

横浜国立大学公開講座2010

# 化審法におけるリスク評価 準備/情報収集・識別・データ選定等

2010年10月22日

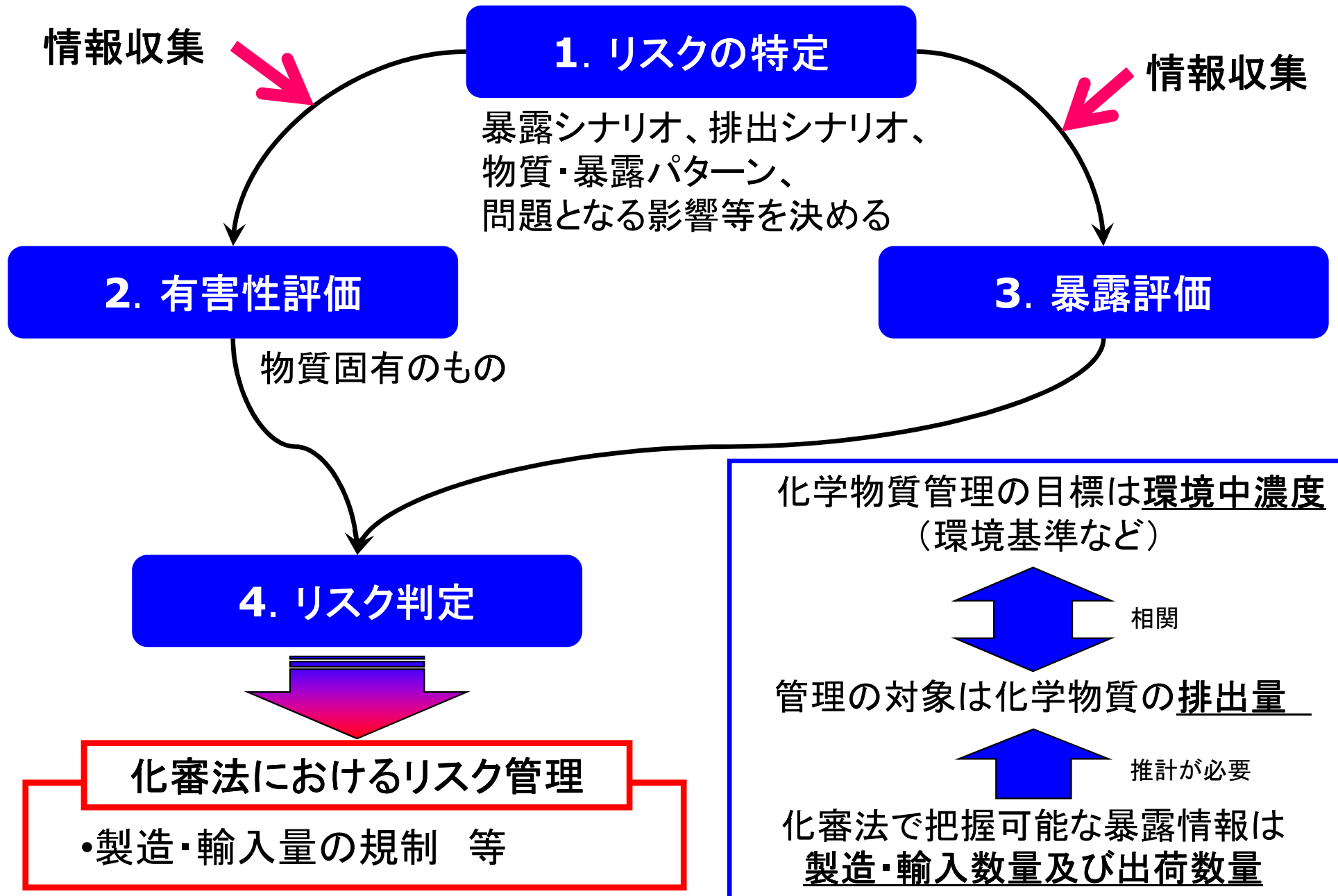
独立行政法人 製品評価技術基盤機構

化学物質管理センター 山田 亜矢

# Contents

1. リスク評価とその準備など
2. リスク評価(一次)評価 I における準備
  - 製造・輸入数量等の届出情報
  - 性状の情報
3. 信頼性評価
4. リスク評価(一次)評価 I における性状データの選定
5. 物理化学的性状のこと・・・

# リスク評価とリスク管理



# なぜリスク評価に準備が必要なのか

平成23年4月1日に施行される化審法に基づき、国は

1. 一般化学物質に対するスクリーニング評価
2. 優先評価化学物質に対するリスク評価

を実施する予定。

科学的かつ客観的な手法に基づくリスク評価を実施することにより、さらなる措置(有害性調査指示等)を講じる必要があるかどうかを判断する

- ◆物質間で一律な評価(統合的な評価)である
- ◆運用面においても効率的かつ効果的に実施可能である

リスク評価に必要な有害性データ等の保有状況は物質によって異なっている

今までの化審法の規制対象とは異なる物質単位での届出

準備

- ① リスク評価に必要なデータの収集
- ② 評価対象物質の識別
- ③ リスク評価に用いるデータの選定

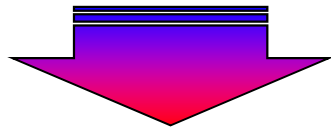
相互が  
作用し合う

# リスク評価に必要な情報とは

## リスク評価に必要な情報 (第13回日本水環境学会シンポジウム講演集 p96-97)

人間の健康リスク評価に関して

- 1) 評価対象とする化学物質
- 2) 毒性の種類(作用部位と損傷の型)
- 3) 毒性の発現する曝露条件(量、時期、持続時間、経路)
- 4) 評価対象とする集団(地域、年齢、性別、特性)
- 5) 評価対象集団の曝露条件(量、時期、持続時間、経路)



## 化審法におけるリスク評価(一次)評価 I 段階では?

- 1) **評価対象物質を識別する**
- 2)、3) **有害性情報**

人健康→一般毒性(反復投与毒性)、生殖発生毒性、変異原性、発がん性

生態毒性→藻類・甲殻類・魚類に対する急性・慢性毒性

→ 詳しくは第4週(11月2日) 有害性評価へ

- 4) 曝露集団については、第4週(11月2日) 曝露評価へ

- 5) **製造・輸入数量** → 排出量

**物理化学的性状・分解性・蓄積性** → 排出量・曝露濃度等

→ 詳しくは第4週(11月2日) 曝露評価へ

# リスク評価(一次)評価 I における準備

## 対象物質:優先評価化学物質

### ● 製造数量等の届出情報

本編 p61-  
付属書 p1-

- 化審法第9条に基づき、優先評価化学物質を製造又は輸入した者により届け出られる

### → 1.評価対象物質の「すそ切り」

本編 p69-

製造数量+輸入数量の合計値 $\leq$ 10トンの物質は評価対象外

「10トン」化審法第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

- 環境省が実施している黒本調査において調査対象とされた物質に関して、製造・輸入数量が10トン未満の物質に検出実績がない(昭和49年度~)

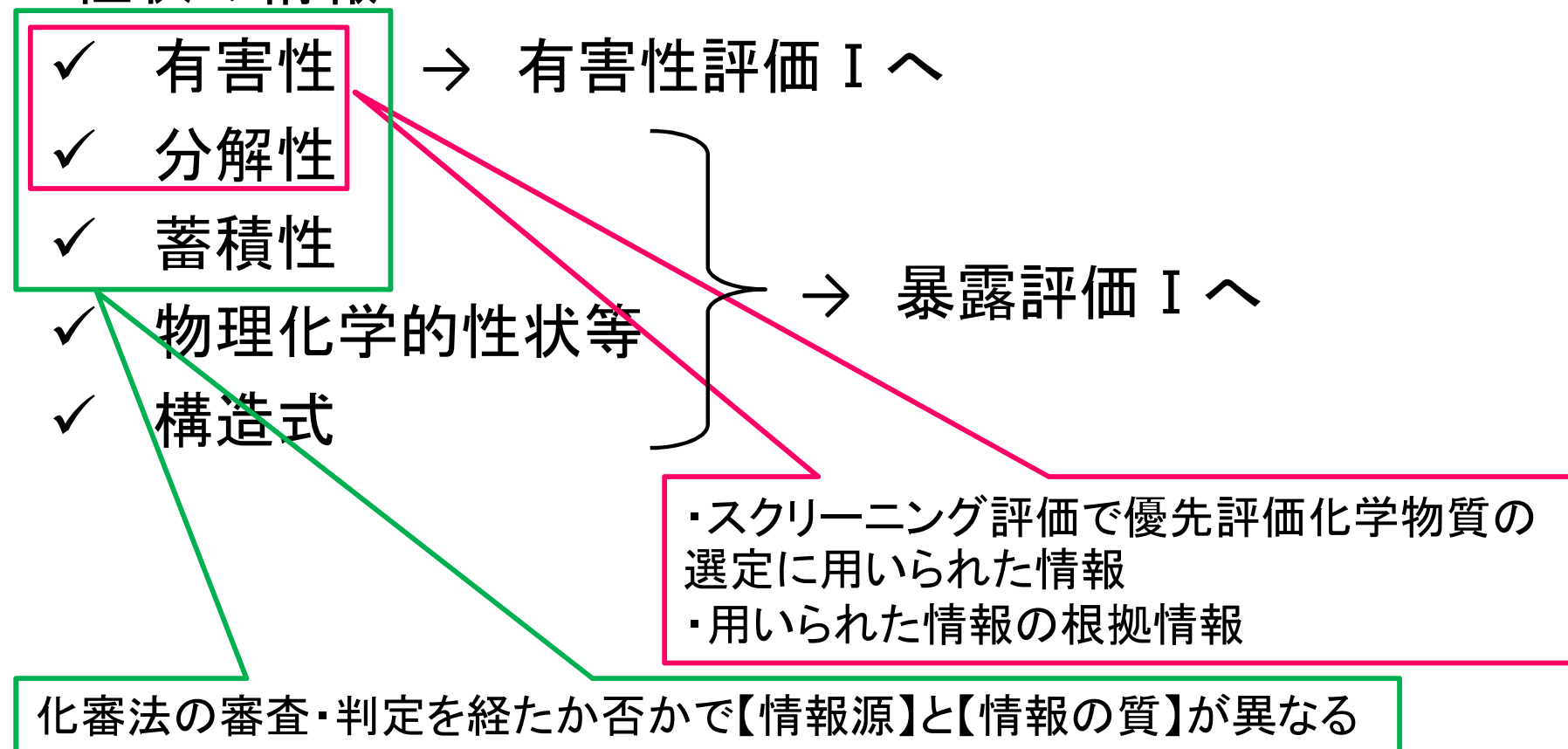
### → 2.暴露評価における排出量推計

本編 p122-

# リスク評価（一次）評価 I における情報収集

製造数量＋輸入数量の合計値＞10トンの物質について収集

## ● 性状の情報



審査・判定を経ていない物質  
 →使用可否基準に沿った各種既存情報

# 分解性・蓄積性・有害性の項目

		試験項目等(例)
分解性		微生物等による化学物質の分解度試験
蓄積性		魚介類の体内における濃縮度試験、1-オクタノールと水との間の分配係数測定試験
人健康	一般毒性(反復投与毒性)、生殖発生毒性	ほ乳類を用いる28日間・90日間の反復投与毒性試験、反復投与毒性・生殖毒性併合試験、経口投与簡易生殖試験、一世代生殖試験
	変異原性	細菌を用いる復帰突然変異試験(Ames試験)、ほ乳類細胞を用いる染色体異常試験、マウスリンフォーマTK試験、小核試験、変異原性クラス
	発がん性	国際機関(IARC、産業衛生学会、ACGIH、US.EPA、NTP、EU)による発がん性分類、発がん性クラス
生態	急性毒性	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
	慢性毒性	藻類生長阻害試験、ミジンコ繁殖試験、魚類初期生活段階毒性試験



# 物理化学的性状等の項目

項目
1-オクタノールと水の分配係数(logKow)
分子量
沸点
融点
蒸気圧
水溶解度
酸解離定数(pKa)
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)
ヘンリー則定数
構造式

# 化審法の審査・判定を経た物質の情報

## 「難分解性」と判定されたもの

	新規化学物質由来	既存化学物質由来	PRTR・MSDS対象由来
分解性	審査情報と判定結果 ・3省DB	既存点検情報と判定結果 ・JECDB ・J-CHECK	審査情報又は既存点検情報と判定結果
蓄積性			PRTR対象物質の指定根拠の有害性情報 ・PRTR・MSDS対象物質ハザードデータ
有害性			

## 「良分解性」と判定されたもの

	「良分解性」と判定されたもの
分解性	審査情報又は既存点検情報と判定結果 ・3省DB ・J-CHECK
蓄積性	使用可否基準に合致した各種の既存情報
有害性	

# 化審法の審査・判定を経た物質の情報1

## ● 新規化学物質由来

### 【3省共同化学物質データベース(3省DB)】(非公開)

- 厚生労働省、経済産業省、環境省及びNITEにより過去に個々に蓄積されてきた化審法審査情報を一元的に管理し、情報の共有化、審査の効率化を行うことを目的としている非公開データベース。化審法の試験法通知に基づきGLP制度によって実施されている。

- ✓ 分解性
  - ✓ 蓄積性
  - ✓ 反復投与毒性
  - ✓ 変異原性
  - ✓ 生態毒性
- } 「スクリーニング毒性に関する試験」

# 化審法の審査・判定を経た物質の情報2

## ● 既存化学物質由来

【既存化学物質毒性データベース (JECDB)】[http://dra4.nihs.go.jp/mhlw\\_data/jsp/SearchPage.jsp](http://dra4.nihs.go.jp/mhlw_data/jsp/SearchPage.jsp)

- 国立医薬品食品衛生研究所が厚生労働省からの委託を受けて管理。OECDのテストガイドラインに準拠して実施された既存化学物質の試験報告が格納。以前「化学物質毒性試験報告」(緑本)として発刊。
  - ✓ 反復投与毒性
  - ✓ 生殖発生毒性
  - ✓ 変異原性

【化審法データベース (J-CHECK)】<http://www.safe.nite.go.jp/jcheck/Top.do>

- 厚生労働省、経済産業省、環境省が化学物質の安全性情報を広く国民に発信するために作成。既存化学物質の安全性点検データ(分解性・蓄積性)、生態影響試験結果、ジャパンチャレンジプログラムデータを提供。
  - ✓ 分解性
  - ✓ 蓄積性
  - ✓ 生態毒性

# 化審法の審査・判定を経た物質の情報3

- PRTR・MSDS対象物質由来

- 化管法対象であり、その有害性データに基づき、第二・第三種監視化学物質に選定された物質

## 【PRTR・MSDS対象物質ハザードデータ】

- NITEのCHRIP (<http://www.safe.nite.go.jp/japan/db.html>) 内にある。

- 反復投与毒性又は生殖発生毒性
  - ✓ 経口慢性毒性
  - ✓ 吸入慢性毒性
  - ✓ 作業環境許容濃度
  - ✓ 生殖／発生毒性
- 発がん性クラス
- 変異原性クラス
- 生態毒性

# 化審法に基づく有害性情報の報告等

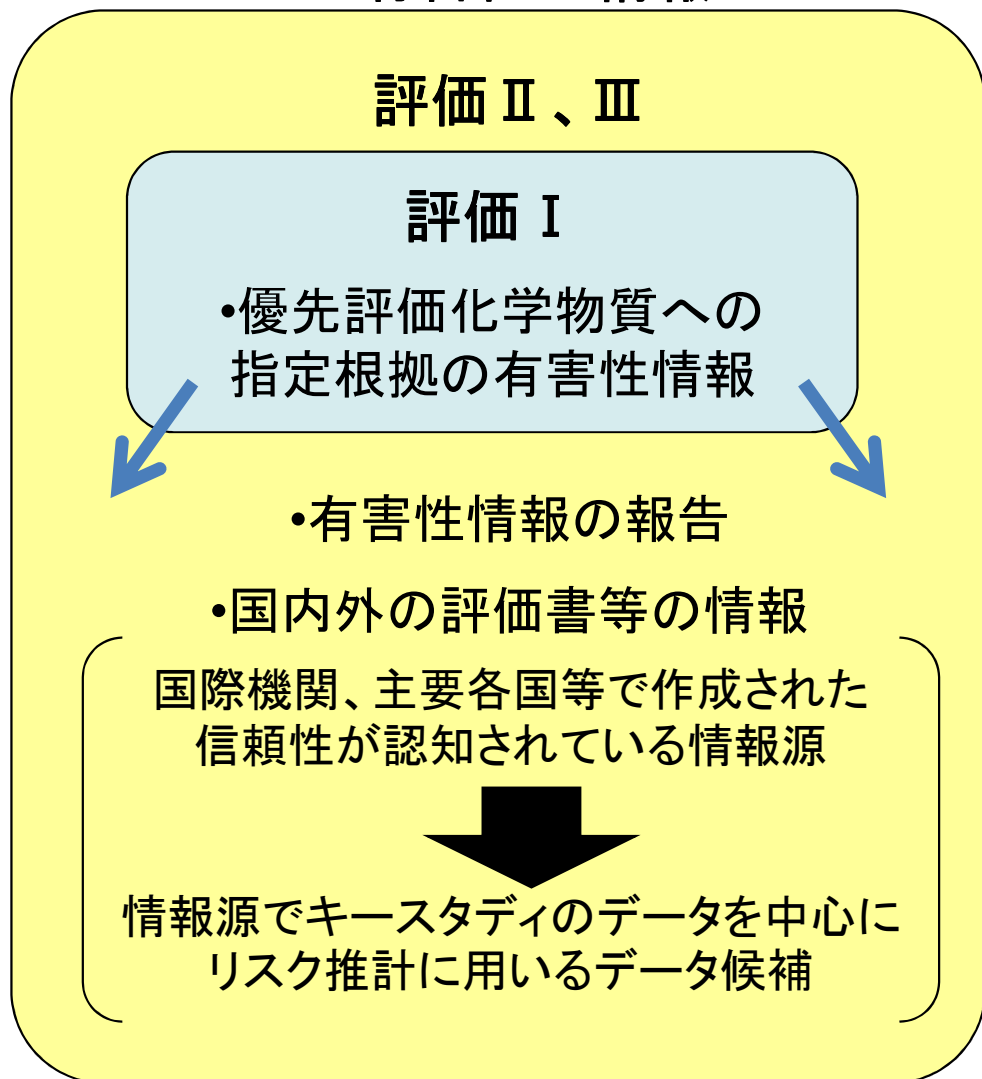
- 第41条第1項に基づき、優先評価化学物質、監視化学物質、第二種特定化学物質又は一般化学物質を製造又は輸入した者により報告される
  - 環境中運命(logKow、生分解性、生物濃縮性)
  - 有害性情報(SIDS項目)
- 第41条第3項に基づき、優先評価化学物質、監視化学物質又は第二種特定化学物質を製造又は輸入した者により報告される
  - 物理化学的性状(SIDS項目)
  - 環境中運命(SIDS項目)
  - 有害性情報(SIDS項目)

## SIDS項目

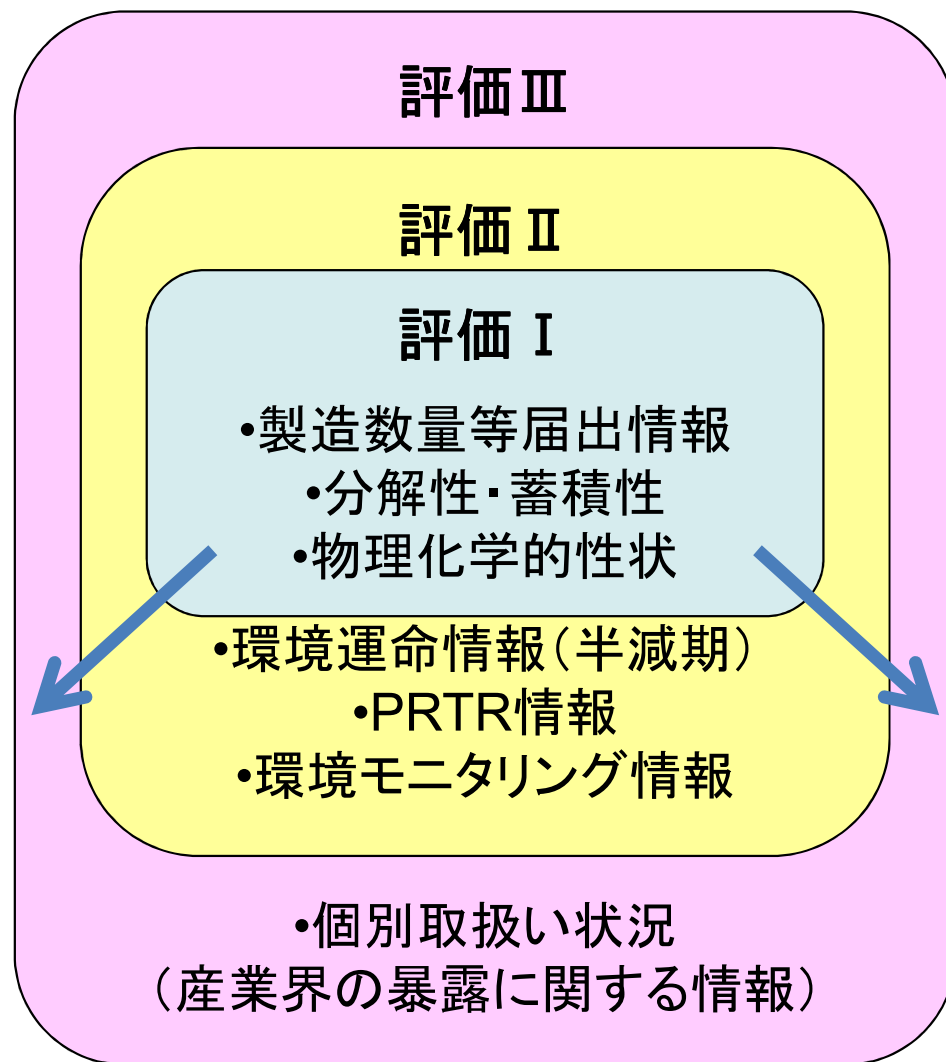
- 物理化学的性状
  - 沸点、融点、蒸気圧、logKow、水溶解度、解離定数
- 環境中運命
  - 光分解性、加水分解性、大気・土壌・底質・土壌にかかる分配係数、生分解性、生物濃縮性
- 有害性情報
  - 魚類に対する急性・慢性毒性、水生の無脊椎動物に対する急性・慢性毒性、水生の植物に対する毒性、鳥類の繁殖に及ぼす影響、底生生物に対する毒性
  - 生体内運命、薬理学的特性、反復投与毒性、慢性毒性、変異原性、がん原性、催奇形性、生殖能及び後世代に及ぼす影響、その他毒性学的に重要な影響

# 評価の段階で拡大される情報収集範囲(イメージ)

## 有害性の情報



## 暴露の情報



# 評価対象物質の識別

1. 分解生成物を含むか
2. 物質と性状情報の対応
3. 混合物等か
4. 環境分配モデル適用物質か



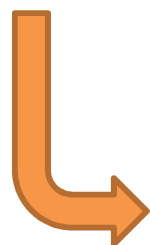
# 評価対象物質の識別

## 1. 評価対象物質が分解生成物を含むか否かの確認

【化審法の審査・判定で「難分解」の判定を受けたことのある物質】

- － 化審法において、分解生成物の性状によって、分解する前の化学物質（親化合物）が優先評価化学物質に指定されることがある

→ どの化学物質の性状によって、第4条第1項の判定がされたかを確認



- A) 親化合物のみでリスク評価を行う物質
- B) 1種類の分解生成物でリスク評価を行う物質
- C) 親化合物と分解生成物（複数の場合を含む）の両方でリスク評価を行う物質
- D) 複数の分解生成物でリスク評価を行う物質

	A)	B)	C)	D)
1. 優先評価化学物質が分解生成物を含むか否かの確認	<p style="text-align: center;"><b>親化合物</b></p>	<p style="text-align: center;">ただちに1種類の分解生成物に変化する</p> <p style="text-align: center;"> </p>	<p style="text-align: center;">分解生成物がある</p> <p style="text-align: center;"> </p>	<p style="text-align: center;">ただちに複数の分解生成物に変化する</p> <p style="text-align: center;"> </p>
リスク評価(一次)評価 I の対象物質	<p style="text-align: center;">親化合物のみでリスク評価を行う</p> <p style="text-align: center;"><b>親化合物</b></p>	<p style="text-align: center;">1種類の分解生成物のみでリスク評価を行う</p> <p style="text-align: center;">分解生成物</p>	<p style="text-align: center;">親化合物と分解生成物でリスク評価を行う</p> <p style="text-align: center;"><b>親化合物</b></p> <p style="text-align: center;">分1 分2</p>	<p style="text-align: center;">複数の分解生成物でリスク評価を行う</p> <p style="text-align: center;">分1 分2</p>

# 評価対象物質の識別

## 2. 評価対象物質と性状情報の対応の確認

### 【化審法の判定を経していない既存化学物質】

- 優先評価化学物質に指定された化学物質の区分と、有害性情報等の性状情報の化学物質の区分の対応が適切であるかを確認

→ 優先評価化学物質の区分のままではリスク評価が適切に行えないことがある

- [例]
- 混合物あるいは包括名称で括られたグループで指定されたが、指定後に一部の成分の性状の情報が得られ、その情報でグループ全体の評価を行うのが不適切と判明
  - 1つの化合物で指定されたが、指定後にその化合物を含む混合物の性状の情報が得られ、混合物としての評価を行う方が適切と判明

# 評価対象物質の識別

## 3.混合物等かの識別

名称に「混合物」又は「反応生成物」という用語を含む構造不定物質  
→ほとんど場合は有姿で有害性の試験を行っている

### ◆ 混合物

- 物質名に「混合物」と表記される。
  - 化合物名、構造が明確な2成分又は3成分の混合物であることが多い
    - ✓ 化合物名、構造が特定可能で、異性体の混合物である場合
      - 物性等は大きく違わないとの仮定の下、1成分(主成分が明確な場合は主成分)を代表成分として評価する
    - ✓ 主成分の構造が特定されない場合
      - 「構造不定物質」として評価する

### ◆ 反応生成物

- 「ある化合物と別の化合物の反応生成物」と表記される。
  - ✓ 名称中に主成分の記載があり、主成分とその構造が特定可能な場合
    - 主成分を代表成分として評価する
  - ✓ 主成分が単一でなく複雑な組成と考えられる
    - 「構造不定物質」として評価する

# 評価対象物質の識別

## 4.環境分配モデル適用物質かの識別

- 環境分配モデルへの適用可否について判定

### A) 環境分配モデル適用物質

- B)に属する物質群を除いた物質
- 非解離性の有機物質
- 構造不定物質

### B) 環境分配モデル適用外物質

- 塩類の金属イオン分
- 無機物質及び金属化合物
- 高分子化合物
- 界面活性作用のある物質
- 水と反応性の高い物質

## A)環境分配モデル適用物質

- B)に属する物質群を除いた物質で、基本的に化学構造が特定できる、ポリマーではない単一の非解離性の物質である
  - 物理化学的性状が測定可能又は予測可能な物質である
  - 大気、水、土壌及び底質への分配があると考えられる物質である
  - 蒸気圧がある程度ある物質である
- 環境分配モデル適用物質に必要な物理化学的性状について収集・選定

### 環境分配モデル適用物質に分類される物質

- 解離性の有機物質
  - 水中における酸解離定数(pKa)の値を確認し、logKowの補正を行うことで環境分配モデル適用物質として扱う。
- 構造不定物質
  - 主成分や構成成分が環境分配モデル適用物質に属する場合があります、推計暴露量がワーストとなるデフォルト値でリスク評価を行う。

## B)環境分配モデル適用外物質

- 環境分配モデルへの適用が不適切と考えられる物質を指し、単純希釈を想定する。
- 収集・選定する項目は蒸気圧、水溶解度、BCF  
 推定によるデータ補完は行わない

化学物質のグループ	以下の性状が測定もしくは定義できない			
	分子量	蒸気圧	水溶解度	logKow
塩類の金属イオン分*		■		■
無機物質、金属化合物				■
高分子化合物	■	■		■
水との反応性が高い物質、 界面活性作用がある物質			■	■

\*アニオン分が有機化合物であれば、アニオン分は環境分配モデル適用物質

# 信頼性評価



# 情報の質を表わす性状データの信頼性

OECD HPVマニュアル、Japanチャレンジを参考に設定

	信頼性スコア	定義
①	1 信頼性あり	化審法の試験通知又は国際的に認められたガイドラインの試験法による試験又はデータ
②	2A 信頼性あり (制限付き)	原著文献の確認等により、特定の試験指針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又はデータ
③	2B 信頼性あり (制限付き)	<u>信頼性の定まった情報源*</u> に収録されている試験又はデータ
④	2C 信頼性あり (制限付き)	<b>適用範囲の推定方法</b> による推定値 (蓄積性、物理化学的性状のみ該当)
⑤	3 信頼性なし	・原著文献の確認等により、試験に障害又は不適切な箇所があり、専門家の判断用として容認できない試験又はデータ ・実測値か推定値か不明
⑥	4 評価不能	十分な実験の詳細のない、短い要約又は二次的文献(本、レビュー等)にリストアップされているだけの試験又はデータ

\*ピアレビューされた情報源

例) PRTR・MSDS対象物質ハザードデータ、初期リスク評価書、環境省の環境リスク初期評価等

リスク評価(一次)評価Ⅰの段階でデータの精査は行わないが、  
評価Ⅱ以降の段階では必要性に応じて内容を精査し、信頼性スコア1や2Aを付与することがある

# 評価 I でデータ補完に用いる推定方法 (【信頼性スコア2C】のデータとして)

項目	推定方法	推定に必要な項目
BCF	回帰式	logKow
logKow	KOWWIN (EPI-Suite)	SMILES又はCAS No.
融点	MPBPWIN (EPI-Suite)	SMILES又はCAS No.
沸点	MPBPWIN (EPI-Suite)	SMILES又はCAS No.
蒸気圧	MPBPWIN (EPI-Suite)	SMILES又はCAS No.、融点、沸点
水溶解度	回帰式	logKow、融点、分子量
Koc	回帰式	logKow
ヘンリー則定数	①計算式 ②HENRYWIN (EPI-Suite)	①分子量、水溶解度、蒸気圧 ②SMILES又はCAS No.
pKa	SPARC	SMILES

適用範囲: **環境分配モデル適用物質**に分類されている物質

# 性状データの選定

(リスク評価(一次)評価 I)

# 評価 I における性状データの選定

## ■有害性

→第4週 11月2日

「化審法におけるリスク評価(有害性評価)」にて解説

## ■分解性

【使用可否基準】化審法の判定結果である

→用いるのは「難分解性／良分解性」の定性情報  
また、分解生成物の有無、分解生成物の構造

リスク評価(一次)評価 I での分解性の用途

- ✓排出係数の選択
- ✓評価対象物質の識別

✓分解性判定がある場合

- 試験データ
- 類推

✓分解性判定がない場合

- 使用可否基準を満たす情報がない
- 「難分解性」とする

## ■蓄積性

化審法では

- 分配係数測定試験により $\log K_{ow} < 3.5^*$ のとき、「高濃縮性でない」との判断がなされ、濃縮度試験を省くことができる。
- また、類推による「高濃縮性でない」との判断も認めている。  
→化審法の蓄積性判定を受けていても測定値のBCFが得られないことがある

\*昭和61年改正法における平成15年4月18日改正の判定基準までは、「3.0未満」であった

## ■生物濃縮係数 *BCF*

リスク評価(一次)評価 I でのBCFの用途

- ✓高蓄積性の疑いのある物質の抽出→有害性評価
- ✓BMFの選定→暴露評価
- ✓環境分配モデルのインプットデータ(魚介類摂取による人の暴露量推計のための魚中濃度の推計)  
→暴露評価

OECD TG 305 Bioconcentration: Flow-through Fish Test

# ■生物濃縮係数 BCF

## 想定されるBCFのデータパターン

### ✓化審法における蓄積性判定あり

➤ BCFあり

➤ BCFなし < 類推  
回帰式による推定値 (logKowが測定値) a.かb.

### ✓化審法における蓄積性判定なし

➤ BCFあり (OECD TG 305等)

➤ BCFなし — 回帰式による推定値 < logKowが測定値 a.かb.  
logKowが推定値 a.かc.

### 選定基準

信頼性スコアが同じ複数の選択可能な値がある場合、最大値を選択する。

構造不定物質と環境分配モデル適用外物質でBCFが得られない場合、化審法における「高濃縮性でない」の判定基準の一つである「濃縮倍率が1,000倍未満であること」から、BCF=1,000とする

## データ補完に用いる回帰式

**a.**  $\log BCF = 1.05 \times \log Kow - 1.71$

脂肪族、芳香族炭化水素、そのハロゲン化物で、logKowが測定値の場合。

**b.**  $\log BCF = 0.85 \times \log Kow - 0.70$

a.、c.に該当しない場合。

**c.**  $\log BCF = 1.03 \times \log Kow - 1.48$

脂肪族、芳香族炭化水素、そのハロゲン化物で、logKowが推定値の場合。

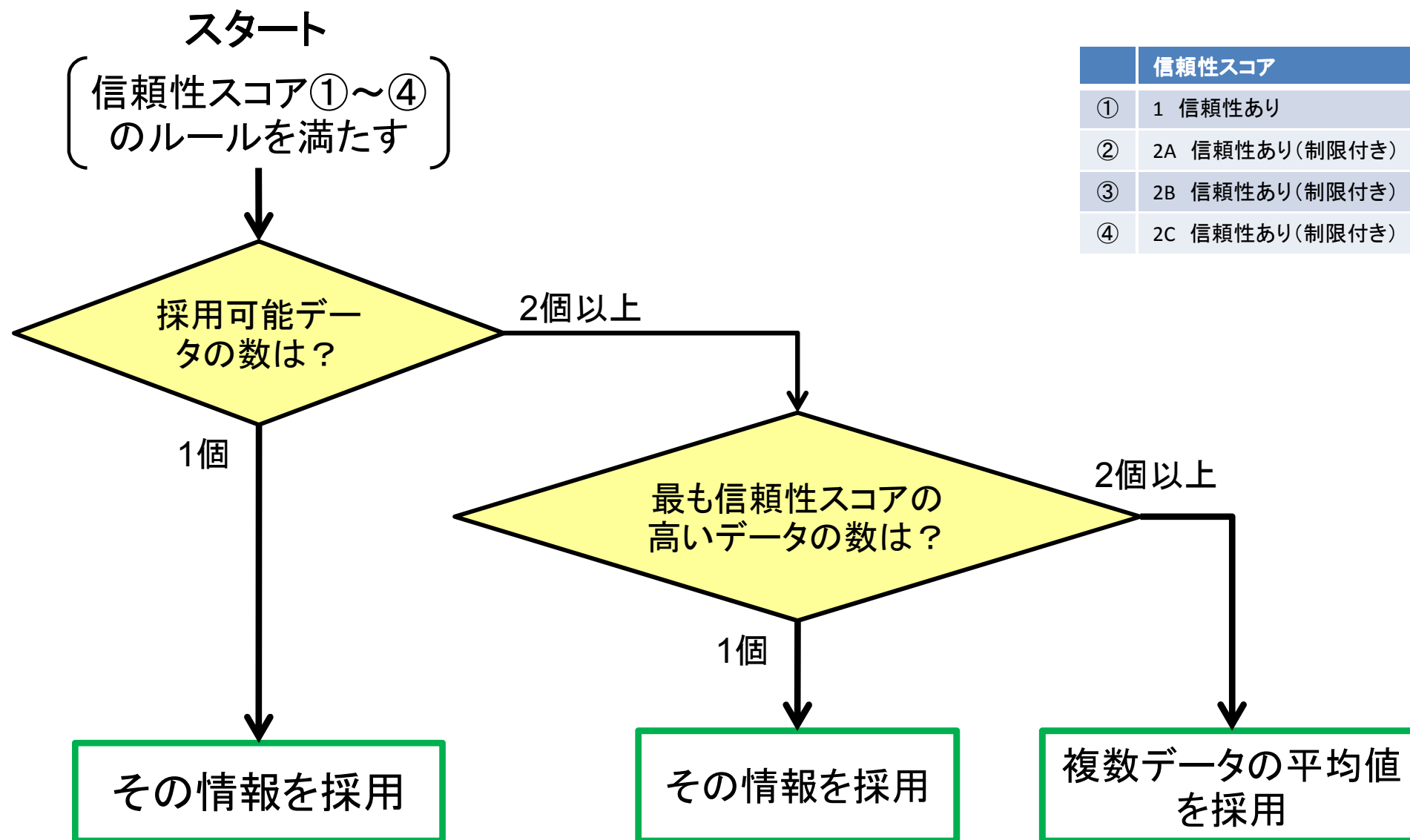
### a.式及びc.式

NITEの構造活性相関委員会により開発された「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」として開発された式。脂肪族、芳香族炭化水素、そのハロゲン化物は「カテゴリー I 単純受動拡散カテゴリー」に分類される。

### b.式

ECETOC(1998)、RIVM(2000)、EU-TGD(2003)において、logKow<6の物質のBCFを算出する式として紹介。

# ■ 物理化学的性状



## ■1-オクタノールと水との分配係数 *logKow*

付属書 p22-

リスク評価(一次)評価 I でのlogKowの用途

- ✓水溶解度の回帰式による推定(データ欠損時)
- ✓Kocの回帰式による推定(データ欠損時)
- ✓BCFの回帰式による推定(データ欠損時)
- ✓高蓄積性の疑いのある物質の抽出→有害性評価
- ✓評価IIにおける底生生物のリスク評価の必要性の判定→有害性評価
- ✓環境分配モデルのインプットデータ(農作物及び畜産物への移行係数の推計)→暴露評価

OECD TG 107 Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method

JIS Z7261-107 分配係数の測定—フラスコ振とう法

OECD TG 117 Partition Coefficient (n-octanol/water): High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method

OECD TG 123 Partition Coefficient (1-Octanol/Water): Slow-Stirring Method

データの補完に用いるソフト

**KOWWIN**

## ■分子量 *MW*

付属書 p23-

リスク評価(一次)評価 I での分子量の用途

- ✓高分子か否かの判断
- ✓ヘンリー則定数の無次元換算
- ✓水溶解度の回帰式による推定(データ欠損時)
- ✓排出量の換算(親化合物から分解生成物への換算)



## ■融点 *MP*、沸点 *BP*

融点 OECD TG 102 Melting Point  
沸点 OECD TG 103 Boiling Point

付属書 p23-

リスク評価(一次)評価 I での用途

### 【融点】

- ✓蒸気圧のMPBPWINによる推定(データ欠損時)
- ✓水溶解度の回帰式による推定(データ欠損時)
- ✓環境分配モデルのインプットデータ(常温で固体の物質の蒸気圧の換算)→暴露評価

### 【沸点】

- ✓蒸気圧のMPBPWINによる推定(データ欠損時)

データの補完に用いるソフト

**MPBPWIN**

## ■蒸気圧 *VP*

OECD TG 104 Vapour Pressure

付属書 p24-

リスク評価(一次)評価 I での蒸気圧の用途

- ✓ヘンリー則定数の推定
- ✓環境分配モデルのインプットデータ(大気相でのガス態/粒子態の分布比の推計)→暴露評価

大気への排出係数の選択条件

$VP < 1$ 、 $1 \leq VP < 10$ 、 $10 \leq VP < 100$ 、 $100 \leq VP < 1,000$ 、 $1,000 \leq VP < 10,000$ 、 $10,000 \leq VP$ [Pa]

## ■水溶解度 *WS*

OECD TG 105 Water Solubility

付属書 p26-

リスク評価(一次)評価 I での水溶解度の用途

✓ヘンリー則定数の推定

✓環境分配モデルのインプットデータ(水中濃度が水溶解度を超えていないかの判断及び上限値の設定)→暴露評価

水域への排出係数の選択条件

$WS < 10$ 、 $10 \leq WS < 100$ 、 $100 \leq WS < 1,000$ 、 $1,000 \leq WS < 10,000$ 、 $10,000 \leq WS$ [mg/L]

データ補完に用いる回帰式

$$\log WS = -0.935 \times \log Kow + 0.978 - 0.0082 \times (MP - 20) - 0.00468 \times MW$$

William M. Meylan *et al.*(1996)

## ■酸解離定数 *pKa*

OECD TG 112 Dissociation Constants in Water

付属書 p29-

リスク評価(一次)評価 I での酸解離定数の用途

✓環境分配モデルのインプットデータ(解離性物質のlogKowの補正)

(解離基のある物質に限られる)→暴露評価

データの補完に用いるソフト

SPARC

# ■有機炭素補正土壌吸着係数 *K<sub>oc</sub>*

付属書 p27-

OECD TG 121 Estimation of the Adsorption Coefficient (*K<sub>oc</sub>*) on Soil and on Sewage Sludge using High Performance Liquid Chromatography (HPLC)

OECD TG 106 Adsorption -- Desorption Using a Batch Equilibrium Method

土壌吸着係数、有機炭素/水分配係数などいろいろな名称で呼ばれている。  
[L/kg]の次元を持ち、土壌や底質への吸着される化学物質の傾向を示す。

リスク評価(一次)評価 I での*K<sub>oc</sub>*の用途

✓環境分配モデルのインプットデータ(土壌、底質、水中の浮遊粒子の分配の推計)→暴露評価

データ補完に用いる回帰式

$$\log K_{oc} = 0.544 \times \log K_{ow} + 1.377$$

William M. Meylan *et.al*(1992)

# ■ヘンリー則定数 *Henry*

付属書 p28-

ある温度における平衡状態にある大気中蒸気圧と水中濃度の比

リスク評価(一次)評価 I でのヘンリー則定数の用途

✓環境分配モデルのインプットデータ(揮発による消失速度、ガス態の沈着速度、土壌への吸着速度、農作物への移動係数の推計)→暴露評価

水溶解度  $WS < 1 \text{ mol/L}$  のとき

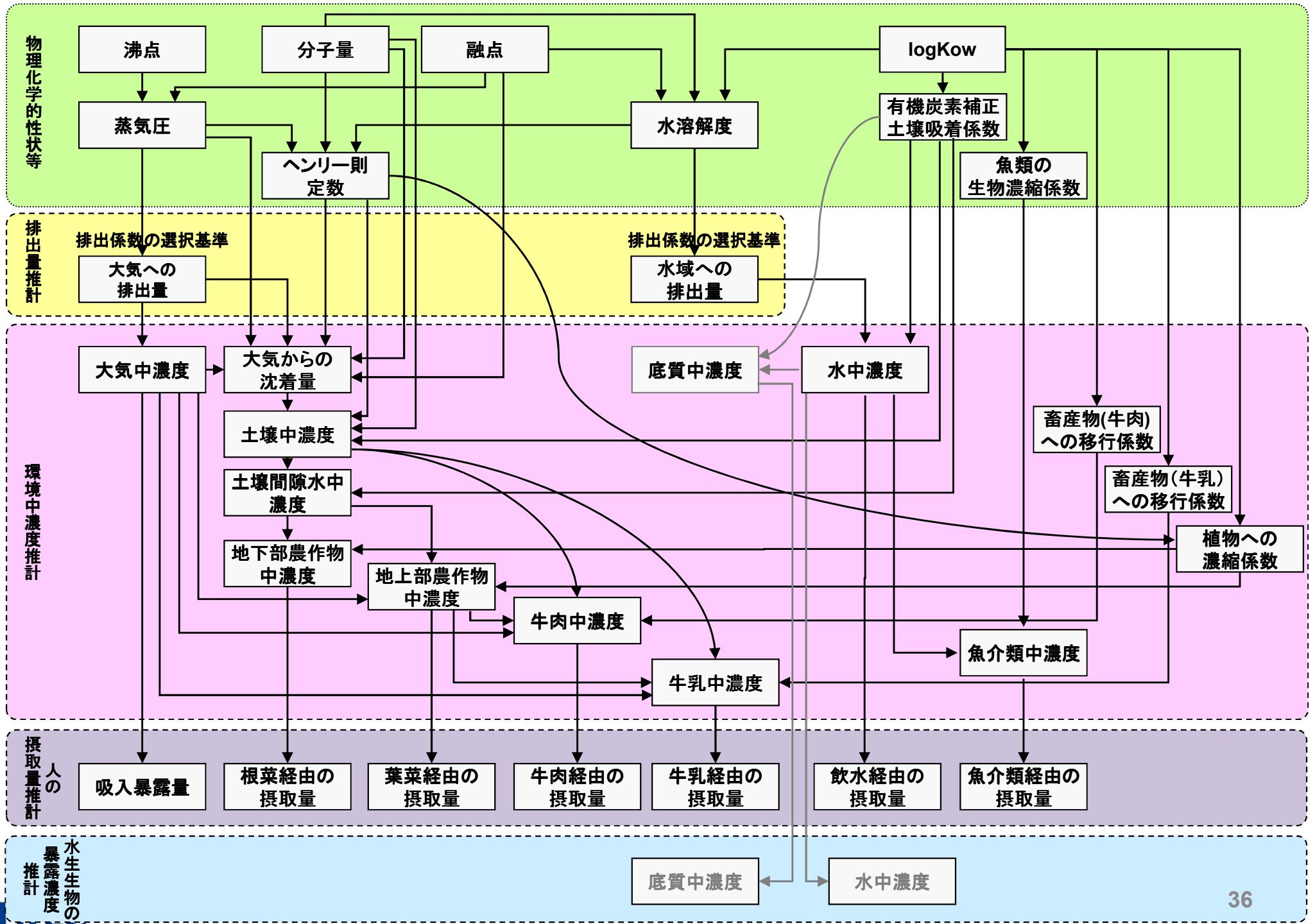
$$Henry [Pa \cdot m^3 / mol] = \frac{VP}{WS}$$

水溶解度が  $1 \text{ mol/L}$  以上の場合、  
データの補完に用いるソフト

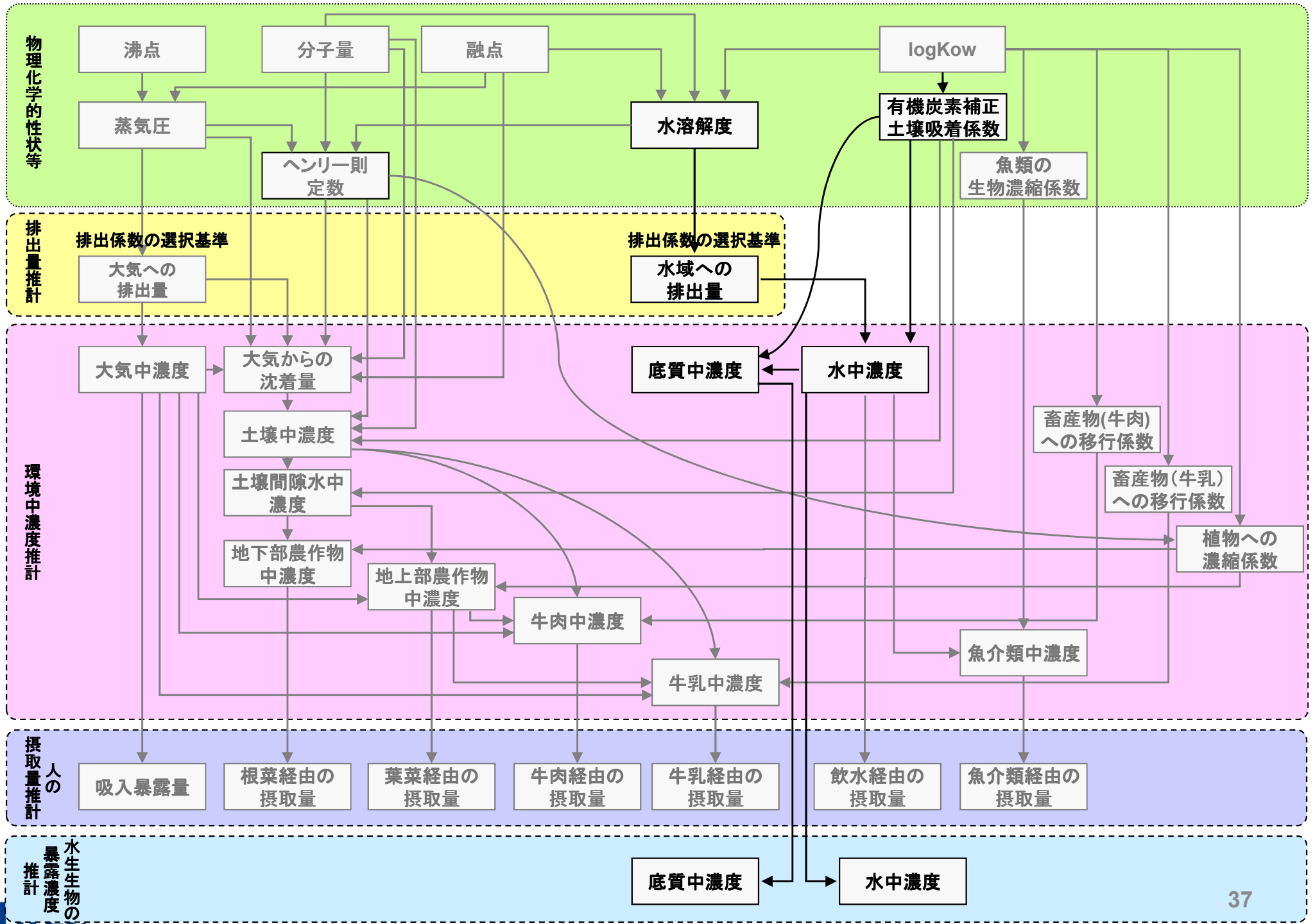
**HENRYWIN**

環境分配モデル内では無次元Henry則定数(= $K_{aw}$ )に変換して使用  $K_{aw} = K_{air-water} = \frac{Henry}{R \times T}$

# 環境分配モデルでの物理化学的性状の利用(人健康影響)



# 環境分配モデルでの物理化学的性状の利用(生態毒性)



# ご清聴ありがとうございました

ご質問は下記のアドレスをお願いいたします。

[safe@nite.go.jp](mailto:safe@nite.go.jp)