図表 VIII-6 に示す。

図表 VIII-5　暴露評価に用いる情報源と特徴等

<table>
<tr><th rowspan="2">情報源</th><th rowspan="2">概要</th><th colspan="3">主な特徴</th></tr>
<tr><th>長所</th><th colspan="2">短所／留意点</th></tr>
<tr><td>製造数量等の届出情報</td><td>化審法に基づく製造・輸入事業者ごとの
・ 都道府県別製造数量
・ 輸入数量
・ 都道府県別・詳細用途別出荷数量</td><td>すべての優先評価化学物質が有する</td><td colspan="2">・ この情報を用いた推計結果は多段階の推計ステップを重ねるため、相対的な量
・ 第二種特定化学物質指定等の最終判断の前には個別の取扱い状況等の追加情報が必要</td></tr>
<tr><td>PRTR 情報</td><td>化管法に基づく
・ 取扱い事業者による届出排出量
・ 国による推計排出量</td><td>・届出排出量データは個別排出源別・媒体別で具体的
・環境モニタリング情報の解釈に利用できる</td><td rowspan="2">・ 一部の優先評価化学物質のみ有する
・ 化学物質の範囲が優先評価化学物質とは一致しない場合がある</td><td>・ 排出源の範囲が化審法の規制対象とは必ずしも一致しない
・ 推計排出量は都道府県別であり、必ずしも媒体別ではない</td></tr>
<tr><td>環境モニタリング情報</td><td>環境媒体（大気、河川水、海水、底質、魚介類等）や食物中の化学物質の実測濃度</td><td>・人又は生物が暴露される実環境の濃度レベルを把握できる
・数理モデルによる推計濃度の裏付けとなりうる</td><td>・ 単独では、化審法の規制対象由来の排出か等の解釈が困難
・ 複数の暴露経路からの人の暴露量の把握は困難
・ 測定回数によっては、暴露シナリオで想定している濃度（長期間平均値等）を代表しない</td></tr>
</table>



図表 VIII-6　暴露評価の情報源別の推計ステップの違い

環境モニタリング情報が暴露評価に利用できる場合、図表 VIII-6 に示すように排出量や環境中濃度の推計を行う必要はないので、数理モデルによる環境中濃度の推計値よりも精度・確度が高いという考え方がある。

その一方で、環境モニタリング情報は図表 VIII-5 の短所／留意点に記載した内容や、以下に挙げるような特徴があるため、暴露評価への適用に当たっては、暴露評価（リスク評価）の目的への適合性[1]の観点から注意する必要がある。

(ア) 個々のデータはある場所、ある時間のスナップショット的な記録であること。

・時間的な変動　　例：工場稼働時？平日？休日？無風時？干潮時？季節？
・空間的な変動　　例：排出源近傍？風下？風上？上流？下流？
・サンプリングの頻度　例：単発？毎月？連続？

(イ) 技術的要因によるばらつきと不確実性を内包

・ 分析方法・分析精度　例：公定法？
・ サンプリング方法とサンプルの取扱い　　例：コンポジット試料？表層のみ？ろ過？

VIII.3.1.2 環境媒体ごとの特徴

環境モニタリング調査は、環境中の様々な媒体を対象に行われている。環境モニタリングデータの調査環境媒体ごとの特徴について整理し、図表 VIII-7 に示した。以下順に説明する。

化学物質の排出源からの排出は時間に対して均一でなく、また、図表 VIII-7 に示したように、大気、公共用水域の水質は、時間変動する風速、流速により希釈の程度が変わるので、特に発生源周辺では上記両者の変動により環境中濃度には時間による変動がある。一般的に、大気、公共用水域の水の滞留時間は短いため、これらの媒体の各々の測定濃度はある一定のサンプリング期間内での濃度を表している。一方、公共用水域の底質、魚介類及び食物中濃度は、測定されるまでの期間の蓄積状況を表すという側面がある。また、地下水濃度は地下水の流速等により時間的に変化するが、その変化のスケールは非常に長い時間であると推測され、測定されるまでの期間の蓄積状況を表していると考えられる。ただし、これらの特徴はあくまで一般的な特徴を捉えたものであり、このような例によらない場合もあるため環境モニタリングデータの使用には注意が必要である。

[1] 例えば、事故時等の急性毒性のリスク評価をするには短期間のピーク濃度の測定が必要であり、長期毒性のリスク評価をするには長期間の平均濃度を把握するための継続的な測定が必要であるなど。

図表 VIII-7　環境モニタリングデータの調査環境媒体ごとの一般的な特徴

調査環境媒体	測定値の特徴	測定地点とのつながり	サンプリング頻度例
大気	特定の瞬間値もしくはサンプリング期間内の値	測定地点が明確である	3 回/年、12 回/年
公共用水域の水質			1 回/年
公共用水域の底質	特定期間の蓄積状況		1 回/年
地下水		測定地点が特定できない	1 回/年
魚介類		測定地点と暴露濃度が必ずしも明確でない	1 回/年
食物（陰膳方式）		産地が不明	1 回/年

大気、公共用水域の水質及び底質等の環境媒体中濃度や魚介類中濃度には、測定地点が情報として付記されている。ただし、魚介類のような生物は水域中を移動しているため、その測定地点の環境中濃度と暴露濃度の関係が必ずしも明確ではなく不確実性が伴う。また、地下水の測定地点に関しては、近年、個人情報保護の観点から詳細情報がないため、測定地点を特定することは困難である。一方、陰膳方式で測定された食物中濃度は、様々な食物が含まれ、調理された状況での人の暴露量の把握を目的としているため、食物それぞれはサンプリング地点（産地）との関係が明確になっていない[1]。

以上の特徴を踏まえてデータ使用の際に考慮する点は、次節 VIII.3.2 で述べる。

VIII.3.2 環境モニタリング情報を暴露評価に利用する場合に考慮する点

前節で記載した環境モニタリング情報の特徴を踏まえ、環境モニタリング情報の利用に当たっては本スキームの暴露評価の目的との適合性を考慮するものとする。具体的には、REACH-TGD 等における「暴露評価の裏付けに使用可能な環境モニタリング情報の品質基準[2]」を参考にして、以下(ア)～(ウ)の 3 点を考慮する。

原則として、（ア）と（イ）を満たす環境モニタリング情報であれば「暴露評価の裏付けに使用可能」とし、暴露シナリオごとの環境中濃度として利用する（VIII.4.2 参照）。いずれかを満たさない場合は、暴露濃度等としてリスク評価には直接使用せず、参考値扱いと

[1] 本スキームでは、マーケットバスケット方式で調査された食物中濃度の情報を用いていないが、この方式においてもサンプリング地点との関係は明確になっていない。

[2] ECHA (2012) Guidance on information requirements and chemical safety assessment. Chapter R.16.4 Mesured Data における Quality criteia for use of existing measured data.
これは以下の OECD の文書を引用している。
OECD (2000) Report of the OECD Workshop on Improving the Use of Monitoring Data in the Exposure Assessment of Industrial Chemicals. Series on Testing and Assessment No. 18.
この OECD の文書は以下の改訂版が出されている。
OECD (2013) Guidance document for exposure assessment based on environmental monitoring. Series on Testing and Assessment No. 185.
http://www.oecd.org/env/ehs/testing/seriesontestingandassessmentemissionandexposure.htm

する[1]。（ウ）に関しては不確実性解析の一部として個別に検討する。

(ア) 分析精度等の信頼性
(イ) 暴露シナリオに対する代表性[2]
(ウ) 統計的な代表性

(ア)については、国が主体である調査結果を利用することにより担保されているものとみなし、具体的に利用する環境モニタリング情報を次節 VIII.3.2.1 で示す。その他の調査結果を利用する場合は個別に判断する。また、環境モニタリングの測定対象物質と、評価Ⅱの評価対象物質（技術ガイダンスⅠ章参照）の一致性に留意が必要である。優先評価化学物質のリスク評価では、指定されている優先評価化学物質以外に評価対象物質を設定することがある。両者の包含関係を確認し、環境モニタリングの測定対象物質が評価対象物質の一部である場合や、その逆である場合は、その扱いについて個別に判断する。

(イ)については、暴露評価で想定しているシナリオを時間的・空間的に代表しているかどうかという観点である。VIII.3.2.2 で説明する。

(ウ)については、暴露シナリオで想定する暴露量を代表する数値として、分布をもった環境モニタリングデータのいずれの統計量[3]が適切かに関連する。このことについては VIII.3.2.3 で後述する。

VIII.3.2.1　分析精度等の信頼性を担保しているとみなす環境モニタリング情報

暴露評価Ⅱに利用する環境モニタリング情報は、原則として図表 VIII-8 に示したものを利用する。暴露評価Ⅱの段階では、分析精度等に関する一定の信頼性を確保するため、国が実施した既往の環境モニタリング情報を基本とし、過去 10 年以内の実測データを収集する。

各環境モニタリング情報の概要等（目的、対象物質の選定基準、測定頻度や測定地点数等）については付属資料 VIII.6.1 に収載している。

なお、事業者から提供を受けた環境モニタリング情報に関しては、測定手法や試験報告書等を精査した上で利用の可否を検討するものとする。

[1] 環境モニタリングデータの媒体の種類によって、2 つの項目についての要件を満たす必要があるかどうかは分かれる。次項(2)で説明。
[2] ここでいう代表性は、英語では”representativeness”である。
[3] 統計量：標本の平均、メディアン、最小値、最大値、パーセンタイル値等、標本を要約し、母集団の母数のいろいろな推測に使われるもの。

図表 VIII-8　評価Ⅱで基本的に利用する国が実施した環境モニタリング情報

情報源（調査名等）	実施主体等	測定媒体				
		大気	水質	底質	魚介類	食事
化学物質環境実態調査（化学物質と環境）（エコ調査）	環境省	○	○	○	○	○
地方公共団体等における有害大気汚染物質モニタリング調査	環境省、地方公共団体、国土交通省	○				
水環境保全に係る調査（人健康）要調査項目	環境省		○			
水質汚濁に係る要監視項目等の調査	環境省、国土交通省、地方公共団体		○			
公共用水域水質測定（健康項目）	環境省、国土交通省、地方公共団体		○			
食事からの化学物質暴露量調査	環境省					○
全国一級河川における微量化学物質に関する実態調査（ダイオキシン類、内分泌かく乱化学物質）	地方公共団体、国土交通省、環境省		○	○		

VIII.3.2.2　暴露シナリオに対する代表性

暴露シナリオに対する代表性には、時間的な代表性と空間的な代表性がある[1]。

(1) 時間的な代表性

環境モニタリング情報の暴露シナリオに対する時間的な代表性については、「本スキームの暴露評価における暴露濃度は評価対象年度の排出量から推計された濃度であり、これと対応する環境中濃度が得られているか」という観点で判断する。すなわち、評価対象年度（化審法の製造数量等の届出や PRTR 排出量の届出の実績年度）の環境中濃度と見なせる環境モニタリングデータが、想定する暴露シナリオに対応したものとなり、暴露評価とリスク推計に用いる候補となる。以下の例のように時間的な代表性について検討の上、その利用の可否を判断する。

例１：対象物質の排出量は過去 10 年間横ばいで、環境モニタリング情報は 5 年前のものがある。この場合、現状の環境中濃度は過去と大きな変化はないと考えられるため、現状の排出量の下での環境中濃度とみなせると考えられる。

例２：対象物質の排出量はここ数年増加傾向にあり、一方環境モニタリング情報は 5

[1] 暴露シナリオに対する代表性は、下記の OECD のガイダンスにおける ”representativeness in the scale of spatial and temporal distributions of environmental concentrations and exposures” に該当する。
OECD (2013) Guidance document for exposure for exposure assessment based on environmental monitoring. 4.1 How representative is the monitoring data? Series on Testing and Assessment No. 185.

年前のものしか得られない。この場合、この環境モニタリング情報では現状の環境中濃度を反映しておらず、想定している暴露シナリオに対する時間的な代表性は乏しいと考えられる。

以上のように、製造・輸入数量、排出量の経年変化と環境モニタリング調査の実施年度とを付き合わせ、現状の排出量の下での環境中濃度として代表性があるかを確認して利用する。代表性が乏しい場合は暴露濃度等としてリスク評価には直接使用せず、参考値扱いとする。

(2) 空間的な代表性

空間的な代表性に関しては、排出源との近接性に関連する。環境モニタリング情報の利用では、特定の排出源の影響を受けたデータか否かを区別することが解釈の上で重要である。ここでは、固定排出源である PRTR 届出事業所と環境モニタリング調査の測定地点との位置関係から、環境モニタリングデータが特定の排出源の影響を受けると想定される範囲（排出源ごとの暴露評価のエリアの範囲）のものか否かを判別する。

なお、この排出源との近接性の識別には排出源の緯度経度情報（水域の場合はさらに排出先水域名）が必要であるため、評価Ⅱの段階では評価対象物質が PRTR 対象物質である場合にのみ、この判別が可能となる。逆に言うと、PRTR 対象物質ではなく製造数量等の届出情報と環境モニタリング情報を有する対象物質の場合、環境モニタリングデータの空間的な代表性（排出源周辺か一般環境[1]か）は判別不可能となる。このような場合でリスクが懸念されるようなときには、事業者に対して取扱い状況の報告を求めるなどにより、化審法に係る製造、輸入、使用等との因果関係あるいはその寄与についての関係性を調査する必要がある（VIII.2.2 参照）。

環境媒体ごとの環境モニタリングデータの特徴を踏まえ（VIII.3.1.2 参照）、大気、公共用水域の水質・底質、魚介類については測定地点と排出源の近接性を考慮する。一方、地下水の測定地点は排出源との近接性を判別できず、食事データは特定の排出源の影響を受けたものではないと想定する。

また、大気、公共用水域の水質及び底質と異なり、魚介類、食物の環境モニタリング情報には、魚介類の種類や、陰膳とした食事の種類といった違いが含まれることに留意する必要がある。

VIII.3.2.3　統計的な代表性

統計的な代表性[2]は、暴露シナリオで想定する暴露量を代表する数値として、分布をもっ

[1] 一般環境とは、本ガイダンスでは「特定の排出源の影響を受けない地域」と定義する。
[2] 統計的な代表性は、下記の OECD のガイダンスにおける ”the specific placement of the selected target or reference concentration in the distribution of the data” に該当する。OECD (2013) Guidance document for exposure for exposure assessment based on

た環境モニタリングデータのいずれの統計量[1]が適切かに関連する。例えば、長期毒性による人健康影響のリスク評価をするためには、暴露量は長期間の平均値（一般的には年平均値）を用いるが、その場合は、年平均値を得るのに十分な測定頻度があるかどうかに関連する。また、前節 VIII.3.2.2 で述べた暴露シナリオに対する代表性を検討する際は、同一地点での時間平均と、複数地点間の地点間平均の区別も注意が必要である。

本スキームの暴露シナリオで想定する暴露量は「長期毒性のリスク評価の暴露濃度であるため長期平均値（人健康影響に関しては基本的には年平均値）」である（「技術ガイダンスⅤ章参照）。これが年平均値であるとして、それを代表する統計量は測定年の測定値の算術平均である[2]。しかし測定値の平均は標本平均であって母集団の平均ではない。例えば、年間の大気中濃度の変動を連続測定で捉え、その平均が母集団の平均（仮に「理想的な年平均値」と呼ぶ。）とみなすとすれば、年に数回測定されたデータの平均（ここでは「測定値の平均値」と呼ぶ。）は理想的な年平均値と乖離しうる。過大にも過小にもなりうるが、リスク評価に使う暴露量としては特に過小になる場合は問題となる[3]。

暴露評価には「理想的な年平均値」を使うのが望ましいが、実際に得られるのは年に数回測定された値の平均値である。後者は測定頻度が少ないほど、理想的な年平均値から離れる可能性が大きくなる。

本スキームでは、環境媒体ごとの環境モニタリングデータの特徴を踏まえ（VIII.3.1.2 参照）、環境モニタリングデータを暴露評価に用いた場合の不確実性解析において、統計的な代表性ついて個別に検討を行う。なお、環境モニタリング情報で年間の測定頻度や公表データの属性（測定値か平均値か等）が不明な場合は暴露濃度等としてリスク評価には直接使用せず、参考値扱いとする。

VIII.4 環境モニタリング情報の利用方法

VIII.2.1 で述べたとおり、本スキームでは環境モニタリング情報を以下の 3 つの目的で使用する。ここでは、(ア)と(イ)の利用方法について記載する（(ウ)については付属資料 VIII.6.3 を参照。）。

---

environmental monitoring. 4.1 How representative is the monitoring data? Series on Testing and Assessment No. 185.

[1] 統計量：標本の平均、メディアン、最小値、最大値、パーセンタイル値等、標本を要約し、母集団の母数のいろいろな推測に使われるもの。

[2] US.EPA. (1992) Supplemental Guidance to RAGS: Calculating the Concentration Term. PB92-963373.

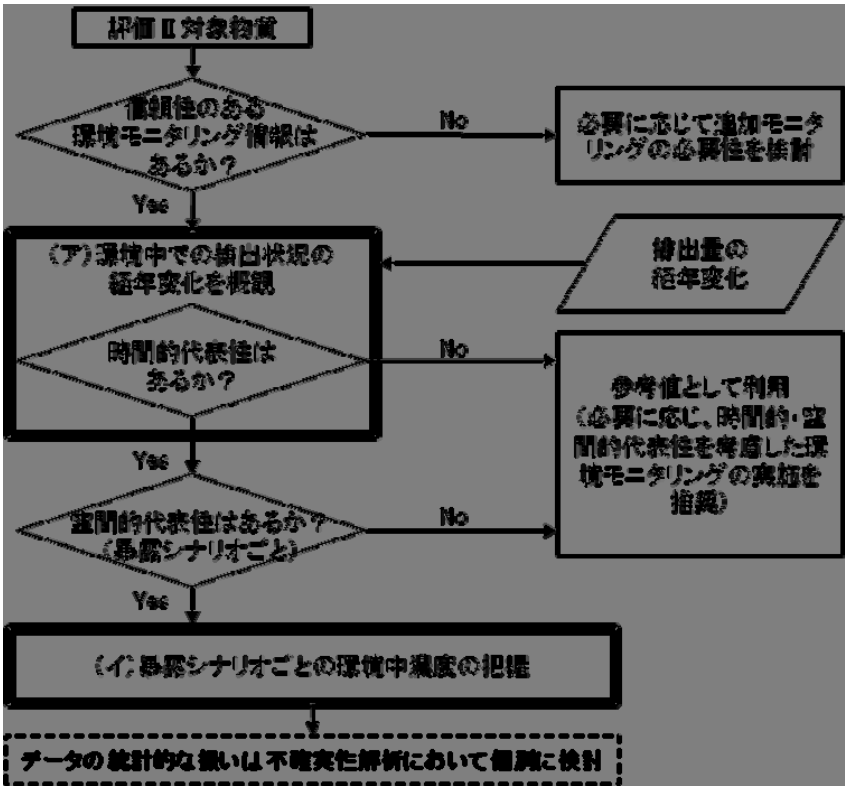
[3] U.S. EPA のスーパーファンドサイトのリスク評価ガイダンスでは、単なる測定値の平均ではなく、真の平均の推計における不確実性を考慮して算術平均の 95%上側信頼限界を暴露評価に用いることを推奨している。
U.S. EPA (1989) Risk Assessment Guidance for Superfund Volume I, Human Health Evaluation Manual (Part A). EPA/540/1-89/002.
US.EPA (2003) Calculating Upper Confidence Limits for Exposure Point Concentrations at Hazardous Waste Sites. OSWER 9285.6-10.

(ア) 環境中での検出状況の経年的な概観
(イ) 暴露シナリオごとの環境中濃度の把握
(ウ) 暴露評価に適用している環境中濃度を推計する数理モデルの推計精度の確認

VIII.2.3 で説明したとおり、本スキームにおける暴露評価Ⅱでは、対象化学物質の環境モニタリング情報が得られる場合は、化審法届出情報や PRTR 情報に基づいた数理モデルによる推計結果と併用することとしている。

図表 VIII-8 に記載された環境モニタリング情報の多くは、本スキームにおけるリスク評価の目的に応じたものとなっているわけではない。しかし、信頼性・代表性が確保されている環境モニタリング情報は、化審法届出情報や PRTR 情報を用いた数理モデルによる推計濃度を補足するものとして有効に利用すべきである。

既存の環境モニタリングデータは、ある特定の場所、期間における測定の記録であることから、暴露評価の対象や目的に応じて、VIII.3.2 で説明したように分析方法や分析精度等の信頼性、サンプリング頻度や期間及びサンプリング地点等による時間的・空間的な代表性を判断する必要がある。以上のことを踏まえた環境モニタリング情報の利用フローを図表 VIII-9 に示す。



図表 VIII-9　環境モニタリング情報の利用フロー

VIII.4.1 環境中の検出状況の経年変化の概観

本スキームは、VIII.3.2.1 に示した国による環境モニタリング調査結果の利用を想定して

策定している。

複数年の環境モニタリング情報が得られる場合には、環境媒体ごとの経年的な検出状況を排出量等の経年変化と比較する。複数年の情報が得られない場合にも、排出量等の経年変化と比較する。これにより「暴露評価に利用する場合に考慮する点」のうち時間的な代表性（VIII.3.2.2 (1)参照）を有するかを媒体ごとに個別に判断する。これが満たされた環境モニタリング情報を、暴露シナリオごとの暴露濃度の把握に使用する。

また、暴露評価Ⅱでは環境中での残留性をみるための指標として多媒体モデルを用い、環境中の定常到達時間等を推計している（残留性の評価については VIII.4.2.5 参照。）。この推計結果も参考にしながら検出状況を概観する。

VIII.4.2 暴露シナリオごとの環境中濃度の把握

暴露評価Ⅱでは、複数の暴露シナリオについて数理モデルを利用して環境中濃度等の推計を行う。暴露シナリオごとに想定している排出源、環境媒体、環境スケール等が異なる。ここでは、暴露シナリオごとの環境中濃度の把握に環境モニタリング情報を用いるための考え方と当てはめ方等について説明する。

VIII.4.2.1　各暴露シナリオに共通する考え方

本スキームにおける暴露評価には大気、公共用水域の水質、公共用水域の底質、地下水、魚介類及び食事の環境モニタリング情報を用いる。人に対する暴露を考える場合では大気、公共用水域の水質、地下水、魚介類及び食事の 5 媒体の情報を、生態（水生生物・底生生物）に対する暴露を考える場合では公共用水域の水質、公共用水域の底質の 2 媒体の情報を利用する。なお、公共用水域とは河川、湖沼、海域等である。

(1) 暴露シナリオに対する代表性

① 時間的な代表性

いずれの環境媒体についても排出量の経年変化との対応を確かめる。具体的には、製造・輸入量、排出量の経年変化と環境モニタリング調査の実施年度とを付き合わせ、現状の排出量の下での環境中濃度として代表性があるかを確認して利用する。評価対象年度（化審法の製造数量等の届出や PRTR 排出量の届出の実績年度）の環境中濃度と見なせる環境モニタリングデータは時間的な代表性を有するものと考える。評価対象年度に測定されたデータが得られない場合、VIII.3.2.2 (1)に前述した検討を行う。代表性が乏しい場合は暴露濃度等としてリスク評価には利用せず参考値扱いとする（図表 VIII-9 参照）。

② 空間的な代表性

媒体中濃度は場所ごと、時間ごとの状況を表すもので、食事データ以外は測定地点の情

報が付随する。食事データは、例えば陰膳の場合、様々な食物が渾然となって産地との関係は不明である。

以上より、食事データ以外は原則として排出源との近接性から排出源周辺と一般環境の振り分けを行う。近接性の判断には、排出源と環境モニタリング測定地点双方の緯度・経度情報や住所、地名等を利用する（緯度・経度情報を用いた近接性の判断方法は付属資料 VIII.6.2 参照）。

一般環境とは、ここでは、特定の排出源の影響を受けない地域と定義する。食事データの場合は基本的に特定の排出源の影響を受けたものではないと想定し、一般環境のものとみなして使用する。

(2) 統計的な代表性

大気中濃度と河川水中濃度は、流束の中で希釈された値を表し、流れ（風速、流速）が大きく時間変動し排出速度の変化もそれに加わる。底質中濃度と生物中濃度（食物含む）は、流速のような分・時間もしくは日単位の時間変動ではなく、測定されるまでの期間の蓄積状況を表す側面があると考えられる（VIII.3.1.2 参照）。

以上より、大気中濃度と河川水中濃度については、同一地点での測定値のばらつきは時間変動と捉え、地点ごとの年平均値を暴露評価に用いる場合には 1 地点につき年間の測定値が複数ある場合には算術平均し、地点ごとの年平均値にする。

底質、魚介類、食事については、1 つの測定値をある期間の蓄積の結果とみなす。測定値のばらつきは、ある場所の時間変動というより底質の性質、魚介の種類、食事の種類といった属性のばらつきと捉え、時間に関する平均化は行わない[1]。

以上の媒体ごとの環境モニタリングデータの特徴と暴露シナリオごとの暴露評価に利用可能な条件との対応を図表 VIII-10 に整理した。

次項以降では、暴露シナリオごとに環境モニタリングデータを環境中濃度の把握に用いるための暴露シナリオに対する代表性の担保方法について説明する。

[1] それぞれ化学物質濃度は以下のような属性でばらつくと考えられる。
底　質：ここでは有機炭素含有率、砂か泥か等の性状等
魚介類：種類（食性や生息範囲、食物連鎖の位置）、脂肪含有率、大きさ（齢）等
食　事：献立、国産品の比率、脂肪含有率等

図表 VIII-10　媒体ごとの環境モニタリングデータの特徴と暴露シナリオごとの暴露評価に利用可能な条件との対応

媒体	環境モニタリングデータの特徴			暴露シナリオに対する代表性		③統計的な代表性	暴露シナリオごとの暴露評価への利用
	測定場所とのつながり	測定値の捉え方	測定値のばらつきの主要因	①時間的	②空間的(排出源との近接性)		
大気	あり	ある時間の瞬間値もしくはサンプリング期間の期間平均値	時間変動	○	○	※	①②を満たしていれば暴露シナリオごとの環境中濃度として利用
水質(河川)	あり		時間変動	○	○	※	①②を満たしていれば暴露シナリオごとの環境中濃度として利用
底質	あり	ある期間の蓄積の結果	底質の性質等	○	○		①②を満たしていれば暴露シナリオごとの環境中濃度として利用
魚介類	関連性は低いとみなす		魚介の種類等	○	○		①②を満たしていれば暴露シナリオごとの環境中濃度として利用
食事	関連性は低いもしくはないとみなす		食事の種類等	○	(近接していないとみなす)		①を満たしていれば一般環境の濃度として利用

注：○は暴露評価シナリオごとの暴露評価に利用するために考慮すべき項目。
※は不確実性解析において個別に検討。

VIII.4.2.2　排出源ごとの暴露シナリオにおける環境中濃度の把握

排出源ごとの暴露シナリオは、製造、調合、工業的使用段階の事業所等の周辺に居住もしくは生息する暴露集団の暴露量を推計する。人に関しては排出源を中心とした半径 1～10km（1km 刻み）のエリア（ただし半径 100m 内は除く）を設定し、エリアごとの暴露量を推計する。生態（水生生物、底生生物）に関しては、上述した事業所等から排出のある河川水中濃度を推計する（詳細は技術ガイダンスⅤ章参照）。

① 暴露シナリオに対する代表性

時間的代表性を満たすモニタリング情報について、以下のように空間的代表性を担保する。

大気中濃度に関しては、PRTR 届出事業所の緯度経度と環境モニタリング測定地点の緯度経度から、両者の二地点間距離を求め、距離が 10km 以内であれば、排出源ごとの暴露シナリオに対応した環境モニタリングデータとみなす。いずれの排出源からも 10km を超えて離れている測定地点のものは一般環境の環境モニタリングデータとみなす。この 10km という距離は排出源ごとの暴露評価のエリア設定と合わせたものである（「技術ガイダンスⅤ章参照）。この際、複数の排出源が 10km 以内に存在しうるため、最も関連の強い排出源

を抽出する場合には「排出量／(二地点間距離)^2」を指標に対応付ける（以後「マッチング」という）。

2 地点間距離の算出方法は付属資料 VIII.6.2.1 を参照されたい。

河川水中濃度の場合は、上記のような 2 地点間距離も参考にするが PRTR 届出事業所の排出先水域と環境モニタリング測定水域の名称から、排出源の影響を受けているとみなせるかを判別する。

水域、底質、魚介類の濃度については、測定地点が PRTR 届出事業所からの排出先水域付近に位置する場合や、排出源の下流に位置する場合等に排出源ごとの暴露シナリオに対応した環境モニタリングデータとみなす。

② 解釈等

得られた環境モニタリングデータの媒体からの暴露経路が排出源ごとの暴露シナリオの人の総暴露量に占める割合を勘案し、適切と判断できれば必要に応じ暴露量を推計して有害性評価値との比較を行う。

排出源ごとの暴露シナリオにおいて、環境モニタリング情報では、暴露評価で対象としているすべての排出源（PRTR 届出事業所）とマッチングした測定値があるわけではない。そのため、環境モニタリングデータとマッチングできた排出源だけで「暴露要件に抵触するほどの箇所でリスク懸念」となる場合[1]以外は、有害性評価値との比較でリスク懸念箇所があったとしても、傍証的な扱いとなる。

なお、優先評価化学物質（生態）については、環境モニタリング情報のうち水質・底質（底生生物を対象とする場合）について収集し利用する。人健康影響の評価に用いる場合は年平均値、生態影響の評価に用いる場合は個別の測定値を用いるため、モデル推計値との対応もその点を考慮する。

VIII.4.2.3　用途等に応じた暴露シナリオにおける環境中濃度の把握

(1) 大気系の非点源シナリオ

大気系の非点源シナリオは、移動体や家庭等からの排出に係る用途（燃料添加剤、殺虫剤や芳香剤など）を対象としている。評価Ⅱの大気系非点源シナリオにおける排出量推計では移動体や家庭等における大気への排出量の全国合計値を求め、人口等の割り振り指標を用いてメッシュ単位で按分し、必要に応じてメッシュ単位の環境中濃度等を推計する（詳細は技術ガイダンスⅣ章及びⅥ章参照）。

① 暴露シナリオに対する代表性

時間的代表性を満たすモニタリング情報について、以下のように空間的代表性を担保す

[1] このような場合は、当該排出源が化審法の製造、輸入、使用等に関わるかの確認等を経て、暴露要件への該当性が判断されるものと想定される。

る。

環境モニタリングデータは測定地点の緯度経度が分かっており、上記の測定地点を含むメッシュ単位の推計値との比較が可能である。ただし、排出源からの寄与を考慮し、ここで比較に用いる環境モニタリングデータは、どの固定排出源（PRTR 届出事業所）からも 10km 以上離れた点で測定されたデータを用いるものとする。

② 解釈等

当該暴露シナリオのモデル推計値と環境モニタリングデータを比較する際には、一つのメッシュに複数の測定地点が含まれる場合、地点ごとの年平均値の地点間平均値とするとすることを検討する[1]。これは、比較対象である推計による環境中濃度は、そのメッシュ内の平均値であるためである。実際のメッシュ内の領域における環境中濃度には分布がある。環境モニタリングデータとしては、メッシュ内の環境中濃度分布を捉えた地点間平均値が得られることが理想的であるが、メッシュ内の測定地点が少ない場合、メッシュ内の領域における濃度の濃淡を十分に考慮できないために暴露シナリオに対する代表性は低下する。

(2) 水系の非点源シナリオ

水系の非点源シナリオは、水系洗浄剤、ワックス、殺生物剤等の水域への排出に係る用途を対象としている。水系の非点源シナリオにおける暴露評価では、評価Ⅰについては物質ごとに仮想的な下水処理場・河川を想定して推計を行う（国民一人当たりの使用・排出量に換算し、デフォルトの河川希釈率を用いて仮想的な河川における河川中濃度を推計する。詳細は技術ガイダンスⅣ章及びⅥ章参照）。評価Ⅱでは必要に応じて、メッシュ単位の環境中濃度等を推計する（技術ガイダンスⅥ章参照）。当該シナリオの評価Ⅱで想定している排出源は、家庭等からの水系洗浄剤等の用途からの排水を処理する下水処理場と、下水処理施設未普及地域の家庭等である。

① 暴露シナリオに対する代表性

環境モニタリング測定地点の緯度経度が得られる場合、測定地点に該当する河川・底質又はメッシュ単位の推計値と対応させることが可能である。その際は、下水処理場の位置、PRTR 届出事業所及び測定地点との位置関係に留意する。

当該シナリオの下水処理場からの排出の寄与に対応する環境モニタリングデータは、下水処理場の位置とその流入先河川並びに測定地点の位置が分かる場合に対応付けが可能である。同一流域に PRTR 届出事業所がある場合は、個別に対応関係を検討する。具体的には、PRTR 届出事業所からの寄与も受けていると考えられる環境モニタリングデータは、本シナリオに対応させるものからは除く。

下水処理施設未普及地域からの排出の寄与に対応する環境モニタリングデータは、下水

[1] 地点ごとの測定頻度などより、同程度の確度のデータであるかを確認の上、扱いを決定する。

処理場と PRTR 届出事業所からの排出の寄与がないと考えられるメッシュの推計値と対応づけられる。

② 解釈等

人健康影響の評価に用いる場合は年平均値、生態影響の評価に用いる場合は個別の測定値を用いるため、モデル推計値との対応もその点を考慮する。

河川のモデル推計は流域単位の計算が行われる。環境モニタリングデータを河川流域の境界部分のメッシュ推計値と対応させる場合、隣接する流域の環境モニタリングデータではないかどうか、河川名などにより確認を行う。

(3) 船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオ

本シナリオでは船底塗料用、漁網用の防汚剤が船底塗膜や漁網から海域に排出されることを想定し、評価Ⅱでは該当用途の全国出荷数量から海域への排出量を算出し、海域中濃度を推計する。

船底塗料・漁網防汚剤由来のシナリオにおいても、測定地点が海域内にある環境モニタリングデータがあれば、必要に応じて当該シナリオに対応させられるかを考慮して用いる。

(4) 地下水汚染の可能性シナリオ

地下水に係る環境モニタリング情報については測定地点が特定できないため（VIII.3.1.2 参照）、排出源との位置関係を特定することができない。このため、地下水質の環境モニタリング情報は、基本的には暴露シナリオに対応した環境中濃度の把握に用いるのではなく、排出実態の把握の必要性等のリコメンデーションのために利用する。

リコメンデーションを行うことが想定されるのは、地下水質の環境モニタリング情報を用いて飲料水として摂取した場合のリスクの試算によりリスクが懸念される場合と、モデル推計による地下水汚染の可能性が高い場合である。ただし、後者については、あくまで相対的な優先順位から判断するため、どのような場合に情報収集を推奨するかの判断基準については今後さらに検討の余地がある。

また、実際に土壌汚染・地下水汚染が発見された場合、人の健康に対するリスクの有無を知るためには暴露評価と有害性評価に基づくリスク推計を行う必要がある。その際、空間的・時間的な汚染状況の分布も含めて評価するためには数理モデルを利用して地下水中濃度を推計することが考えられる（詳細は技術ガイダンスⅥ章参照）。

VIII.4.2.4　様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ

排出源ごとの暴露シナリオでは、サプライチェーンの上～中流の固定排出源（製造段階、調合段階、工業的使用段階）を対象に暴露評価を行っている。暴露評価Ⅱでは、固定排出源だけではなく、様々な排出源（家庭、移動体等）からの影響などを含めた「様々な排出

源の影響を含めた暴露シナリオ」を設定する。様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオでは、PRTR 情報等の地理的な情報を含む排出量情報を利用できる場合、G-CIEMS という数理モデルを利用して、全国の環境中濃度をメッシュ又は流域単位で推計する。そのほか、MNSEM という数理モデルも用いて、環境中のいずれの媒体に分布しやすいか等の推計を行う。

(1) G-CIEMS による推計

G-CIEMS は、詳細な空間分解能を持つ GIS 環境多媒体モデルである。本モデルは、GIS（地理情報システム）で用いる地理データに基づき、環境中に放出された化学物質について、大気、水、土壌、底質等の媒体間の輸送と、大気、河川等での輸送との両方を同時に計算して、媒体間の輸送や分配と地点間の輸送と同時に推計する（詳細は VII.3 参照）。

G-CIEMS を用いた推計では、全国的な空間分布として、約 5km グリッド（2.5 次メッシュ）、約 1km のグリッド（3 次メッシュ）又は小流域単位に区分し、区分ごとに多媒体の媒体間の輸送と、大気、河川等での輸送との両方を同時に計算し環境中濃度を推定する。

① 暴露シナリオに対する代表性

環境モニタリングデータは測定地点の緯度経度が分かっており、また G-CIEMS による推計についてもメッシュごと又は流域ごとに環境中濃度の全国的な分布を求めることができる。すなわち G-CIEMS で環境中濃度を推計可能な大気、水質（海域は除く）及び底質については、推計濃度と環境モニタリングデータとの比較が可能である。

G-CIEMS による推計と組み合わせた環境モニタリング濃度の空間的代表性の確認には 2 つの対応がある。

一つは、高濃度となることが想定される測定地点の環境モニタリング情報が得られているかを確認することである。G-CIEMS の推計における高濃度メッシュ又は流域における環境モニタリング情報が得られているかどうかについて整理し、環境モニタリングデータの空間的代表性を確認する。

もう一つは、排出源の近傍すぎる環境モニタリングデータでないかを確認することである。これは、G-CIEMS の推計結果との比較ではなく、G-CIEMS の入力データとして用いる排出量に関するデータを用いて確認する。大気については排出量データの基となった排出源（PRTR 届出事業所）と環境モニタリングの測定地点との距離の関係を確認する前述の VIII.4.2.2 項の方法で確認できる。水質、底質については、当該環境モニタリング地点を含む流域の上流の濃度について、流域をたどって確認することでその環境中での存在に寄与する排出源を確認することが可能である。

上記のような確認により空間的代表性があるかを考慮しつつ、G-CIEMS による推計値の推計濃度と比較して極端に環境モニタリング濃度が高いデータがある等、評価に用いる濃度において推計結果と整合しない結果がみられる場合には、そのような結果となる理由の確認のため、今後の情報収集の対象とする等が考えられる。

② 解釈等

上述のように、大気、水質及び底質の環境モニタリングデータは、G-CIEMS による推計濃度と対応させることが可能である。G-CIEMS では高濃度となる流域、高濃度とならない流域等の空間分布における相対的な関係については説明可能であるといえる。一方で、G-CIEMS による結果は推計値のため、実際の環境中濃度と数オーダー程度ずれる傾向にあるのかという整合性も踏まえつつ評価に活用すべきである。

そこで、大気、水域及び底質の環境モニタリングデータと、同一のメッシュ又は流域の G-CIEMS による推計値と比較することで、両者のオーダーの合致や相違の程度について傾向を把握する。この傾向を踏まえて、リスク推計における HQ や PEC/PNEC 比の解釈に活用する。例えば、水域濃度について G-CIEMS の推計濃度が環境モニタリングデータの実測値よりも 100 倍程度小さい傾向にある場合、モデル推計濃度の解釈において 100 倍程度の不確実性を考慮する。すなわち推計値に基づく HQ や PEC/PNEC 比が 1/100 の流域までは、リスクの懸念の可能性が否定できないと解釈したうえで、追加モニタリング地点の候補地とするというように活用する。

また、追加モニタリングを実施する際のモニタリング地点や対象媒体の検討に活用するなど、評価Ⅲ以降の暴露評価の精緻化に活用することも考えられる。

(2) MNSEM による推計

MNSEM（Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model）とは日本版の多媒体モデルの一つで、環境媒体間の分配のほか、人の暴露量を推計するために農作物・畜産物中濃度推計モデルも組み込まれている。MNSEM は G-CIEMS とは異なり、メッシュごとの濃度を推計するモデルではなく、日本全域を 1 つのボックスとして、環境媒体（大気、土壌、水、底質）中の平均的な濃度及び媒体別の化学物質量比率等を推定するモデルである。このモデルを用いて、評価対象化学物質が相対的にどの媒体に残留しやすいか等を把握することができる。

MNSEM による推計結果は環境中濃度や暴露量自体ではなく、環境中の分配比率等であるため、環境モニタリング情報と対応付けは行わないが、どの媒体の環境モニタリングデータに注力すべきか等の判断に利用することができる。

VIII.4.2.5 残留性の評価

リスク推計を目的として環境中濃度等の推計や人の暴露量を推計する暴露評価とは別に、暴露評価Ⅱでは残留性の評価も行う。この評価は、第二種特定化学物質の定義の中に、広範な地域でリスクが懸念される状況にある場合のみならず「近くその状況に至ることが確実と見込まれる」場合も含んでいるため、化学物質の環境中での残留状況の増減傾向等を推計することを目的に設定したもので、上述の数理モデル MNSEM を用いる（詳細は技術

ガイダンスⅦ章参照)。

残留性の評価における環境モニタリングデータの利用方法の例としては、情報を収集し媒体中の経年的な検出状況を確認する方法（VIII.4.1 参照）以外に、数理モデルと併用する以下に述べるようなものもある。

残留性の評価においては定常状態到達時間（ある媒体への化学物質の流入速度と消失速度がつりあった状態で、その流入速度の下では存在量に変化がない状態に達する時間）を推計する。定常状態到達時間が短いということは、対象物質の評価対象年度の排出速度ではすぐに定常濃度に達しそれ以上の濃度にはならないことを意味する。逆に言うと排出がなくなれば速やかにその媒体からはその化学物質が消失することを意味する。例えば、定常状態到達時間が短いのに、環境モニタリングデータの結果が年々高くなっている場合には、年々排出量が増加していると推測することができる。

VIII.5 追加モニタリング調査

前節までは既往の環境モニタリング情報の利用について説明した。本節では、国が実施した既往の環境モニタリング情報以外に、追加モニタリング調査の実施の必要性や実施条件（VIII.5.1）、及び事業者が自主的に行った環境モニタリング調査結果等（VIII.5.2）の活用の検討について述べる。いずれの場合においても、VIII.3.2で示した「分析方法等の信頼性」、「暴露シナリオに対する代表性」、「統計的な代表性」に留意する。

VIII.5.1 追加モニタリング

VIII.5.1.1　実施の必要性の判断

追加的モニタリング調査を実施するに当たっては、コスト低減や期間短縮の観点から、その実施は必要最小限とする必要がある。

当面は以下のような場合に限定して、可能な限り追加モニタリングを実施することとする。

・モデルによる推定摂取量によってリスク懸念の可能性が示され、主に寄与する環境媒体について、モデルの検証が不十分である場合。（必要に応じてリスク懸念の地域が多い物質を優先するなどさらに追加的モニタリング調査対象物質を絞り込むこととする。）
・モデルでのリスク推計が困難であると考えられる場合（例：無機化合物、金属化合物等）
・モデルによるリスク評価ではリスク懸念の可能性が示されていないが、環境中濃度が高く化審法対象用途外の寄与等を加味するとリスク懸念が生じる可能性がある場合。（化審法対象用途外の寄与が大きいほど、化審法による規制の効果は小さくなることから、あらかじめ化審法対象用途外の寄与が大きいことがPRTR 排出量データ等から分かる

場合には、化審法のリスク評価のために行う追加的モニタリング調査の優先順位は低くする。）

VIII.5.1.2 実施条件の設定

追加モニタリングを実施する上で、その後の評価Ⅲ、リスク評価（二次）を行うため、実施条件を適切に設定する必要がある。この際、評価Ⅲ、リスク評価（二次）に必要最小限の追加モニタリングとなるよう精査が必要となる。また、一般的にモニタリング調査の実施には、分析方法の開発から開始すると、結果の報告まで2年以上を要する場合もあることから、化審法のリスク評価を円滑に進める観点から、実施期間の短縮が必要である。図表 VIII-11に追加モニタリング調査の実施条件を示す。追加モニタリング実施の検討に当たっては、モデルによるリスク推計において得られる地理的情報や媒体情報などを最大限活用することが考えられる。

図表 VIII-11　追加モニタリング調査の実施条件

対象物質	リスク評価の対象となる物質そのものを測定することを基本とする。 ただし、それまでのリスク評価の結果や解釈を踏まえて、他の物質も含めて測定しておいたほうが良いと考えられる場合（例えば、当該物質に変化する前駆物質もモニタリングする等。）は、それらの物質もモニタリングする。 また、同時分析が可能な物質があれば、それらの物質について同時分析することで追加モニタリング全体のコストを縮減できるかどうか検討することとする。
目標の明確化	実施条件を設定する上で、モニタリングの目標を明確にしておくことが有効である。 ＜例＞ ①リスク懸念に主に寄与する暴露媒体の濃度を確認する。 ②モデルでのリスク推定結果でリスク懸念の可能性のある地点の近傍を測定しモデルの裏付けをとる ③②とは異なる地点を測定して広域な範囲でのモデルとモニタリングの整合性を確認する。 等。
対象の媒体	リスクの懸念に主に寄与する暴露経路が想定できる場合は、当該暴露媒体のモニタリングを行う。
測定時期	時期による濃度増減がある場合等には、リスク懸念を把握するのに適した時期に留意する必要がある。
測定頻度	暴露シナリオに適した測定頻度を想定する。
モニタリング地点	リスクの懸念ありの複数地域のモニタリング結果を得られるように選定する。リスクの懸念ありの地域が多数ある場合には、濃度の高い地域から優先してモニタリング地点を設定する。

VIII.5.2 事業者が自主的に行う環境モニタリング調査等

事業者が自主的に実施している（実施しようとしている）環境モニタリング調査の結果が自主的に提供された場合や、地方公共団体や国及び地方公共団体の研究機関が実施した環境モニタリングデータを入手できる場合は、国のコスト等の削減の観点からも、化審法

のリスク評価に利用することとする。その際、VIII.3.2で示した「分析方法等の信頼性」、「暴露シナリオに対する代表性」、「統計的な代表性」について、これらを確認するための情報の提供も求め、リスク評価で利用する際に留意することとする。

VIII.6 付属資料

VIII.6.1 収集する環境モニタリング情報と整理方法

VIII.6.1.1　収集する環境モニタリング情報

前述したとおり、収集する環境モニタリング情報は、国内の中央省庁・地方自治体等の公的機関が実施している調査結果とする。対象としたモニタリング調査の調査名、実施主体等、調査年度、調査目的、調査環境媒体等をまとめ、図表 VIII-12～図表 VIII-14 に示す。なお、各調査はここに掲げた調査環境媒体以外にも「室内空気[1]」等を調査している場合があるが、本スキームで対象とする媒体に限定して掲載している。また、各調査において媒体の名称が異なる場合があるが、本スキームで対象とする媒体の名称に統一した。

[1] 室内空気汚染によるヒト健康リスクは、化審法の対象外である（技術ガイダンス V 章参照）。

図表 VIII-12　対象とする環境モニタリング調査一覧（1/3）

調査名	実施主体等	調査年度	目的	対象物質の選定基準	対象物質（群）数	調査環境媒体	測定頻度	測定地点数等	測定地点等の選定法	入手可能な最小単位のデータ
地方公共団体等における有害大気汚染物質モニタリング調査	地方公共団体・環境省・国土交通省	H9～	長期的に暴露された場合に健康影響が懸念される有害大気汚染物質について大気汚染防止法に基づき調査。 年平均濃度を算出し、環境基準等と比較評価。	有害大気汚染物質（継続的に摂取される場合には人の健康を損なうおそれがある物質で大気の汚染の原因となるもの）のうち、当該物質の有害性の程度や我が国の大気環境の状況等に鑑み、健康リスクがある程度高いと考えられるもの（優先取組物質）。 (1)環境基準が設定されている物質（4物質） (2)指針値が設定されている物質（7物質） (3)その他の有害大気汚染物質（8物質）	19物質	大気	原則として月1回以上の頻度で測定。その際連続24時間のサンプリングを実施し、日内変動を平均化。曜日が偏らないようにし、週内変動を平均化するのが望ましい。	(1)一般環境 (2)固定発生源周辺 (3)沿道 (1)～(3)合計で300～500地点程度	(1)一般環境 固定発生源等の直接の影響を受けない地点に地域における有害大気汚染物質による大気汚染の状況の継続的把握が効果的になされるように選定する。経年変化を見るため原則同一地点でモニタリング。 (2)固定発生源周辺 固定発生源からの影響を直接受け、かつ移動発生源の直接の影響を受けない地点。排出等が予想される物質の濃度が高くなる地域を選定。経年変化を見るため原則同一地点でモニタリングするが、年度ごとに地域を変え区域全体の状況把握も有効。 (3)沿道 固定発生源の直接の影響を受けず、自動車からの排出が予想される物質の濃度が高くなる地点を選定。原則同一地点でモニタリング。	地点毎の年平均値 （算術平均）
水環境保全に係る調査（人健康）要調査項目	環境省	H10～	「要調査項目」は、個別物質ごとの「水環境リスク」は比較的大きくない、又は不明であるが、環境中での検出状況や複合影響等の観点から見て、「水環境リスク」に関する知見の集積が必要な物質を選定。	以下のいずれかに該当する物質を選定 (1)一定の検出率を超えて水環境中から検出されていること。 (2) 国内、諸外国、国際機関が水環境を経由した人への健康被害の防止または水生生物 の保護の観点から法規制の対象としている物質で、水環境中から 検出されている、あるいは一定量以上製造・輸入・使用されている物質 (3)国内、諸外国、国際機関が人への健康被害または水生生物への影響を指摘している 物質で、水環境中から検出されている、あるいは一定量以上 製造・輸入・使用されている物質 (4) 我が国で精密な調査・分析が行われていない物質等であるが、専門家による知見等 により、水環境を経由して人あるいは水生生物に影響を与える可能性のある物質	リスト上は300物質	公共用水域の水質 地下水	年間１回以上	50～170地点程度	試料採取に当たっては、特定の発生源の影響を受けない一般的な環境を対象として地点を選定。原則として比較的晴天が続き、水質が安定している日を選定する。感潮域や海域にあっては潮汐等も考慮して採水時間を決める。	検体毎の測定値
水質汚濁に係る要監視項目等の調査	環境省・地方公共団体・国土交通省	H5～	人の健康の保護に関連する物質であるが、公共用水域等における検出状況等から見て、直ちに環境基準とはせず、引き続き知見の集積に努めるべき物質として設定。 現在人の健康に係るものとして29物質(27物質が健康項目、2物質が生活項目)が監視項目として、指針値（水質要監視項目の指針値）が示されている。指針値は飲料水経由の影響（主として長期間の飲用）及び水質汚濁に基づく食品経由の影響（長期間の摂取）を考慮して設定。	左記のとおり。	29物質	公共用水域の水質 地下水	年間１回以上	河川：600～1000地点程度 湖沼：30～40地点程度 海域：100～200地点程度 地下水：200～600地点程度	採水日は、採水日前において比較的晴天が続き水質が安定している日を選ぶこととする。採水地点は、次の地点を考慮して選定する。 ① 利水地点 ② 主要な汚濁水が河川に流入した後十分混合する地点および流入前の地点 ③ 支川が合流後十分混合する地点および合流前の本川または支川の地点 ④ 流水の分流地点 ⑤ その他必要に応じ設定する地点 採水時刻は、人間の活動時、工場、事業場の操業時および汚濁物質の流達時間を考慮して決定する。なお、感潮域では潮時を考慮し、水質の最も悪くなる時刻を含むよう採水時刻を	１９９４～１９９８年度は検体ごとの測定値 それ以降は地点平均値

図表 VIII-13　対象とする環境モニタリング調査一覧（2/3）

調査名	実施主体等	調査年度	目的	対象物質の選定基準	対象物質（群）数	調査環境媒体	測定頻度	測定地点数等	測定地点等の選定法	入手可能な最小単位のデータ
公共用水域水質データ（健康項目）	環境省・地方公共団体・国土交通省	H5～	水質汚濁防止法に基づき、都道府県知事は、公共用水域の水質の汚濁状況を常時監視することとされており、都道府県ごとに毎年作成される測定計画に従って、国及び地方公共団体が公共用水域の水質の測定を行っている。これらのデータを国立環境研究所がデータベース化。 同一測定地点における年間の総検体の測定値の平均値（年間平均値）が環境基準を満たしているかどうかで判断。	水質汚濁法のうち人の健康の保護に関する環境基準の定められている項目を選定。	26物質	公共用水域の水質	環境基準地点と補助地点に分かれており、環境基準地点では原則月1回以上測定。 各1回について4回程度採水。このうち1回については全項目測定、他回は必要と思わ	H16年度　8700地点	次による。 (1)公共用水域の水質の汚濁の状況の常時監視の観点から必要な地点を選定。 (2)測定地点の選定にあたっては、著しい重複、変更が生じないように国の地方行政機関と協議するほか市町村とも協議する。 (3)従来の測定により、著しい水質の汚濁が認められた地点については引き続き測定を行う。	検体ごとの測定値
食事からの化学物質暴露量調査	環境省（測定は日本食品分析センター）	H9～（H14は除く）	食事中の化学物質の存在状況について陰膳方式により調査分析。	左記のとおり。	H9　：6物質 H10　：21物質 H11　：28物質 H12　：7物質 H13：9物質 H15：7物質 H16：8物質 H17：10物質 H18：3物質	食事	年1回（3日間）	陰膳方式 H9　9自治体各5世帯 H10　9地区57世帯 H11　9地区各5世帯 H12　9地区各5世帯 H13　10地区各5世帯 H15　10地区各5世帯 H16　10地区各5世帯 H17　10地区各5世帯 H18　10地区各5世帯	-	３日間の食事を全て合わせて一検体としたものの測定値
全国一級河川における微量化学物質に関する実態調査（ﾀﾞｲｵｷｼﾝ類、内分泌かく乱化学物質） ※H16以前は「内分泌かく乱化学物質における環境実態調査」	環境省・地方公共団体・国土交通省	H11～	水環境に係る内分泌攪乱化学物質の科学的知見の集積を図るため、公共用水域の水質、底質及び地下水における内分泌攪乱化学物質の存在状況について調査するものである。	内分泌かく乱作用を持つと疑われる物質。	平成14年度調査においては18物質であった。	公共用水域の水質 公共用水域の底質 地下水	年一回	平成14年度調査においては水質91地点、底質24地点であった。	水質調査地点は環境基準点を基本とし、過去の調査で検出された地点を中心に全国から選定した。底質調査地点は、過去の調査において、何らかの物質が比較的高濃度で検出された地点を選定した。	検体毎の測定値

図表 VIII-14　対象とする環境モニタリング調査一覧（3/3）

調査名		実施主体等	調査年度	目的	対象物質の選定基準	対象物質（群）数	調査環境媒体	測定頻度	測定地点数等	測定地点等の選定法	入手可能な最小単位のデータ
（以下の測定頻度、測定値点数、対象物質数はH18年度（暴露量調査はH17年度）調査の例）											
化学物質環境実態調査（報告書は「化学物質と環境」（ＥＨＣ調査））	初期環境調査	環境省	H14～	化管法の見直し（現行の指定化学物質の見直し）のための調査、及びその他の環境残実態の確認が必要な化学物質を対象とした調査。	「化学物質環境実態調査推進検討会」における有害性知見、PRTR データ、環境残留性予測結果、分析技術確立の実現性、社会及び行政的な必要性等の観点からの検討を経て選定。（H17）	49	公共用水域の水質	年1回（3検体/地点）	48地点（33自治体）	化学物質環境実態調査は、一般環境中における化学物質の残留状況を把握することを原則とするため、当該調査対象物質の排出源近傍など特異な地点を調査地点とすることは避け、調査地点を含む周辺地域の環境及び化学物質の残留状況を代表する地点を調査地点とする。調査を実施する地域又は水域は、調査対象物質の排出源近傍にあるなど特段の理由がある場合を除き、既往の調査地点及び採取点で調査を行うことを原則とする。特に、モニタリング調査は、経年的な環境残留実態推移の把握を目的とすることから、調査地点及び採取点は、やむを得なき理由により調査の継続が困難な場合を除き、既往の調査地点及び採取点とする。	検体ごとの測定値
						6	公共用水域の底質	年1回（3検体/地点）	11地点（7自治体）		
						1	魚介類	年1回（3検体/地点）	5地点（4自治体）		
						28	大気	年1回（3検体/地点）	18地点（15自治体）		
	詳細環境調査		H17～	(1)化審法に基づく第二種特定化学物質の指定の必要性に関する判断を行うため。 (2)化管法第12条に基づく詳細環境実態調査の実施	同上	22	公共用水域の水質	年1回（3検体/地点）	37地点（29自治体）		検体ごとの測定値
						7	公共用水域の底質	年1回（3検体/地点）	13地点（10自治体）		
						11	魚介類	年1回（3検体/地点）	15地点（14自治体）		
						7	大気	年1回（3検体/地点）	15地点（14自治体）		
	暴露量調査		H14～	化審法における特定化学物質及び監視化学物質、環境リスク初期評価を実施すべき物質等の環境残留状況の把握。	同上	17	公共用水域の水質	年1回（3検体/地点：例外あり）	56地点（40自治体）		検体ごとの測定値
						3	公共用水域の底質	年1回（3検体/地点）	35地点（31自治体）		
						8	魚介類	年1回（3検体/地点）	12地点（12自治体）		
						2	食事	年1回（150検体）（家庭内食事は除膳、インスタント、外食は家庭内食事に準じて調製）	-	－	
	モニタリング調査		H14～	「残留性有機汚染物質に関するストックホルム条約」（POPs条約）の対象物質及びその候補となる可能性のある物質並びに化審法の特定化学物質及び監視化学物質のうち、環境基準等が設定されていないものの、環境残留性が高く環境残留性の実態の把握が必要な物質を経年的に調査。 （「生物モニタリング」、「水質・モニタリング」、「指定化学物質等検討調査」、「非意図的生成化学物質汚染実態追跡調査」等の一定の対象物質の経年変化を見る調査の後継調査）	同上	11	公共用水域の水質	年1回（1検体/地点）	48地点（42自治体）	代表性を考慮して調査水域を選び、調査水域において特定の排出源の影響を直接受けない地点を選定。	検体ごとの測定値
						11	公共用水域の底質	年1回（3検体/地点）	64地点（48自治体）		
						18	魚介類	年1回（5検体/地点）	16地点（14自治体）：魚類 7地点（7自治体）：貝類		
						12	大気	年2回（1検体/地点）：温暖期と寒冷期1回ずつ	37地点（35自治体）		
	化学物質環境調査		S49～H13	一般環境中に残留する化学物質の早期発見及びその濃度レベルの把握。 （「第1次化学物質環境安全性総点検調査」（S54～S63）、「第2次化学物質環境安全性総点検調査」（H1～H13）等を含む）	H13の報告書では以下とおり。 物質そのものの有害性のほか、生産量、用途など環境への放出という観点も考慮に入れて物質を選択。 一般環境中に残留する化学物質の早期発見及びその濃度レベルの把握を目的としており、プライオリティリストに収載された物質を、化学物質の構造（クラス）ごとに点検していく。各年においては環境中の運命予測手法を用いて人への暴露面を検討し、環境調査を行うべき物質として選択。これに加えて必要に応じ、プライオリティリスト収載以外の物質についても調査。	約700物質	公共用水域の水質 公共用水域の底質 魚介類 大気	様々	多数	以下は「化学物質環境調査における試料採取にあたっての留意事項(H13)」より 「環境中に残留する化学物質を検索し、環境中に異常が存在するかどうかの知見を得ることを第一義とする。したがって、調査対象化学物質が排出されているような地点（例えば当該化学物質の製造または使用事業所等の排水口付近及び交通機関の通過する付近等）及び汚染の直接的影響を受ける地点は試料採取地点としない。」	検体ごとの測定値

① 地方公共団体等における有害大気汚染物質モニタリング調査

環境省[1]の報告書等から該当年度データの測定地点名、検体数、測定値(算術平均)及び濃度範囲を収集する。

② 水環境保全に係る調査（人健康）要調査項目

環境省[2]の報告書等から該当年度データの水域区分、水域名、測定地点名、採取日、測定値及び定量下限値を収集する。

③ 水質汚濁に係る要監視項目等の調査

環境省から詳細データを入手し、該当年度データの絶対番号（独立行政法人国立環境研究所指定の地点番号)、水域名、測定地点名、最大値、平均値（算術平均値）及び検体数を収集する。

④ 公共用水域水質測定（健康項目）検体ごとの測定値データ

独立行政法人国立環境研究所[3]の報告書等から該当年度データをのレコードID(unique)、絶対番号、水域名、採取年月日、検体ごとの測定値を収集する。

⑤ 食事からの化学物質暴露量調査

④と同様に環境省から詳細データを入手し、測定地点名（都市名)、測定値及び採取年月日を収集する。

⑥ 全国一級河川における微量化学物質に関する実態調査（ダイオキシン類、内分泌かく乱化学物質）[4]

環境省[5]（平成16年度調査からは国土交通省[6]）の報告書等から該当年度データの検体ごとの測定値、当該物質に対する検出限界値及び測定地点名を収集する。

⑦ 化学物質環境実態調査（報告書は「化学物質と環境」（エコ調査））

環境省[7]の報告書等から該当年度データの検体ごとの測定値、当該物質に対する検出限界値及び測定地点名を収集する。

---

[1] http://www.env.go.jp/air/osen/monitoring/index.html
[2] http://www.env.go.jp/water/chosa/index.html
[3] http://www.nies.go.jp/igreen/tm_down.html
[4] 平成 16 年度以前は「内分泌かく乱化学物質における環境実態調査」という名称
[5] http://www.env.go.jp/chemi/end/index.html
[6] http://www.mlit.go.jp/river/toukei_chousa/kankyo/kankyou/suisitu/index.html
[7] http://www.env.go.jp/chemi/kurohon/index.html

VIII.6.1.2　環境モニタリング情報の整理方法

本スキームで環境モニタリング情報を利用するために、VIII.6.1.1 で収集した環境モニタリング情報（⑦以外）に対して、緯度経度情報（世界測地系）の付与を行う（⑦に関しては調査の段階で既に緯度経度情報が付与されている。）。付与する緯度経度情報は独立行政法人国立環境研究所　環境数値データベース[1]をベースに自治体の報告書等の公文書、国土交通省公表の街区レベル位置参照情報、国土地理院の基準点検索、地図で直読の順で調査し付与を行う。

なお、⑤に関する調査については、測定地点として都市名のみの記載のため、緯度経度情報の付与は行わない。

VIII.6.2 排出源との近接性の判断方法

環境モニタリング情報を暴露評価に用いる際、暴露シナリオに対する代表性に考慮するとしている（VIII.3.2.2 参照）。暴露シナリオに対する代表性には、時間的な代表性と空間的な代表性があり、ここでは後者の空間的な代表性の判断につながる排出源と環境モニタリング測定地点との近接性を調べる方法を説明する。

VIII.6.2.1　二地点間距離の算出方法

排出源ごとの暴露シナリオでは、排出源周辺（特定の排出源の影響を受ける地域）という空間スケールのシナリオを設定している。

本スキームでは評価対象物質が PRTR 制度対象物質である場合に、PRTR 届出事業所の緯度経度情報と環境モニタリング地点の緯度経度情報から、簡易的に二点間距離を計算することにより、PRTR 届出事業所とモニタリング地点間の二地点間距離が 10[km]以内の場合を排出源周辺、10[km]超の場合を一般環境の代表値とみなすことにした。なお、評価対象物質が PRTR 制度対象化学物質でない場合は、モニタリング地点が排出源周辺か否かの区別がつけられないため、暴露シナリオに対応させたデータには用いることができない。

10[km]以内か 10[km]超かを判定するために、二地点間距離を、地球を完全な球体とみなしてその中心から 2 地点へ直線を結び、東西の変位と南北の変位を三角関数で求めて、三平方の定理を適用する簡易な方法で計算する。

地点 1 （Lat1,Lon1）と地点 2（Lat2,Lon2）の二地点間距離の具体的な計算式は次のとおりである。

$$d = \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}$$　　式 VIII-1

[1] 水域は「公共用水域水質測定局データ」、大気は「大気環境測定局データ」を用いた。（参照：http://www.nies.go.jp/igreen/index.html）

記号	説明	単位	値	出典・参照先
d	二点間距離	[m]		式 VIII-1
Δx	東西の変位	[m]		式 VIII-2
Δy	南北の変位	[m]		式 VIII-3

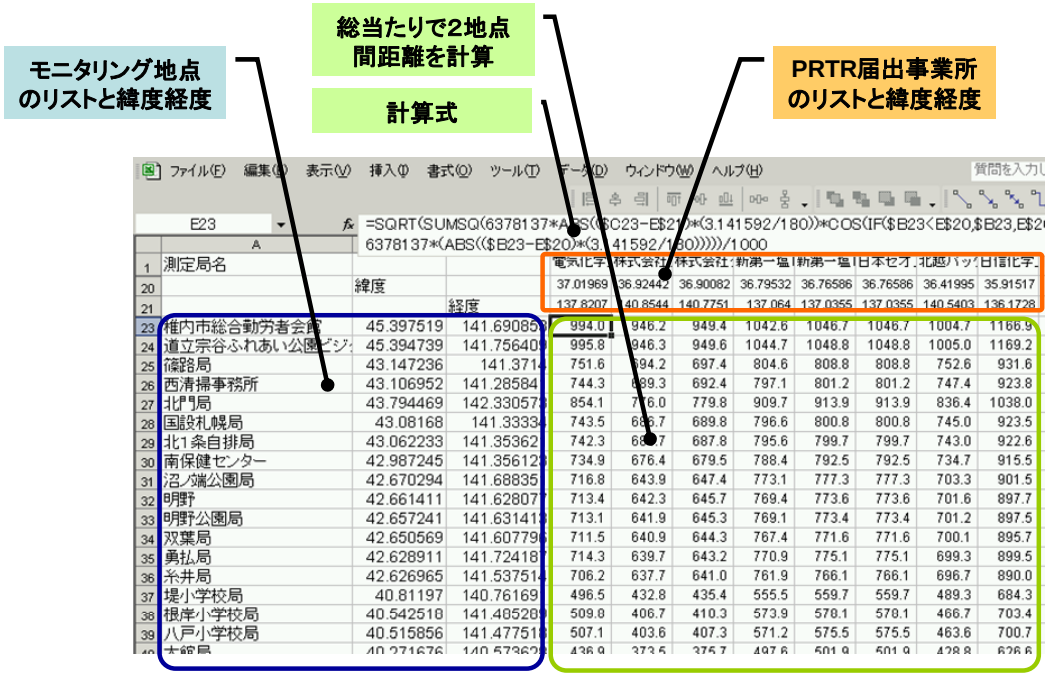
$$\Delta x = 6{,}378{,}137 \times (Lon2 - Lon1) \times \frac{\pi}{180} \times \cos\left(\frac{Lat1 + Lat2}{2} \times \frac{\pi}{180}\right) \qquad \text{式 VIII-2}$$

$$\Delta y = 6{,}378{,}137 \times (Lat2 - Lat1) \times \frac{\pi}{180} \qquad \text{式 VIII-3}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
Δx	東西の差	[m]		
Δy	南北の差	[m]		
Lat1	地点 1 の緯度(※)	[度]		
Lon1	地点 1 の経度(※)	[度]		
Lat2	地点 2 の緯度(※)	[度]		
Lon2	地点 2 の経度(※)	[度]		
6,378,137	地球の半径	[m]		

※　緯度、経度は小数点以下を 10 進数で表す。

二点間距離を計算するイメージを図表 VIII-15 に示す。



図表 VIII-15　環境モニタリング情報の排出源との近接性の識別イメージ

VIII.6.2.2　排出源との関係性

前節に記載したように排出源周辺における環境モニタリング情報を考える際には、環境モニタリングの測定地点と PRTR 届出事業所との空間的な近接性が重要な要素である。そのため、もし一つの環境モニタリング地点に対し 10[km]以内に複数の排出源が存在する場合に、最も影響が大きいと考えらえる排出源を 1 つ抽出するには、式 VIII-4 の E_i が最大となる排出源 i が最も大きな影響を及ぼしているものと仮定する。

$$E_i = \frac{Q_i}{r_i^2}$$ 式 VIII-4

記号	説明	単位	値	出典・参照先
E_i	排出源 i が環境モニタリング地点の測定値に及ぼす影響の強さ	[kg/year/m^2]		式 VIII-4
Q_i	排出源 i の排出量	[kg/year]		
r_i	排出源 i と環境モニタリング地点の二点間距離	[m]		

VIII.6.3 数理モデルによる推計値との比較における留意点

環境モニタリング情報は、VIII.4.2 に示したように暴露シナリオに対応させることができれば、当該暴露シナリオに対応した実測濃度として暴露評価に利用する。その際、環境モニタリングデータは数理モデルによる推計値と比較することになるが、以下の点に留意する必要がある。

数理モデルによる推計値と環境モニタリングデータを対比・比較する際は、数理モデルで想定しているシナリオに沿うように可能な範囲で測定値を抽出・加工するものの、本来両者は一致するものではない、という認識が必要である。以下に排出源ごとの暴露シナリオの例を挙げる。数理モデルによる環境中濃度は「技術ガイダンスⅤ.3.3 環境中濃度推計」に示したように暴露シナリオに沿った仮定上の数値である。例えば本スキームの排出源ごとの暴露評価による大気中濃度は排出源から半径 1km 等のエリア内の年平均濃度である。これと対応する環境モニタリングデータは、厳密に言えば対応するエリアの計算地点に相当する格子点ごとに測定された年平均濃度の、エリア内の格子点間平均濃度であるが、現実には存在しない。

両者は相関が強いと想定されるもの同士の比較であり、推計結果の解釈に利用するために、その相関や対応する数値同士の比がどの程度であるのかという視点で眺めることが有用である。

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

Ⅸ. リスク推計・優先順位付け・とりまとめ

Ver.1.2

令和４年７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	平成 26 年 6 月	初版
Ver. 1.1	平成 30 年 1 月	「優先評価化学物質のリスク評価手法について」及び「化審法に基づく優先評価化学物質のリスク評価の基本的な考え方」の改訂に伴う改訂
Ver. 1.2	令和 4 年 7 月	「優先評価化学物質のリスク評価手法について」及び「化審法に基づく優先評価化学物質のリスク評価の基本的な考え方」の改訂に伴う改訂

目　次

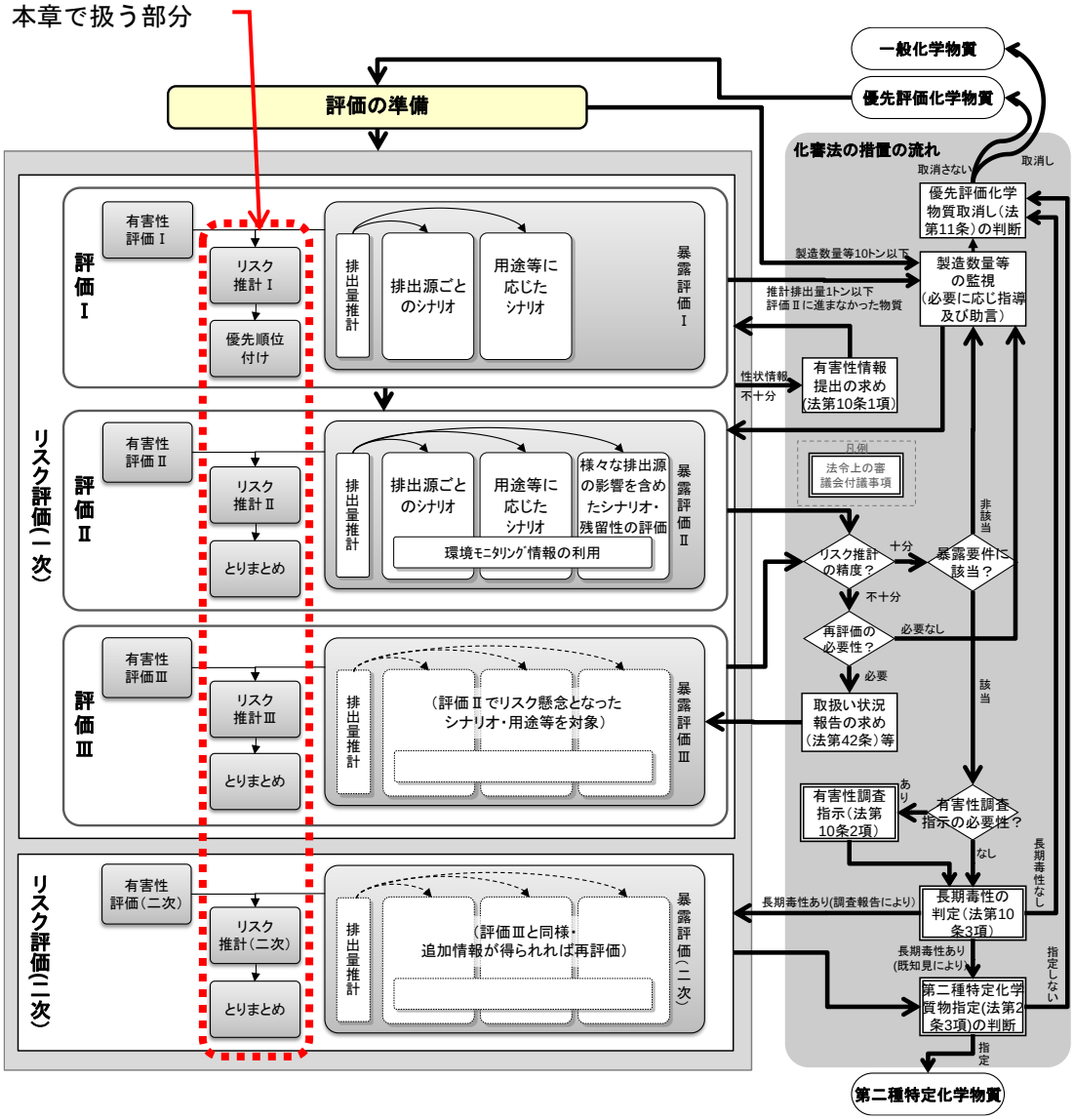
IX. リスク推計・優先順位付け・とりまとめ 1
IX.1 はじめに 1
IX.1.1 本章の位置づけ 1
IX.1.2 他の章との関係 2
IX.2 リスク推計Ｉと優先順位付け 2
IX.2.1 リスク推計の定義等 2
IX.2.2 人健康に係るリスク推計Ｉと優先順位付け 3
IX.2.3 生態に係るリスク推計Ｉと優先順位付け 10
IX.3 リスク推計Ⅱととりまとめ 13
IX.3.1 はじめに 13
IX.3.2 リスク推計Ⅱ 16
IX.3.3 とりまとめ 19
IX.3.4 優先評価化学物質（生態）のとりまとめ 36
IX.4 リスク推計Ⅲととりまとめ 36
IX.5 リスク推計（二次）ととりまとめ 37
IX.6 付属資料 38
IX.6.1 評価対象物質の不確実性(物質の識別における適切さ) 38
IX.6.2 物理化学的性状データの不確実性 39
IX.6.3 PRTR 情報等の不確実性 39
IX.6.4 排出量推計の不確実性 40
IX.6.5 暴露シナリオの不確実性 41

IX. リスク推計・優先順位付け・とりまとめ

IX.1 はじめに

IX.1.1 本章の位置づけ

本章では、優先評価化学物質のリスク評価のうち、「リスク推計」、「優先順位付け」、「とりまとめ」について記載する。リスク評価スキーム全体における本章で扱う部分を図表 IX-1 に示す。



図表 IX-1　リスク評価スキームにおける本章で扱う部分

リスク推計では、有害性評価で導出した有害性評価値（又は PNEC）と暴露評価で算出した暴露量とを比較し、リスク懸念を判断する。評価Ⅰではその結果を用いて次の段階（評価Ⅱ、有害性情報の提出の求め等）を実施するための優先順位付けを行う。評価Ⅱ以降では、リスク評価の過程で得られた情報及び評価結果を、有害性調査指示や第二種特定化学物質の指定等の措置の判断に役立つよう、リスク評価書等としてとりまとめる。

IX.1.2 他の章との関係

本章は、各段階のリスク評価におけるリスク推計以降のステップを記載している。ここに至るまでの各ステップの詳細については評価の準備（Ⅰ章）、有害性評価（Ⅱ～Ⅲ章）、暴露評価（Ⅳ～Ⅷ章）を参照されたい。

IX.2 リスク推計Ⅰと優先順位付け

IX.2.1 リスク推計の定義等

本スキームで「リスク推計」とは、暴露量又は暴露濃度（人の健康に対する評価の場合は摂取量、生態の場合は PEC）と有害性評価値（生態の場合は PNEC）を比較することを意味し、前者が後者の値以上であれば「リスクが懸念される」（単に「リスク懸念」ともいう）　と表現する[1]。

✓	人の健康の場合のリスク推計	
	摂取量≧有害性評価値	リスクが懸念される
✓	生態の場合のリスク推計	
	PEC ≧ PNEC	リスクが懸念される

評価Ⅰでは、「排出源ごとの暴露シナリオ」と「用途等に応じた暴露シナリオ」の 2 種類の暴露シナリオでリスク推計を行う。用途等に応じた暴露シナリオには、用途に応じて複数のシナリオが設定されており、評価Ⅰのリスク推計では「水系の非点源シナリオ」と「大気系の非点源シナリオ」が対象となる（排出源ごとの暴露シナリオと用途等に応じた暴露シナリオの詳細はⅤ章またはⅥ章を参照）。また、有害性評価値と PNEC はⅡ章またはⅢ章で導出した値を用いる。リスク評価の対象（人の健康か生態か）と暴露シナリオに応じてリスク推計は図表 IX-2 に示すように異なる。

[1] これは「ハザード比 HQ≧1」、「暴露マージン MOE≦不確実係数積 UFs」と同義である。また、評価Ⅰ及び評価Ⅱにおいて閾値のない発がん性の観点でのリスク推計を行う場合も、有害性評価値として 10^{-5} 相当の発がんリスクレベルを導出してリスク推計を行う。（Ⅱ章「人健康影響に関する有害性評価」参照）

図表 IX-2　評価Ⅰにおける暴露シナリオごとのリスク推計

暴露シナリオ	リスク推計の対象	
	人健康	生態（水生生物）
排出源ごとの暴露シナリオ	リスク懸念となる仮想的排出源の全国の箇所数と全国の合計影響面積	リスク懸念となる仮想的排出源の全国の箇所数
用途等に応じた暴露シナリオ	代表的な地点でリスクが懸念されるか	代表的な地点でリスクが懸念されるか

IX.2.2 人健康に係るリスク推計Ⅰと優先順位付け

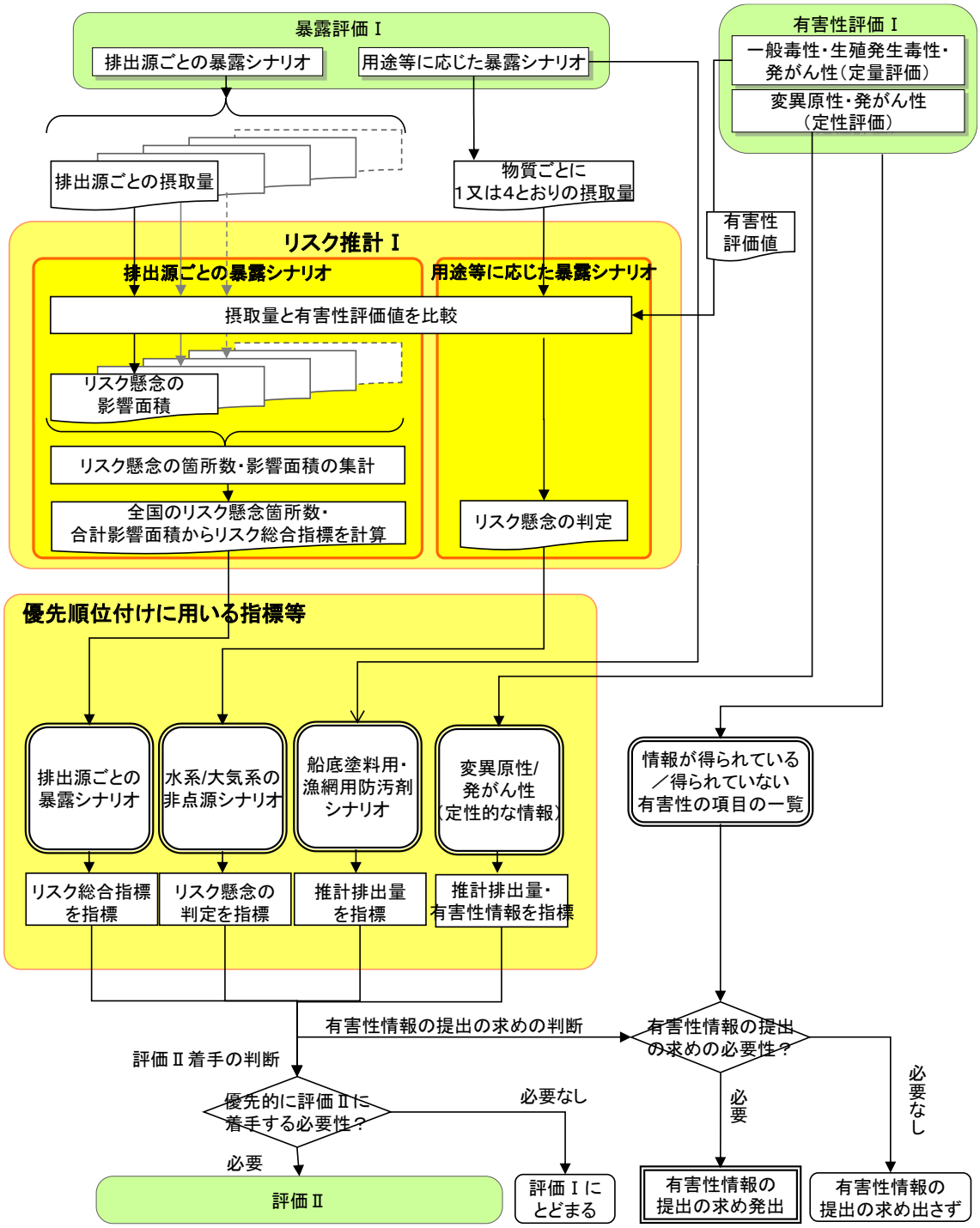
IX.2.2.1 人健康に係るリスク推計Ⅰと優先順位付けのフロー

優先評価化学物質（人健康）のリスク推計Ⅰと優先順位付けのフローを図表 IX-3 に示す。

優先順位付けは評価Ⅰの最後のステップで人健康と生態のそれぞれで行う。人健康では評価Ⅰの結果、優先評価化学物質ごとに有害性情報の有無状況、推計排出量、有害性情報を有する場合にはリスク推計の結果等が得られる。これらの情報を優先順位の指標にし、次の段階（評価Ⅱもしくは法第 10 条第 1 項に基づく有害性情報の提出の求め[1]）の必要性の判断に利用する。

続いて、フローに沿って順に説明する。

[1] 人の健康に係る有害性項目は、「一般毒性」、「生殖発生毒性」、「変異原性」及び「発がん性」の 4 項目である。このうち、生殖発生毒性と発がん性については、法第 10 条第 1 項に基づき有害性情報の提出を求めることができる項目に含まれない。（ただし、一般毒性の情報がない場合は、28 日反復投与毒性試験のかわりに反復・生殖発生毒性併合試験を法第 10 条第 1 項で求めることもできるので、その場合は生殖発生毒性の情報も求めることになる。）これらについては、一般毒性と変異原性のいわゆるスクリーニング毒性試験結果を用いたリスク評価等の結果、暴露要件に該当すると判断される場合に、法第 10 条第 2 項に基づき有害性調査の指示が行われるものと考えられる。



図表 IX-3　優先評価化学物質（人健康）のリスク推計Ⅰと優先順位付けのフロー

IX.2.2.2 人健康に係るリスク推計Ⅰ

評価Ⅰでは、一般毒性及び生殖発生毒性に係る有害性評価値、並びに評価Ⅰにおいて新たに導出する発がん性の有害性評価値が得られた場合にこれらを用いてリスク推計Ⅰを実施するが、変異原性と発がん性に係る定性的な情報は、これらを用いたリスク推計Ⅰは実施しない。ただし、変異原性と発がん性についても、定性的な情報として優先順位付けに使用す

る。

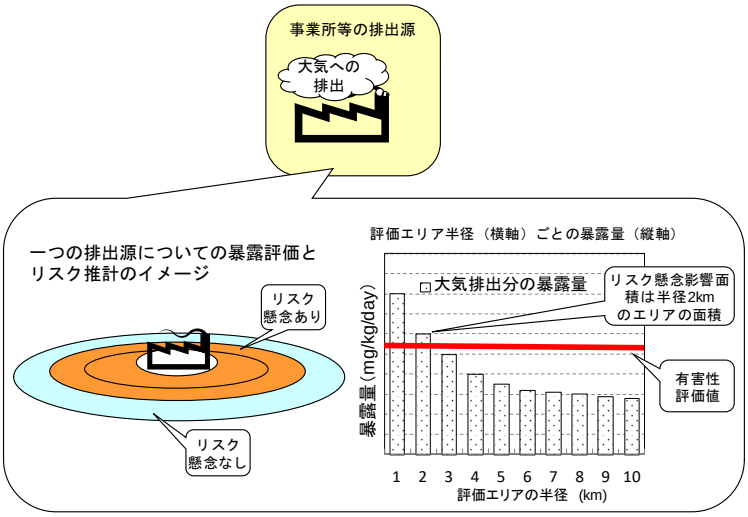
評価Ⅰでは、「排出源ごとの暴露シナリオ」と「用途等に応じた暴露シナリオ」の別に暴露評価を行うが、シナリオに応じて暴露評価結果の内容が異なる。このため、リスク推計Ⅰについても、シナリオに応じてリスク推計結果が意味する内容と表し方が異なる。以降では、これらシナリオごとのリスク推計Ⅰの結果が意味する内容と表し方を説明する。

(1) 排出源ごとの暴露シナリオにおける人健康に対するリスク推計Ⅰ

以下の内容は評価Ⅰ～Ⅲを通じて共通である。なお、評価Ⅱで PRTR 情報を利用できる場合や評価Ⅲで排出源が特定できる場合には、「仮想的排出源」ではなく、特定された実際の排出源を用いる（Ⅳ章「排出量推計」参照）。

① リスク懸念の影響面積の考え方

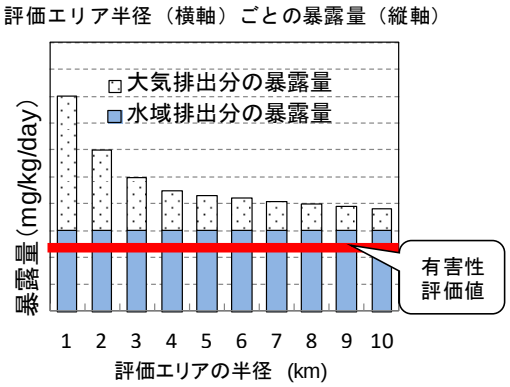
「排出源ごとの暴露シナリオ」では、リスクの指標をリスク懸念の影響面積で表すため、排出源を中心とした半径 1km～10km の 1km 刻みの 10 種類の大きさの評価エリアごとにリスク推計を行う。例えば、ある排出源について半径 2km の評価エリアまででリスクが懸念されれば、リスク懸念影響面積は半径 2km の面積とする[1]（図表 Ⅸ-4）。このようにして全ての排出源でリスク推計を行い、それぞれのリスク懸念影響面積を導出する。結果として、全国のリスク懸念の合計影響面積と箇所数が得られる。



図表 Ⅸ-4　排出源ごとの暴露シナリオのリスク推計とリスク懸念影響面積の関係

「排出源ごとの暴露シナリオ」では、評価エリアの半径に応じて減衰する大気排出分の暴露量と、評価エリアの半径に無関係な水域排出分の暴露量の合計暴露量が得られる（図表 Ⅸ-5 参照）。

[1] ただし、リスク懸念影響面積の計算時は半径 0.1km（=100m）以内は事業所敷地内と仮定して除く。



図表 Ⅸ-5　有害性評価値が水域排出分の暴露量を下回る場合のリスク推計

以上のことから、大気排出分と水域排出分の両方の経路からの暴露量に基づく人の健康に対するリスク推計では、リスク懸念の影響面積とリスク懸念の箇所数という 2 つのリスクの指標が存在することになる。これらを用いて評価Ⅰにおける優先順位付けを行う際には、次に述べる「リスク統合指標」を算出する。

② リスク統合指標の設定

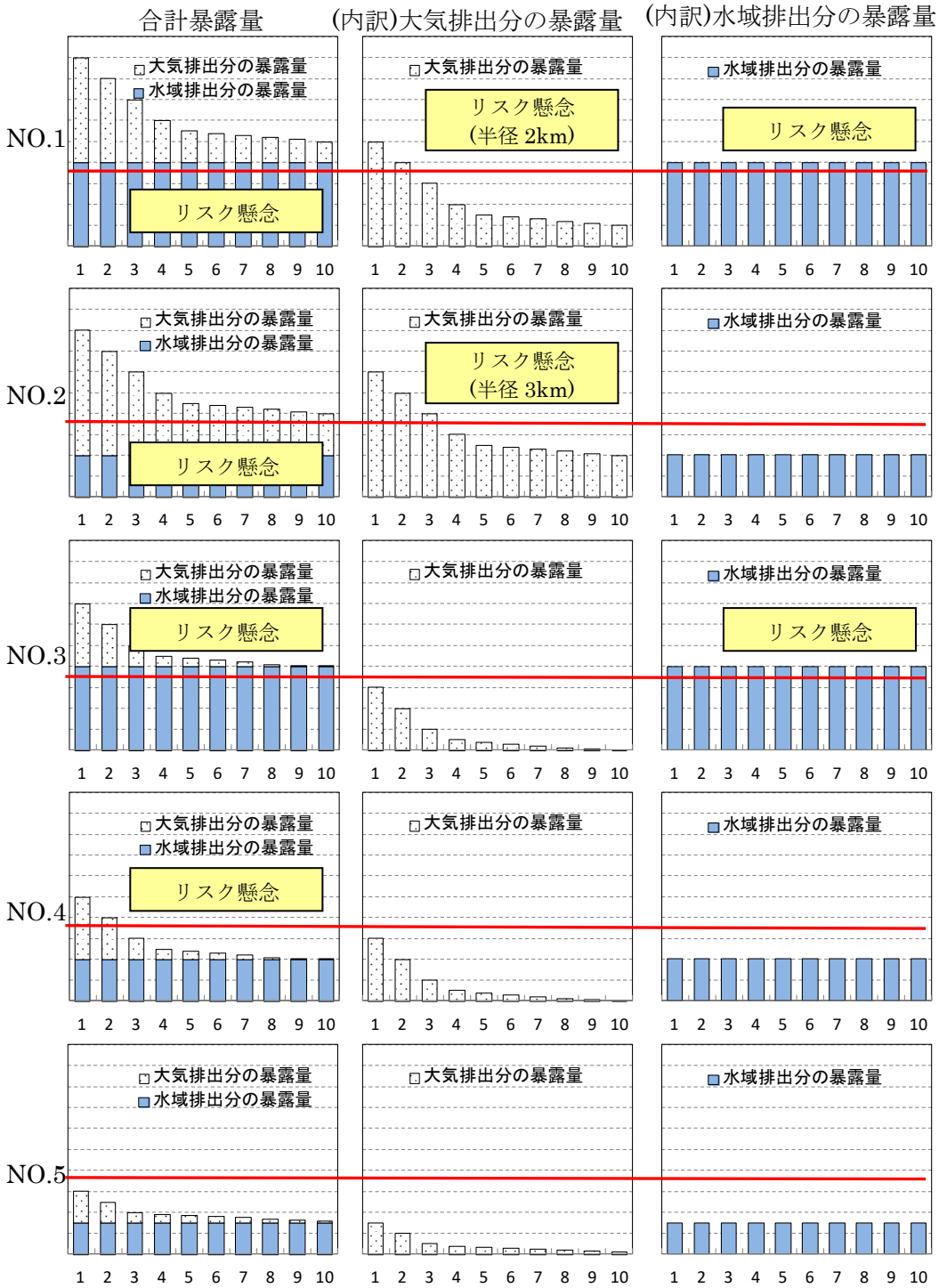
評価Ⅰの人健康に係る評価の場合には、リスク懸念の影響面積とリスク懸念箇所数の 2 つの指標を以下の式で統合した「リスク統合指標」を用いる。

リスク統合指標＝大気排出分に係るリスク懸念の合計影響面積＋
(リスク懸念の箇所数－大気排出分でリスク懸念の箇所数)
×半径 1km のエリアの面積　　式 IX.2-1

ここで用いるリスク統合指標は、リスクの指標を面積の尺度としており、大気排出分だけでリスク懸念となる面積と、水域排出分だけがリスク懸念となる箇所や、大気排出分や水域排出分だけではリスク懸念とならないが合計暴露量ではリスク懸念となる箇所を半径 1km のエリアの面積に換算したものの合計である。そのため、本「リスク統合」指標の単位は面積（km^2）となる。具体的な計算例を次に示す。

③ リスク統合指標の計算例

全国に次の 5 つ(No.1～No.5)の排出源があった場合を例にリスク統合指標を計算する。図表 IX-6 において、各グラフの縦軸は暴露量で横軸は評価エリアの半径（km）である。左端のグラフが各排出源の合計暴露量で中央のグラフと右端のグラフは内訳（大気排出分の暴露量、水域排出分の暴露量)、赤い横線は有害性評価値である。



図表 IX-6　各排出源の暴露量とリスク推計

リスク推計の定義より、合計暴露量が有害性評価値以上であればリスク懸念となるので、

- リスク懸念箇所数：４箇所（No.1、No.2、No.3、No.4）
- 大気排出分でリスク懸念の箇所数：2 箇所（No. 1 ：2km まで懸念、No.2：3km まで懸念）

となる。

したがって、

リスク統合指標＝大気排出分に係るリスク懸念の合計影響面積
＋(リスク懸念の箇所数－大気排出分でリスク懸念の箇所数)
×半径 1km のエリアの面積
={半径 2km のエリア面積＋半径 3km のエリア面積}
＋(4－2) ×半径 1km のエリアの面積
$=\{\pi(2^2-0.1^2)+\pi(3^2-0.1^2)\}$
$+(4-2)\times\pi(1^2-0.1^2)\fallingdotseq 47$

となり、この場合のリスク統合指標は約 47km² である。

④ リスク評価Ⅰで用いるリスク統合指標とスクリーニング評価における優先度マトリックスとの関係

スクリーニング評価における優先度マトリックスの優先度「高」（優先評価化学物質相当）を設定する際においては、旧第二種監視化学物質かつ PRTR 対象物質を用いて試行を行い、リスク評価Ⅰで用いる「リスク統合指標」が 10km² 以上となるものと対応するように設定された[1]。

(2) 用途等に応じた暴露シナリオにおける人健康に対するリスク推計Ⅰ

用途等に応じた暴露シナリオの 1 つである水系の非点源シナリオでは、排出量推計から環境中濃度推計まで原単位ベースの比率として扱い、物質ごとに 1 つの暴露量を推計する（「Ⅵ章用途等に応じた暴露シナリオ」参照）。この暴露量と有害性評価値を比較し、リスク推計では物質ごとに 1 つの結果が得られる。このシナリオによる暴露量は、日本全国で使用された当該化学物質に起因する代表値であり、これを用いたリスク推計は下水処理場から流入がある河川を想定した場合に、そこでリスク懸念があることが仮想的に推定されたということを意味する。これは、排出源ごとの暴露シナリオでの排出源が 1 つの場合に 1 つのリスク懸念があったときと同じリスク推計結果に見えるが、表す意味は異なる。

大気系の非点源シナリオでは、全国のメッシュに割り振った推計排出量から環境中濃度を推計するが、評価Ⅰではメッシュ単位の大気への推計排出量が全国で 100 パーセンタイル、95 パーセンタイル、50 パーセンタイル、5 パーセンタイルとなる 4 メッシュで代表させて、環境中濃度を推計する（Ⅵ章「用途等に応じた暴露シナリオ」）参照）。この暴露量と有害性評価値とを比較し、リスク推計Ⅰでは物質ごとに 4 つの結果が得られる。

[1] 厚生労働省,経済産業省,環境省,スクリーニング評価手法の詳細（平成 22 年 10 月 8 日）,pp.18-24
(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/screening_detail.pdf)
なお、人健康に係る優先度マトリックスの設定に際し、旧第二監視化学物質かつ PRTR 対象物質を用いたリスク評価の試行結果が用いられている。一方で、生態に係る優先度マトリックスは、旧第三種監視化学物質かつ PRTR 対象物質を用いてリスク評価を試行し、リスク懸念箇所数が 10 以上となる化学物質が優先度「高」になるように暴露クラスを設定している（pp.34-40）。

Ⅸ.2.2.3 人健康に係る優先順位付け

評価Ⅰでは、優先評価化学物質（人健康）に対して、評価Ⅱを着手する判断のための優先順位付けや有害性情報の提出の求めを発出する判断のための優先順位付けを行う。優先順位付けに用いる指標等は以下のとおりである。(ア)～(エ)については図表 Ⅸ-3 に対応している。

(ア) 排出源ごとの暴露シナリオでは、Ⅸ.2.2.2 (1)で解説した評価Ⅰに用いられる指標を優先順位付けの指標とする。

(イ) 水系の非点源シナリオ（該当用途がある場合のみ）では、リスク懸念を判定しておく。大気系の非点源シナリオのリスク推計の結果（該当用途がある場合のみ）は、4 つのケース（大気への推計排出量が 100 パーセンタイル、95 パーセンタイル、50 パーセンタイル、5 パーセンタイル）の各々についてリスク懸念を判定しておく。これらのリスク懸念の判定結果[1]を優先順位付けの指標とする。

(ウ) 船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオの対象物質（該当用途がある場合のみ）は、現状のスキームでは評価Ⅱからリスク推計を実施するという整理であるため（Ⅵ章「用途等に応じた暴露シナリオ」）参照）、ここでは当該用途に係る推計排出量を優先順位付けの指標とする。

(エ) 定性的な情報により変異原性又は発がん性を有すると類別された優先評価化学物質については、閾値のない有害性を有する可能性が考えられる物質であり、優先順位付けの指標を推計排出量と当該有害性情報とする。

なお、上記の（ア）と（イ）については、有害性評価値が得られた一般毒性、生殖発生毒性及び発がん性ごとに行う。

評価Ⅱに着手する優先順位は（ア）～（エ）の指標から総合的に判断し、そのうえで当該年度に評価Ⅱに着手する物質を決定する。また、有害性情報の提出の求めの優先順位は、有害性情報の得られている項目と得られていない項目を整理し、上記（ア）～（エ）の指標や推計排出量の大きさから総合的に判断し、そのうえで不足している有害性項目について有害性情報の提出の求めを発出する物質を決める。

---

[1] Ⅸ.2.2.2 (2)に説明したように水系の非点源シナリオによるシナリオでリスク懸念ということは下水処理場からの流入のある全国の大半の河川に関連する暴露でリスクが懸念されると推計されたということを意味する。そのため、排出源が 1 つの場合におけるリスク懸念とはリスク推計結果の表す意味が異なる。因みに、全国の下水処理場の数は約 1800 箇所（下記資料）あり、式 Ⅸ.2-1 で算出されるリスク統合指標に換算すると約 5700 km^2 という大きい数値になる。

総務省編「平成 18 年度版（平成 16 年度決算）地方財政白書」によれば、平成 16 年度の終末処理場の箇所数は 1841 箇所（終末処理場とは下水道法上の下水処理場の呼称）。

評価Ⅱへ進まなかった物質は評価Ⅰの段階にとどまり、次年度の評価Ⅰ実施の候補[1]となる。次年度の評価Ⅰの結果次第では評価Ⅱに着手する可能性もある。なお、人健康と生態影響の両方の観点で優先評価化学物質となっている場合は、それぞれについて評価Ⅱを着手するかどうかを判断する。このため、例えば人健康の観点では評価Ⅱへ進むが、生態影響の観点では評価Ⅰにとどまるといったケースも想定される。

IX.2.3 生態に係るリスク推計Ⅰと優先順位付け

IX.2.3.1 生態に係るリスク推計Ⅰと優先順位付けのフロー

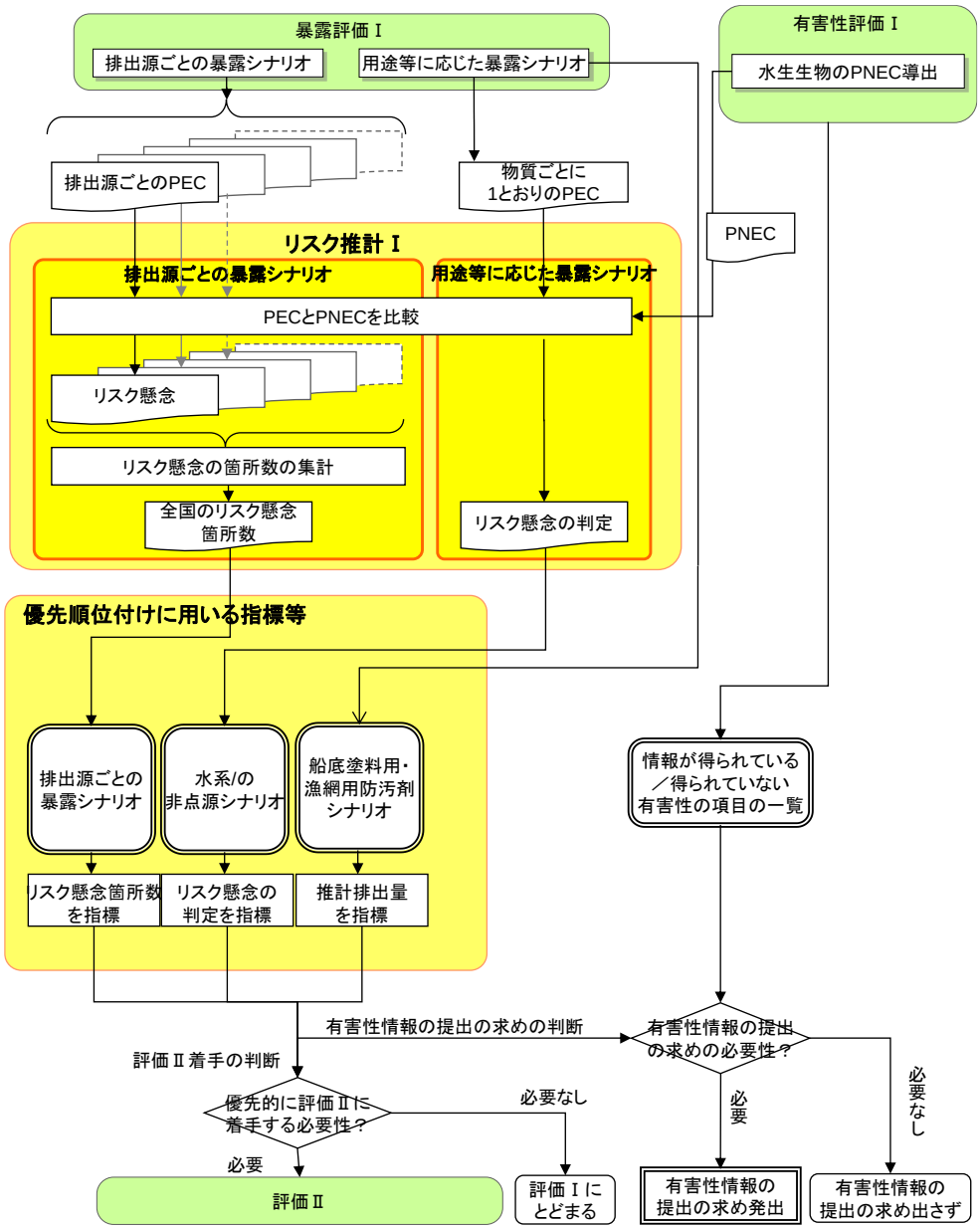
優先評価化学物質（生態）のリスク推計Ⅰと優先順位付けのフローを図表 IX-7 に示す。

優先順位付けは評価Ⅰの最後のステップで人健康と生態のそれぞれで行う。評価Ⅰの結果、優先評価化学物質ごとに有害性情報の有無状況、推計排出量、リスク推計の結果等が得られる。これらの情報を優先順位の指標にし、次の段階（評価Ⅱもしくは法第 10 条第 1 項に基づく有害性情報の提出の求め[2]）の必要性の判断に利用する。

続いて、フローに沿って順に説明する。

[1] 製造輸入数量の全国合計量が 10t 以下の優先評価化学物質は評価Ⅰの対象外（Ⅰ章「評価の準備」参照）。

[2] 法第 10 条第 1 項に基づく有害性情報の提出の求めることができる試験項目は、藻類生長阻害試験、ミジンコ急性遊泳阻害試験、魚類急性毒性試験と省令で定められている。（新規化学物質に係る試験並びに優先評価化学物質及び監視化学物質に係る有害性の調査の項目等を定める省令）



図表 IX-7　優先評価化学物質（生態）のリスク推計Ⅰと優先順位付けのフロー

IX.2.3.2 生態に係るリスク推計Ⅰ

評価Ⅰでは水生生物に係るリスク推計（リスク推計Ⅰ）を実施する。評価Ⅰでは、「排出源ごとの暴露シナリオ」と「用途等に応じた暴露シナリオ」の別に暴露評価を行うが、シナリオに応じて暴露評価結果の内容が異なる。このため、リスク推計Ⅰについても、シナリオに応じてリスク推計結果が意味する内容と表し方が異なる。以降では、これらシナリオごとのリスク推計Ⅰの結果が意味する内容と表し方を説明する。

(1) 排出源ごとの暴露シナリオにおける生態に対するリスク推計Ⅰ

以下の内容は評価Ⅰ～Ⅲを通じて共通である。なお、評価ⅡでPRTR情報を利用できる場合や評価Ⅲで排出源が特定できる場合には、「仮想的排出源」ではなく、特定された実際の排出源を用いる（Ⅳ章「排出量推計」推計）。

「排出源ごとの暴露シナリオ」では、仮想的排出源ごとに1つのPECが推計され、リスク推計も 1 つの結果が得られる。全ての仮想的排出源でリスク推計を行い、結果として全国のリスク懸念の箇所数が得られる。

(2) 用途等に応じた暴露シナリオにおける生態に対するリスク推計Ⅰ

用途等に応じた暴露シナリオの 1 つである水系の非点源シナリオ[1]では、排出量推計から環境中濃度推計まで原単位ベースの比率として扱い、物質ごとに1つだけPECが推計される。（Ⅵ章「用途等に応じた暴露シナリオ」参照）このPECとPNECを比較し、リスク推計では物質ごとに1つの結果が得られる。このシナリオによるPECは、日本全国で使用された当該化学物質に起因する代表値であり、これを用いたリスク推計は下水処理場から流入がある河川を想定した場合に、そこでリスク懸念があることが仮想的に推定されたということを意味する。これは、排出源ごとの暴露シナリオでの排出源が 1 つの場合に 1 つのおけるリスク懸念があったときと同じリスク推計結果に見えるが、表す意味は異なる。

Ⅸ.2.3.3 生態に係る優先順位付け

評価Ⅰでは、優先評価化学物質（生態）に対して、評価Ⅱを着手する判断のための優先順位付けや有害性情報の提出の求めを発出する判断のための優先順位付けを行う。優先順位付けに用いる指標等は以下のとおりである。(ア)～(ウ)については図表 Ⅸ-7 に対応している。

(ア) 排出源ごとの暴露シナリオでは、Ⅸ.2.3.2 (1)で解説したリスク懸念箇所数を優先順位付けの指標とする。
(イ) 水系の非点源シナリオ（該当用途がある場合のみ）では、リスク懸念を判定しておく。リスク懸念の判定結果を優先順位付けの指標とする。
(ウ) 船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオの対象物質（該当用途がある場合のみ）は、評価Ⅰで採用可能な簡便なリスク推計手法がないため、ここでは当該用途に係る推計排出量を優先順位付けの指標とする。

評価Ⅱに着手する優先順位は（ア）～（ウ）の指標から総合的に判断し、そのうえで当該

[1] 大気系の非点源シナリオは排出源ごとの暴露シナリオと同じく、大気へ排出される化学物質に起因する水生生物の暴露は考慮していないため、生態に対するリスク推計Ⅰの対象外である。

年度に評価Ⅱに着手する物質を決める。また、有害性情報の提出の求めの優先順位は、有害性情報の得られている項目と得られていない項目を整理し、上記（ア）～（ウ）の指標や推計排出量の大きさから総合的に判断し、そのうえで不足している有害性項目について有害性情報の提出の求めを発出する物質を決める。

評価Ⅱへ進まなかった物質は評価Ⅰの段階にとどまり、次年度の評価Ⅰ実施の候補[1]となる。次年度の評価Ⅰの結果次第では評価Ⅱに着手する可能性もある。なお、人健康と生態影響の両方の観点で優先評価化学物質となっている場合は、それぞれについて評価Ⅱを着手するかどうかを判断する。このため、例えば生態影響の観点では評価Ⅱへ進むが、人健康の観点では評価Ⅰにとどまるといったケースも想定される。

IX.3 リスク推計Ⅱととりまとめ

IX.3.1 はじめに

IX.3.1.1 本節の位置付け

本節（IX.3）では、「リスク推計Ⅱ」及び「とりまとめ」について解説する。

リスク推計Ⅱは、優先評価化学物質（人健康）については一般毒性、生殖発生毒性、発がん性の中から得られた総合的な観点で選定された適切なキースタディより導出した有害性評価値を用いて行う[2]。優先評価化学物質（生態）については水生生物と評価対象物質の性状に応じて底生生物を対象に行う。

とりまとめは、リスク評価の過程で得られた情報と評価の結果をリスク評価書等[3]に統合することである。とりまとめの中で行う不確実性解析についても本節で説明する。

IX.3.1.2 リスク推計Ⅱととりまとめのフロー

リスク推計Ⅱ及びとりまとめのフローについて優先評価化学物質（人健康）を例にして図表 IX-8 に示す。フローに沿って、次項以降順に説明する。

人健康に係るリスク推計Ⅱでは、評価対象物質のキースタディから導出された有害性評価値に対してリスク推計を行い、リスク懸念の影響面積、箇所数、メッシュ又は小流域等を推計する。

---

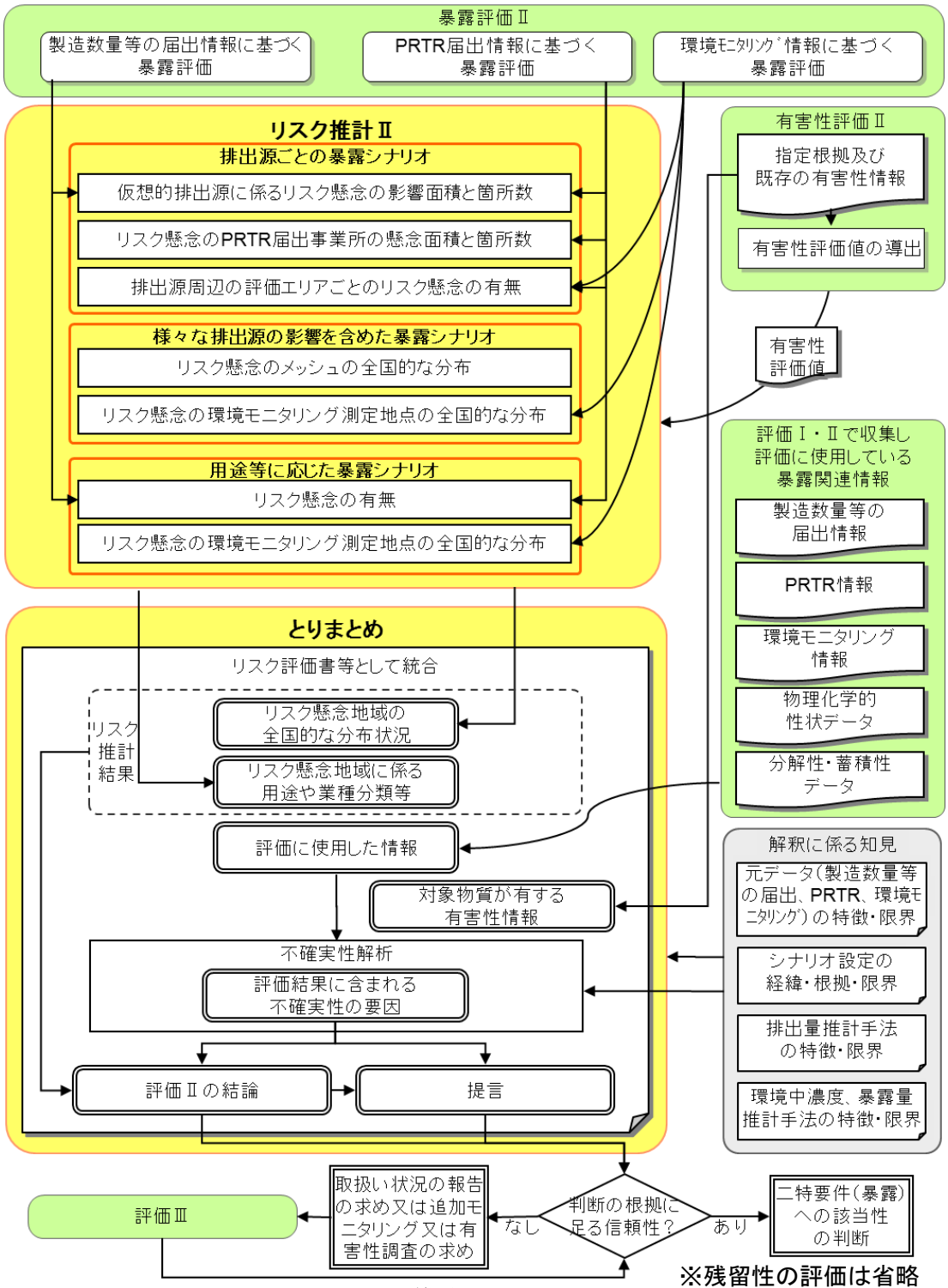
[1] 製造輸入数量の全国合計量が 10t 以下の優先評価化学物質は評価Ⅰの対象外（Ⅰ章「評価の準備」参照）。

[2] 有害性評価値の導出については、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 Ⅱ．人健康影響に関する有害性評価の II.4.1.3　有害性評価Ⅱの目的に記載。

[3] リスク評価書「等」としているのは、本節で述べる内容を全て網羅した詳細なリスク評価書の他に、簡易的に結果を示すもの（簡易版）も含めているためである（IX.3.3 参照）。

とりまとめでは、リスク評価の過程で得られた情報と評価の結果をリスク評価書等に統合する。とりまとめにおいては、有害性評価Ⅱ、暴露評価Ⅱ及びリスク推計Ⅱの結果とともに、それらに用いた情報を集約する。暴露評価で推計に利用している元データ、推計方法の特徴や限界といった知見から不確実性の要因を抽出する。不確実性の要因は、この段階で得られている評価結果が行政上の判断の根拠に足るものかの判断材料として提示する。これらから、評価Ⅱの結論を導き、有害性調査指示や第二種特定化学物質の指定、評価Ⅲに進むのか否かが判断されると想定している。とりまとめについては IX.3.3 で説明する。

優先評価化学物質（生態）のとりまとめについては IX.3.4 に人健康のそれと異なる部分を整理する。



図表 IX-8　リスク推計Ⅱととりまとめのフロー

（優先評価化学物質（人健康）の場合）

IX.3.2 リスク推計Ⅱ

リスク推計Ⅱについて、人の健康に対する場合と生態に対する場合のそれぞれでリスク推計Ⅰと異なる部分を説明する。

図表 IX-8 に示したように、ここで得られるリスク推計Ⅱの結果と、後述（IX.3.3.3 ）する不確実性解析の結果が統合されて、評価Ⅱの結論を導くことになる。

IX.3.2.1 人健康に係るリスク推計Ⅱ

優先評価化学物質（人健康）についてリスク推計Ⅱを行う暴露シナリオと、情報源及び有害性項目に応じたリスク推計結果の表し方を図表 IX-9 に示す。

図表 IX-9　優先評価化学物質（人健康）のリスク推計Ⅱを行う暴露シナリオ・情報源・有害性項目に応じたリスク推計結果の表し方

<table>
<tr><th rowspan="3">暴露シナリオ</th><th rowspan="3">情報源</th><th colspan="3">有害性項目※3</th></tr>
<tr><th>一般毒性</th><th>生殖発生毒性</th><th>発がん性</th></tr>
<tr><th>リスク推計結果の表し方</th><th>リスク推計結果の表し方</th><th>リスク推計結果の表し方</th></tr>
<tr><td rowspan="3">排出源ごとの暴露シナリオ</td><td>製造数量等の届出情報</td><td colspan="2">仮想的排出源に係るリスク懸念の影響面積と箇所数</td><td>仮想的排出源に係るリスク懸念の影響面積と箇所数</td></tr>
<tr><td>PRTR 情報</td><td colspan="3">リスク懸念の PRTR 届出事業所の懸念面積と箇所数</td></tr>
<tr><td>環境モニタリング情報</td><td colspan="3">排出源周辺の評価エリアごとのリスク懸念の有無
（PRTR情報も得られる場合）</td></tr>
<tr><td rowspan="2">様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ※1</td><td>PRTR 情報</td><td colspan="3">リスク懸念のメッシュや小流域の全国的な分布</td></tr>
<tr><td>環境モニタリング情報</td><td colspan="3">リスク懸念の環境モニタリング測定地点の全国的な分布</td></tr>
<tr><td rowspan="3">用途等に応じた暴露シナリオ※2</td><td>製造数量等の届出情報</td><td colspan="2">リスク懸念の有無※4</td><td>リスク懸念の有無※4</td></tr>
<tr><td>PRTR 情報</td><td colspan="3">リスク懸念の有無※3</td></tr>
<tr><td>環境モニタリング情報</td><td colspan="3">リスク懸念の環境モニタリング測定地点の全国的な分布</td></tr>
</table>

注：太枠で囲った部分はリスク推計Ⅰでも実施する区分

※1　化審法の製造数量等の届出情報を用いた評価Ⅱにおける様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオでは、日本全体を 1 つの箱とみなして広域的・長期的スケールの数理モデルも用いて暴露状況を推計するが、そこでは基本的にはリスク推計は行わない。

※2　評価Ⅰの船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオでは推計排出量による優先順位付けを行う。また、評価Ⅱから実施する地下水汚染の可能性シナリオでは地下水への移行し易さについて相対的な評価を行う。

※3　リスク推計Ⅱを実施する有害性項目は、評価Ⅱの結果に基づき、一般毒性、生殖発生毒

性、発がん性のいずれか 1 項目[1]について行う。
※4　評価Ⅰの結果はシナリオごとに、リスク懸念で表すが、評価Ⅱ以降ではリスク懸念のメッシュの全国的な分布で表すこともある。

図表 IX-9 においてリスク推計Ⅰでも実施する区分を太枠で示した[2]。それ以外が評価Ⅱで加わる部分である。ただし、有害性情報と暴露情報の情報源が評価Ⅱで追加されなければ、リスク推計を行う区分は評価Ⅰと同様である。

有害性項目は、有害性評価Ⅱで情報の得られた一般毒性、生殖発生毒性、及び発がん性のうち、有害性評価値の指標となったいずれか 1 項目についてリスク推計を行う。暴露評価は情報源に PRTR 情報と環境モニタリング情報が追加される。環境モニタリング情報を利用する場合は、その測定地点ごとのリスク懸念の有無で表される。リスク推計結果がリスク懸念の影響面積と箇所数で表されるのは、製造数量等の届出情報もしくは PRTR 届出情報を用いた排出源ごとの暴露シナリオの場合である。様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおいて PRTR 情報等の地理的な情報を含む排出量情報を用いて地理情報を活用した数理モデルを使いメッシュごとに環境中濃度等を推計する場合、リスク評価結果はリスク懸念のメッシュの全国的な分布で表される。

IX.3.2.2 生態に係るリスク推計Ⅱ

優先評価化学物質（生態）についてリスク推計Ⅱを行う暴露シナリオと、情報源及び対象生物に応じたリスク推計結果の表し方を図表 IX-10に示す。

[1] なお、経口及び吸入の経路ごとに有害性評価値は算出する。
[2] 指定根拠の有害性が生殖発生毒性の場合もある。

図表 Ⅸ-10　優先評価化学物質（生態）のリスク推計Ⅱを行う暴露シナリオ、情報源及び対象生物に応じたリスク推計結果の表し方

暴露シナリオ	情報源	対象生物	
		水生生物	底生生物
		推計結果の表し方	推計結果の表し方
排出源ごとの暴露シナリオ	製造数量等の届出情報	リスク懸念の仮想的排出源の数	リスク懸念の仮想的排出源の数
	PRTR情報	リスク懸念のPRTR届出事業所の数	
	環境モニタリング情報	排出源周辺の環境モニタリング測定地点ごとのPEC/PNEC比（PRTR情報も得られる場合）	
様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ※1	PRTR情報	リスク懸念のメッシュや小流域の全国的な分布	
	環境モニタリング情報	リスク懸念の環境モニタリング測定地点の全国的な分布	
用途等に応じた暴露シナリオ※2	製造数量等の届出情報	リスク懸念の有無※3	リスク懸念の有無※3
	PRTR情報	リスク懸念の有無※3	
	環境モニタリング情報	リスク懸念の環境モニタリング測定地点の全国的な分布	

注：太枠で囲った部分はリスク推計Ⅰでも実施する区分
※1　化審法の製造数量等の届出情報を用いた評価Ⅱにおける様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオでは、日本全体を１つの空間とみなして広域的・長期的スケールの数理モデルも用いて暴露状況を推計するが、そこでは基本的にはリスク推計は行わない。
※2　評価Ⅰの船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオでは推計排出量による優先順位付けを行う。
※3　評価Ⅰの結果はシナリオごとに、リスク懸念で表すが、評価Ⅱ以降ではリスク懸念のメッシュの全国的な分布で表すこともある。

図表 Ⅸ-10 においてリスク推計Ⅰでも実施する区分を太枠で示した。それ以外が評価Ⅱで加わる部分である。ただし、底生生物が評価対象とならず、暴露情報の情報源が評価Ⅱで追加されなければ、リスク推計Ⅱを行う区分は評価Ⅰと同様である。

対象物質が底質に残留しやすい場合には（logPow の値で判断。第Ⅲ章「生態影響に関する有害性評価」参照）、評価対象生物に底生生物を加え、有害性評価で PNECsed を導出してリスク推計を行う。暴露評価は情報源に PRTR 情報と環境モニタリング情報が追加される。環境モニタリング情報を利用する場合は、その測定地点ごとのリスク懸念の有無で表される。リスク評価結果がリスク懸念の箇所数で表されるのは、製造数量等の届出情報もしくは PRTR 届出情報を用いた排出源ごとの暴露評価の場合である。様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおいて、PRTR 情報等の地理的な情報を含む排出量情報を用いて地理情報を活用した数理モデルを使いメッシュ又は小流域ごとに環境中濃度等を推計する場合は、リスク評価結果はリスク懸念のメッシュ又は小流域の全国的な分布で表される。

IX.3.3 とりまとめ

本項では、はじめにとりまとめの定義と本スキームにおける考え方を示すとともに、本スキームにおけるとりまとめの要素を挙げる（IX.3.3.1 ）。次に、評価結果から判断される内容と、とりまとめの要素との対応を示す（IX.3.3.2 ）。IX.3.3.3 では、とりまとめの際に行う不確実性解析の説明をする。IX.3.3.4 ～IX.3.3.7 ではその他のとりまとめの要素について解説し、IX.3.3.8 ではとりまとめの要素を関連付けた結論の導出の考え方を説明する。

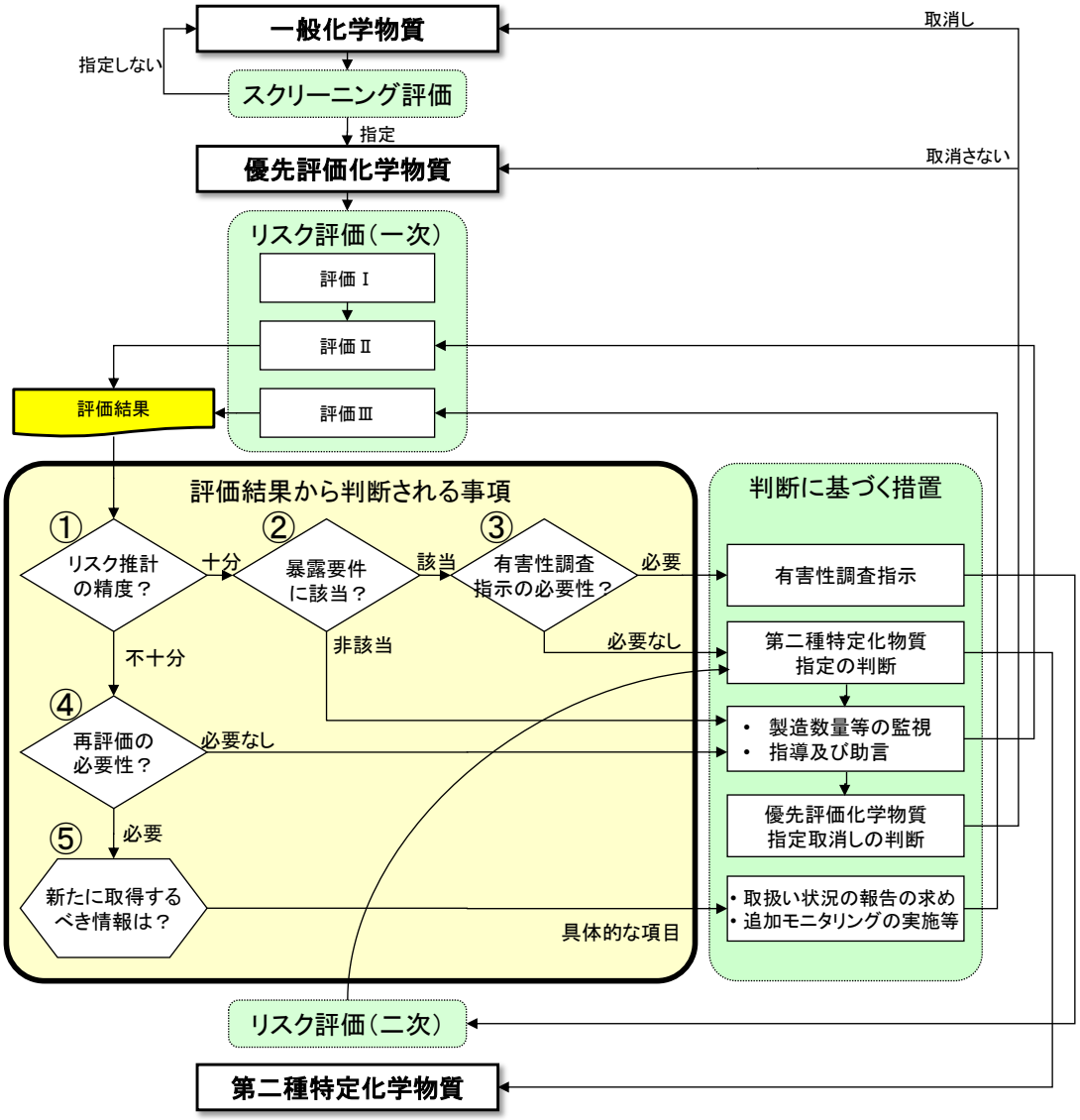
優先評価化学物質（生態）のとりまとめについては、優先評価化学物質（人健康）とは異なる部分を次節 IX.3.4 に整理する。

IX.3.3.1 とりまとめの基本的な考え方

優先評価化学物質のリスク評価スキームの中で評価Ⅰでは、評価Ⅱの対象とする物質を着手の判断のための優先順位付けと有害性情報の提出の求めの判断のための優先順位付けが目的であったが、評価Ⅱ以降では有害性調査指示や第二種特定化学物質の指定の必要性といった化審法上の判断の根拠となりうることが目的となる。そのため、本スキームにおける評価Ⅱ以降のとりまとめにおいては、リスク評価結果を以下の（ア）～（オ）に示す化審法上の判断に基づく措置に役立つようにリスク評価書等をとりまとめることが基本的な考え方となる。

(ア) 有害性調査指示　（法第 10 条第 2 項）
(イ) 第二種特定化学物質への指定　（法第 2 条 3 項）
(ウ) 指導及び助言　（法第 39 条）
(エ) 製造数量等の監視　（法第 9 条）
(オ) 事業者への取扱い状況に関する報告の求め（法第 42 条）や追加モニタリング実施等

本スキームにおけるリスク評価Ⅱ・Ⅲの結果から、上述の判断に基づく措置（ア）～（オ）に役立つために、図表 IX-11 に示す①～⑤の事項を整理した。



図表 Ⅸ-11　評価Ⅱ・Ⅲの結果から判断される事項とそれに基づく措置

本スキームのとりまとめではこれら①～⑤の事項の判断が可能となるよう、リスク評価の結果を統合することになる。

第二種特定化学物質への指定の判断においては、暴露要件と有害性要件のそれぞれの該当性が個別に判断された上で指定がなされる（「導入編」参照）。典型的な例としては、1)暴露要件に該当しているとして長期毒性に係る有害性調査の指示が出され、2)当該有害性調査の報告を受けて第二種特定化学物質の有害性要件の判定がなされ、3)判定された有害性をもって再度、暴露要件の該当性が確認された上で、第二種特定化学物質の指定が行われる。そのため、リスク評価の各ステップの中では、リスクが懸念されるほどの暴露状況かどうかを評価する暴露評価の精査が中心となり、暴露評価の信頼性が問われることになる（IX.3.3.3 で後出）。

IX.3.3.2 とりまとめに必要な事項

評価Ⅱ以降のリスク評価書等には、前述した①～⑤の事項を判断するために、以下の（ア）～（カ）の 6 つの項目を明示的に含める必要がある。以後、これらの要素を「とりまとめに必要な事項」と呼ぶ[1]。

リスク評価書等に含める項目（とりまとめに必要な事項）	主に対応する判断内容
(ア) 評価結果に含まれる不確実性の要因	①⑤
(イ) リスク懸念地域の全国的な分布状況	②④
(ウ) リスク懸念地域に係る用途や業種分類等	③④⑤
(エ) 評価に使用した情報	①③④⑤
(オ) 対象物質が有する有害性情報	③
(カ) 評価Ⅱの結論（不確実性を低減するための情報の種類等を含む）	①②③④⑤

リスク評価書等では、(ア)～(カ)のとりまとめに必要な項目を含め、評価Ⅱ以降の各ステップで得られた情報を結合する。

とりまとめに必要な事項の(ア)～(カ)の項目の位置付けと考え方等について次節以降、順に説明する。

IX.3.3.3 不確実性解析

本節では、とりまとめに必要な項目「不確実性の要因」を抽出する手段である不確実性解析について説明する。

(1) リスク評価における不確実性

不確実性（Uncertainty）はリスク評価の各ステップ（有害性評価、暴露評価、リスク推計）に存在する。有害性評価においては、動物試験データを人への影響の評価に使用する値に外挿するために不確実係数を用いる手法が広く定着している。一方、暴露評価の不確実性は、その存在は認識されているものの、有害性評価のような不確実性を評価に組み込む定型的な手法は必ずしも明確にはなっていない。

以下は、WHO の暴露評価の不確実性に関するガイダンス[2]に基づく。

「リスク削減の必要性や適切な対策に係る合理的な意思決定には、透明性のあるリスク評価が基礎となる。そして、透明性のあるリスク評価には、暴露評価の不確実性が適切に説

[1] なお、とりまとめの中で何が重要かはリスク評価の目的や詳細さの程度によって異なると考えられ、ここで挙げた項目は化審法の枠組みの中で一定の役割をもつ本スキームに係る「とりまとめの要素」である。

[2] WHO (2008) Guidance Document on Characterizing and Communicating Uncertainty in Exposure Assessment. (Harmonization Project Document No. 6)

明（characterize）されていることが不可欠である。また、暴露評価を行う側にとっては、暴露評価の不確実性解析によって透明性が増し、評価プロセスの信頼性を向上させることにつながる。さらに、推計の精度を高めるために重要なデータギャップが明らかになることからワーストケースアプローチを回避することに結び付く。」

(2) 本スキームにおける不確実性解析の位置付けと必要性

本スキームの不確実性解析は暴露評価が中心であるが、これは暴露評価は取り扱う情報が評価対象物質ごとに大きく異なり精査が必要であるため、リスク推計の不確実性に大きく寄与するためである。

本スキームの不確実性解析は、主に暴露評価結果に含まれる不確実性を定性・定量両面から考察することであり、それによって評価結果が判断の根拠に足る信頼性の有無を判別する役割がある。

リスク推計の結果は単に数値で表されるため、その数値だけを評価結果として示すとそこに含まれる不確実性は伝わらない。そこで、推計結果の不確実性は別途、提示する必要がある。本スキームのとりまとめでは不確実性解析を行い、不確実性の要因[1]を提示する。この不確実性の要因によって「判断の根拠に足る信頼性を有するか」を判別することが、化審法上の措置のための判断を評価Ⅱの結果を用いて行うか、評価Ⅲに進むかの岐路になっている（図表 IX-11 参照）。不確実性解析によって、不確実性の主な要因及びその不確実性を低減するための情報の種類が明らかになれば、評価Ⅲのために範囲を絞った情報収集が可能になる。

(3) 不確実性解析の対象項目

本スキームの不確実性解析では、主に暴露評価の結果に含まれる不確実性の要因の抽出を行う。ここでは、暴露評価の結果を左右する項目を不確実性解析の対象項目として設定する。以下では、主に排出源ごとの暴露シナリオの不確実性の項目について記載する。

本スキームによる暴露評価結果は、一連の仮定に基づく推計値である。以下に化審法の届出情報を用いた暴露評価で用いる推計モデルの基本骨格の式を示す。

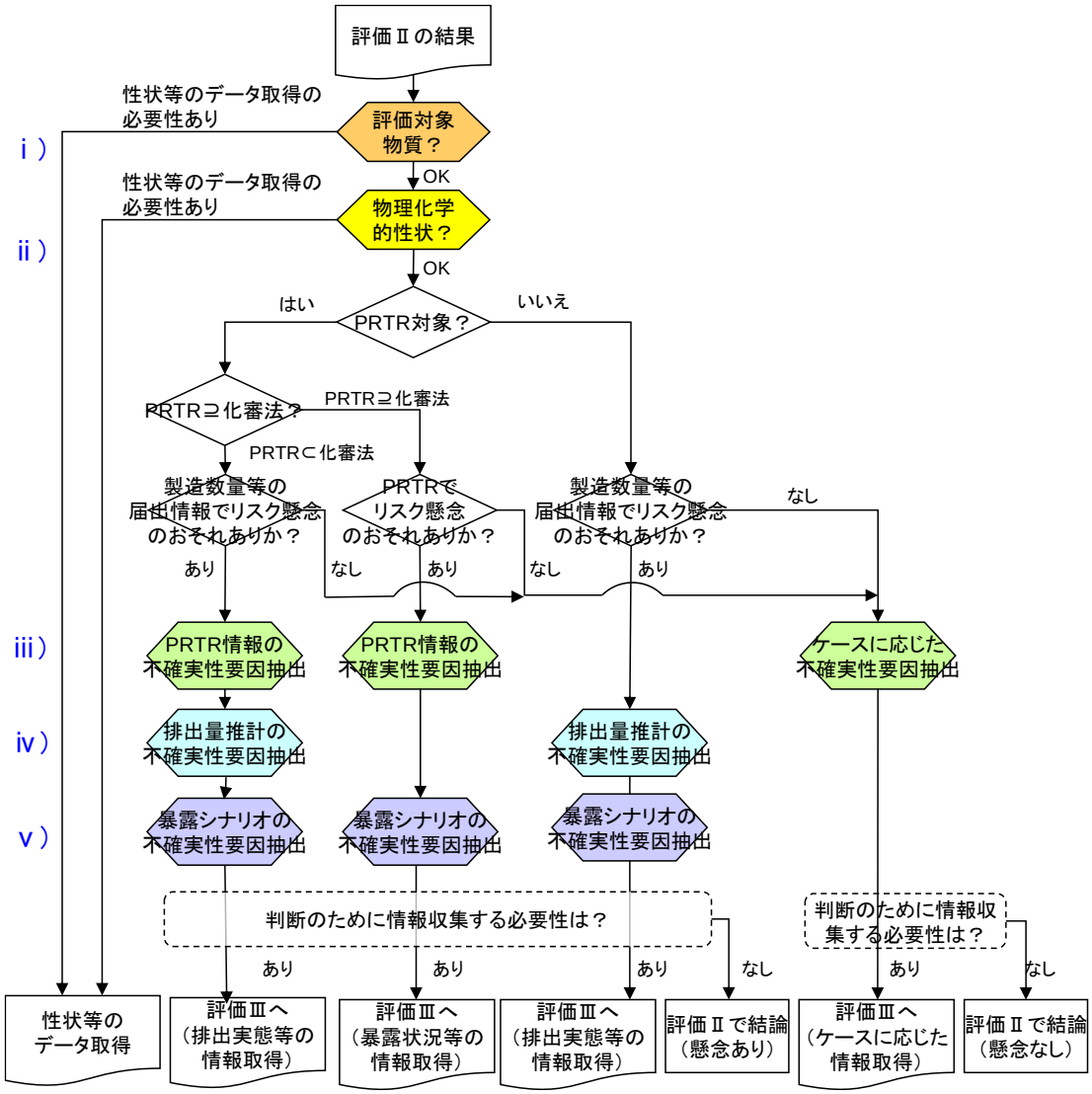
[1] ここでは「信頼性が高い」と「不確実性が低い」、もしくは「信頼性が低い」と「不確実性が高い」を概ね同じ意味で使用している。物理化学的性状データ等の測定可能なものに対して「信頼性」という言葉は使えても、様々な要素（シナリオ、モデル、パラメータ）の複合として出力される暴露評価の推計結果に対しては、測定可能な事実との関係が複雑で「信頼性」という言葉がなじみ難い。そのため、文章においては両者の区別をあいまいにしているが、両者をまとめて指す際には「不確実性」という言葉で統一している。

暴 露 量 ＝推計排出量×f_1（化学物質の性状、暴露シナリオ）
推計排出量 ＝ 届出数量×排出係数
排出係数 ＝ f_2（化学物質の性状、排出シナリオ）

式 IX.3-1

これらの式では、推計暴露量（環境中濃度や摂取量）は化学物質の性状、暴露シナリオ（排出シナリオ含む）及び届出数量で決定されることを示している。そのため、基本的にはこれらにおける、ⅰ)評価対象物質、ⅱ)物理化学的性状、ⅲ)PRTR 情報、ⅳ)排出量推計、ⅴ)暴露シナリオを不確実性解析の対象項目とする。これらの項目の不確実性解析における段階的な進め方を図表 IX-12 に示す。

図表 IX-12 には、六角形のダイヤグラムで示した不確実性解析の項目ⅰ)～ⅴ)のうち、評価Ⅱの結果に応じて順にどの部分の不確実性解析を行うかを示している。不確実性解析の概要と場合別の実施項目を図中の下部に示した表に示している。以下ⅰ)～ⅴ)の各解析の対象項目を説明する。



評価Ⅱの不確実性解析の項目と場合別の実施項目（●を実施）

不確実性解析の対象項目	場合 / 概要	暴露要件の該当性を判断する前	リスク懸念のおそれ			暴露要件に非該当
			製造数量等の届出情報に基づく	製造数量等の届出情報とPRTR届出情報に基づく	PRTR届出情報に基づく	
i) 評価対象物質	対象物質と評価に用いているデータの一致性と適切性	●	●	●	●	●
ii)物理化学的性状	データの信頼性と、信頼性が一定基準に満たない場合のリスク推計結果への感度	●	●	●	●	●
iii) PRTR情報等	• 化審法で評価対象とする物質・用途とPRTR情報との包含関係 • 製造数量の届出制度・PRTR制度上の届出要件と実態との乖離等			●	●	●
iv)排出量推計	排出シナリオ（都道府県別・用途別の仮想的排出源、用途と物性に応じた排出係数）と実態との乖離		●	●		
v)暴露シナリオ	暴露シナリオ（河川水を飲水、排出源周辺の農作物摂取等）と実態との乖離		●	●	●	

図表 IX-12　不確実性解析の段階的進め方

これら不確実性解析の対象のうち、ⅰ)とⅱ)で示した項目に関しては、リスク評価に用いた性状データの根源的な適切性を問うものである。これらのデータが不適切で、そのデータを用いたことによって過小評価の可能性がある場合は、当該推計結果に意味は見出せず、性状等のデータの取得後に再評価を行う必要がある。

i)　評価対象物質の不確実性

評価対象物質と有害性を含む性状データの不一致によりもたらされる不確実性である。ここではそのデータギャップの有無と、データギャップがある場合にそれが過小評価をもたらすかについて考察する。データギャップとは例えば、混合物であるが、そのうちの一成分のみの性状で代表させている等である。そのことが過小評価をもたらすかについては、個別ケースに応じて判断する。

ii)　物理化学的性状データの不確実性

評価Ⅱにおける精査の結果、信頼できる情報源から得られた各物理化学的性状データまたはそれらの推計データが大幅にばらつく場合は、数理モデルを用いて暴露評価を実施する際に必要に応じて感度解析もあわせて実施する（感度解析の詳細は「Ⅰ章 評価の準備」を参照。）。その結果、結果の変動がわずかである、もしくは暴露要件の判断を左右するほどではない場合には、次の不確実性解析のステップへ進む。

評価対象物質又は物理化学的性状のいずれかによって過小評価のおそれがあるような場合は、図表 IX-12 に示すように基本的にはその先の不確実性解析は行わない。まずこれらの不確実性を下げないと、その先にある不確実性の内訳も見分けられないためである。

iii)　PRTR 情報等の不確実性

図表 IX-12 のフローでは、iii)の並びに 3 つの六角形のダイヤグラムがあるが、これらはそれぞれ内容的に異なる。

左は、PRTR 届出情報では評価対象物質の範囲をカバーしておらず、PRTR 届出情報に基づくと過小評価になる場合である。この場合、PRTR 届出情報をどの程度、製造数量等の届出情報に基づく評価の補足に使用できるかが判断できるような情報収集が必要で、その部分が不確実性の要因である。

中は、PRTR 届出情報に基づくリスク推計結果でリスク懸念のおそれがあるが、化審法の適用除外用途による排出等も含まれている可能性があるため、化審法に係る「化学物質の製造、輸入、使用等」の寄与についての情報収集が必要で、その部分が不確実性の要因である。

右は、製造数量等の届出情報、PRTR 届出情報いずれの場合でもリスク懸念のおそれがないが、これらの届出制度上の届出要件（取扱量 1 トン未満は届出不要等）等によって、リスク懸念となる排出源を見逃している可能性がある場合に情報収集が必要と考えられ、その部分が不確実性の要因である。

なお、環境モニタリング情報の対象となった化学物質と評価対象物質の関係につい

ても、PRTR 届出の対象となる化学物質と評価対象物質の関係と同じことが言える。つまり、環境モニタリング情報でも評価対象物質の範囲よりも狭い（又は広い）範囲が対象となることがあるため、環境モニタリング情報を用いたリスク推計においても、PRTR 情報の不確実性と同様の解析が必要となる。

iv）排出量推計（排出シナリオ）の不確実性

製造数量等の届出情報に基づくリスク推計結果においてリスク懸念のおそれがあるとなった仮想的排出源を対象に、排出シナリオの不確実性の要因を抽出する。製造数量、出荷数量から仮想的排出源を設定して排出量を推計する一連の仮定が不確実性の要因であり、主に排出源の数と排出係数という 2 つの観点から情報収集をするべき事項を列挙する。

v）暴露シナリオの不確実性

評価対象物質が環境中に排出されてから人が暴露されるまでの経路における一連の仮定は不確実性の要因である。ただし、ここの要因抽出ではすべての仮定を列挙するのではなく、評価対象物質に関してリスク懸念のおそれとなる人の暴露経路に係る部分に着目することになる。暴露シナリオよって仮定や暴露量推計に用いる数理モデルが異なるため、暴露シナリオ別に考察する。

製造数量等の届出情報に基づくリスク推計結果に関しては、ⅲ)の排出シナリオについて排出実態が得られれば、当初推定されていた主要暴露経路が異なること等が十分考えられるため[1]、情報収集の優先度は排出量推計の不確実性に係る事項のほうが高い[2]。したがって、基本的には排出量推計の不確実性を低減してもなおリスクが懸念される場合に暴露シナリオの不確実性の要因に関する調査をすることになると想定される。

PRTR 届出情報に基づくリスク推計結果に関しては、リスク懸念となる個別事業所や排出先水域名が判別できるため、公知の情報によってある程度は暴露シナリオを実態に近づけられると考えられ、それでも残る不明点を抽出することになる。

環境モニタリング情報に基づくリスク推計に関しては、製造輸入数量の推移や PRTR 情報の推移を確認してリスク推計に利用可能なものかを確認するとともに、暴露シナリオの不確実性の要因の検証に用いることと想定される。

[1] 例えば、対象物質の用途と物理化学的性状区分では、大気と水域へおよそ半々の排出割合であるというデフォルトの設定であり、人の暴露経路は大気吸入のほかに飲水や魚介類の寄与もあると推計されていたものが、排出に係る情報を収集したら水域への排出実態はないと判明する等である。

[2] 排出係数の実態との乖離が～3 オーダーである（「Ⅳ章　排出量推計」参照）ことに対して、暴露シナリオに関するパラメータの変動は河川流量を除いてはそれほど大きなものはなく、通常、リスク推計結果への影響度は排出シナリオの不確実性の要因のほうが大きい。

(4) 不確実性解析結果の示し方

不確実性解析を行った結果として、有害性評価値が最も厳しい有害性評価項目に係るリスク推計結果に関して図表 IX-13 に例示するような総括表を作成する。

総括表では、前項(3)で挙げた 5 つの対象項目に関して抽出した不確実性の要因を一覧表示する。要因ごとに、調査の必要性及び再評価に有用な情報とその理由を付す。

図表 IX-13 では 4 つの項目の例示を示す。

不確実性解析の結果をこのように示すことで、どの項目がリスク推計結果へ影響があるかについて透明性をもって示すことが可能となる。影響度の大きい項目は、情報収集によってリスク推計結果全体への不確実性の低減に効果的である項目である。

この総括表は後出する評価Ⅱの結論（IX.3.3.8 ）につながる。

図表 IX-13　不確実性解析結果の総括表のイメージ

項目	不確実性の要因	調査の必要性	再評価に有用な情報	理由
① 評価対象物質	・評価対象物質と性状等試験データ被験物質との不一致など	低い	－	・異性体混合物であるが、混合物としての性状データで過小評価のおそれはないと考えられるため
② 物理化学的性状	・推計値しかない場合等のリスク推計結果への影響など 例：蒸気圧が推計値で評価結果への感度が高い。	なし	－	・評価結果への感度は低いため実測は不要と考えられた
③ PRTR 情報	・化審法対象物質と PRTR 対象物質との不一致 ・化審法届出情報と PRTR 届出情報との不一致 例：化審法届出情報では出荷先である都道府県が、PRTR 排出量の届出がない。	あり	・化審法の届出において、A 県への出荷を届け出た事業者への事実確認等。	・化審法届出情報では、A 県に 1 トン以上の出荷があるが、PRTR 排出量の届出はなかった。A 県の仮想的排出源周辺では、「リスク懸念」であったことから、PRTR 情報を用いた評価結果から評価書としての結論を導く場合は、届出事業者に確認をした方がよいと考えられるため
④ 排出量推計	・化審法届出情報に基づく排出量推計の排出シナリオと実態との乖離等 例 1：排出源ごとの暴露シナリオにおいて、リスク懸念 5 箇所中 4 箇所を占める「溶剤」の出荷先（工業的使用段階）での具体的用途、排出実態	あり	・具体的用途（何用の溶剤か） ・出荷先の数 ・排出先媒体別推計排出量（もしくは排出係数）	・何用の溶剤か不明のため、「その他の溶剤」とした結果、「リスク懸念」となっているため ・溶剤の種類によっては汎用的に使われ「出荷先の都道府県内で 1 箇所の排出源」という設定が実態と乖離している可能性があるため

<table>
<tr><th>項目</th><th>不確実性の要因</th><th>調査の必要性</th><th>再評価に有用な情報</th><th>理由</th></tr>
<tr><td></td><td>例 2：リスク懸念 5 箇所中 1 箇所を占める「●●剤」の出荷先での排出実態</td><td>あり</td><td>・排出先媒体別推計排出量（もしくは排出係数）</td><td>・排出係数がデフォルト値で過大評価のおそれがあるため</td></tr>
<tr><td rowspan="5">⑤
暴露シナリオ</td><td rowspan="5">・暴露シナリオと実態との乖離等
例：③の各排出源の排出先水域の実態を反映していないモデル推計</td><td colspan="3">➢ 例：排出源ごとの暴露シナリオ</td></tr>
<tr><td>③で水域排出がある場合必要あり</td><td>・水域排出の場合は排出先水域名
・河川の場合は流量
・河川の場合、排出先水域での水道水取水状況
・取水している場合水道の浄化率</td><td>・流量がデフォルト値で過大又は過小評価のおそれがあるため
・「排出先水域の水を摂取」というシナリオと実態が乖離している可能性があるため</td></tr>
<tr><td colspan="3">➢ 例：様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ
（環境中濃度等の空間的分布の推計）</td></tr>
<tr><td>低い</td><td>－</td><td>・モニタリングデータと G-CIEMS モデルに基づく水質・底質濃度は概ね整合的であり、実態を捉えたものとなっていると考えられるため。</td></tr>
<tr><td colspan="3">➢ 例：用途等に応じた暴露シナリオ</td></tr>
<tr><td></td><td>…</td><td>…</td><td>…</td></tr>
</table>

IX.3.3.4 リスク懸念地域の全国的な分布状況

このとりまとめに必要な項目は、各暴露シナリオに基づく暴露評価によるリスク推計結果において、リスク懸念の影響面積と箇所数、リスク懸念のメッシュ又は小流域の全国的な分布、リスク懸念の環境モニタリングデータの分布等で表される（図表 IX-9 参照）。

IX.3.3.5 リスク懸念地域に係る用途や業種分類等

ここでは排出源ごとの暴露シナリオを例において、リスク懸念となった排出源の内訳を示す方法を説明する。製造数量等の届出情報に基づく暴露評価ではライフサイクルステージ・用途別に表し、PRTR 届出情報に基づく場合は業種分類別に表す。

■位置付け

これにより、リスク懸念地域が特定の用途・業種に係るのか、複数の用途・業種にわたるのかが示される。これは、以下のような事項の判断の根拠となると想定される。

- ✓ リスク推計の結果の精度が不十分と判断される場合：
  - どのような用途について取扱い情報を収集するか。
- ✓ 暴露要件に該当すると判断される場合：
  - 第二種特定化学物質の指定に至る場合は、どのような事業者（ライフサイクルステージ・取り扱う用途・業種）を対象として、法第 27 条に基づく環境汚染を防止

するための技術上の指針を公表するか。

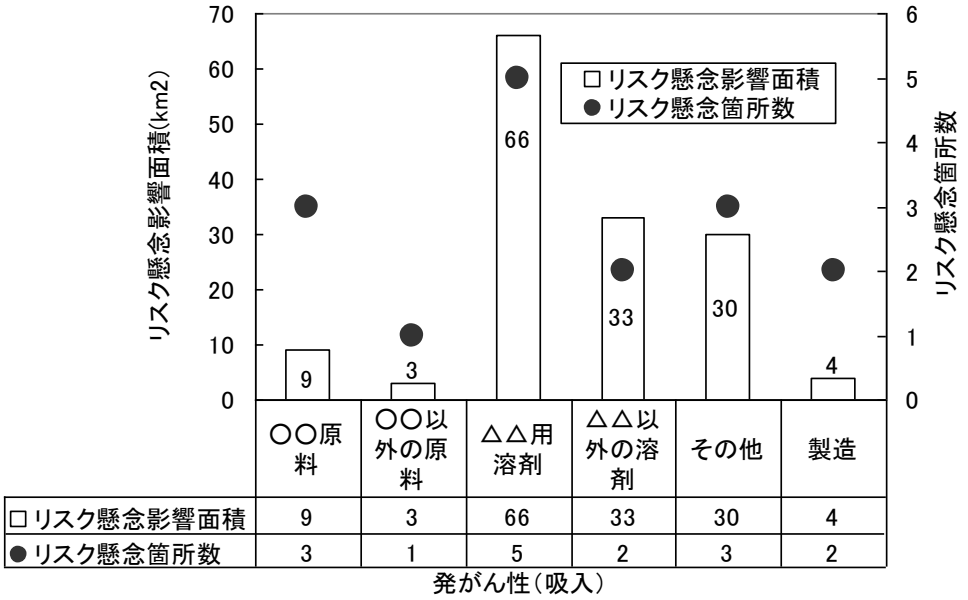
✓ 暴露要件に該当せず指導・助言が必要と判断される場合：

・ どのような事業者（ライフサイクルステージ・取り扱う用途・業種）を対象として指導・助言をするか。

■示し方の例

リスク懸念の排出源について、リスク懸念の影響面積と箇所数を図表 IX-14 のように図示する。横軸は排出源の種類で区分し、縦軸はリスク懸念の影響面積を棒グラフで、箇所数をプロットで表示している。

このような図を有害性評価項目ごとに作成する。さらに製造数量等の届出情報と PRTR 届出情報のそれぞれで作成する。例えば、一般毒性の他に生殖発生毒性でも有害性評価値が導出でき、PRTR 対象物質である物質の場合、この図が 4 種類[1]得られることになる。排出源の種類は、製造数量等の届出情報の場合は用途で示され、PRTR 届出情報の場合は業種分類で示される。



図表 IX-14　排出源ごとの暴露シナリオの結果の排出源の内訳を示す表示例

IX.3.3.6 評価に使用した情報

評価Ⅱに使用する情報には、評価対象物質の(1) 同定に係るプロファイル、(2)性状、(3)暴露関連情報及び(4)有害性情報がある。以下順に説明する。

[1] 発がん性の情報について経口経路と吸入経路の両方得られる場合には 8 種類となる。

(1) 対象物質のプロファイル

対象物質の各種の番号（優先評価化学物質の番号、官報公示整理番号等）や構造式、複数物質であればそのリスト等を示す部分である。評価の準備段階において評価対象物質の識別をする部分である。化審法の制度との関係で以下の 3 つの観点から整理する。

(ア) 評価の準備段階で識別した、評価対象物質とその性状データの対応関係とデータギャップの有無
(イ) 化審法の運用通知[1]により、製造数量等の届出情報に含まれるうる化学物質のリスト又は該当する物質の例
(ウ) 評価対象の優先化学物質と対応する PRTR 対象物質について、上記(イ)の化学物質群との包含関係と、化審法の適用除外用途との関係

■位置付け

有害性評価と暴露評価の元となる情報はどの化学物質に対するものかを示す部分で、リスク評価全体の根底となる。不確実性解析と評価Ⅱの結論を導く際に関連する。

(ア)では、対象とする優先評価化学物質に関して、リスク評価の対象とするのはどの化学物質かと性状データとの対応関係を示す。例えば、「Ⅰ章　評価の準備」で説明したように、「優先評価化学物質が指定名称から主成分は特定できないものの構造の特定できる複数成分の混合物である場合」がある。これには「A と B の混合物」等といった名称のものや、「キシレン」など異性体が含まれる名称のもの、繰り返し構造の数が変化する混合物等が該当する。有り姿の性状データがなく、いずれかの構成成分の性状データで全体を代表させて評価した場合、基本的に評価結果には不確実性が伴うことになる。

(イ)では、構造の一部に対象とする優先評価化学物質が含まれるもののリスト（又は例）を列挙しておく。例えばヒドラジンの場合、各種の水和物、塩などである。化審法の製造数量等の届出ではこれらがヒドラジンとしての数量に換算されて届出られていると想定される。次の(ウ)との関係で重要である。

(ウ)では、評価対象の優先評価化学物質と対応する PRTR 対象物質について、上記(ア)(イ)

[1] 運用通知「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について」の「２．新規化学物質の製造又は輸入に係る届出関係」により新規化学物質としては取り扱わないものとしたもののうち、構造の一部に優先評価化学物質を有するもの（例：分子間化合物、ブロック重合物、グラフト重合物等）及び優先評価化学物質の構成部分を有するもの（例：付加塩、オニウム塩等）については、優先評価化学物質を含む混合物として取り扱うこととし、これらの製造等に関しては、優先評価化学物質として製造数量等届出する必要がある。(「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について」平成 23 年 3 月 31 日薬食発 0331 第 5 号、平成 23･03･29 製局第 3 号、環保企発第 110331007 号）

との関係を整理する。例えばヒドラジンの場合、ヒドラジンは PRTR 対象物質であり排出量が届け出られているが、各種の塩はそこに含まれない。このような場合、PRTR 情報による暴露評価のみで結論を導くと過小評価となる。製造数量等の届出情報と PRTR 情報のそれぞれに基づく評価結果が得られるときに、いずれをベースに結論を導くかに関係する。

また、化審法適用除外用途（農薬、化粧品等）に係る排出についても PRTR 制度では対象となっているが、それらは製造数量等の届出情報には含まれない。このような情報源の間の不一致を認識することが重要である。特に PRTR 届出情報を用いてリスク懸念となる際は、化審法に係る製造、輸入、使用等の寄与の解析をする必要性を判断し、注意深く評価を行う必要がある。

(2) 性状（物理化学的性状、蓄積性、分解性）

評価Ⅰの準備段階で国が公表している信頼性評価基準[1]に沿って収集・推計・選定し、評価Ⅱであらためて精査した物理化学的性状データ、蓄積性データ及び分解性データである（「Ⅰ章　評価の準備」参照）。

■位置付け

物理化学的性状の項目のうち、蒸気圧と水溶解度は製造数量等の届出情報から排出量推計をする際の排出係数の選択基準となる。これら 2 項目を含む物理化学的性状と BCF、環境媒体中の半減期のデータはモデル推計による暴露評価の入力値となる。

暴露評価の結果はこれらの数値の関数であるため、これら性状データの信頼性は暴露評価結果の信頼性を左右する。これら性状データの値のバラつきが大きく、値の幅の変動でリスク推計結果を左右するような場合には、新たにデータを入手し置き換えて再評価が必要との判断につながる。

(3) 暴露関連情報

暴露評価の元となっている情報及びその解釈に用いる情報を示す部分であり、①化審法の製造数量等の届出情報、②PRTR 情報、③環境モニタリング情報、④排出源に係るその他の情報がある。以下順に説明する。なお、ここでは位置付けの説明は、排出源ごとの暴露シナリオにおけるものを例として述べている。

① 化審法の製造数量等の届出情報

以下のような項目について整理する。

(ア) 製造・輸入量の経年変化
(イ) 出荷量（用途別）の経年変化

[1] 「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」

(ウ) 年度別推計排出量（用途別）
(エ) 評価対象年度の用途別の出荷先都道府県数と仮想的排出源数
(オ) 排出量推計に使用している用途別・ライフサイクルステージ別の排出係数

■位置付け

製造数量等の届出情報に基づく暴露評価において、以下のような観点で評価の各部分の解釈等とつながっている。

(ア)～(ウ)は、評価対象年度の推計排出量によって将来の予測をすることが、過去の傾向からみて過小評価になっていないかの確認に用いる。例えば、評価対象年度では数量が小さいが、年度による変動が大きい場合には、人の生涯の暴露量の推計には過去の届出の期間平均値を使うほうが相応しいといった考察につながり、暴露量推計を追加することもありうる。

(エ)と(オ)については、製造数量等の届出情報に基づく排出量推計における排出シナリオの具体的な中身である。この仮定（排出源の数、排出先媒体や排出係数）が実態と乖離しているほど推計排出量ひいては推計暴露量、さらにはリスク推計の結果の不確実性が高いということを意味する。推計排出量は推計暴露量を直接（線形に）左右するため（IX.3.3.3 (3) 式 IX.3-1 参照）、(エ)と(オ)については、暴露評価の不確実性解析の対象項目となっている。

② PRTR 情報

以下のような項目について整理する。

(ア) 届出排出量と移動量・届出外排出量の経年変化
(イ) 評価対象年度の届出排出量と移動量・届出外排出量等の内訳（媒体別、推計区分別等）
(ウ) 評価対象年度の届出排出量の業種別の排出量・届出事業所数等の内訳
(エ) 評価対象年度の届出外排出量の推計区分の詳細内訳と推計量

■位置付け

PRTR 情報に基づく暴露評価において、以下のような観点で評価の各部分の解釈等とつながっている。

(ア)については、前項① における(ア)～(ウ)と同様に、モデル推計において評価対象年度の排出量を使って将来の予測をすることが、過去の傾向からみて過小評価になっていないかの確認に利用する。

(イ)については、PRTR 届出情報に基づく排出源ごとの暴露シナリオが捕捉する排出量について、下水道への移動量や廃棄物としての移動量及び届出外排出量も含めた全体の中で、どの程度の割合かが示される。この割合が大きければ、排出源ごとの暴露シナリオに基づく暴露評価の結果をもって暴露要件への該当性を判断することを支持するものとなる。一方、

小さい場合は、排出源ごとの暴露シナリオに基づく暴露評価では一部の排出源しか捉えていないことを意味する。

(ウ)については、PRTR 届出情報に基づく排出源ごとの暴露シナリオの元データである。PRTR 届出情報に基づく暴露評価が行える場合には、この結果をもって暴露要件への該当性の判断につながることが多いと想定される。ただし、以下の観点からの検討を経ることが必要となる。

この部分については、届出排出量でリスク懸念となりうる排出点源を捕捉しているかという観点で他の情報と比較しつつデータを眺める。まず PRTR 制度のすそ切り以下事業所からの推計排出量と比較する。例えば、その推計排出量が届出排出量と比較して割合が大きい場合は、PRTR 届出排出量による暴露評価における排出源の捕捉率が低いということを意味する。このときに、対象化学物質の排出源ごとの暴露評価における排出量の閾値[1]が 1 トンを超えるのであれば、取扱量に係るすそ切り分についてはそれ以上の考慮は不要と考えられる。排出量の閾値が 1 トンを下回る場合には、PRTR 届出情報のみではリスク懸念となる排出源を見逃しているおそれがあると考えられる。すそ切り条件のうち従業員数に係るすそ切り分については、さらに必要に応じて PRTR 届出排出量による暴露評価が過小評価する可能性を個別に考察する。以上のことは、PRTR 届出情報等の不確実性の要因の一つである。

(エ)については、環境モニタリング情報が得られ、一般環境でリスクが懸念されるような場合[2]に、それをもたらす原因が化審法の製造等に係るかの検討の手がかりの一つとなる。

③ 環境モニタリング情報

暴露評価Ⅱの既存情報収集により、評価対象年度から過去 10 年の環境中濃度の測定データを収集し（「Ⅷ章　環境モニタリング情報を用いた暴露評価」参照）、環境モニタリング情報を用いたリスク推計、環境中における検出状況を概観するためのデータである。

■位置付け

環境中での検出状況と排出量の経年的な推移を並べて示すことにより、リスク推計や暴露評価の裏付けに使用可能な環境モニタリング情報を確認する（「Ⅷ章　環境モニタリング情報を用いた暴露評価」参照）。

④ 排出源に係るその他の情報

既存の文献等において、評価対象物質のその他の排出源に係る情報（非意図的生成、輸入

[1] 推計暴露量が有害性評価値又は PNEC と同じになる推計排出量で、排出源ごとの暴露評価のリスク推計により逆算できる。
[2] 適切な環境モニタリング情報が利用できる場合にリスク推計が可能になる。「Ⅷ章　環境モニタリング情報を用いた暴露評価」参照。

製品への含有等）があれば、記述を引用する。

(4) 有害性情報

優先評価化学物質の指定根拠の有害性情報と既知見から収集した情報の中から、有害性評価項目ごとにキースタディの候補及び選定したキースタディを示す部分である。

■位置付け

リスク推計に用いる有害性評価値の根拠に選定されたキースタディをその候補と併せて示す。

有害性試験に係る投与経路・標的臓器や所見と、暴露に係る暴露経路や暴露期間との関係は、評価Ⅱにおけるリスク評価の適切性の検討に非常に重要である。評価Ⅱの結論や提言を検討する際には、暴露評価の内容と併せ、例えば以下のような観点で改めて有害性情報を見て、必要に応じ暴露評価の見直しや評価Ⅲで収集するべき情報の内容に反映させる。

- ✓ 暴露経路は吸入が主であると推計されるが、有害性情報が経口投与試験で得られている場合、吸入経路の毒性試験を行う必要があるか。
- ✓ 発生毒性がみられる場合は、生涯の平均暴露量ではなく、より短期間の高暴露を推計する必要はないか。

IX.3.3.7 評価対象物質が有する有害性情報

本スキームによるリスク評価の目的の一つは、長期毒性に係る有害性調査指示の必要性の判断の根拠となることである。新規化学物質由来の優先評価化学物質や、有害性情報を有さずに優先評価化学物質に指定されたものについては、評価Ⅱ以降の段階で有する有害性情報はほとんどがスクリーニング毒性試験結果と考えられるため[1]長期毒性は不明であり、暴露要件に該当する場合には長期毒性に係る有害性調査が必要と想定される。一方、中にはPRTR 対象物質でもある物質などでは、長期毒性試験結果やがん原性試験結果を有するものもある。このような物質が暴露要件に該当する場合には、長期毒性に係る有害性調査指示を要さずに第二種特定化学物質に指定されることも考えられる。

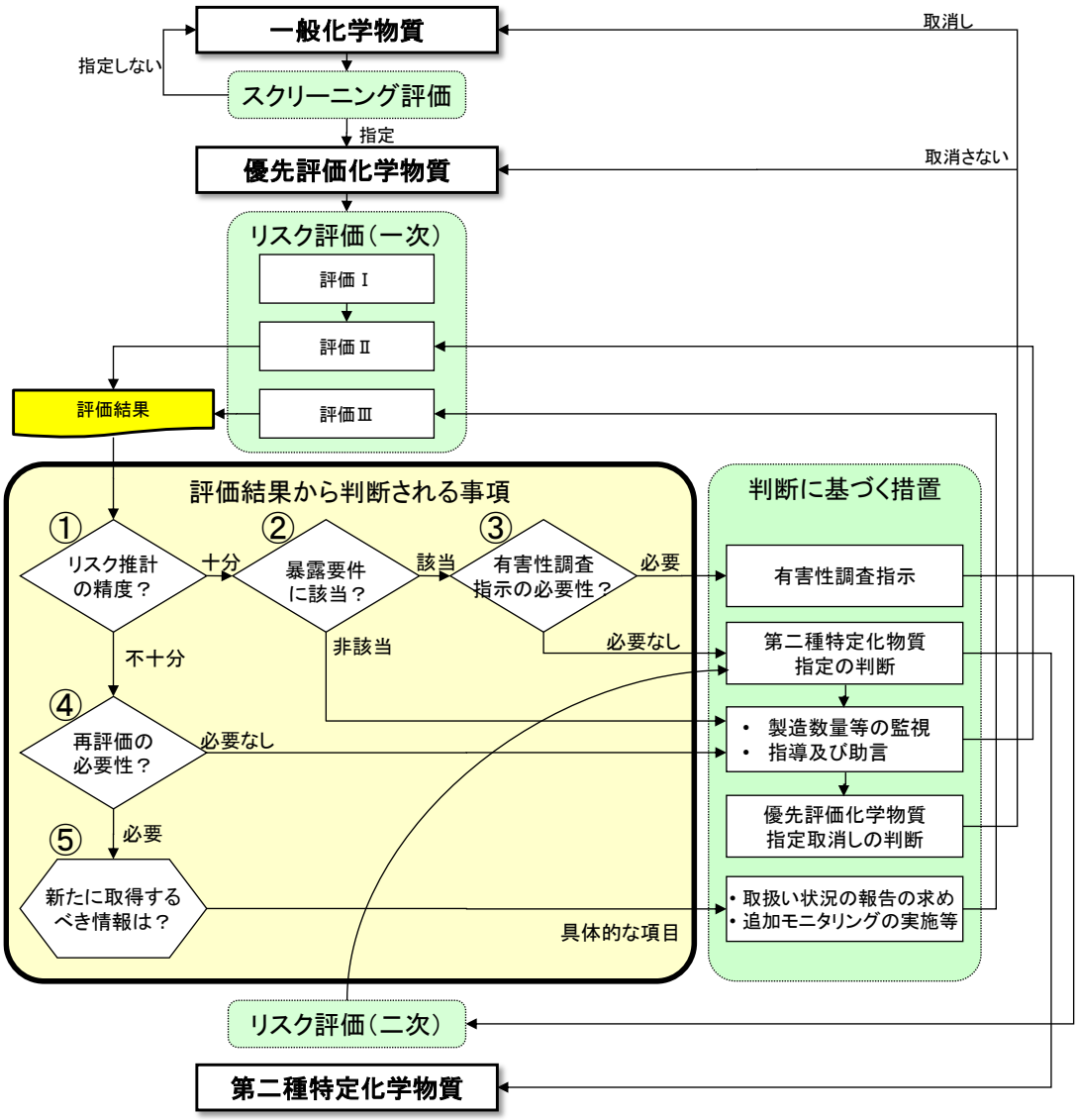
ここでは、必要に応じて有害性評価Ⅱで収集した有害性情報を、長期毒性に係る有害性調査指示の調査項目に相当するかという観点から整理し、有無状況を一覧表示する。これにより、暴露要件への該当性が判断された対象化学物質について有害性調査指示の必要性とその項目を検討する際の一助とすることを想定している。

[1] 有害性情報を有さずに優先評価化学物質に指定された物質で、評価Ⅱのリスク評価書を作成する段階に進んでいるものは、評価Ⅱに先立って法第 10 条第 1 項に基づく有害性調査の求めに応じた有害性情報が得られているか、法第 41 条に基づく有害性情報の報告がなされていることを想定している。法第 10 条第 1 項に基づき求めることができる有害性調査の項目は、新規化学物質の事前審査と同様の試験項目である。

IX.3.3.8 評価Ⅱの結論

評価Ⅱの結論は、IX.3.3.3 ～IX.3.3.7 で示したとりまとめに必要な項目を整理し、リスク推計の結果を論理的に考察し、総括することによって導く。

評価Ⅱの結果に基づき判断される事項に対応した内容を整理し結論を導く。結論には、不確実性解析から導かれた評価Ⅲで収集すべき情報や有害性情報の整理から導かれた取得すべき有害性情報等について具体的に記載する。なお、評価Ⅱの結果に基づき判断される事項とは次図に示した以下の 5 項目である。



図表 IX-15　評価Ⅱ・Ⅲの結果から判断される事項とそれに基づく措置
（図表 IX-11 の再掲）

①リスク推計の精度が十分か。

②暴露要件に該当するか。
③有害性調査指示の必要性があるか。
④評価Ⅲ（再評価）の必要性があるか。
⑤評価Ⅲ（再評価）のために収集すべき情報は何か。

IX.3.4 優先評価化学物質（生態）のとりまとめ

本節では優先評価化学物質（生態）に対するとりまとめについて、優先評価化学物質（人健康）と異なる部分を整理する。

優先評価化学物質（生態）については生活環境動植物に対するリスク評価を行う。生活環境動植物は水生生物と底生生物を対象とし（「Ⅲ章　生態影響の有害性評価」参照）、評価Ⅱではこの両方を評価対象とする。

とりまとめの全体構成は IX.3.3 で示した優先評価化学物質（人健康）の場合と同様であり、考え方も通底する。とりまとめに必要な項目（IX.3.3.2 (ア)～(カ)）については、有害性調査指示の項目や、底生生物の評価を行う場合の底質中濃度の取扱いなどがあるが、特に優先評価化学物質（人健康）と大きくは変わらない。

IX.4 リスク推計Ⅲととりまとめ

ここでは評価Ⅲにおいて行われるリスク推計Ⅲととりまとめについて述べる。

評価Ⅲは、評価Ⅱのリスク評価結果が「暴露要件への該当性等の判断の根拠に足る信頼性がない」と判断された優先評価化学物質を対象に行う。そのような物質の場合、評価Ⅱで抽出された不確実性を低減させるための暴露関連情報等の種類が示される。評価Ⅲに先立って化審法第 42 条に基づき取扱事業者に対して「取扱いの状況に関する報告」を求め、それにより取扱事業者から提供された情報や追加の環境モニタリング調査の結果を加味し、評価Ⅲに着手することになる。入手した情報を加味し、排出量や暴露量の再計算等[1]を行い、暴露評価結果を更新する。暴露評価によって得られた暴露量（人の場合は摂取量、生態の場合は PEC）と有害性評価によって得られた有害性評価値（生態の場合は PNEC）を比較するというリスク推計の基本的な考え方は同じである。有害性調査指示の必要性の判断等を行えるようにリスク評価書等のとりまとめが行われる。また、既に長期毒性情報が得られている場合は、有害性調査指示やリスク評価（二次）は要さず、第二種特定化学物質の指定の判断を行えるようにとりまとめが行われる点は評価Ⅱと同様である。

なお、リスク評価結果に看過できない不確実性が含まれ、有害性調査指示等の判断に用いることができないうちは、基本的に「不確実性解析→情報入手→再評価」のサイクルを繰り

[1] 排出量や暴露量の再計算に関する具体的な考え方や例は、「Ⅳ章　排出量推計」や「Ⅴ章　排出源ごとの暴露シナリオ」の評価Ⅲの箇所を参照。

返すことになる。そのため、判断の根拠に足る評価結果が得られるまでこの段階に留まると想定される。

IX.5 リスク推計（二次）ととりまとめ

ここではリスク評価（二次）において行われるリスク推計（二次）ととりまとめについて述べる。

リスク評価（二次）の有害性評価については、有害性調査指示に基づき事業者から報告された長期毒性に係る有害性情報を用いて、有害性評価値（生態の場合は PNEC）を導出することとし、暴露評価については評価Ⅲと同様の方法を基本とするが、新たに情報が得られた場合には、それらを踏まえて、排出係数の見直しや暴露シナリオの見直しを行うなどの改善、精緻化を図ることとする。リスク推計の基本的な考え方は評価Ⅲまでと同じである。第二種特定化学物質の指定の必要性の判断が行えるようにリスク評価書等のとりまとめが行われる。

IX.6 付属資料

付属資料では、評価Ⅱ及び評価Ⅲにおいて行う不確実性解析について、ステップごとに不確実性の要因とその抽出の考え方を説明する。対応する本編は「IX.3.3.3 不確実性解析」である。

IX.6.1 評価対象物質の不確実性(物質の識別における適切さ)

評価対象物質の不確実性は、とりまとめの要素の「本編　IX.3.3.6 (1)対象物質のプロファイル」に係る部分である。

「評価対象物質」とは、リスク評価の実質的な対象物質を指すものである。評価対象物質のほかに、製造数量等の届出の対象となる化学物質、性状データについて既知見を収集する際の対象物質、有害性試験等の被験物質である「試験対象物質」があり、これらは必ずしも相互に一致しないことがある。そのため、リスク評価の評価対象物質についてこれらの情報の確認を行い、評価対象物質を決定する。この一連の作業を「評価対象物質の識別」と呼ぶ（詳細は「Ⅰ章　評価の準備」を参照）。

プロファイルで示す内容のうち、混合物が優先評価化学物質の場合には、リスク評価の対象とするべき物質について性状データが揃い、評価対象物質となっているのかという観点で確認する。確認の結果、なんらかのデータギャップがあり、それによる過小評価のおそれがある場合は、調査が必要な事項として抽出する。

また、例えば炭素数の異なる混合物の中で、最も有害性評価値の低いデータを有する物質を代表として評価する場合等である。すなわち、評価対象物質の選定においてデータギャップがあったとしても、最も厳しい条件で評価をしてその結果がリスクが懸念されないのであれば、評価結果の信頼性は担保できていると考える。

判断の理由はリスク評価書等に記載する。

図表 IX-16　評価対象物質の特定に係る不確実性の要因の例

問題なし	要調査項目として抽出
・ リスク評価対象物質の構造式、判定データとも明白	【左記以外の場合（下に例示）】 ・ 混合物等であるが主成分で構造を代表させて評価させており、過小評価のおそれがある ・ 本来のリスク評価対象物質以外の物質で評価（例：変化物が生じ、環境排出後は変化物が主に存在すると想定されるが親物質の毒性データしか得られず親物質で評価）しており、過小評価のおそれがある ・ リスク評価対象物質とデータの不一致があり（例：有害性データは変化物１、BCF データは親物質で変化物１は類推）、過小評価のおそれがある

IX.6.2 物理化学的性状データの不確実性

物理化学的性状データの精度は、リスク推計結果の精度に影響を及ぼすため、必要に応じて、物理化学的性状データの不確実性がリスク推計結果に与える影響を解析する必要がある(感度解析)。対象とするデータ項目や感度解析の具体的な方法は「Ⅰ章　評価の準備」を参照されたい。

IX.6.3 PRTR 情報等の不確実性

PRTR 情報が利用できる場合、以下の観点から優先評価化学物質の評価に用いる情報として過小評価のおそれがないかという観点で、不確実性の要因を抽出する。

- ✓ PRTR 対象物質と優先評価化学物質の化学物質の包含関係
- ✓ 化審法適用除外用途等に係る包含関係
- ✓ すそ切り以下の事業所の占める割合

一つ目については、化審法の製造数量等の届出に含まれうる物質群と PRTR 対象物質が一致しない可能性があるため、ギャップの有無と過小評価の可能性があるかを判断する。過小評価の可能性とは、例えば優先評価化学物質名、PRTR 対象物質名とも「A」であるが、化審法上は運用通知[1]により「A」を含む各種の塩等が化審法の届出には含まれ、PRTR の届出情報には含まれないと想定される場合等である。

二つ目の用途に関しては、製造数量等の届出情報には化審法の適用除外用途の数量は含まれない一方、PRTR 情報には含まれることになる。この場合、PRTR 情報を用いても暴露要件に該当しなければ問題はないが、該当する場合には、化審法に係る「化学物質の製造、輸入、使用等」の寄与が判別できなければ情報を収集すべき不確実性の要因となる。

三つ目のすそ切りに関しては、すそ切り推計排出量の占める割合が大きい場合や、すそ切り推計が行われていない場合には、届出に含まれる排出源は全体の一部であると考えられ

[1] 運用通知「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について」の「２．新規化学物質の製造又は輸入に係る届出関係」により新規化学物質としては取り扱わないものとしたもののうち、構造の一部に優先評価化学物質を有するもの（例：分子間化合物、ブロック重合物、グラフト重合物等）及び優先評価化学物質の構成部分を有するもの（例：付加塩、オニウム塩等）については、優先評価化学物質を含む混合物として取り扱うこととし、これらの製造等に関しては、優先評価化学物質として製造数量等届出する必要がある。(「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について」平成 23 年 3 月 31 日薬食発 0331 第 5 号、平成 23･03･29 製局第 3 号、環保企発第 110331007 号)

る。そのような際は個別に検討し、リスク懸念の排出源を見逃しているおそれがあると考えられる場合には不確実性の要因として抽出する。

IX.6.4 排出量推計の不確実性

化審法の製造数量等の届出情報を用いたリスク推計Ⅱで、基本的にはリスク懸念となった仮想的排出源を対象に行う。排出量推計の過程は、排出源の設定と環境媒体別の排出量の推計に分けられ、それぞれの不確実性は排出源の数と排出係数に集約される。これらの不確実性の要因を抽出する観点について解説する。

(1) 排出源の数の不確実性

暴露評価を行う排出源の数については暴露要件への該当性の判断に関わるため、不確実性解析の項目としている。

製造数量等の届出情報から排出源ごとの暴露シナリオで暴露評価を行う場合、出荷先については、ライフサイクルステージ・都道府県・詳細用途別に一つずつの仮想的排出源を仮定している。これが実態と乖離している可能性がある。ライフサイクルステージと詳細用途によって以下のような観点で排出源の数に係る不確実性の要因を抽出する。

製造段階の排出源の数については、製造事業所の住所を国に届け出ることから、製造事業所数と排出源の数は一致するものと考える。

出荷先である調合段階と工業的使用段階については、仮想的排出源の数と実在する排出源の数との乖離はあると考え、リスクが懸念される仮想的排出源については、要調査項目として抽出する。通常、調合段階よりも工業的使用段階のほうが乖離の程度が大きいと考えられる。特に出荷先の都道府県が多い詳細用途の場合には、PRTR 情報をみると、さらに都道府県内において複数の排出源が存在する場合が多く、実在する排出源の数の把握は化審法届出情報からでは困難であると考えられる。

以上述べたことは、製造数量等の届出情報で暴露要件に該当する場合に、「そのままでは過大評価である」という前提の下で行う不確実性の要因の抽出である。一方、製造数量等の届出情報で暴露要件に該当しない場合には、この届出制度の届出要件（取扱量 1 トン未満の事業者は届出不要）によって、リスク懸念となる排出源を見逃していないかという過小評価のおそれの観点から不確実性の要因を抽出する。これは、有害性評価値が非常に小さく、リスク懸念となる推計排出量の閾値が 1 トン未満となる場合に不確実性の要因となりうる。

(2) 排出係数デフォルト値

「Ⅳ章　排出量推計」で説明したように、本スキームの排出係数は EU-TGD の A-table という排出係数一覧表をベースにし、日本の排出係数で裏付けや置き換えをして設定している。

これらの排出係数は、基本的には過小評価をしないように設定しているため、リスク懸念となった排出源に係る排出係数、排出先媒体については、不確実性の項目として抽出する。

排出係数によってはその設定の過程において、日本における排出実態のデータが反映されているため、その元データも参考になることもありうる。

IX.6.5 暴露シナリオの不確実性

暴露シナリオに関しては、環境中に排出されてから人や生活環境動植物が暴露される量を推計する過程で設定している各種のデフォルトと実態の乖離が不確実性といえる。IX.6.4 の排出実態の不確実性を低減してもリスク懸念である場合や、PRTR 届出情報を用いてリスク懸念である場合には、暴露状況を実態に近づけるため、対象物質の人の主要暴露経路に着目して以下のような要調査項目を抽出する。

暴露シナリオの不確実性の要因の抽出例：

- ✓ リスク懸念で飲水の寄与がある場合：
  排出先水域名、排出先水域の飲料水取水状況、排出先水域の流量、浄水除去率、水道水での検出実態等
- ✓ リスク懸念で魚介類摂取の寄与がある場合：
  排出先水域名、排出先水域の漁業の実態、排出先水域の流量等
- ✓ リスク懸念で農作物、畜産物の寄与がある場合：
  事業所周辺の農地、牧草地の土地利用状況等
- ✓ 生態でリスク懸念となる場合：
  排出先水域名、排出先水域の流量

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

X. 性状等に応じた暴露評価における扱い

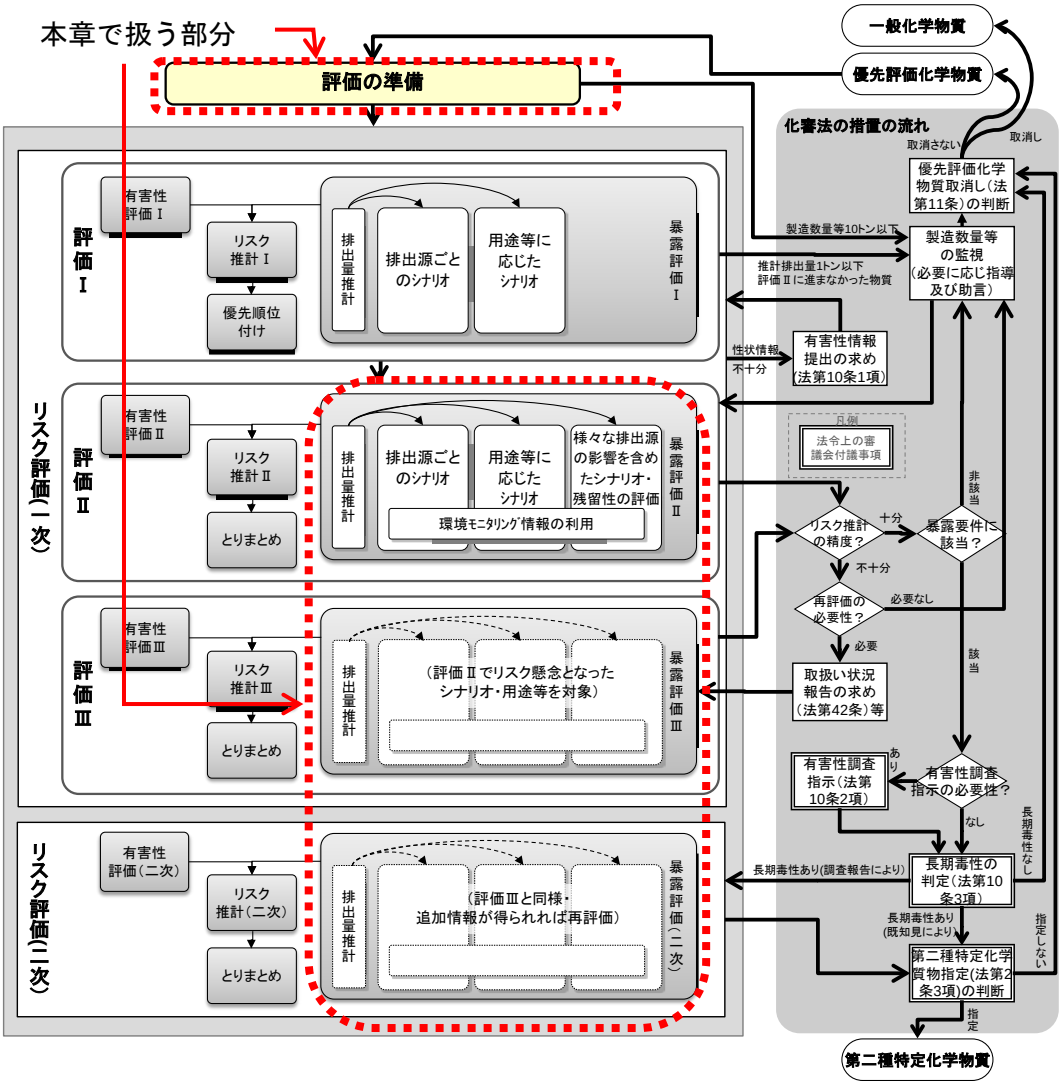
X.1 はじめに

X.1.1 本章の位置づけ

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。

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、解離性物質等に特有な環境中動態推計を実施する。

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、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。

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。

(2) 解離性物質とは

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。

$$\underset{\text{酸}}{CH_3COOH} + \underset{\text{塩基}}{H_2O} \xleftrightarrow{Ka} \underset{\text{塩基}}{CH_3COO^-} + \underset{\text{酸}}{H_3O^+}$$

[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、電気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（*K*a)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。

$$NH_3 + H_2O \xleftrightarrow{Ka} NH_4^+ + OH^-$$

塩基　酸　　酸　塩基

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（*K*a)[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（*K*a)は通常、逆数の常用対数をとって、p*K*a の形で用いられる。

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

$$pKa = pH - \log\left[\frac{[NH_3]}{[NH_4^+]}\right] \qquad \text{式 X-1}$$

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 から明らかなように、pH ＝ p*K*a 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（$10^{-k} \fallingdotseq 10^{-14}$ 正確には、*k*=13. 995 (25℃)、14. 000 (24℃)、14. 9435 (0℃)、13. 5348 (40℃)である)。

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す。

$$CH_3COONa \rightarrow CH3COO^- + Na^+$$

$$CH_3COO^- + H_2O \xleftrightarrow{Ka} CH_3COOH + OH^-$$

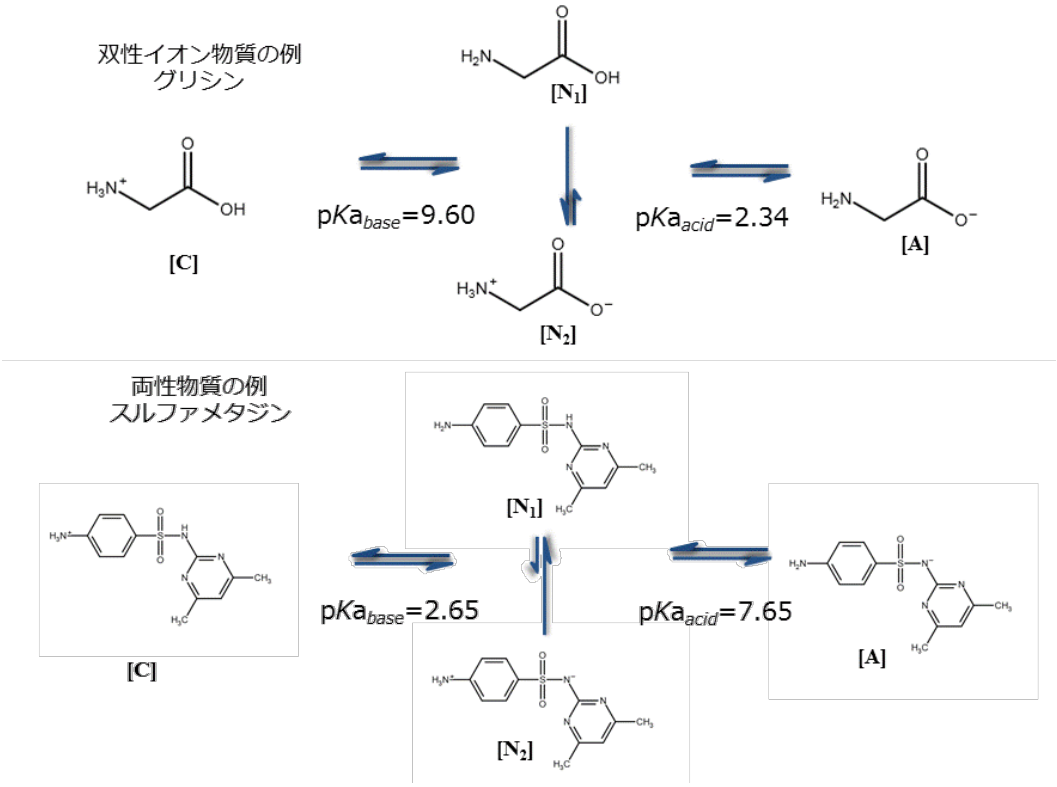
□□□　　酸　　酸　　塩基

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、プロトン濃度が増加するため、水溶液は酸性を示す（姫野と市村, 2009[2]）。

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。

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双性イオン物質と両性物質がある（図表 X-3）。

[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 p*K*a 値は HSDB、スルファメタジンの p*K*a 値は PubChem からの情報である。

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（pKa_{acid}）、塩基解離基の酸解離定数（pKa_{base}）及び水溶液の pH の間に、pKa_{acid} < pH < pKa_{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（pKa_{acid} = 2.34、pKa_{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（-NH_2）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（N_2）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]。pKa_{acid}、pKa_{base}及び水溶液のpHの間に、pKa_{base} < pH < pKa_{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（pKa_{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。

pKa$_{base}$ = 2.65)の場合、pH7では、NH基は解離せず、NH_2基にプロトンも付加せず、非解離型（N_1)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取り扱いの対象である。

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(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/m^3]を C とし、非解離種分率を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濃度 [mol/m^3]は、以下の式で表される。

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

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

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

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、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壌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、非解離種は土壌や底質中の有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、水に溶解しやすくなる一方、正電荷と負電荷を持つ土壌鉱物等との親和性も高くなる傾向にある。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。

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って必要となる事項について、順次解説する。

X.2.2 解離性物質の評価の準備

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。

る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特有の留意点や推計方法について述べる。

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評価する。

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

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。これらの解離性物質特有のデータに関する留意点などを以下に示す。

(1) 水に対する溶解度

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。

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 で求めることができる（Schwarzenbach et al., 2003[2]）。

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

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。

※ 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（*sw*）、淡水域の水（*wfw*）、海水域の水（*wsw*）である。

[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.

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。

① 測定値

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(ITS: Integrated Testing Strategy)において、p*K*a が 3～10 の酸や塩基は、環境中の pH (例えば 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 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る。また、p*K*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、海水にて測定されたデータが必要かもしれないと記述されている。

OECD (1995)の試験ガイドライン No105[3]や U.S. EPA の OPPTS　830.7840[4] (両ガイド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、U.S. EPA の OPPTS　830.7860[5] (水溶解度ジェネレータカラム法)では、酸解離定数 (p*K*a)又は塩基解離定数 (p*K*b)が 3～11 の物質については、pH5.0、7.0、9.0 等で水に対する溶解度を測定するようにとの記述がある。

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、採用の可否を検討する。

② 推計値

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 と WATERNT の二つの推計法が搭載されている。(WSKOWWIN と WATERNT の詳細については、I.7.3 参照)

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* (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、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)を入力し、非解離種の水に対する溶解度（WS_n)を推計する。

イオン種の水に対する溶解度（WS_i)を推計する場合には、同様に、KOWWINに解離種の構造を示す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.

Structures in EPI Suite Programs[1]、イオン種の *Pow*（Pow_i）を推計し、これをWSKOWWINに入力し、イオン種の水に対する溶解度（WS_i）を推計する。イオン種のPow_i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とも可能である。

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イオン種の水に対する溶解度（WS_i）を推計できる（U.S. EPA, 2012[1]）。

(2) 1-オクタノールと水との間の分配係数[2]

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p*K*a値により変動し、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、解離状態では低くなる（U.S. EPA, 2012[1]）。

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, 試験ガイドライン No.107[3]; OECD, 2004, 試験ガイドライン No.117[4])。強酸や強塩基では非解離状態で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 2014[5])[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る場合がある。

① Pow_n

i) 測定値

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、p*K*a より、2 以上低い時、塩基の場合、測定 pH が、p*K*a より 2 以上高い時は、非解離種の値と判断してよい。

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。

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]。

$$\log Pow_n = \log D + \log\left(1 + 10^{\mathrm{pH} - \mathrm{p}Ka_{acid}}\right) \quad \text{式 X-5}$$

$$\log Pow_n = \log D + \log\left(1 + 10^{\mathrm{p}Ka_{base} - \mathrm{pH}}\right) \quad \text{式 X-6}$$

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	—	—	—
p*K*a$_{acid}$	酸解離基の p*K*a	—	—	X.2.2.1 (5)
p*K*a$_{base}$	塩基解離基の p*K*a	—	—	X.2.2.1 (5)

pH と 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 Leo, 1995[2]）という記述もある。

ii) **推計値**

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 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: 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。

② *Pow*$_i$

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、以下の式を用いる（Franco and Trapp, 2008[4]; Trapp and Horobin, 2005[5]）。

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

[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	—	—	—

双性イオン物質の場合の式を参考に示す(Trapp, 2009[3])。

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

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	—	—	—

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できる（U.S. EPA, 2012, SMILES Help[4]）。

③ $\log D$

環境媒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係数（$\log D_x$）は、次式で計算した値の常用対数値である。

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\log D_x$	x ごとの見かけの 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。
$\log Pow_n$	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

[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
				用する。
$\log Pow_i$	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 Guide[1]）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 No106[2])

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, 2003[3]）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. 106[2] 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), Adsoption/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. 106[1]）。

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	—	—
Kd	土壌吸着係数	L/kg	—	—
OCsos	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. 106[1]）。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。

*K*oc 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.

と同じである。

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。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* 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* 測定データが少ないため信頼性は高くない。

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トに対する値)と報告されている。

*K*oc 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]、塩基に対する p*K*a 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*)ごとに計算する。

i) pH7 における *D* 値　D_7

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

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
D_7	pH7 における *D* 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。
logPow_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、p*K*a 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

ii) 【参考】非解離種 *Koc*（回帰式）

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 MAMI (a Multimedia Activity Model applicable to neutral and Ionizable molecules)の Excel 版で使用されている非解離種の log *Koc* の推計式である Sabljić の式を参考に示す。

$$\log Koc_{nonionizable.sablijic} = 0.81 \times \log Pow_n + 0.1 \qquad \text{式 X-12}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$Koc_{nonionizable.sablijic}$	非解離性物質の有機炭素補正土壌吸着係数（Sablijć 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

iii) 酸 *Koc*（回帰式）

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。

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

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

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

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	—	—	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] Sabljić, 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			

※ 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。

iv) 塩基 *Koc*（回帰式）

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。

$$Koc_{xe} = \phi_{xep.n} \times Koc_n + \phi_{xep.c} \times Koc_c \qquad \text{式 X-16}$$

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

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

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 p*K*a	—	—	X.2.2.1 (5)
D_7	pH7 における *D* 値	L/kg	—	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。

v) 両性物質 *Koc*（回帰式）

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。

$$Koc_{xe} = \phi_{xep.n} \times Koc_n + \phi_{xep.a} \times Koc_a + \phi_{xep.c} \times Koc_c \qquad \text{式 X-19}$$

$$Koc_n = 10^{0.50 \times \log Pow_n + 1.13} \qquad \text{式 X-20}$$

$$Koc_a = 10^{0.11 \times \log Pow_n + 1.54} \qquad \text{式 X-21}$$

[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.

$$Koc_c = 10^{pKa_{base}^{0.65} \times \left(\frac{D_7}{D_7+1}\right)^{0.14}}$$ 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 p*K*a	—	—	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., 2010[4]）。

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.

$$H_n = \left(\frac{C_{n.a}}{A_{ct.a}}\right)_{\mathrm{eq}} = \left(\frac{C_a}{A_{ct.n.w}}\right)_{\mathrm{eq}} = \frac{C_{n.a}}{\gamma_n \times C_{n.w.eq.a}} = \frac{C_a}{A_{ct.w} \times \phi_n} = \frac{HENRY}{\phi_n}$$ 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/m³	—	—
$A_{ct.a}$	気相活量	mg/m³	—	—
C_a	気相濃度	mg/m³	$=C_{n\,a}$	—
$A_{ct.n.w}$	非解離種水相活量（溶媒が純水の場合の値）	mg/m³	$=A_{ct\,a}$（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/m³	—	—
$A_{ct.w}$	水相総活量	mg/m³	—	—
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, 2001[1])。

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（ガイダンス 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（pKa)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 pKa 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.

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。

① 実測値

p*K*a 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ことができる。

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

② 推計値

SPARC[1]、ACD/Percepta[2]等の推算ソフトにより、p*K*a の推計値と化学種分率を得ることが可能である。

(6) 生物濃縮係数

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な吸収経路であり、log*BCF* と log*Pow* との間に相関関係があることが知られている。他方、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る化学物質とは生物濃縮挙動が異なり、log*BCF* と log*Pow* との相関が弱く、生物濃縮され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すく、生体内から排せつされにくいことに起因している。

また、解離性物質の生体内への取り込み速度（*k1*)は、pH の影響を受けることも知られている。Saarikoski et al. (1986)[3]は、グッピーにおける pH=3～9 下での 4-Phenylbutyric acid などのアニオン性化学物質の *k1* を測定し、pH の増加に伴い *k1* が減少したことを報告している。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されている。また、この試験結果において pH の増加に伴い *k1* が減少したことなどから、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.

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, 2012[1]）

① 測定値

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が高い測定値がある場合には、それらの値を優先する。

② 推計値

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、NITE カテゴリーアプローチ、EPI Suite の *BCFBAF*（U.S. EPA, 2012[2]）、*BCF* base-line モデル（OASIS Cagtalogic)があげられている。

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、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の物質は、さらに以下の5つの物質群に分類されている。

(i)　アニオン性物質
(ii)　カチオン性物質
(iii)　双性イオン性物質
(iv)　パーフルオロカルボン酸（PFCA）
(v)　パーフルオロスルホン酸（PFSA）

NITE（2012)[1]では、カテゴリーⅢの物質について、log*Pow*やp*K*aなどを用いた生物濃縮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。

手法１：物質群（i)と（ii)については、log*BCF*<3 とする。
手法２：Read-across（類推)による定量的又は定性的な予測を行う。

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. EPA, 2012[2])及び*BCF* base-lineモデル（OASIS Catalogic)の検証を行っている。この結果、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, 2012[2])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、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。

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.

推)を実施することとした[1]。

X.2.3 解離性物質の排出量推計

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能性があり、現実に即し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。

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]、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。

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①～③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記の仮想的区分を用いることとした。

① 非解離状態で使用されている場合

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該当する区分となる。

② 完全に解離している状態で使用されている場合

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、最大水溶解度区分[2]及び最小蒸気圧区分[2]となる。

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

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、一つの水溶解度及び蒸気圧に特定することはできない。

X.2.4 解離性物質の暴露評価

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。

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、エアロゾルや霧、雨、雪などに分配している（Trapp et al., 2010[1]）。また、静電相互作用により粒子に強く吸着する性質がある（van Beelen, 1998[2]）。

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、逆の電荷を持つ表面部に吸着される（Schwarzenbach et al., 2003[3]）。

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による影響を受けると考えられる（NITE, 2012[4]）。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り、体内に蓄積されるイオントラップが起こる可能性なども考えられている（Bromilow and Chamberlain, 2000[5]）。

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。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。

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（van Beelen, 1998[2]; 2000[7]）、多媒体モデルの RAIDAR（Arnot and Mackay, 2007[8]）及び水系２コンパートメントモデル SAFECAS（Yoshida et al., 1987[9]）では、イオン種に対してパラメータを補正している。

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、非解離種とイオン種の動態も考慮可能である（Franco and Trapp, 2010[10]）。EUSES（European 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.

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、解離性物質の環境中動態推計を可能にしている。

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い、環境中動態を並行して推計する方法を導入する。

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載する。

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

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）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)について解説する。

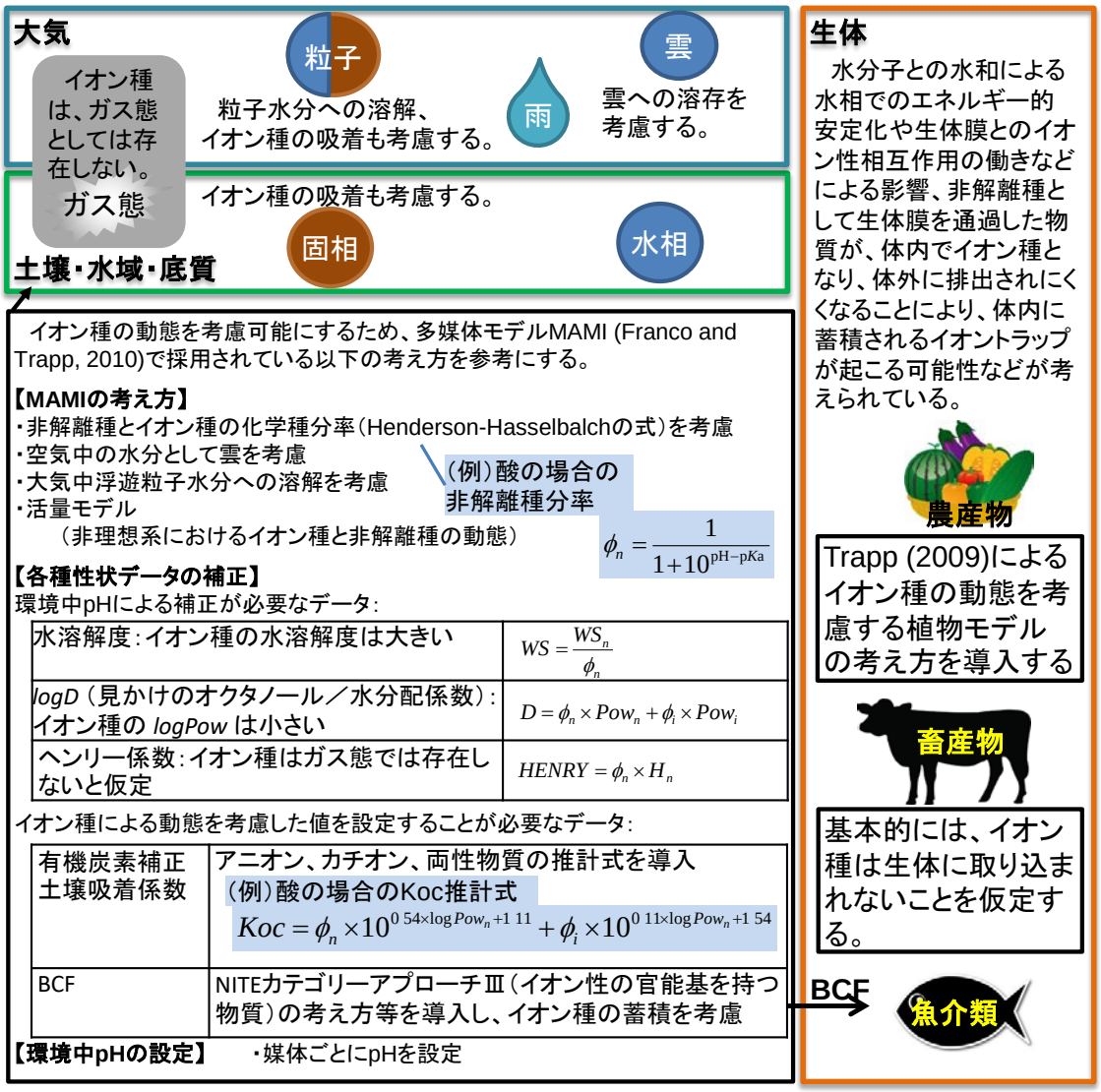
従来の暴露評価モデルについては、「V.3.3　環境中濃度推計」及び「V.7.3　環境中濃度推計に用いる数理モデル」を参照されたい。

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。

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 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

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

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., 2010[1])ため、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解を考慮する。また、非解離種では、土壌吸着係数と有機炭素の存在割合との相関が高いと考えられているが、イオン種では、土壌中の有機及び無機の粒子表面の電荷による影響も考えられる。このため、X.2.2.1 (3)に解離性物質の有機炭素補正土壌吸着係数に関する留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）

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よる影響がある（Trapp, 2009[2])。イオン種は、非解離種と比較して、細胞膜を通過しにくいため、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「イオントラップ」という（Bromilow and Chamberlain, 2000[3])。このため、弱い電解質の物質は、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, 2000[4])。

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、イオン種の拡散は、濃度勾配の他に電位勾配も考慮にいれた Nernst 式に基づいて計算する。また、根からの土壌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。（詳細は付属資料 X.3.1.2 (7)を参照されたい)。

畜産物については、U.S. EPA (2005)[5]の HHRAP (Human Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities)と同様に、小腸内の pH を考慮した見かけの 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.

資料 X.3.1.2 (8)を参照されたい)

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。

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について、解説する。

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の方法で推計する。

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」、「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。

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　地下水汚染の可能性シナリオ」及び「VI6.4　地下水汚染の可能性シナリオ」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。また、「VI6.4.3　地下水へ移行の可能性のある物質の抽出と順位付け」、「VI6.4.3 (1)　地下水へ移行する可能性のある物質の抽出」、「VI6.4.3 (1)②　log*Koc* を用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*Koc* (X.2.2.1 (3)で説明した有機炭素補正土壌吸着係数（*Koc*)の常用対数値)は、土壌間隙水における値を用いる。

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・漁網用防汚剤シナリオ」の手法のとおりに実施する。例えば、船底塗料用・漁網用防汚剤シナリオで用いるソフトウェアには、*Koc* 推計モジュールがあるが、基本的には X.2.2.1 (3)に記載した値を用いる。

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

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

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。

X.3 付属資料

X.3.1 解離性物質の評価

X.3.1.1 はじめに

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、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、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、推計式と環境中 pH の設定経緯について説明する。

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))。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。

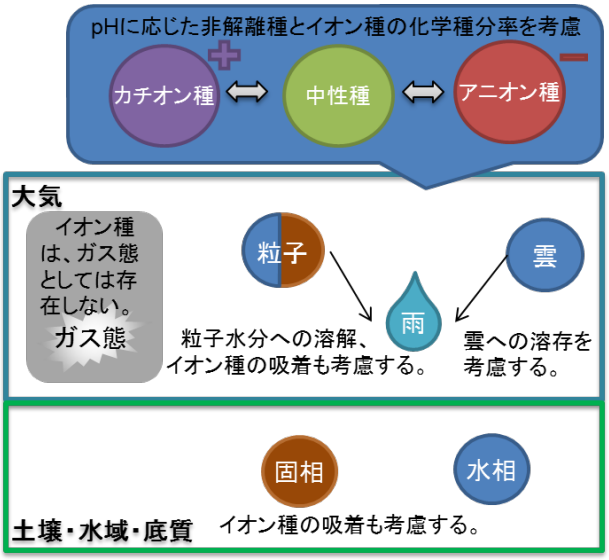
イオン種の環境中動態を考慮するためには、図表 X-5 に示すように、Franco and Trapp (2010)[1] の MAMI の考え方をモデルに導入する。導入した数式については、以下のとおりである。

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

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。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、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(Ksw)については、X.3.1.2 (4)で説明する。

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。

[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.

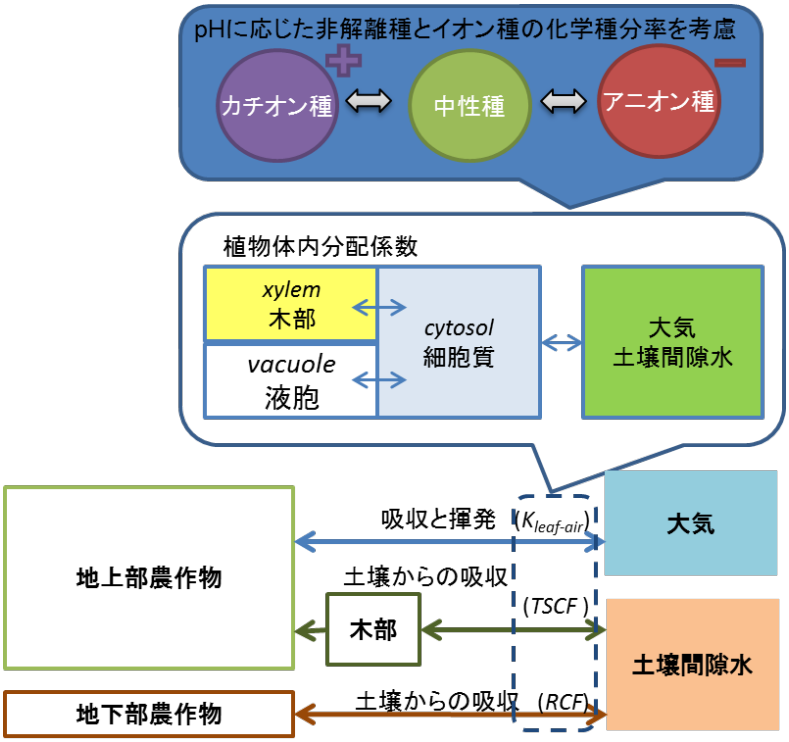


図表 X-5　イオン種環境中動態とその推計式の導入

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（$K_{leaf\text{-}air}$）、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 HHRAP[1]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.

図表 X-7　数理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
MW	分子量	—	—
MP	融点	℃	I 章
VP	蒸気圧	Pa	I 章
WS_n	非解離種の水に対する溶解度※1	mg/L	X.2.2.1 (1)
$\log Pow_n$	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)
$\log Pow_i$	イオン種の 1-オクタノールと水との間の分配係数	—	X.2.2.1 (2)
$Henry_n$	非解離種のヘンリー係数	Pa・m³/mol	X.2.2.1 (4)
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数※2	L/kg	X.2.2.1 (3)
Kd	土壌吸着係数※2	L/kg	X.2.2.1 (3)
BCF	生物濃縮係数	L/kg	X.2.2.1 (6)
BMF	生物蓄積係数	—	I 章、V 章
$\mathrm{p}Ka_{acid}$	酸の酸解離定数	—	X.2.2.1 (5)
$\mathrm{p}Ka_{base}$	塩基の酸解離定数	—	X.2.2.1 (5)
z	当該物質のイオン種の電荷※3	—	X.2.2.1 (5)
$t_{1/2,sobio}$	土壌における生分解の半減期	day	I 章
$t_{1/2,sowater}$	土壌における加水分解の半減期	day	I 章
$t_{1/2,sototal}$	土壌における総括分解半減期	day	I 章

※1　「混和」の場合、pH で補正せず、最大値又は 1×10^6 mg/L[1]として扱う。
※2　Koc の実測値が入手できない場合には、$\log Pow_n$ 及び $\mathrm{p}Ka_{acid}$、$\mathrm{p}Ka_{base}$ 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。
※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。

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。

$$M = MW \qquad \text{式 X-24}$$

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
M	モル質量	g/mol	—	
MW	分子量	—	—	化学物質情報
$WS_{n,mol}$	非解離種の水に対する溶解度(モル)	mol/L	—	
WS_n	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 1×10^6mg/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。

$$H_n = \frac{Henry_n}{R \times T}$$ 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･m³/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,1993[2])。

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。

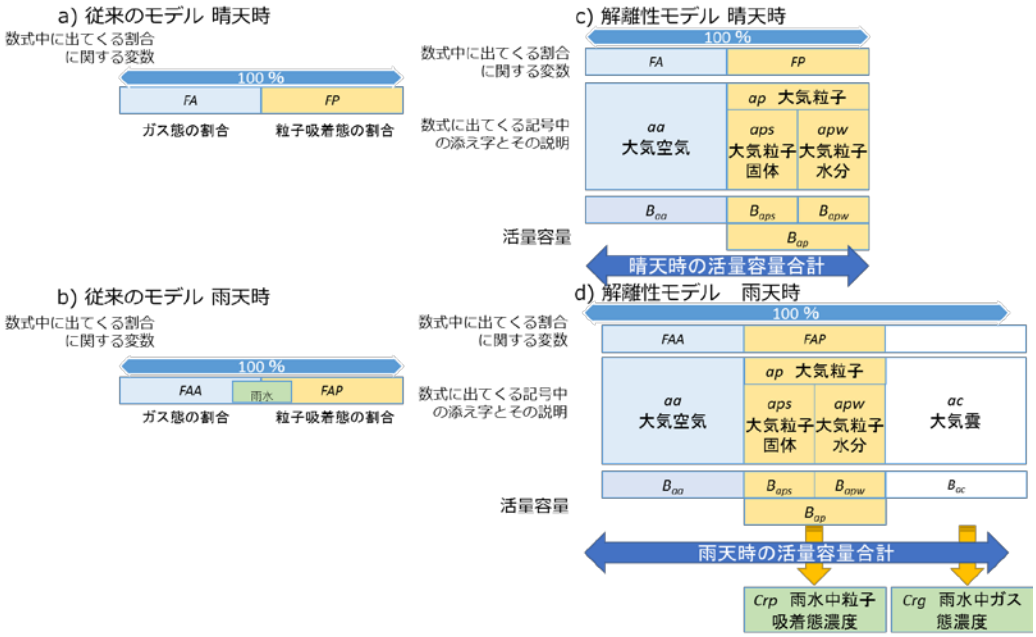
---

[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。



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

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、以下のように定義する。

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)

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

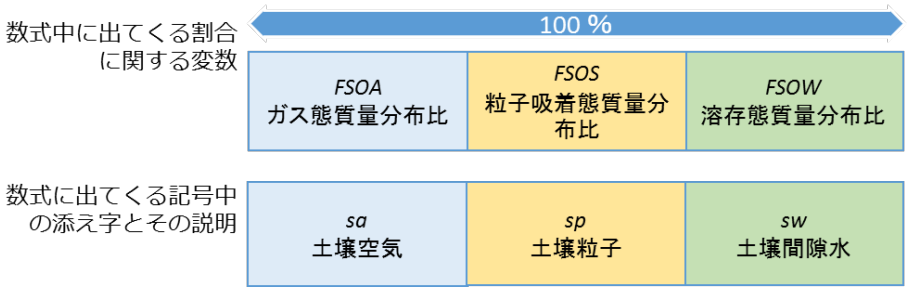
FAA：雨天時に大気空気（*aa*)中に存在する物質量/大気中に存在する物質全量

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

ii) 土壌

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 X-9)。

[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。

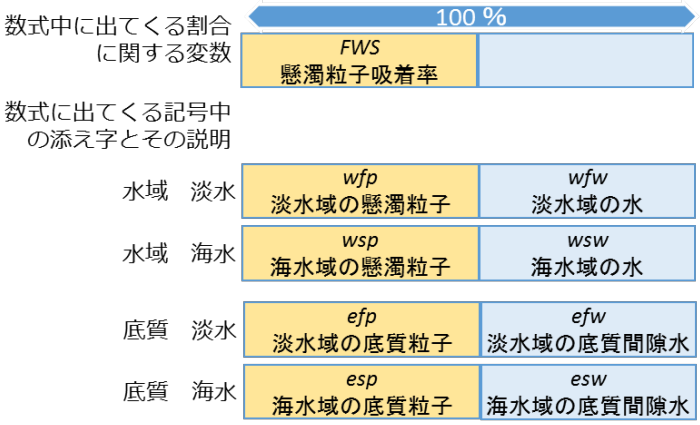
FSOA：土壌空気中の物質量/土壌中に存在する物質全量（ガス態質量分布比）

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.

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)を自由に通ることができる（Mc Farlane, 1995[1]）。根から吸収された水分を葉や茎へ運ぶ木部と葉から養分を運ぶ師部は、このカスパリー線内側に存在する。

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

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* を用いることがある。

③ 環境及び環境構成要素の特性データ

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 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*)	記号	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	*a*	空気			*aa*
		粒子			*ap*
		水分	○		*apw*
		固体		○	*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	○		*ac*
土壌		*s*	空気			*sa*
			水	○		*sw*
			粒子		○	*sp*
水域	淡水	*wf*	水	○		*wfw*
			懸濁粒子		○	*wfp*
	海水	*ws*	水	○		*wsw*
			懸濁粒子		○	*wsp*
底質	淡水	*ef*	水	○		*efw*
			懸濁粒子		○	*efp*
	海水	*es*	水	○		*esw*
			懸濁粒子		○	*esp*

※　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	*cytosol*
	木部	*xylem*
	液胞	*vacuole*
牛	牛の小腸	*cow*

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
				(2010)[1]
f_{wsw}	海水域の水の体積分率	—	—	—
f_{wfp}	淡水域の懸濁粒子の体積分率	—	2×10^{-5}	=CWss/RHOsolid 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} [m^3 / m^3])と大気柱雲水量 / 大気柱水蒸気量比 (900 [g/m^2] / (2×10^4) [g/m^2])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*Koc*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, 2008[2], Franco and Trapp, 2010[1]）。

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.

pH_{xew}と同じとする。

$$pH_{xep} = pH_{xew}$$ 式 X-27

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

※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*)、淡水域の懸濁粒子（*wfp*)、海水域の懸濁粒子（*wsp*)である。
※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*)、海水水（*wsw*)である。

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素の水のpH_{xew}を用いて計算する。

酸：

$$pH_{xep} = pH_{xew} - 0.6$$ 式 X-28

塩基：

$$pH_{xep} = 4.5$$ 式 X-29

両性物質：

$$pH_{xep} = 5$$ 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

※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*)、淡水域の底質粒子（*efp*)、海水域の底質粒子（*esp*)である。
※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*)、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。

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

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。

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

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

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℃、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.

v) 粒子の密度（ρ）

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。

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	$=\rho_p$ [kg/m^3]/1000 V 章 p.67
ρ_{sp}	土壌粒子の密度	kg/L	1.5	=DEN$_{SOS}$ 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

vi) 有機炭素含有率（*OC*)

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。

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	=OC$_{SOS}$ V 章 p.67
OC_{wfp}	淡水域の懸濁粒子の有機炭素含有率	—	0.1	=*FOC*susp V 章 p.67
OC_{wsp}	海水域の懸濁粒子の有機炭素含有率	—	0.1	=*FOC*susp V 章 p.67
OC_{efp}	淡水域の底質粒子の有機炭素含有率	—	0.1	=*FOC*susp V章 p.67
OC_{esp}	海水域の底質粒子の有機炭素含有率	—	0.1	=*FOC*susp V 章 p.67

(2) 化学種分率の計算

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（pKa$_{.acid}$、pKa$_{.base}$)から Henderson-Hasselbalch 式で算出できる。

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.

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)の値を用いる。

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　水分	○		*apw*
		粒子　固体		○	*aps*
		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	○		*wsw*
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*

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（$\phi_{x.n}$)、アニオン種分率（$\phi_{x.a}$)及びカチオン種分率（$\phi_{x.c}$)はそれぞれ 1、0、0 となる。酸、塩基及び両性物質については、式 X-34～式 X-43 で計算する。

酸：　酸解離基をもつ物質

$$\phi_{x.n} = \frac{1}{1+10^{pH_x - pKa_{acid}}} \qquad \text{式 X-34}$$

$$\phi_{x.a} = 1 - \phi_{x\,n} \qquad \text{式 X-35}$$

$$\phi_{x\,c} = 0 \qquad \text{式 X-36}$$

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
				(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※	—	0	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
$\mathrm{p}Ka_{acid}$	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（*wsw*）、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

$$\phi_{x\,n} = \frac{1}{1+10^{\mathrm{p}Ka_{base}-\mathrm{pH}_x}} \qquad \text{式 X-37}$$

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

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

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]
$\mathrm{p}Ka_{base}$	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（*wsw*）、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]

$$\phi_{x\,n} = \frac{1}{1+10^{\mathrm{pH}_x-\mathrm{p}Ka_{acid}}+10^{\mathrm{p}Ka_{base}-\mathrm{pH}_x}} \qquad \text{式 X-40}$$

$$\phi_{x\,a} = \phi_{x.n}\times 10^{\mathrm{pH}_x-\mathrm{p}Ka_{acid}} \qquad \text{式 X-41}$$

[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。

$$\phi_{x\,c} = \phi_{x\,n} \times 10^{\mathrm{pKa}_{base} - \mathrm{pH}_x}$$ 式 X-42

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$\phi_{x.\mathrm{n}}$	*x* ごとの非解離種分率	—	—	Franco and Trapp (2010)[1]
$\phi_{x.\mathrm{a}}$	*x* ごとのアニオン種分率	—	—	Franco and Trapp (2010)[1]
$\phi_{x.\mathrm{c}}$	*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
$\mathrm{p}Ka_{acid}$	酸の酸解離定数	—	—	化学物質情報
$\mathrm{p}Ka_{base}$	塩基の酸解離定数	—	—	化学物質情報

※　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（*wsw*）、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。

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。

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

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

※　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（*wsw*）、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。

(3) pH で補正が必要な化学物質に関するデータ

各媒体を構成する要素（*xe*)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（$\log Pow_n$ 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.

なお、有機炭素補正土壌吸着係数（*Koc*）には、実測値があればそれを用い、実測値がない場合には、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 Koc 値を用いる。

(4) 大気粒子固体-空気分配係数（*Kpn*）と粒子固体-水分配係数（*Ksw*）

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（*Ksw*）を用いる（詳細は X.3.1.3 (1)②に説明）。非解離種の *Ksw* 算出には、大気粒子固体-空気分配係数（Kp_n）を用いる。Kp_n 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）を使用する。また、参考までに、Harner と Bidleman の式に基づく Franco の式（式 X-46）（Harner and Bidleman,1998[1]; Franco and Trapp,2008[2]）も以下に示す。

$$Kp_n = Kp_{n.Junge} \quad \text{or} \quad Kp_{n.Harner_and_Bidleman} \qquad \text{式 X-44}$$

$$Kp_{n.Junge} = \frac{CJ \times SP}{VPL \times f_{aps}} \qquad \text{式 X-45}$$

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

$$Kp_{n.Harner_and_Bidleman} = 0.54 \times \frac{Pow_n}{H_n} \times OC_{aps} \times \rho_{aps} \qquad \text{式 X-46}$$

記号	説明	単位	値	出典・参照先
Kp_n	大気粒子固体-空気分配係数※	—	—	X.3.1.3 (1)②
$Kp_{n\ Junge}$	Junge 式による Kp_n	—	—	X.3.1.3 (1)②
$Kp_{n\ Harner_and_Bidleman}$	Harner and Bidleman 式による Kp_n	—	—	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

※　Kp_n 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.

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、$Kp_n = C_{adsorption/particle} / C_g$

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。

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(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、粒子重量当たりの化学物質量[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、本章では、Franco and Trapp (2010)[1]に倣い、無次元量[L/L]としている。

非解離種の *Ksw*：

$$Ksw_{aps.n} = Kp_n \times H_n \qquad \text{式 X-47}$$

イオン種の *Ksw*：

Koc 又は *Kd* の実測値がある場合は、以下の式で算出する。

$$Ksw_{aps.i} = Koc \times OC_{aps} \times \rho_{\mathrm{aps}} \qquad \text{式 X-48}$$

Koc 又は *Kd* の実測値がない場合は、以下の式で算出する。

$$Ksw_{aps.i} = Koc_i \times OC_{aps} \times \rho_{\mathrm{aps}} \qquad \text{式 X-49}$$

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ー係数	—	—	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

※　Ksw_{aps} の定義は以下のとおり。
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.

(5) 大気中濃度及び沈着量の推計

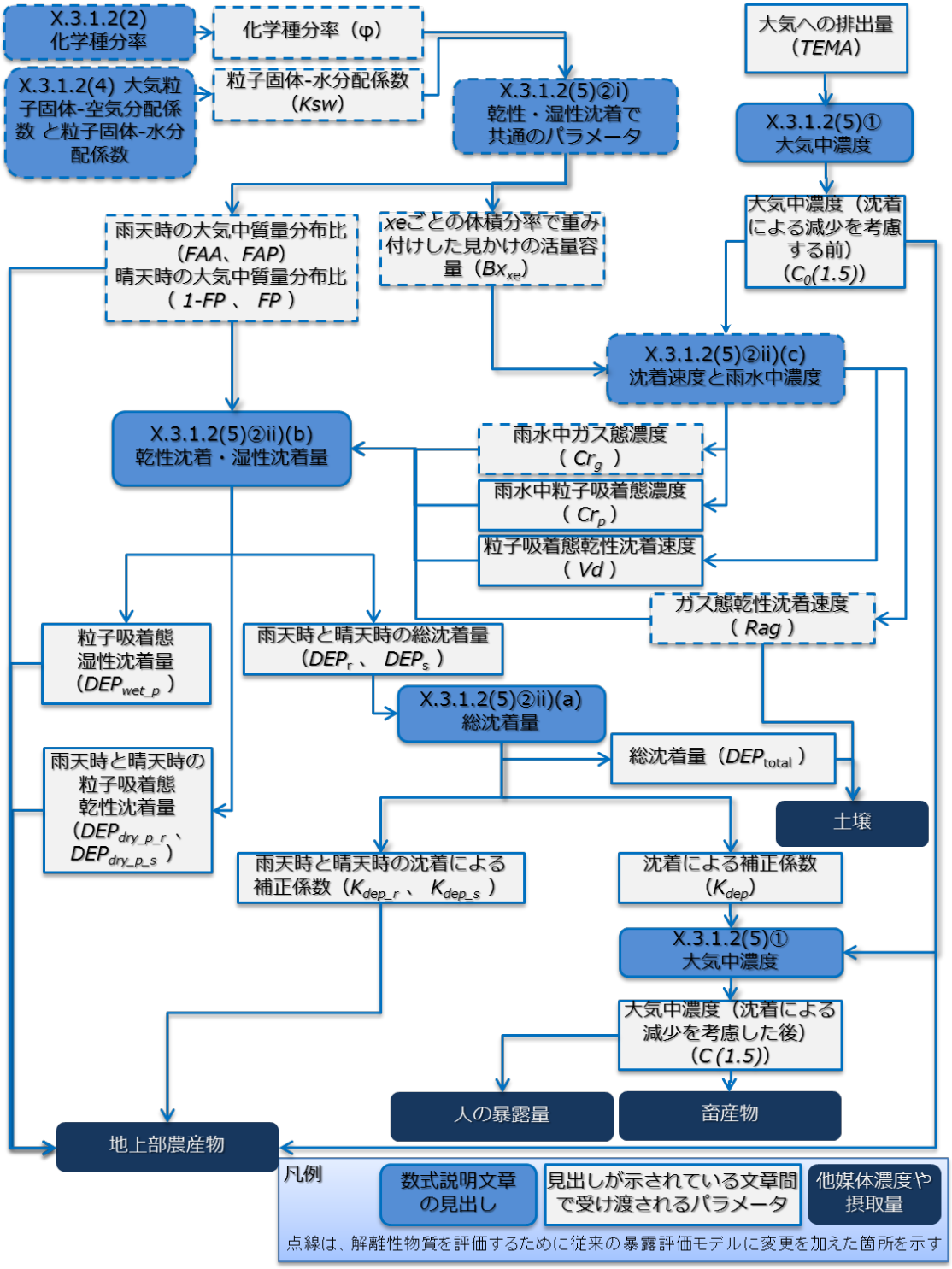
X.3.1.2 (5)では、大気中濃度及び沈着量の推計に用いる数式やパラメータについて説明する。

大気中濃度及び沈着量の推計の手順を図表 X-22 に示す。

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*、*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 and Trapp (2010) [1]の考え方を導入する。

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 (1)にで述べる。

[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

（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 V-40 によりモル濃度で計算する。

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

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

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

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/m³	―	V 章 p.69
a	大気中濃度換算係数※1	mg/m³/(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/m³	―	V 章 p.69
K_{dep}	沈着による補正係数	―	―	式 V-52

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

② 大気から土壌への沈着量

i) 乾性・湿性沈着で共通のパラメータ

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
① 乾性・湿性沈着で共通のパラメータ

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]（雨に捕捉された粒子吸着物質を含まない）は、晴天時と雨天時で異なる。

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、雨天時の大気中粒子吸着態質量分布比（*FAP*）である。

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量に対する、大気空気に存在する物質量の比
[2] 大気空間全体に存在する物質量に対する、大気粒子固体に存在する物質量の比
[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.

以下の式 X-51～式 X-54 でこれら 4 つの質量比を計算する。

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。

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

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

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

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

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

※　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*）、大気中の粒子水分（*apw*）、大気中の雲（*ac*）である。

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}）は以下の式で計算する。

ガス態：

$$Bx_{aa} = f_{aa} \times H_n \times \phi_{ac.n}$$ 式 X-55

粒子固体：

$$Bx_{aps} = f_{aps} \times \left(\frac{Ksw_{aps.n} \times \phi_{apw.n}}{\gamma_{a\,n}} + \sum \frac{Ksw_{aps.i} \times \phi_{apw.i}}{\gamma_{a\,i}} \right)$$ 式 X-56

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。

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

雲：

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

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*：≒1 *aps*：2×10^{-11} *apw*：2×10^{-11} *ac*：3×10^{-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。
$Ksw_{aps.n}$	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
$Ksw_{aps.i}$	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
γ_{xmn}	*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

※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*）、大気中の粒子水分（*apw*）、大気中の雲（*ac*）である。
※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。

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。

ii) 沈着量

(a) 総沈着量 DEP_{total}

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
i) 総沈着量の推計

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}）、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。

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

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

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

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

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

$$Q_d = TEMA \times 10^6 / 365$$ 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/m²	—	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/m²	—	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/m²	—	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	m²	—	—
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。

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

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
DEP_r	雨天時の総沈着量	mol/day/m²	—	V 章 p.75
DEP_s	晴天時の総沈着量	mol/day/m²	—	V 章 p.75
$DEP_{dry_g_r}$	雨天時のガス態乾性沈着量	mol/day/m²	—	式 V-57
$DEP_{dry_p_r}$	雨天時の粒子吸着態乾性沈着量	mol/day/m²	—	式 V-58
$DEP_{dry_g_s}$	晴天時のガス態乾性沈着量	mol/day/m²	—	式 V-59
$DEP_{dry_p_s}$	晴天時の粒子吸着態乾性沈着量	mol/day/m²	—	式 V-60
DEP_{wet_g}	ガス態湿性沈着量	mol/day/m²	—	式 V-61
DEP_{wet_p}	粒子吸着態湿性沈着量	mol/day/m²	—	式 V-62

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（$DEP_{dry_p_r}$）、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 により計算する。

$$DEP_{dry_g_r} = C_0(1.5) \times FAA \times Rag$$ 再掲（単位を修正）　式 V-57

$$DEP_{dry_p_r} = C_0(1.5) \times FAP \times V_d$$ 再掲（単位を修正）　式 V-58

$$DEP_{dry_g_s} = C_0(1.5) \times (1 - FP) \times Rag$$ 再掲（単位を修正）　式 V-59

$$DEP_{dry_p_s} = C_0(1.5) \times FP \times V_d$$ 再掲（単位を修正）　式 V-60

$$DEP_{wet_g} = Cr_g \times TRF$$ 再掲（単位を修正）　式 V-61

$$DEP_{wet_p} = Cr_p \times TRF$$ 再掲（単位を修正）　式 V-62

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/m²	—	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/m²	—	V 章 p.75-76
$DEP_{dry_g_s}$	晴天時のガス態乾性沈着量	mol/day/m²	—	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/m²	—	V 章 p.75-76
DEP_{wet_g}	ガス態湿性沈着量	mol/day/m²	—	V 章 p.75-76
DEP_{wet_p}	粒子吸着態湿性沈着量	mol/day/m²	—	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/m³	—	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
R_{ag}	ガス態乾性沈着速度	m/day	—	式 X-61
Vd	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
1-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/m³	—	式 X-62
Cr_p	雨水中粒子吸着態濃度	mol/m³	—	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。

$$R_{ag} = \frac{KG \times KASLSA + \dfrac{KG \times KASLSW}{H_n \times \phi_{sw.n}}}{KG + KASLSA + \dfrac{KASLSW}{H_n \times \phi_{sw.n}}}$$

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
ϕ_{swn}	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。

$$Cr_g = Ca_0 \times \frac{Bx_{ac}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw} + Bx_{ac}} \times \frac{1}{f_{ac}}$$

式 V-67 置換　式 X-62

$$Cr_p = Ca_0 \times FAP \times CEP$$

再掲（単位を修正）　式 V-68

$$Ca_0 = \frac{C_0(1.5)}{Kc}$$

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/m³	—	X.3.1.3 (1)④

記号	説明	単位	値	出典・参照先
Cr_p	雨水中粒子吸着態濃度	mol/m³	—	V 章 p.79
Ca_0	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/m³	—	V 章 p.79
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※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/m³	—	式 V-38

※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の柱を想定し、その柱の中の濃度平均値である「大気柱中化学物質平均濃度」Ca_0を用いる。

※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*）、大気粒子水分（*apw*）、雲（*ac*）である。

(6) 土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計

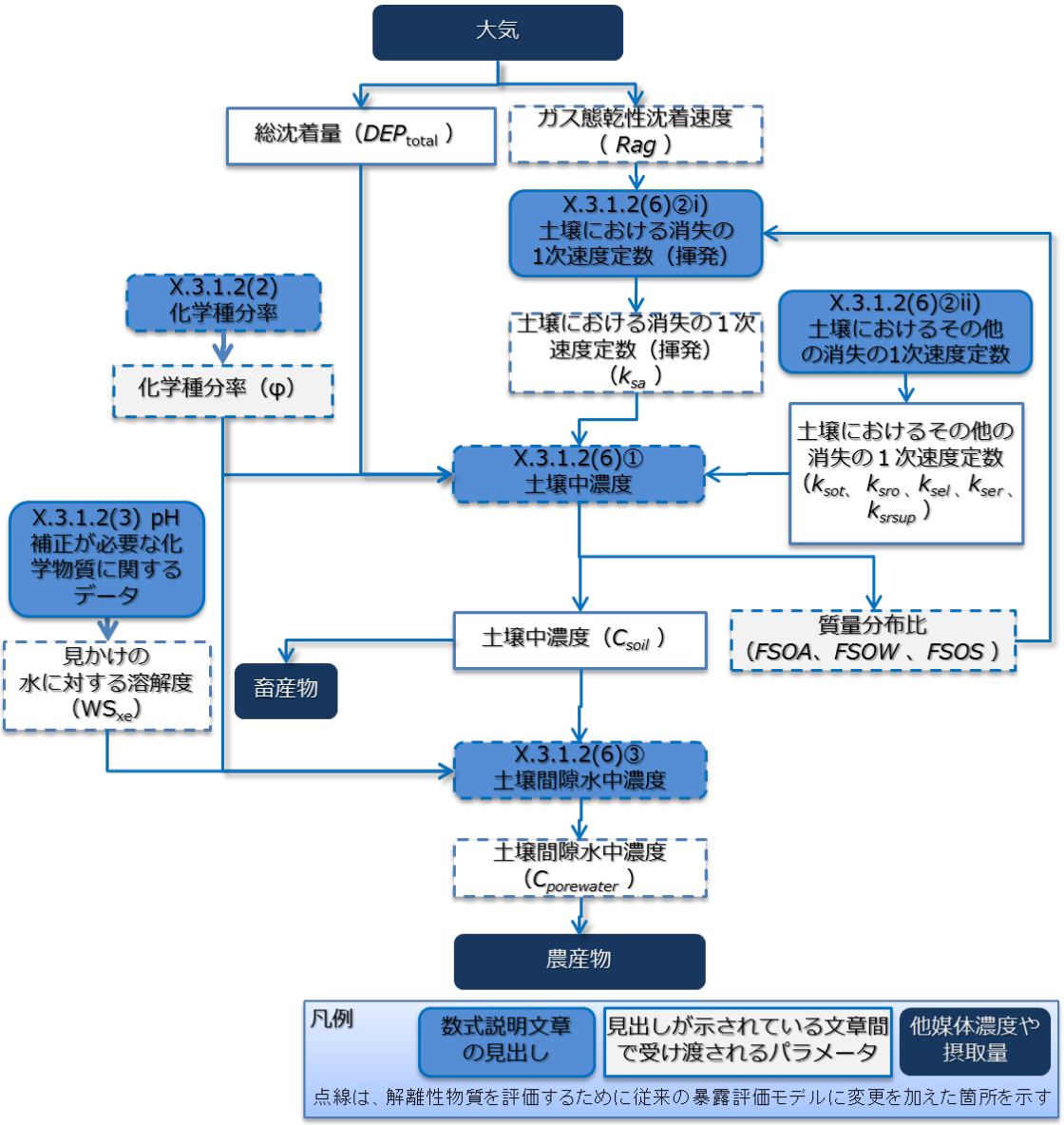
X.3.1.2 (6)では土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計に用いる数式やパラメータについて説明する。土壌中濃度及び土壌間隙水中濃度の推計の手順を図表 X-23 に示す。

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度を推計している。

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 Trapp (2010) [1]の考え方を導入する。

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 (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-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

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

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/m²	—	式 V-49□
BD_{soil}	土壌バルク密度	kg/m³	—	—
DEP_{so}	土壌深度	m	0.2	—

※　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。

土壌バルク密度（BD_{soil}）は、式 V-75 により計算する。

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。

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

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

※ 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 を用いる。

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（$FSOA$、$FSOW$、$FSOS$）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、式 X-68 で計算する。

Koc 又は Kd の実測値がある場合は、以下の式で算出する。

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

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

$$FSOS = \frac{Koc \times OC_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp}}{(H_n \times \phi_{sw.n} \times SOAF + SOWF + Koc \times OC_{sp} \times (1 - SOAF - SOWF) \times \rho_{sp})}$$ 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。

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

式 V-77 置換　式 X-66

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

式 V-78 置換　式 X-67

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

式 V-79 置換　式 X-68

記号	説明	単位	値	出典・参照先
FSOA	ガス態質量分布比	—	—	X.3.1.3 (1)⑤
FSOW	溶存態質量分布比	—	—	X.3.1.3 (1)⑤
FSOS	粒子吸着態質量分布比	—	—	X.3.1.3 (1)⑤
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
H_n	非解離種の無次元ヘンリー係数	—	—	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_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。
$\gamma_{xm.n}$	x*m* ごとの非解離種活量係数※2	—	—	式 X-32
$\gamma_{xm.i}$	x*m* 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。

$$k_{sa} = \frac{FSOA \times R_{ag}}{SOAF \times DEP_{SO}}$$

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。

$$C_{porewater} = \frac{C_{soil} \times \frac{BD_{soil}}{1000}}{K_{soil_water}}$$

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。

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)

※　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}）を採用する。

Koc 又は *Kd* の実測値がある場合は、以下の式で算出する。

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

式 V-97 置換　式 X-70

Koc 又は *Kd* の実測値がない場合は、以下の式で算出する。

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

式 V-97 置換　式 X-71

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{soil\text{-}water}$	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

※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。

(7) 農作物中濃度の推計

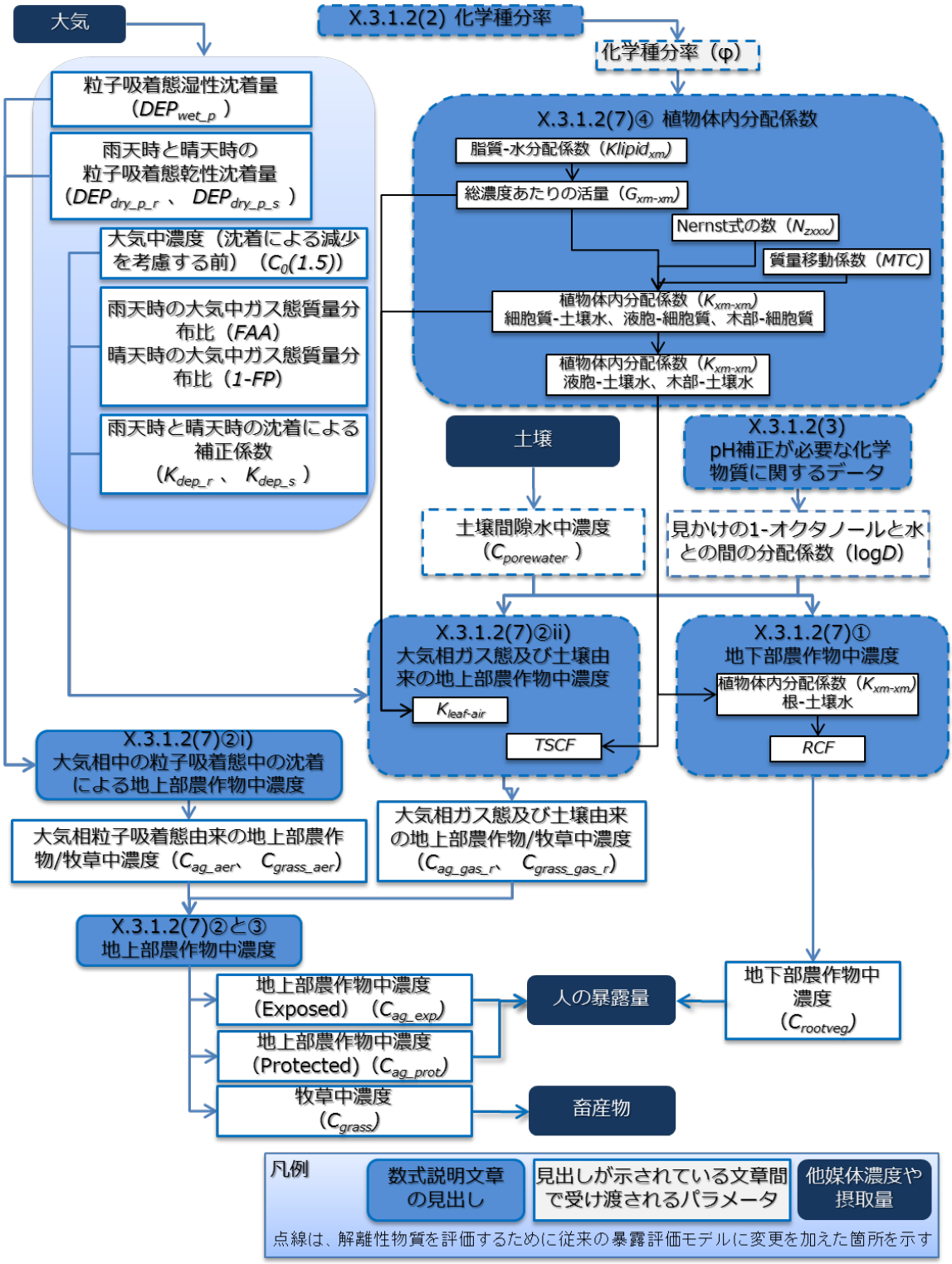
X.3.1.2（7）では、農作物中濃度の推計に用いる数式やパラメータについて説明する。農作物中濃度の推計の手順を図表 X-24 に示す。

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。

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（$K_{leaf\text{-}air}$)及び根から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る影響を考慮する。

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 (2)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-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。

$$C_{rootveg} = C_{porewater} \times RCF \times VG_{rootveg}$$ 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（logD_{sw})≧4 の場合は「0.01」、logD_{sw}＜4 の場合は「1.0」とする。（logD_{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。

$$RCF = K_{root-sw}$$ 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
$K_{root\text{-}sw}$	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（$K_{root\text{-}sw}$)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。

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{root\text{-}sw}$	根-土壌間隙水分配係数	L/kg	—	X.3.1.3 (2)②
$K_{cytosol\text{-}sw}$	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
$K_{vacuole\text{-}sw}$	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。

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

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

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

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/m²	—	—
Mf	生産性	kg/m²	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/m²	—	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/m²	—	式 V-58□
$DEP_{dry_p_s}$	晴天時の粒子吸着態乾性沈着量	mol/day/m²	—	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。

$C_{ag_gas_r}$　及び　$C_{grass_gas_r}$

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

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
$Qtransp$	蒸散流量	m^3/day	0.001	V章p.94
$K_{leaf\text{-}air}$	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 Equation 5-18 [1]
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（logD_{sw})≧4 のとき「0.01」、logD_{sw}＜4 の場合「1.0」、牧草については常に「1.0」
(logD_{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/m³]	—	V 章 p.94-95
rainyday	降雨日数	[day/year]	100	V 章 p.94
$C_0(1.5)$	大気中濃度（沈着による減少を考慮する前）	[mol/m³]	—	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。

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

式 V-114 置換　式 X-74

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{leaf\text{-}air}$	大気中のガス態物質の葉・茎への濃縮係数	—	—	X.3.1.3 (2)③
$K_{vacuole\text{-}cytosol}$	液胞-細胞質分配係数	—	—	式 X-78
$K_{air\text{-}water}$	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

$$TSCF = K_{xylem-sw}$$

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壌中水分の間の分配係数	—	—	X.3.1.3 (2)③
$K_{xylem\text{-}sw}$	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（$K_{vacuole\text{-}sw}$)及び木部-土壌間隙水分配係数（$K_{xylem\text{-}sw}$)はそれぞれ式 X-76 及び式 X-77 により推計する。

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

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

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

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

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

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

$$E_{in-(out)} = MTC_{memnbrane\ n} \times G_{in\ n} + MTC_{membrane\ i} \times \frac{N_{in-out}}{\left(\exp\left(N_{in-out}\right)-1\right)} \times \exp\left(N_{in-out}\right) \times G_{in\ i}$$

式 X-80

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{in\text{-}out}$	内側の媒体-外側の媒体分配係数※	—	—	X.3.1.3 (2)⑤
$E_{(in)\text{-}out}$	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
$E_{in\text{-}(out)}$	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
$N_{in\text{-}out}$	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（$K_{cytosol\text{-}sw}$）：
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（$K_{vacuole\text{-}cytosol}$）：
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（$K_{xylem\text{-}cytosol}$）：
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。

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

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

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
	内への質量移動係数			
$MTC_{biomembrane.n}$	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。

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

$$MTC_{biomembrane\ i} = 10^{-3\ 162} \times MTC_{biomembrane\ n} = 6.89 \times 10^{-4} \times MTC_{biomembrane\ n}$$ 式 X-84

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$MTC_{biomembran.n}$	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（$N_{x\text{-}x}$）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。

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

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$N_{x\text{-}x}$	Nernst 式の数※	—	—	X.3.1.3 (2)⑤ ;Trapp (2009)[2]
z	価数	—	—	化学物質情報
$El_{x\text{-}x}$	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。

$$G_{xm\,n} = \frac{1}{\dfrac{W_{xm}}{\gamma_{xm\,n}} + \dfrac{Klipid_{xm\,n}}{\gamma_{xm\,n}} + \left(W_{xm} + Klipid_{xm\,i}\right)\dfrac{\phi_{xm\,i}}{\gamma_{xm\,i} \times \phi_{xm\,n}}} \qquad \text{式 X-86}$$

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

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

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-水分配係数※1	—	—	式 X-89
$Klipid_{xm.i}$	*xm* ごとのイオン種の脂質-水分配係数※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。

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

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

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
$\log Pow_i$	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。

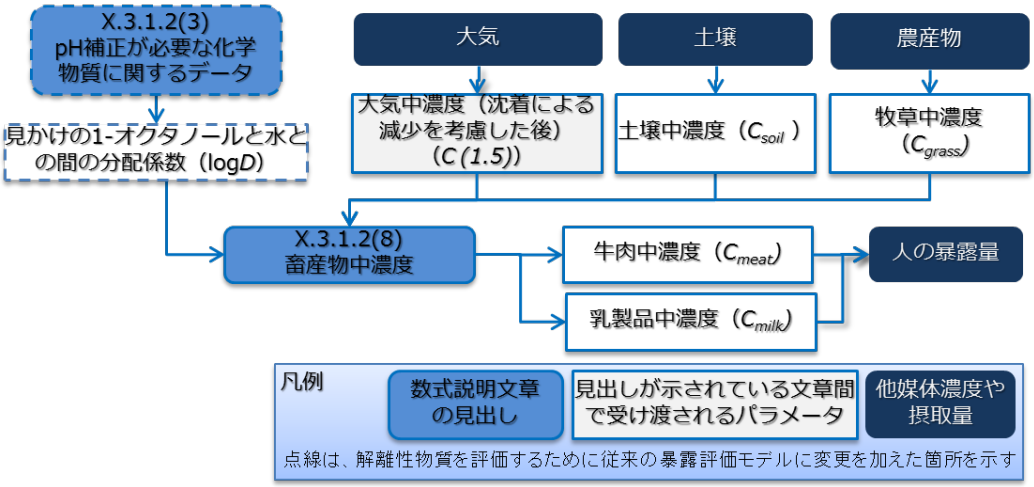
(8) 畜産物中濃度の推計

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、logPow 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/m³	—	式　V-40
CTL_{inhl}	牛の吸入摂取量（大気）	m³/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。

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

$$CONV_{soil} = \frac{\frac{BD_{soil}}{1000}}{DEN_{SOS} \times SOSF}$$ 再掲　式 V-120

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/m³	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

※　$\log D_{cow}$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。

② 乳製品中濃度

参照：　V.7.3.4 畜産物中濃度の推計
(2) 乳製品中濃度

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。

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

再掲　式 V-121

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/m³	—	式 V-40
CTL_{inhl}	牛の吸入摂取量（大気）	m³/day	122	V 章 p.97、p.98

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。

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

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

※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。

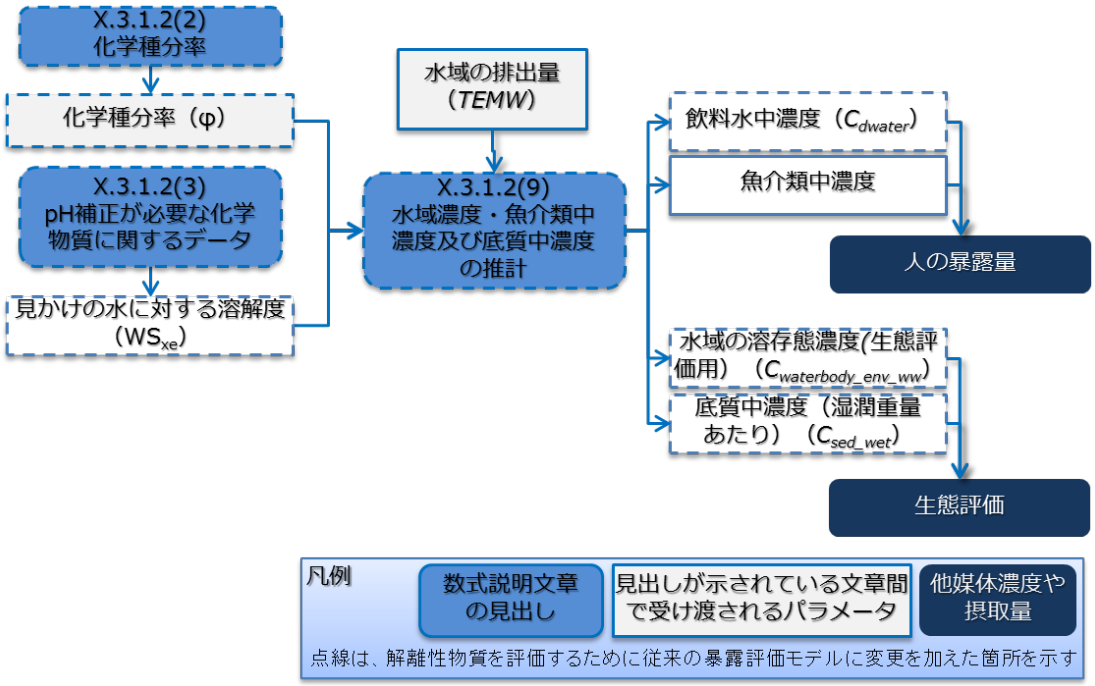
(9) 水域濃度、魚介類中濃度及び底質中濃度の推計

① 水域濃度、魚介類中濃度及び底質中濃度の計算手順

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。

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。

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。



[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）(Cwaterbody_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。

$$C_{river_man} = \frac{TEMW}{V_{river_man} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60)[year \rightarrow \sec] \times M}$$

式 V-123 置換　式 X-93

$$C_{sea_man} = \frac{C_{river_man}}{DILUTION_{sea}}$$

再掲（一部数式を修正）　式 V-124

$$C_{sea_man} = \frac{TEMW}{V_{sea_man} \times (365 \times 24 \times 60 \times 60)[year \rightarrow \sec] \times M}$$

式 V-125 置換　式 X-94

$$C_{waterbody_man_ww} = C_{waterbody_man} \times (1 - FWS_{xm})$$

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} 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※3	mol/L	—	化学物質情報

※1　水域：河川又は海域、*waterbody*：*river* 又は *sea*
※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*）である。
※3　排出量データの種類により以下の値を用いる。
化審法推計排出量：20.85
PRTR 届出排出量（海域以外）：4.35
※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}））。

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。

$$FWS_{xm} = \frac{Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6})}{1 + Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6})}$$

V-127 置換　式 X-95

Koc 又は *Kd* の実測値がない場合は、以下の式で算出する。

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

V-127 置換　式 X-96

記号	説明	単位	値	出典・参照先
FWS_{xm}	*xm* 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}	*xep* 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
$\phi_{xep.n}$ $\phi_{xew.n}$	*xep* 又は *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。
$\phi_{xep.i}$ $\phi_{xew.i}$	*xep* 又は *xew* 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。
$\gamma_{xm.n}$	*xm* ごとの非解離種活量係数※	—	—	式 X-32
$\gamma_{xm.i}$	*xm* ごとのイオン種活量係数※	—	—	式 X-33
f_{xew}	*xew* ごとの体積分率※	—	*xew* ごとの値	図表 X-14

記号	説明	単位	値	出典・参照先
			wfw：2×10^{-5} *wsw*：2×10^{-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。

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

$$C_{fish_sea} = C_{sea_man_ww} \times BCF \times BMF$$ 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、logPow 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。

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

$$C_{waterbody_env_ww} = C_{waterbody_env} \times (1 - FWS)$$ 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、logPow 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 logPow_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。

$$C_{sed_wet} = \frac{K_{susp-water}}{RHO_{susp}} \times C_{waterbody_env_ww} \times 1000$$ 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 $=K_{susp\text{-}water.wf}$、式 X-98、式 X-99、海域の場合= $K_{susp\text{-}water.ws}$
RHO_{susp}	懸濁物質のバルク密度	kg/m³	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（$K_{susp\text{-}water}$）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。

$$K_{susp-water\ xm} = Fwater_{susp} + Fsolid_{susp} \times Koc \times OC_{xep} \times \rho_{xep}$$

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。

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

V-134 置換　式 X-99

記号	説明	単位	値	出典・参照先
$K_{susp\ water.xm}$,	*xm* ごとの懸濁物質-水分配係数	—	—	X.3.1.3 (1)⑧
$Fwater_{susp}$	懸濁物質中の水の容積比率	—	0.9	V 章 p.106
$Fsolid_{susp}$	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}	*xep* ごとのの有機炭素含有率※1	—	0.1	図表 X-20
ρ_{xep}	*xep* ごとの底質粒子の密度※1	kg/L	2.5	図表 X-19
$\phi_{xep.n}$ $\phi_{xew.n}$	*xep* 又は *xew* 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。
$\phi_{xep.i}$ $\phi_{xew.i}$	*xep* 又は *xew* 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
				用する。
$\gamma_{xm.n}$	*xm* ごとの非解離種活量係数※3	—	—	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。

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

$$conv_{susp} = \frac{RHO_{susp}}{Fsolid_{susp} \times RHO_{solid}}$$ 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

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

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。

(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

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

- 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モデル MAMI (Multimedia Activity Model applicable to neutral and Ionizable modules)を開発している。
- 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ルでの計算が適している。
- 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、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）である。
- 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.

・ 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(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、質量濃度からモル濃度に変更する。

② 粒子固体-水分配係数（X.3.1.2 (4)大気粒子固体-空気分配係数（*Kpn*)と粒子固体-水分配係数（*Ksw*))

・ 粒子固体-水分配係数（*Ksw*)は、大気における粒子容量あたりの粒子吸着態と水への溶存態の化学物質の濃度比である。
・ 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 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、蒸気圧を用いて計算する数式である。
・ 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、大気粒子固体への分配を考慮するため粒子固体-水分配係数（*Ksw*)を用いている。非解離種の粒子-水分配係数（$Ksw_{aps.n}$)は、大気粒子固体-空気分配係数（Kp_n)とヘンリー係数（H_n)から計算し、Kp_n の計算には、Harner and Bidleman の式に基づいた式を用いている。イオン種の粒子-水分配係数（$Ksw_{aps.i}$)は、*Koc* を用いて推計している。
・ 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、従来の暴露評価モデルと同様に Junge 式[2]を使用するため、Kp_n 推計式を Junge 式[2]から導出する。そして、Franco and Trapp (2010)[1] と同様に、Kp_n と H_n から $Ksw_{aps.n}$ を計算する。
・ イオン種の Ksw_{aps} は、*Koc* 又は *Kd* の実測値がない場合には、Franco and Trapp (2010)[1]による式を用いて推計する。*Koc* 又は *Kd* の実測値がある場合には、同式で用いられているイオン種の有機炭素補正土壌吸着係数（Koc_i)の代わりに、実測値を用いる。

解離性モデル	$Kp_n = Kp_{n.Junge}$ or $Kp_{n.Harner_and_Bidleman}$	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 Polluntants. In: Suffet, I. H. (ed.) Fate of Pollutans 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（*Koc* 又は *Kd* 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（*Koc* 又は *Kd* の実測値がない場合）	$Ksw_{aps.i} = Koc_i \times OC_{aps} \times \rho_{aps}$	式 X-49

③ 大気中濃度（X.3.1.2 (5)①大気中濃度）

・　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）（$C(1.5)$）を推計している。

・　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。

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

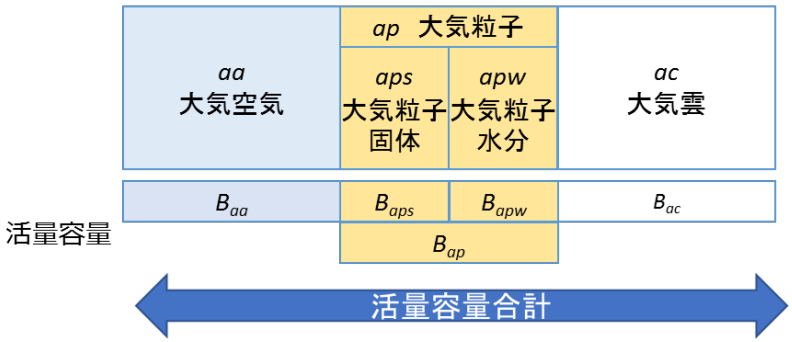
従来の暴露評価モデル	$Q' = TEMA \times 10^{-3}$	式 V-39
	$C(1.5) = C_0(1.5) \times K_{dep}$	式 V-40
解離性モデル	同式を使用。	

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）

・　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着態の化学物質が、雨水中へ取り込まれるとしている。

・ 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質の分配を考慮している。

・ 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 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であるとし、その一部が雨となり湿性沈着すると考える。



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

・ Franco and Trapp (2010)[1]及び Trapp et al. (2010)[2]では、各媒体中濃度は、非解離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、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。

・ 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。大気の構成要素ごと（空気（*aa*）、粒子固体（*aps*）、粒子水分（*apw*）及び雲（*ac*））の活量容量の計算には、Franco and Trapp (2010)[1]の手法を用いる。

[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.
[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	$FP = \dfrac{CJ \times SP}{VPL + CJ \times SP}$	式 V-41
	$1 - FP = \dfrac{VPL}{VPL + CJ \times SP}$	式 V-42
	$FAA = \dfrac{1 - FP}{1 + \dfrac{RRT \times TRF}{V_{rain} - TRF}}$	式 V-45
	$FAP = \dfrac{FP}{1 + \dfrac{RRT \times TRF}{V_{rain} - TRF}}$	式 V-46
解離性モデル	$FP = \dfrac{Bx_{aps} + Bx_{apw}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw}}$	式 X-51
	$1 - FP = \dfrac{Bx_{aa}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw}}$	式 X-52
	$FAA = \dfrac{Bx_{aa}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw} + Bx_{ac}}$	式 X-53
	$FAP = \dfrac{Bx_{aps} + Bx_{apw}}{Bx_{aa} + Bx_{aps} + Bx_{apw} + Bx_{ac}}$	式 X-54

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

・　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。

・　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。

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。	

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

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。	

・　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（$DEP_{dry_g_r}$）、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（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量（$DEP_{dry_p_s}$）を合計して求めている。

・　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	$DEP_r = DEP_{dry_g_r} + DEP_{dry_p_r} + DEP_{wet_g} + DEP_{wet_p}$	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。	

・ 従来の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気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	$R_{ag} = \dfrac{KG \times KASLSA + \dfrac{KG \times KASLSW}{HENRY}}{KG + KASLSA + \dfrac{KASLSW}{HENRY}}$	式 V-63
解離性モデル	$R_{ag} = \dfrac{KG \times KASLSA + \dfrac{KG \times KASLSW}{H_n \times \phi_{sw.n}}}{KG + KASLSA + \dfrac{KASLSW}{H_n \times \phi_{sw.n}}}$	式 X-61

・ 従来の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, 2010[2])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),

中物質量)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（雲体積あたりの雲中物質量)を求めるため、雲の体積分率（f_{ac})で除する。

・　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。	

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

・　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、10 年間の期間平均の土壌中濃度を推計している。

・　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。	

・　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とを仮定して、式 V-77～式 V-79 で推計している。

・　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

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。

・ *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* をあらかじめ展開した数式を示す。

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

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次速度定数 k_{soil})

・ 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、変換できる。本章では、表示の簡略化のため式 X-69 を用いる。

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

・　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 次速度定数（k_{sot}、k_{sro}、k_{sel}、k_{ser}、k_{srsup})を計算する。

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

・　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（$K_{soil\ water}$)を用いて求めている。

・　本章でも同様に、$K_{soil\text{-}water}$ を用いる。$K_{soil\ water}$ の推計には、土壌における質量分布比の推計と同様に、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 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かけのバルク活量容量の比を用いて計算する。

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

従来の暴露評価モデル	$K_{soil-water}=HENRY\times SOAF+SOWF+Koc\times OCsos\times DENsos\times(1-SOAF-SOWF)$	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)	$K_{soil-wate}=\dfrac{H_n\times\phi_{sw\,n}\times SOAF+\left(\dfrac{\phi_{sw\,n}}{\gamma_{s\,n}}+\sum_i\dfrac{\phi_{sw\,i}}{\gamma_{s\,i}}\right)\times SOWF+\left(\dfrac{Koc_n\times OC_{sp}\times\phi_{sp\,n}}{\gamma_{s\,n}}+\sum_i\dfrac{Koc_i\times OC_{sp}\times\phi_{sp\,i}}{\gamma_{s\,i}}\right)\times(1-SOAF-SOWF)\times\rho_{sp}}{\left(\dfrac{\phi_{sw\,n}}{\gamma_{s\,n}}+\sum_i\dfrac{\phi_{sw\,i}}{\gamma_{s\,i}}\right)}$	式 X-71

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）

・　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

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。

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

従来の暴露評価モデル	$C_{sea_man} = \dfrac{C_{river_man}}{DILUTION_{sea}}$	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。	

・　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*）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、水域の見かけのバルク活量容量と粒子吸着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	$FWS_{xm} = \dfrac{Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6})}{1 + Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6})}$	式 V-127
解離性モデル（*Koc* 又は *Kd* の実測値がある場合）	$FWS_{xm} = \dfrac{Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6}[mg \rightarrow kg])}{1 + Koc \times OC_{xep} \times (CW_{ss} \times 10^{-6}[mg \rightarrow kg])}$	式 X-95

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

・　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	$C_{sed_wet} = \dfrac{K_{susp-water}}{RHO_{susp}} \times C_{waterbody_env_ww} \times 1000$	式 V-133
	$C_{sed_dry} = C_{sed_wet} \times conv_{susp}$	式 V-135
	$conv_{susp} = \dfrac{RHO_{susp}}{Fsolid_{susp} \times RHO_{solid}}$	式 V-136
解離性モデル	同式を使用。	

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

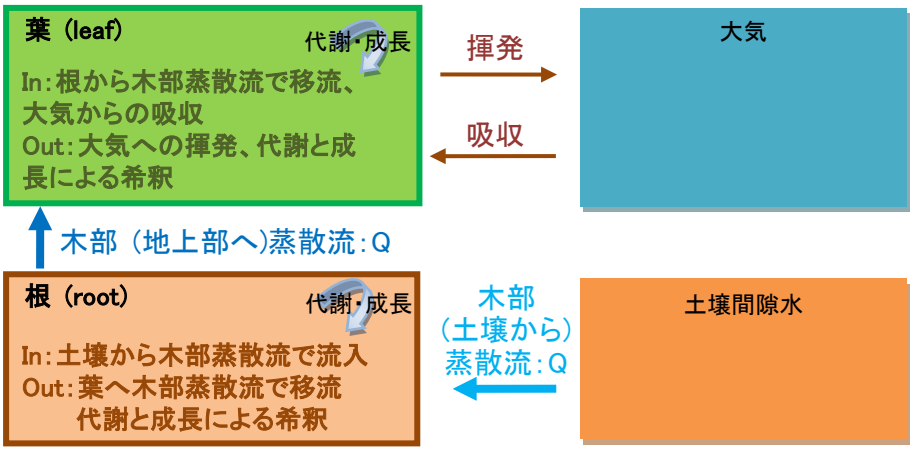
(2) 農作物中濃度推計式の設定経緯

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。

- Trapp は、「Plant Contamination」（Trapp and Mc Farlan, 1995[1])を初めとする植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（Trapp, 2013a[2])他、各種情報を公開している。Trapp の植物モデルは、EU のリスク評価ツールの EUSES (European Union System for the Evaluation of Substances) 等にも採用されている。
- 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、その基本的な考え方（Trapp, 2004[4])や根モデル（Trapp, 2000[5])については論文が発表されている。さらに、これらのモデルの Microsoft ® Excel ファイル版（Trapp, 2013b[6])を公開している。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、不明な箇所は論文（Trapp, 2000[5])やサマースクールのテキスト（Trapp, 2013a[2])と Excel ファイル（Trapp, 2013b[6])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計算結果にできる限り近づけた。
- 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。

[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 Tansport 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),

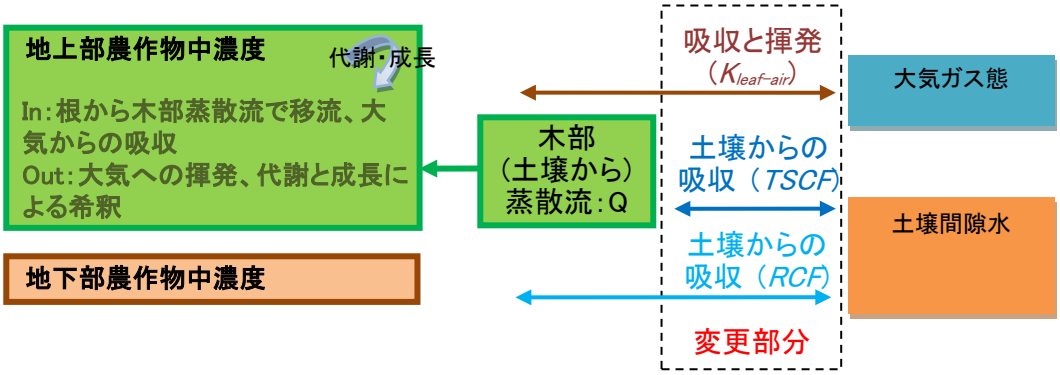


図表 X-29　Trapp による解離性物質の植物モデルイメージ図

・ 従来の暴露評価モデルでは、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）。
・ 従来の暴露評価モデルでは、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, 1995[3]）。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す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($K_{leaf\text{-}air}$)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、$K_{leaf\text{-}air}$、*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.

・ 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ったため、本章では代謝・成長による影響は考慮しない。

・ 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根-土壌間隙水分配係数（$K_{root\text{-}sw}$）になる。

・ *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（$K_{root\text{-}sw}$）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（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 *logPow* に対して設定する下限及び上限の範囲となる。

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≦logPow＜2 のとき、 $RCF = 10^{0.77 \times \log Pow - 1.52} + 0.82$	式 V-99
	2≦logPow≦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

・ Trapp (2009)[1] には、根-土壌間隙水分配係数（$K_{root\text{-}sw}$）は定義されていないが、Trapp (2013b)[3]による根-土壌間隙水分配係数（$K_{root\text{-}sw}$）推計式は、Trapp (2009)[1] の根中濃度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、細胞質と液胞からなると仮定されており、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).

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は、それぞれ細胞質-土壌間隙水分配係数（$K_{cytosol\text{-}sw}$）と液胞-土壌間隙水濃度（$K_{vacuole\text{-}sw}$）である。

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

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

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)大気中の粒子吸着態物質の沈着による地上部農作物中濃度）

・ 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る。

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

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)大気中のガス態及び土壌由来の地上部農作物中濃度）

・ 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。

・ 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。

・ 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、両者の違いは、大気でのガス態の化学物質の葉・茎への濃縮係数（$K_{leaf\text{-}air}$）及び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.

・ *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（$K_{xylem\text{-}sw}$）を推計する過程で使用する脂質-水分配係数（$Klipid_{xm}$）の推計式（式 X-89 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	$C_{ag_gas_r}$ および $C_{grass_gas_r}$ $= \dfrac{\left(\dfrac{C_{air_g} \times g_{plant} \times Area_{plant}}{V_{leaf} \times BD_{plant}} + \dfrac{C_{porewater} \times 1000[L/m^3] \times TSCF \times Qtransp}{V_{leaf} \times BD_{plant}}\right)}{\dfrac{Area_{plant} \times g_{plant}}{K_{leaf-air} \times V_{leaf}} + \lambda_E + \lambda_G} \left\{1 - e^{-\left[\left(\frac{g_{plant} \times Area_{plant}}{K_{leaf-air} \times V_{leaf}} \quad \lambda_E \quad \lambda_G\right) \times 60\right]}\right\} \times VG_{ag}$	式 V-112
	$C_{air_g} = \dfrac{rainyday}{365} \times C_0(1.5) \times K_{dep_r} \times FAA + (1 - \dfrac{rainyday}{365}) \times C_0(1.5) \times K_{dep_s} \times (1 - FP)$	式 V-113
解離性モデル	同式を使用。	

・ 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、大気中のガス態物質の葉・茎への濃縮係数（$K_{leaf\text{-}air}$）及び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*）の推計式を導出した。

・ 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定している。しかし、従来の暴露評価モデルでは、EUSES[3]の様に、Trapp and 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の葉・茎への濃縮係数（$K_{leaf\text{-}air}$）を推計している（式 V-114）。

・ 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, 1995[4]）ことからも、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	$K_{leaf-air} = FPA + \dfrac{K_{plant-water}}{K_{air-water}}$	式 V-114
	$K_{plant-water} = FPW + FPLPD \times \left(10^{\log Pow}\right)^b$	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: chapterIII 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.

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

従来の暴露評価モデル	-0.5＜logPow＜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

⑤ 植物体内分配係数（X.3.1.2 (7)④植物体内分配係数）

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

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

・ 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いて計算している。

・ 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、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、イオン種の拡散フラックスを Nernst 式に基づいて推計している。

・ 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。

・ 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-細胞質分配係数の推計に、Trapp (2009)[1]による式を用いる。

[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	$K_{in-out} = \dfrac{E_{(in)-out}}{E_{in-(out)}}$	式 X-78
	$E_{(in)-out} = MTC_{membrane\ n} \times G_{out\ n} + MTC_{membrane\ i} \times \dfrac{N_{in-out}}{\left(\exp\left(N_{in-out}\right)-1\right)} \times G_{out\ i}$	式 X-79
	$E_{in-(out)} = MTC_{memnbrane.n} \times G_{in.n} + MTC_{membrane.i} \times \dfrac{N_{in-out}}{\left(\exp\left(N_{in-out}\right)-1\right)} \times \exp\left(N_{in-out}\right) \times G_{in.i}$	式 X-80

・ 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 *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 $\log Pow_n$ 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 として、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	$MTC_{cell\ n} = \dfrac{1}{\dfrac{1}{MTC_{biomembrane\ n}} + \dfrac{1}{MTC_{cellwall}}}$	式 X-81
	$MTC_{cell\ i} = \dfrac{1}{\dfrac{1}{MTC_{biomembrane\ i}} + \dfrac{1}{MTC_{cellwall}}}$	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

・ Nernst 式の数（$Nx\text{-}x$）は、媒体間の電位差（$El_{x\text{-}x}$）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	$N_{x-x} = \dfrac{z \times El_{x-x} \times F}{R \times T}$	式 X-85

・ Trapp (2009)[1] では、非解離種の活量（Act_n）を総濃度（$Ctotal$）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（$Ctotal$）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	$G_{xm\,n} = \dfrac{1}{\dfrac{W_{xm}}{\gamma_{xm\,n}} + \dfrac{Klipid_{xm\,n}}{\gamma_{xm\,n}} + \left(W_{xm} + Klipid_{xm\,i}\right)\dfrac{\phi_{xm\,i}}{\gamma_{xm\,i} \times \phi_{xm\,n}}}$	式 X-86
	$G_{sw\,n} = \dfrac{1}{\left(\dfrac{1}{\gamma_{s\,n}} + \dfrac{\phi_{sw\,i}}{\gamma_{s\,i} \times \phi_{sw\,n}}\right)}$	式 X-87
	$G_{x\,i} = G_{x\,n} \times \dfrac{\phi_{x\,i}}{\phi_{x\,n}}$	式 X-88

・ 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 aicd、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 $\log Pow_n$ 及び $\log Pow_i$ 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 として、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	$Klipid_{xm\,n} = L_{xm} \times \left(10^{\log Pow_n}\right)^b$	式 X-89
	$Klipid_{xm,i} = L_{xm} \times \left(10^{\log Pow_i}\right)^b$	式 X-90

⑥ 植物体内の器官や組成間の電位差（$El_{x\text{-}x}$)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（$El_{x\text{-}x}$)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（$El_{x\text{-}x}$)[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-土壌間隙水分配係数（$K_{root\text{-}sw}$)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($K_{leaf\text{-}air}$)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-水分配係数（$Klipid$)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, 2007[2])。U.S. EPA (2005)の HHRAP[3]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、HHRAP[3] 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.

2004[1])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ないとしている。

・ 本章でも、HHRAP[2]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})を推計する。

(4) 環境中 pH の設定

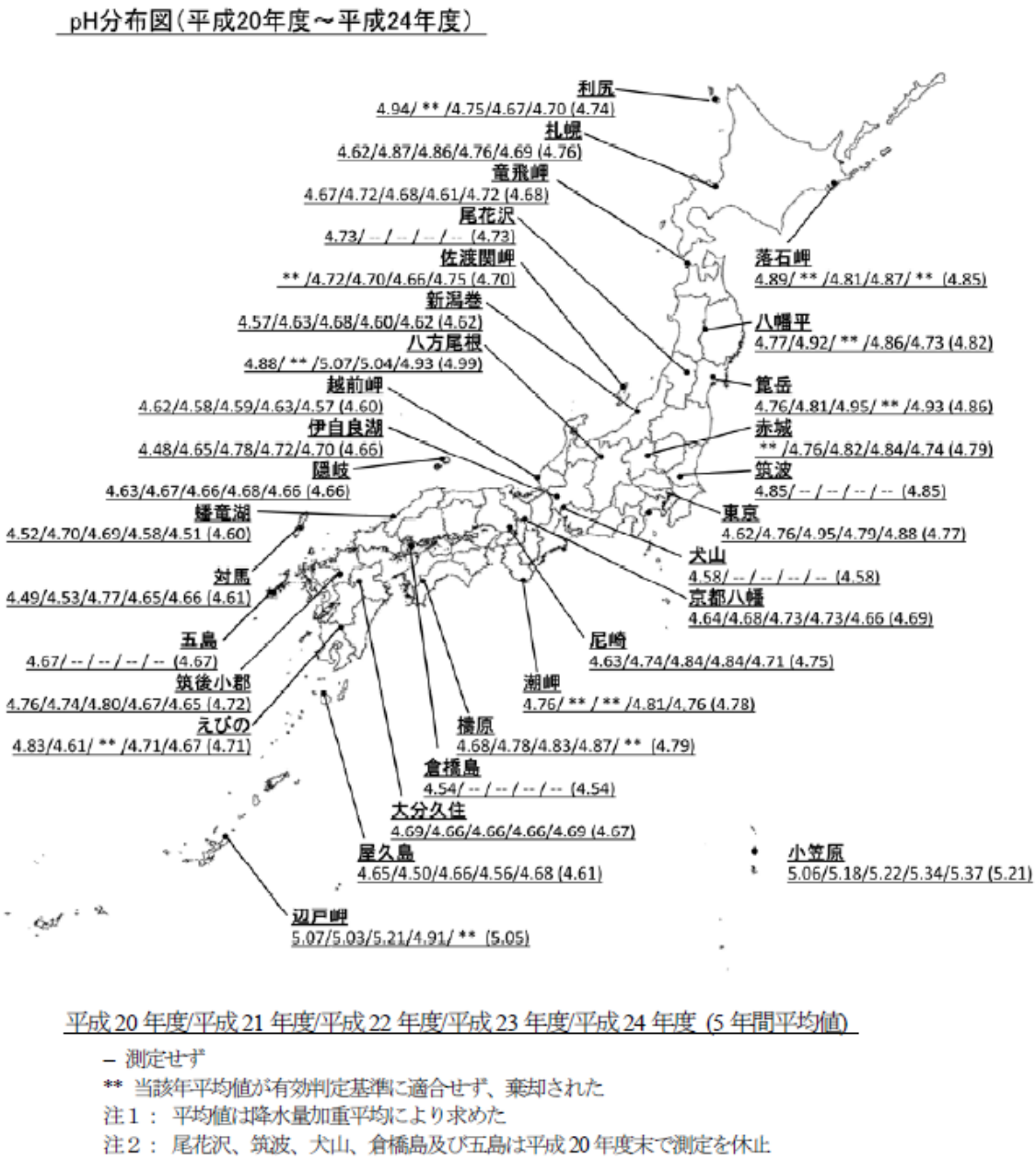
ここでは、化学種分率（ϕ)の計算（式 X-34～式 X-43)に用いる環境媒体中の構成要素の水（xew)の pH_{xew}（図表 X-15)を設定するため、我が国における環境媒体（降水、土壌、淡水、海水)中の pH のモニタリングデータなどをまとめる。

① 我が国の降水の pH モニタリングデータ

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 をモニタリングしていている。

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 であった。

[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) Humam 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)

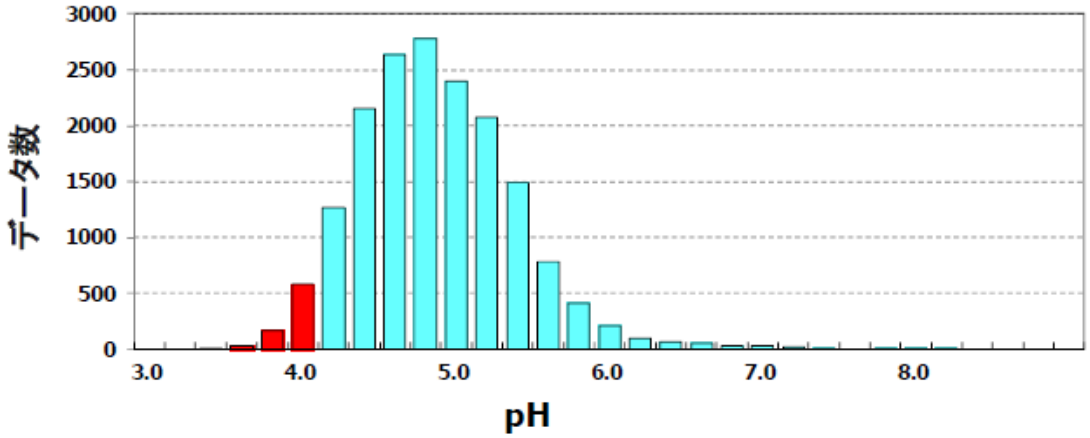


図表 X-33　全国の降水の pH モニタリング結果

環境省（2016）[1]14 ページの図 3-1-1 から転載

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。

[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）[1] 53 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が、年間平均の pH 測定結果を参考にす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（H_2O)を用いた測定の他、KCl 水溶液を用いた pH があるが、ここでは、H_2O 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（H_2O)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 (H_2O)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 (H_2O)

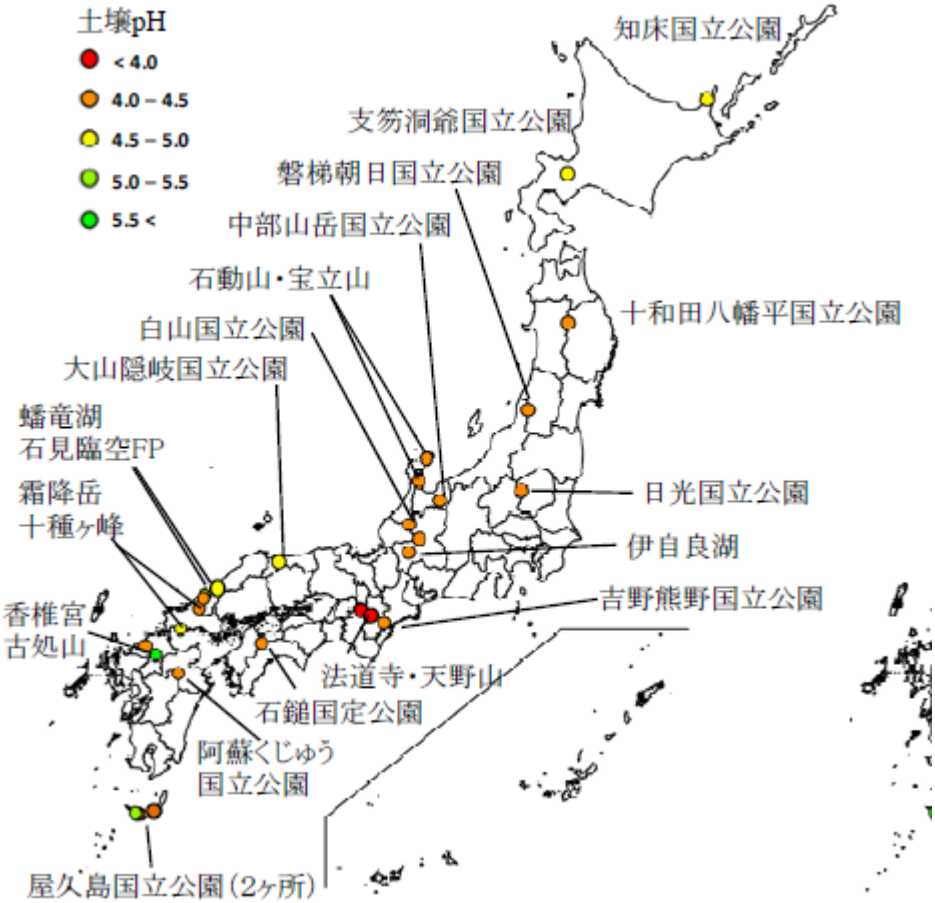
2　農業・食品産業技術総合研究機構　農業環境変動研究センター　土壌情報閲覧システム

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 岩屑土	.	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・灰褐系	5.8	5.8	.	.	5.8
13E 中粗粒灰色低地土・灰褐系	5.8	5.9	.	.	5.8
13F 礫質灰色低地土・灰褐系	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

4

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。



図表 X-36　全国の土壌表層の pH モニタリング結果

環境省（2016)[1] 6 4 ページの図 3-2-1 から引用

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 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（作土層における土地利用「全体」の pH 平均値 5.9)とする。

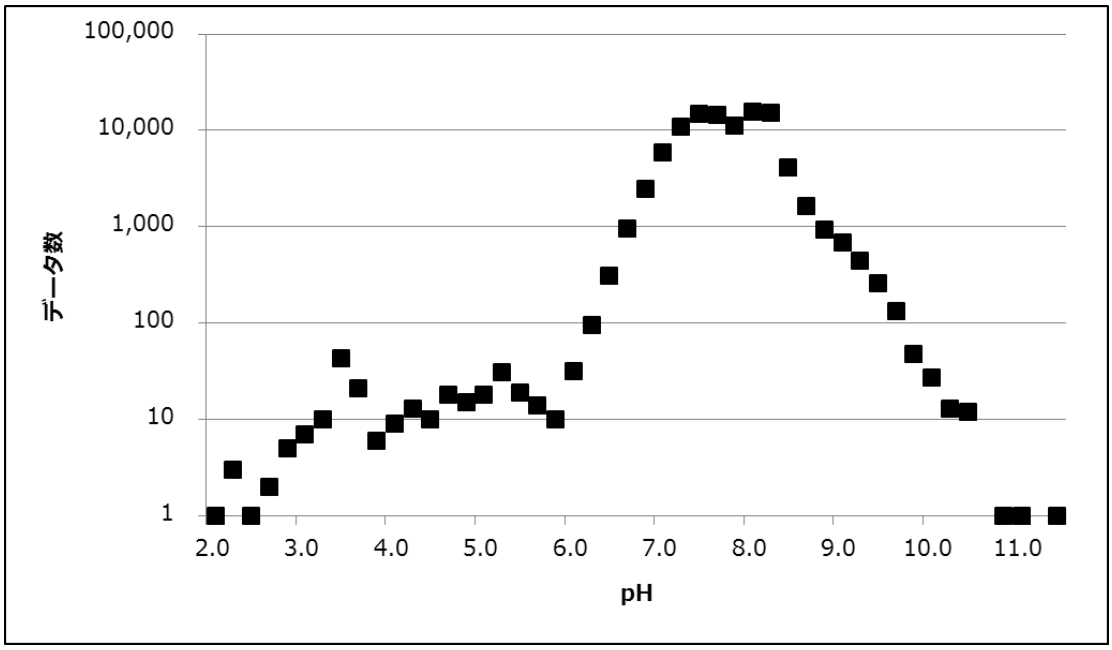
③ 我が国の表層水中 pH モニタリングデータ

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.

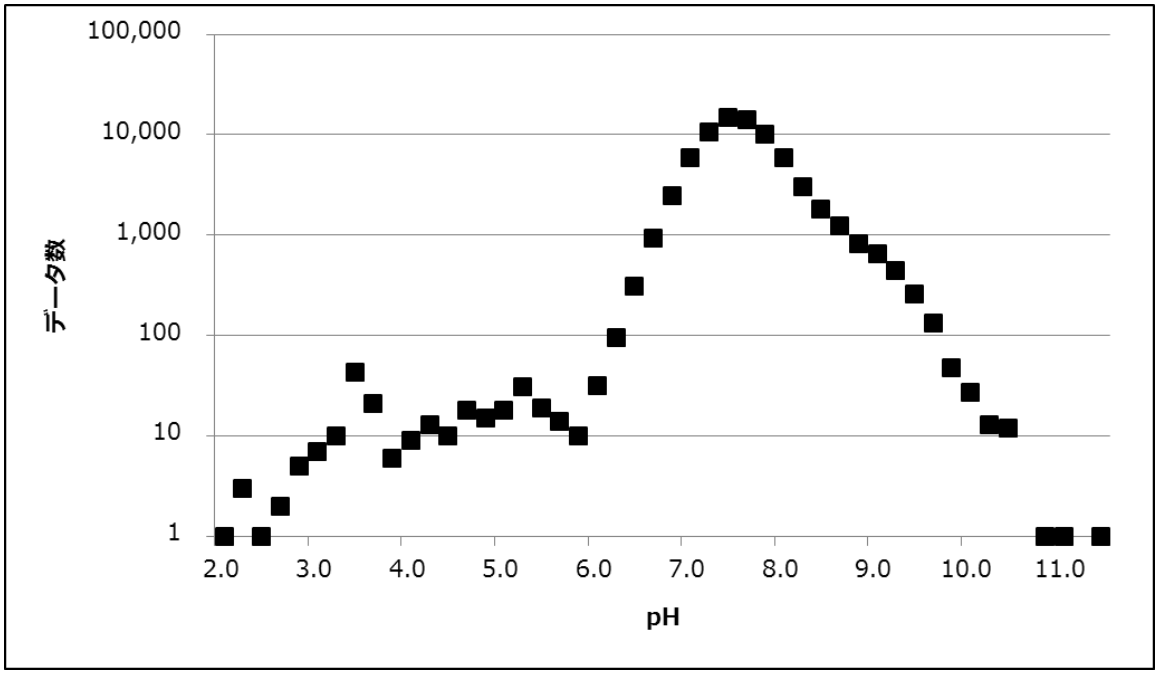
には、1981 年度～2009 年度における約 9,000 の全国 47 都道府県の公共用水域水質測定点における水質監視測定結果がまとめられている。ファイルは、年度別、都道府県別に構成されており、ここでは最新年度の 2009 年度における 47 都道府県のデータを対象に、公共用水域における pH 測定結果の概要をまとめる。

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 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、最大値は 11.4、最小値は 2.0 であった。



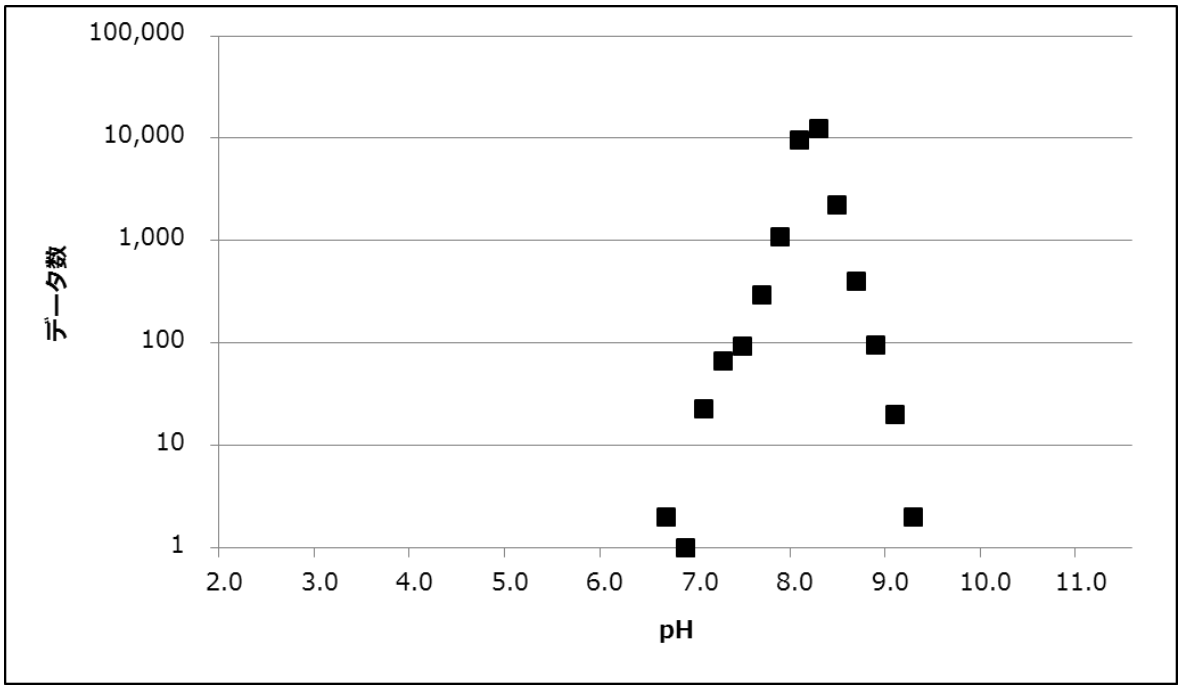
図表 X-37　公共用水域における pH 測定結果

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 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 であった。



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。



図表 X-39　公共用水域（海水）における pH 測定結果

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、最低地点で 5.30、最高地点で 7.25 であった。

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、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）の pH は 8.2（公共用水域（海水）の pH 平均値 8.2）とする。

④ 既存の試験法で規定されている pH

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、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。

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。

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、試験液の pH を 4.0、7.0 及び 9.0 としている。

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、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 の OPPTS　835.1220[2]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.

OECD (2000)の試験ガイドライン No106[1]で規定されている土壌と下水場の処理槽内の pH 5.5～7.5 の範囲内である。

X.4 出典

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

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 Manag. Sci., 13(5), 495–504.

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.

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.

EC (2008) EUSES 2.1 Background Report: Chapter III Model Calculations. (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)

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

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

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

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

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

(https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/5587/5/5/2, 2017/1/17 アクセス)

Franco, A. (2010) Multimedia Activity Model for organic neutral and Ionizable chemicals (Microsoft ® Excel ファイル), (https://homepage.env.dtu.dk/stt/Homepage%20anf/Website.htm, 2017/5/22 アクセス)

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.

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.

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

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

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.

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.

HHRAP : U.S.EPA (2005) Human Health Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities Final. EPA530-R-05-006. (https://www.weblakes.com/products/iraph/protocol.html, 2016/12/13 アクセス)

Junge, C.E. (1977) Basic Considerations About Trace Constituents in the Atmosphere as Related to the Fate of Global Polluntants. In: Suffet, I. H. (ed.) Fate of Pollutans in the Air and Water Environments Part 1, John Wiley and Sons, New York, 7-25.

Kah, M. and Brown, CD. (2008) LogD: Lipophilicity for Ionisable Compounds.

Chemosphere, 72(10), 1401–8.

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

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.

NIST, Reference on Constants, Units and Uncertanity, Fundamental Physical Constants, Faraday Constant.
(http://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?f, 2016/12/13 アクセス)

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).
(http://www.nite.go.jp/chem/qsar/category_approach.html, 2016/12/13 アクセス)

OECD (1995) TG 105: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Water Solubility. No. 105.
(http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-105-water-solubility_9789264069589-en, 2016/12/13 アクセス)

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

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

OECD (2004) TG 117: OECD Guideline for Testing of Chemicals - Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method. No.117.
(http://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-117-partition-coefficient-n-octanol-water-hplc-method_9789264069824-en;jsessionid=2l2ciroq0888a.x-oecd-live-03, 2016/12/13 アクセス)

Rikken M.G.J. and Lijzen J.P.A. (2004) Update of Risk Assessment Models for the Indirect Human Exposure, RIVM reports 601516011.

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.

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.

Sabljić, 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.

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

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.

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

Trapp S. (2004) Plant Uptake and Tansport Models for Neutral and Ionic Chemicals. Environ. Sci and Pollut. Res., 11(1), 33–39.

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

Trapp, S. (2013a) Uptake of Organic Chemicals into Plants Models, Equations and Exercises.
(http://homepage.env.dtu.dk/stt/PhD course 2013website/index.htm (Script) , 2016/12/13 アクセス)

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

(http://homepage.env.dtu.dk/stt/PhD course 2013website/index.htm, 2016/12/13 アクセス)

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

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.

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

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

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

U.S. EPA (1996) Product Properties Test Guidelines: OPPTS 830.7860 Water Solubility (Generator Column Method).
(https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-830-product-properties-test-guidelines, 2016/12/13 アクセス)

U.S. EPA (1998a) Fate, Transport and Transformation Test Guidelines: OPPTS 835.1220 Sediment and Soil Adsorption/Desorption Isotherm.
(https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-835-fate-transport-and-transformation-test, 2016/12/13 アクセス)

U. S. EPA (1998b) Product Properties Test Guidelines: OPPTS 830.7840 Water Solubility: Column Elution Method; Shake Flask Method.
(https://www.epa.gov/test-guidelines-pesticides-and-toxic-substances/series-830-product-properties-test-guidelines, 2016/12/13 アクセス)

U. S. EPA (2012) Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11.
(https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface, 2016/12/13 アクセス)

van Beelen, P. (1998) Environmental Risk Evaluation of Difficult Substances in USES

2.0. RIVM report 679102045.

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.

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.

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）. (http://www.env.go.jp/air/acidrain/monitoring/rep3.html, 2016/12/13 アクセス)

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) . (http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/todoke/shinki/140630_logD.pdf, 2016/12/13 アクセス)

国立環境研究所　環境数値データベース. (http://www.nies.go.jp/igreen/, 2016/12/13 アクセス)

日本化学会（2004）化学便覧 改訂５版 基礎編. 丸善

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. (http://agrimesh.dc.affrc.go.jp/soil_db/index.phtml, 2016/12/13 アクセス)

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.

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