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(Defa の化学物質濃度を推定。	ault はカナダ地域)。大気、	、表層水、魚類、底質、土壌、植物、沿岸域中			

## 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。

🛃 ChemCAN			
MODEL INPUT		MODEL OUTPUT-	Calculations
Simulation ID		Chemical Parameters	
Chemical Properties	Compute >	Regional Parameters	Simulation Tools New Simulation Print Simulation Save To File
Regional Properties		Results	Program Tools
Emissions and Inflows		Diagram	About <u>H</u> elp <u>Q</u> uit

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)					
0 <u>K</u> Help					

3 名前を入力する。

Chemical Properties						
Chemical Name Benzo[a]p	yrene	▼ <u>N</u> ew Chemical				
Molar Mass (g/mol) 252.3	32	Type of Chemical: 1				
Properties for Type 1		Estimating Partitioning to Aerosols				
Data Temperature (°C)	25	One Parameter Method				
Use Two Partition Coefficients		Kp (m <sup>2</sup> /µg) =  1.50E-12 × Koa				
Measured log Kow (dimensionless)	6.04	C Two Parameter Method log Kp (m³/μg) = . x log Koa + .				
Measured log Koa (dimensionless)	ŀ	- Reaction Half-Lives (b)				
🔽 Kaw						
Three Kaw Ontions		Air  170 Negligible				
		Water 1700 🗌 Negligible				
<ul> <li>Naw (measured, dimensionless)</li> </ul>	<u>.</u>	Soil 17000 🔽 Negligible				
C Henry's Law Constant (atm.m)/mol)	•	Sediment 55000				
👝 Water Solubility (g/m²)	0.0038					
Vapour Pressure (Pa)	0.000007	Database Operations				
Temperature Dependence Coefficients (1/mol)						
Delta H for Kow	20000	Save Delete				
Delta H for Kaw	55000					
Delta H for Koa	-75000	O <u>K</u> <u>C</u> ancel <u>H</u> elp				

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: Canada 🗨	Region: Newfoundland	▼ <u>N</u> ew Region		
Physical Dimensions	Other Properties	Transport Velocities		
Primary Compartments	Volume Fractions	Densities (kg/m?)		
Total surface area (km²) 109700 Surface covered by	Particles in air 2E-11	Air: Air Aerosol		
water (% of Total)     1.7       Average air height (km)     2	Particles in water 0.000005	1.272  2400		
Average water depth (m) 20	Fish 0.000001	Water     Sus.Particles     Fish       1000     2400     1000		
Average solidepth (cm) 10 Average sediment depth 1 (cm)	Water in soil 0.3	Soil:         Air         Water         Solid           1.272         1000         2400		
Coastal Water	Soil solids 0.5	Sediment: Water Solid		
Average Depth (m) 100	Sediment pore water 0.7	1000 2400 Plants:		
Average Width (km) 1	Sediment solids 0.3	900		
Database Operations           Save         Delete		O <u>K</u> <u>C</u> ancel <u>H</u> elp		

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)						
Default Yalues     OK     Ca	ncel <u>H</u> elp					

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/ma	bl				
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/m³	1.51E-05	mol/m³			
Vapour Pressure	7.00E-07 Pa					
Henry's Law Constant	4.59E-07 atm.r	m³/mol 0.0465	Pa.m³/m			
Kp = 1.50E-12 x Koa = 0.791 m³/μg						
			OK	Help		

Environmental Parameters							
Canada		Newfoundland					
Dimensions	Bulk-	Compartments Sub-Compartments		Transport Velocities			
Total Surface Area		109700	km²	Temperature Conditions	°C		
Surface Covered by W	ater	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				
Average Sediment Dep	th	1	cm	Organic Carbon Fractions	g/g		
Length of Coastline		17000	km	Particles in Water	0.2		
Average Coastal Wate	r Depth	100	m	Soil Solids	0.02		
Average Coastal Width	I	1	km	Sediment Solids	0.04		
				Fish Lipid	0.048		
Besidence Times	daus			Vegetation Lipid	0.01		
Air Water	0.520 150	-Res Time day:	es s	Conc in Groundwater = C	Conc in Soil Pore Water		
Coast Water	4.17	○ hours		-	(1 + Kow / 500)		
					0 <u>K</u> Help		

・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。

ChemCAN Results									
Benzo[a]pyrene									
Canada, Newfoundland, 4.8*C									
Mass Balance Fugacity Phase Properties Advection Reaction Intermedia Transport Individual Process D Values									
Emission Rate kg/year kg/l	Inflow of Chemical								
		4.0							
Air 23.0 2.63E-0.		12	Ung/m²	1.20E-11 kg/m²					
Water 12.0 1.37E-0.	Lonc. In Water	۷.	3.0 ng/L	2.30E-11 Kg/m					
Soli 23.0 2.635-0.	Inflow Rate in Air	laftere Data in Air 1 OFF - OC hadress							
Jediment 213 0.024.	Inflow Bate in Wate	in Ali 1.000 +00 kg/year in Water 2087 kg/year			- Unite				
iniiow hate in water 2007 kg/year									
					C mol				
Total Chemical Input		Loss Rate	Residence						
1.85E+06 kg/year		kg/year	Time (h)						
	Advection	1 44F+06	5841	⊢ Units for ⊐					
Total Amount of Chemical in System	Reaction	4.15E+05	20232	Res Times					
9.59E+05 kg				hours					
	Overall	1.85E+06	4532	🔿 days					
				0 <u>K</u>	<u>H</u> elp				

10 「Result」タブをクリックすると結果が算出される。



2010/03/10 横浜国立大学 大学院環境情報研究院 / 安心・安全の科学研究教育センター

- \*「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