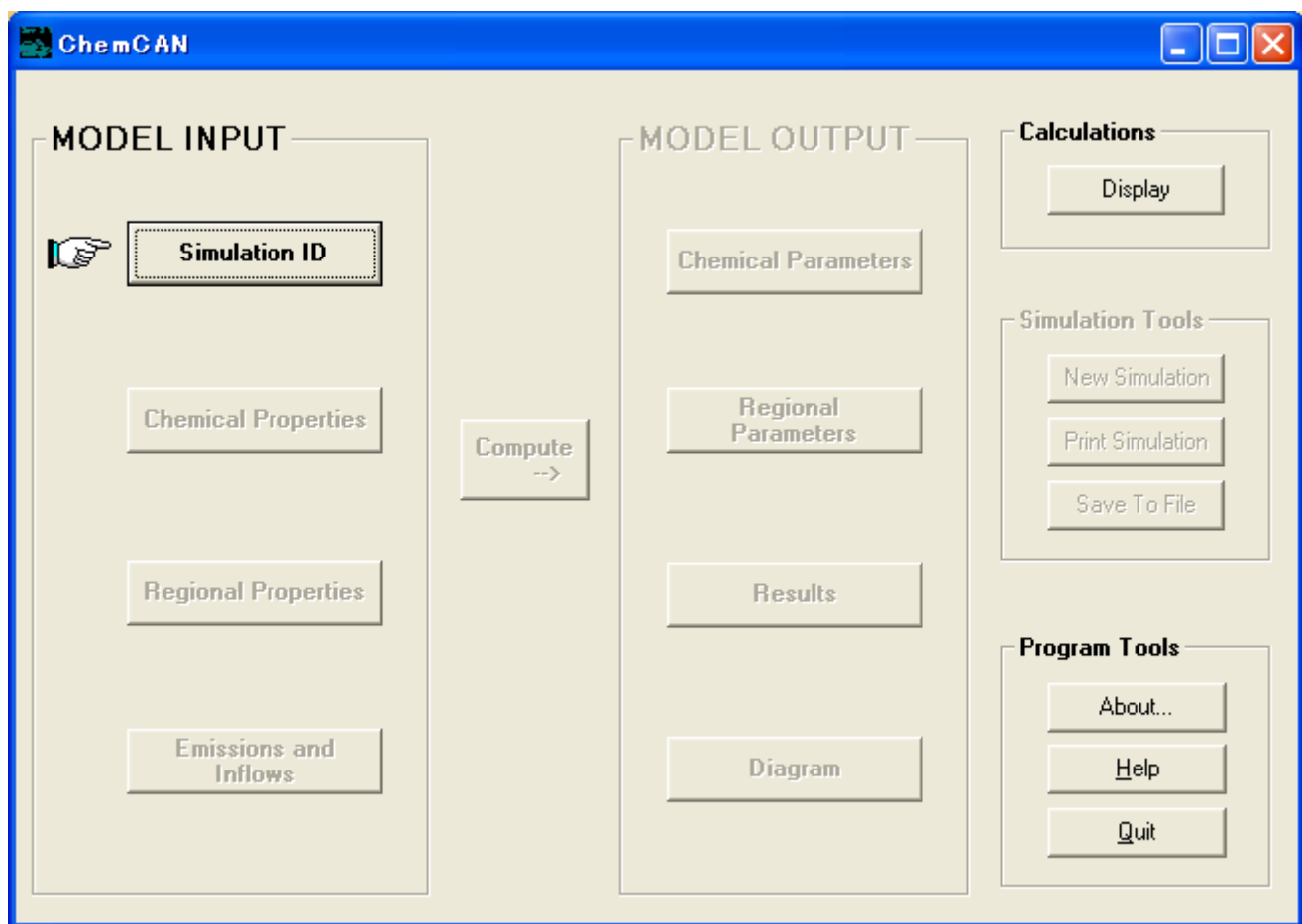


モデル名称	ChemCAN		
開発国	CEPA(カナダ)	開発機関 開発者	カナダ・トロント大学 Mackay 教授
入手方法 (URL・価格等)	http://www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel/models/CC600.html		
モデルの 目的概要	fugacity level III モデル(Default はカナダ地域)。大気、表層水、魚類、底質、土壌、植物、沿岸域中の化学物質濃度を推定。		

操作手順

1. ChemCAN プログラムのアイコンをクリックして実行する。



2. 「Simulation ID」アイコンをクリックする。

Simulation ID

Enter Your Name and/or a Unique Simulation Identifier

Additional Description/Comments (Optional)

OK **Help**

3 名前を入力する。

Chemical Properties

Chemical Name **New Chemical**

Molar Mass (g/mol) **Type of Chemical:** 1

Properties for Type 1

Data Temperature (°C)

Use Two Partition Coefficients

Measured log Kow (dimensionless)

Measured log Koa (dimensionless)

Kaw

Three Kaw Options

Kaw (measured, dimensionless)

Henry's Law Constant (atm.m³/mol)

Water Solubility (g/m³)

Vapour Pressure (Pa)

Temperature Dependence Coefficients (J/mol)

Delta H for Kow

Delta H for Kaw

Delta H for Koa

Estimating Partitioning to Aerosols

One Parameter Method
Kp (m³/μg) = x Koa

Two Parameter Method
log Kp (m³/μg) = x log Koa +

Reaction Half-Lives (h)

Air Negligible

Water Negligible

Soil Negligible

Sediment Negligible

Database Operations

Save **Delete**

OK **Cancel** **Help**

4 「Chemical Properties」 タブをクリックして化学物質情報を入力する。

Regional Properties

Country: Region:

Physical Dimensions	Other Properties	Transport Velocities																						
Primary Compartments Total surface area (km ²) <input type="text" value="109700"/> Surface covered by water (% of Total) <input type="text" value="1.7"/> Average air height (km) <input type="text" value="2"/> Average water depth (m) <input type="text" value="20"/> Average soil depth (cm) <input type="text" value="10"/> Average sediment depth (cm) <input type="text" value="1"/>	Volume Fractions Particles in air <input type="text" value="2E-11"/> Particles in water <input type="text" value="0.000005"/> Fish <input type="text" value="0.000001"/> Air in soil <input type="text" value="0.2"/> Water in soil <input type="text" value="0.3"/> Soil solids <input type="text" value="0.5"/> Sediment pore water <input type="text" value="0.7"/> Sediment solids <input type="text" value="0.3"/>	Densities (kg/m³) Air: <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td></td> <td style="text-align: center;">Air</td> <td style="text-align: center;">Aerosol</td> </tr> <tr> <td></td> <td style="text-align: center;">1.272</td> <td style="text-align: center;"><input type="text" value="2400"/></td> </tr> </table> Water: <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="text-align: center;">Water</td> <td style="text-align: center;">Sus.Particles</td> <td style="text-align: center;">Fish</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">1000</td> <td style="text-align: center;"><input type="text" value="2400"/></td> <td style="text-align: center;"><input type="text" value="1000"/></td> </tr> </table> Soil: <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="text-align: center;">Air</td> <td style="text-align: center;">Water</td> <td style="text-align: center;">Solid</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">1.272</td> <td style="text-align: center;">1000</td> <td style="text-align: center;"><input type="text" value="2400"/></td> </tr> </table> Sediment: <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="text-align: center;">Water</td> <td style="text-align: center;">Solid</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">1000</td> <td style="text-align: center;"><input type="text" value="2400"/></td> </tr> </table> Plants: <input type="text" value="900"/>		Air	Aerosol		1.272	<input type="text" value="2400"/>	Water	Sus.Particles	Fish	1000	<input type="text" value="2400"/>	<input type="text" value="1000"/>	Air	Water	Solid	1.272	1000	<input type="text" value="2400"/>	Water	Solid	1000	<input type="text" value="2400"/>
	Air	Aerosol																						
	1.272	<input type="text" value="2400"/>																						
Water	Sus.Particles	Fish																						
1000	<input type="text" value="2400"/>	<input type="text" value="1000"/>																						
Air	Water	Solid																						
1.272	1000	<input type="text" value="2400"/>																						
Water	Solid																							
1000	<input type="text" value="2400"/>																							
Database Operations <input type="button" value="Save"/> <input type="button" value="Delete"/> <input type="button" value="OK"/> <input type="button" value="Cancel"/> <input type="button" value="Help"/>																								

5 「Regional Properties」タブをクリックして地域情報を入力する。

Emissions and Inflows

Emission Rate (kg/year)

Into Air

Into Water

Into Soil

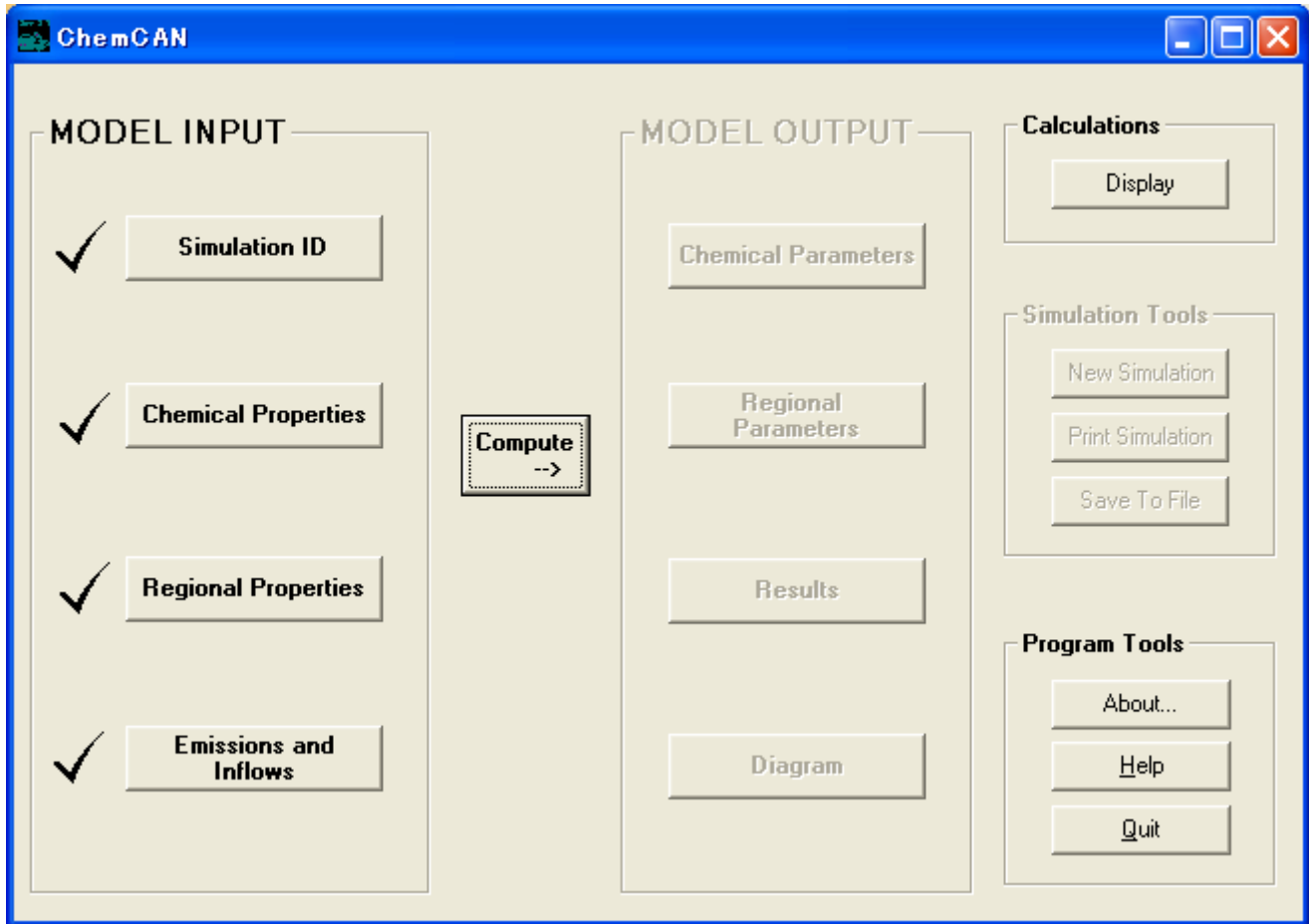
Into Sediment

Advective Inflow Concentrations

Concentration in Air (ng/m³)

Concentration in Water (ng/L)

6 「Emissions and Inflows」タブをクリックして放出率と濃度を入力する。



7 「Compute」タブをクリックする。

Chemical Parameters

Benzo[a]pyrene

Partitioning Properties

	Partition Coefficients		Half-Lives
Chemical Type	1		
Molar Mass	252.32 g/mol		
Data Temperature	25.0 °C		
	Property	Delta H	Environment
Log Kow	6.04	-20000 J/mol	6.29
Log Koa	10.8	-75000 J/mol	11.7
Kaw	1.88E-05	55000 J/mol	3.74E-06
Water Solubility	3.80E-03 g/m ³	1.51E-05 mol/m ³	
Vapour Pressure	7.00E-07 Pa		
Henry's Law Constant	4.59E-07 atm.m ³ /mol	0.0465 Pa.m ³ /m	
Kp = 1.50E-12 x Koa = 0.791 m ³ /μg			

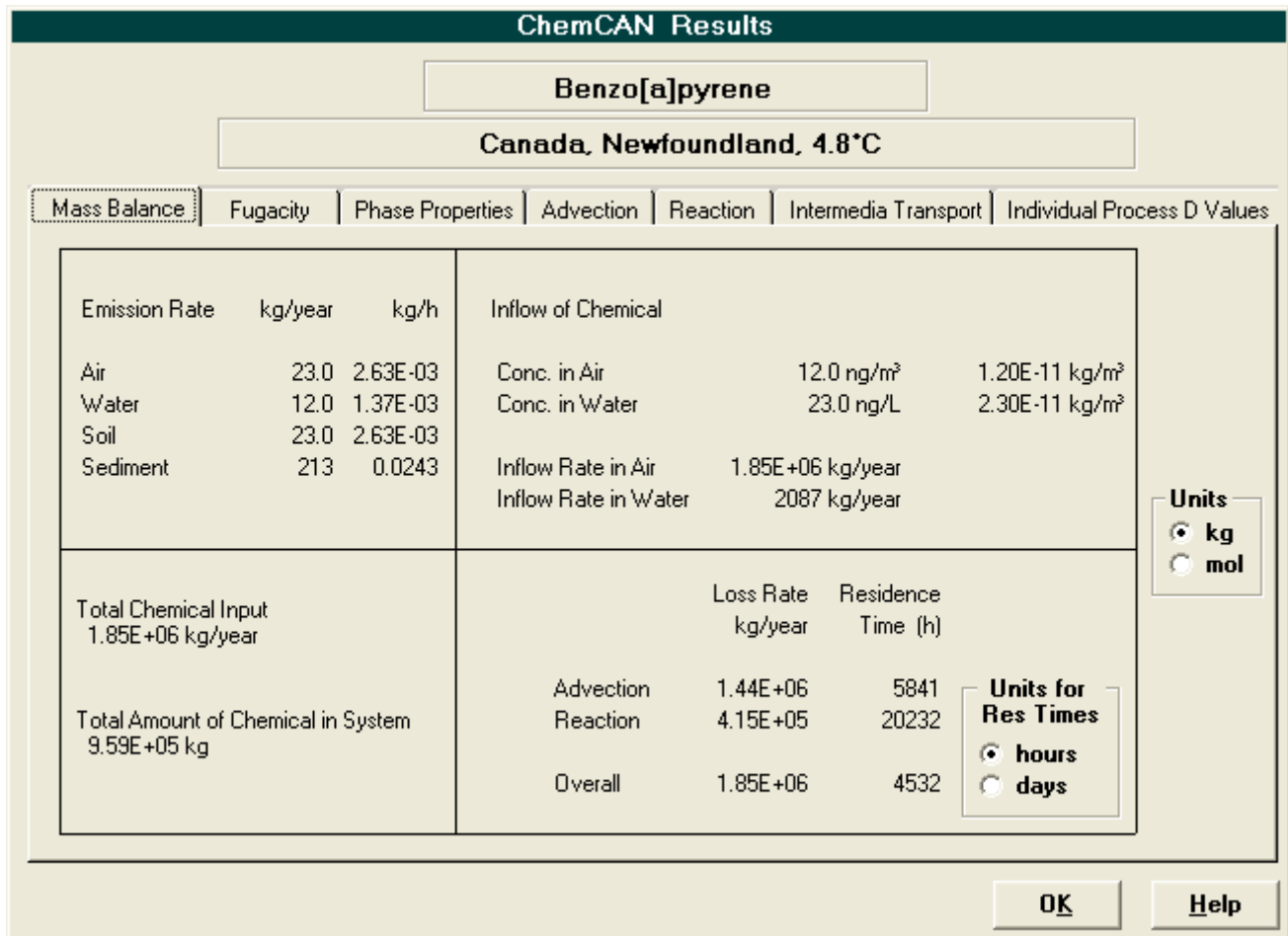
8 「Chemical Parameters」タブをクリックすると化学物質に関する情報が表示される。

Environmental Parameters

Canada		Newfoundland	
Dimensions	Bulk-Compartments	Sub-Compartments	Transport Velocities
Total Surface Area	109700 km ²	Temperature Conditions	°C
Surface Covered by Water	1.7 %	Year Round Mean	4.8
Average Air Height	2 km	Winter Mean	-3
Average Water Depth	20 m	Summer Mean	15.1
Average Soil Depth	10 cm	Organic Carbon Fractions	g/g
Average Sediment Depth	1 cm	Particles in Water	0.2
Length of Coastline	17000 km	Soil Solids	0.02
Average Coastal Water Depth	100 m	Sediment Solids	0.04
Average Coastal Width	1 km	Fish Lipid	0.048
Residence Times	days	Vegetation Lipid	0.01
Air	0.520	Conc in Groundwater = $\frac{\text{Conc in Soil Pore Water}}{(1 + Kow / 500)}$	
Water	150		
Coast Water	4.17		
		Res Times	
		<input checked="" type="radio"/> days	
		<input type="radio"/> hours	

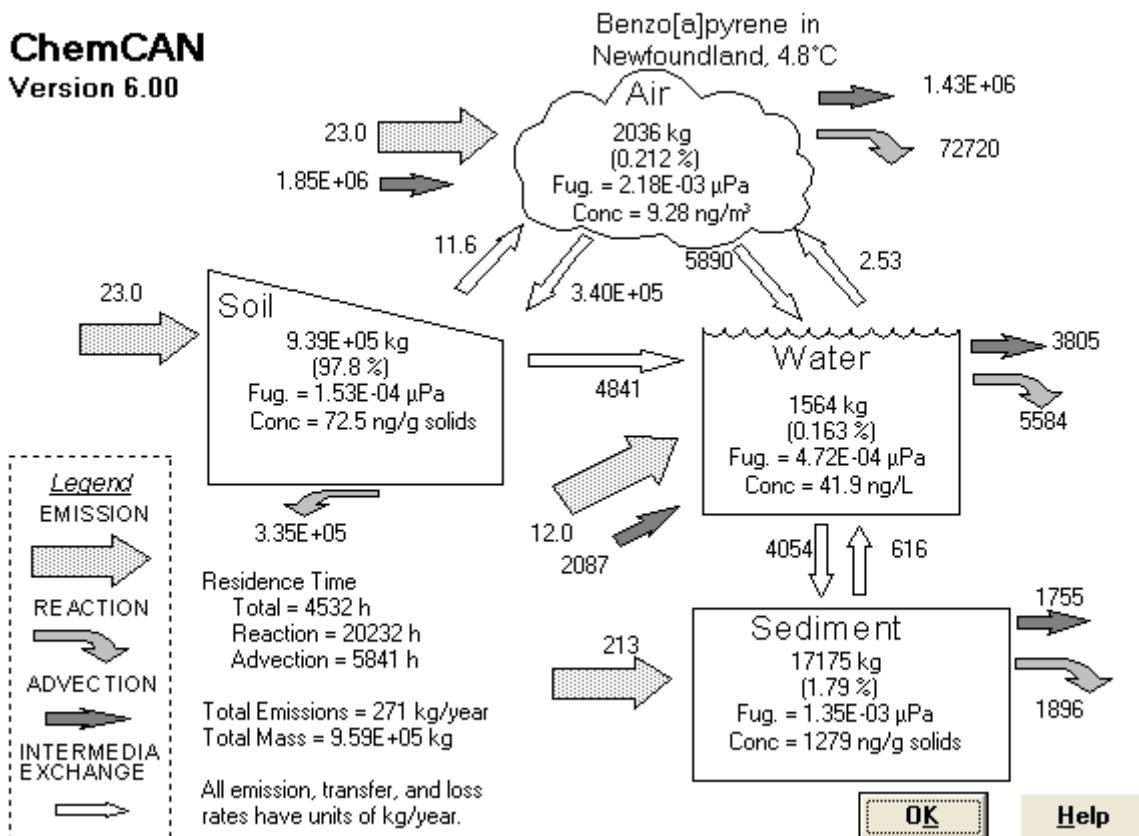
・単位を選択して変えるとそれに伴って数値も変わる。

9 「Regional Parameters」タブをクリックすると地域情報が表示される。



10 「Result」タブをクリックすると結果が算出される。

ChemCAN
Version 6.00



* 「Simulation Tools」の「New Simulation」タブをクリックすると新しく入力できる。

11 「Diagram」タブをクリックすると全体的な図が見える