

4. 計算モード、物質名、物質情報、シナリオの設定

☆ 「メイン」シートに、物質名、物質情報、シナリオを入力してください。

①物質名を入力。物質DBに評価したい物質が掲載されている場合には、プルダウンリストから物質名を選択。

②計算モードを選択。モードについては別紙参照。(まずは計算してみたいという場合はTier1、詳細にパラメータ設定をしたい場合にはTierIIを選択。)

③ 評価物質の物理化学性状や有害性情報を入力。
①でプルダウンリストから物質を選択した場合には、自動的に情報(デフォルト値)が呼び出される。別の値を使用したい場合には、左側の「ユーザー指定」の列に手動で入力すればよい。(変更したい項目にだけ入力すればよい。)

④ 物質の使用シナリオをプルダウンリストから選択しながら、設定。初期状態では4シナリオが設定されているが、不要なものは削除する。逆に、シナリオを5つ以上追加したい場合には、「エリア拡張」ボタンを押すことで最大10のシナリオを設定可能。

STEP(1) 「評価対象の指定」 ヘルプ

化学物質名称 CAS番号

TierI-簡易モード
 TierI-通常モード
 TierII

STEP(2) 「物性と有害性の指定」 ヘルプ

※「ユーザー指定」に値が設定された場合は、当該値を使用。設定されていない場合は物質DBの設定値を使用。

		パラメータ	ユーザー指定	【物質DB】の設定値	
物理化学性状		分子量	g/mol	82.15	
		蒸気圧	Pa	3000	
		蒸気圧の温度	°C	20	
		水溶解度	mg/L	515	
		水溶解度の温度	°C	20	
		オクタノール/水分配係数	logKow	2.85	
		好氣的生分解性	-	易分解	
		有機炭素/水分配係数	L kg ⁻¹	177	
	有害性参照値	作業者 (DNEL, OEL等)	長期-吸入(8時間平均)	mg·m ⁻³	73.1
			長期-経皮	mg kg ⁻¹ day ⁻¹	6.25
消費者 (DNEL, OEL等)		吸入	mg·m ⁻³	8.7	
		経皮	mg kg ⁻¹ day ⁻¹	3.13	
環境 (PNEC, DNEL)		経口	mg L ⁻¹ day ⁻¹	3.13	
		STPの微生物	mg L ⁻¹	8.4	
		淡水中の水生生物	mg L ⁻¹	0.074	
		淡水の底生生物	mg kg _{dwt} ⁻¹	0.46	
		海水の水生生物	mg L ⁻¹	0.0074	
		海水の底生生物	mg kg _{dwt} ⁻¹	0.046	
		陸上生物	mg kg _{dwt} ⁻¹	0.3	
		環境経由ヒト(耐容1日摂取量)	mg kg _{dwt} ⁻¹ d ⁻¹	0.603	消費者の吸入と経口の値を用いる

STEP(3) 「シナリオの指定」 クリア エリア拡張 ヘルプ

作業者	No.	w-1	w-2	w-3	w-4
シナリオ名		製造	移し替え	混合	詰め替え
プロセスカテゴリ(PROC)		PROC2_管理されたばく菌のある閉鎖系の連続プロセスでの使用	PROC8b_専用設備での大容量コンテナとの移し替え	PROC2_管理されたばく菌のある閉鎖系の連続プロセスでの使用	PROC8_小容量コンテナへの移し替え
作業形態		工業	工業	工業	工業
物質形状		固体でない	固体でない	固体でない	固体でない
飛散性(固体)/作業温度での蒸気圧(Pa)(液体)					
作業期間[時間/日]		4時間以上	15分~1時間	4時間以上	4時間以上
換気状態		屋外	屋外	良好な全体換気の室内	良好な全体換気の室内
呼吸保護具の有無と効率		なし	あり(捕集率90%)	あり(捕集率90%)	あり(捕集率90%)
混合物か(含有率)		いいえ	いいえ	1~5%	1~5%
保護手袋の有無と効率		いいえ	グローブ APFS(防塵率80%)	グローブ APFS(防塵率80%)	グローブ APFS(防塵率80%)
(結果) 長期トータル					
消費者	No.	c-1	c-2	c-3	c-4
シナリオ名		接着剤の使用			
製品・成形品カテゴリ(PC/AC)		PC1_接着剤			
PC/ACサブカテゴリ		1_味用接着剤			
(結果) トータル					
環境	No.	e-1	e-2	e-3	e-4
シナリオ名		トルエンの製造	塗料の調剤	消費者塗料使用	
ライフサイクルステージ		製造	調剤	使用	
環境放出カテゴリ(ERC)		ERC1_化学物質の製造	ERC2_調剤の調合	ERC8_反応性物質の開放系での広範囲に分散的な室内使用	
取扱量 [t/年]		10000	10000	1000	
排水処理施設の有無		有	有	無	
(結果) 環境経由ヒト(耐容1日摂取量)					
淡水中の水生生物					

STEP(4) 実行と結果の確認 ヘルプ

→

RCR1の場合のチェックポイントを表示

- ✧ 計算モードで「Tier I 通常モード」を選択した場合、環境ばく露評価のパラメータとして SPERC コードを選択できます。コードの説明を参照する場合には、SPERC コード選択セルを右クリックし、表示されるメニューで「GSSMaker : Show Description」を選択すると、別のシートに選択可能なコードとそれらの説明の一覧が表示されます。確認の上、メインシートで該当するコードを選択して下さい。



図 4 SPERC コード選択時にコードの説明を参照 (Tier I 通常モードのみ)

- ✧ 「メイン」シートの「化学物質名称」欄で選択可能な物質の情報は「物質 DB」のシートに記載されています。
- ✧ ユーザー独自の物質名や物理化学的性状、有害性情報等を登録したい場合には、物質 ID 20 以降の行に追記することが可能です。追記した物質名は、「メイン」シートの「化学物質名称」欄に追加されるので、それを選択すればユーザーの追記した情報が自動的に出力されます。

TRA計算用パラメータ														作業者		消費者	
物理化学性状														長期吸入(8時間平均)	長期経皮	吸入(備考)	吸入
物質ID	化学物質名称	分子量	蒸気圧	蒸気圧の温度	水溶解度	水溶解度の温度	オクタノール/水分配係数	オクタノール/水分配係数 単位	好氣的生分解性	有機炭素/水分配係数	出典・備考	長期吸入(8時間平均)	長期経皮				
		g/mol	Pa	℃	mg/L	℃	-	logKow/Kow	-	Lkg-1	-	mg.m ⁻³	mg.kg ⁻¹ .day ⁻¹	-	mg.m ⁻³	mg	
5	1 トルエン	92.15	3000	20	515	20	2.65	logKow	易分解	177	日化協GPS/	78.1	6.25	日化協GPS/	8.7		
6	2 エタノール	46.069	7892.6624	25	1000000	-	0.50118234	Kow	易分解	-	-	-	-	-	-	-	
7	3 ジエチルシロリアミン(別名)	103.174	30	25	1000000	-	0.007413102	Kow	分解されない	-	-	-	-	-	-	-	
8	4 2-(2-オクタキシエトキシ)	162.224	2932084	25	1000000	25	3.530780548	Kow	易分解	-	-	0.705	20	EURAR	0.093928571		
9	5 N,N-ジメチルアセトアミド	87.122	266.644	25	1000000	25	0.169024365	Kow	易分解	-	-	-	-	-	-	-	
10	6 無水フタル酸	148.112	0.06892747	25	6172.83951	-	39.91071706	Kow	易分解	-	-	-	-	-	-	-	
11	7 酢酸エチル	88.104	12452.2748	25	90200	25	5.370317664	Kow	易分解	-	-	-	-	-	-	-	
12	8 1-オクタシナー2-ヒドロキシ	90.12	1199.898	20	200000	20	0.385594702	Kow	易分解	-	-	-	-	-	-	-	
13	9 1-ブチルアルコール	60.094	2759.7654	25	1000000	-	1.77827941	Kow	易分解	-	-	2.7675	30	EURAR	0.329464266		
14	10 2-(2-オクタキシエトキシ)	120.146	29.98745	20	1000000	25	0.072448596	Kow	易分解	-	-	7.95	0.5383838383	EURAR	0.9442428571		
15	11 アジピン酸	146.14	9.7058416	18.5	15000	15	1.202264435	Kow	易分解	-	-	-	-	-	-	-	
16	12 n-ヘキサン	86.18	14000	18.5	9.3	15	3.9	Kow	易分解	400	化審法リスク	-	-	-	-	-	
17	13 ジクロロメタン(別名塩化メチ)	84.93	45000	18.5	16000	18	1.3	Kow	分解されない	18	化審法リスク	-	-	-	-	-	
18	14 1,3-ジクロロプロペン(別名)	110.97	2800	18.5	2600	18	2.02	Kow	分解されない	32	化審法リスク	-	-	-	-	-	
19	15 ベンゼン	78.11	10000	18.5	1700	18	2.16	Kow	易分解	130	化審法リスク	0.32	0.022857143	EURAR	0.038095238		
20	16 1,2,4-トリメチルベンゼン	120.2	200	18.5	53	18	3.78	Kow	分解されない	540	化審法リスク	-	-	-	-	-	
21	17 フタル酸ビス(2-エチルヘキ)	390.57	0.000034	18.5	9.3	18	8.65	Kow	易分解	170000	化審法リスク	0.24	0.098	EURAR	0.06		
22	18 メチルシロキサ(4,1-フェニル)	250.26	0.002	18.5	6.4	18	4.5	logKow	分解されない	8000	化審法リスク	-	-	-	-	-	
23	19							logKow									
24	20 物質X							logKow									
25	21							logKow									
26	22							logKow									
27	23							logKow									



STEP (1) 「評価対象の指定」

化学物質名称: 物質X

STEP (2) DEHP

パラメータ	ユーザー指定	【物質DB】の設定値
分子量		-
蒸気圧		-
蒸気圧の温度		-
水溶解度		-
水溶解度の温度		-
オクタノール/水分配係数		-
好氣的生分解性		-
有機炭素/水分配係数		-
長期吸入(8時間平均)		-
長期経皮		-
吸入		-
経皮		-
経口		-
STPの微生物		-
淡水中の水生生物		-
淡水の底生生物		-
海水の水生生物		-
海水の底生生物		-

① ユーザー独自の物質名を登録したい場合には、「物質DB」のシートで物質ID 20以降の行(赤囲み部分)に追加してください。

② 追加した物質は、「メイン」シートの「化学物質名称」欄の選択項目に追加されます。その物質を選択すれば、入力情報が自動的に呼び出されます(赤囲み部分)。

図 5 物質DBへの新規物質の登録方法