

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26

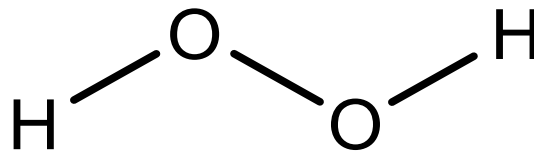
優先評価化学物質のリスク評価(一次)

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

過酸化水素

優先評価化学物質通し番号 89



平成28年6月

経済産業省

28	1 評価対象物質の性状	1
29	1-1 物理化学的性状及び濃縮性	1
30	1-2 分解性	5
31	2 【付属資料】.....	10
32	2-1 物理化学的性状等一覧.....	10
33	2-2 その他	11
34		
35		

36 1 評価対象物質の性状

37 本章では、モデル推計に用いる物理化学的性状データ、環境中における分解性に係るデ
 38 ータを示す。

39

40 1-1 物理化学的性状及び濃縮性

41

42

表 1-1 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ¹⁾

項目	単位	採用値	詳細	評価Iで用いた値(参考)
分子量	—	34.02		34.02
融点	°C	<u>-0.43</u> ^{2,5,6,9)}	EU-RAR(2003)で採用されたMerck(2013)の値であり、EPI Suite の実験値データベースに登録された値と同値	0.015 ²⁾
沸点	°C	<u>152</u> ^{2,5,6,9)}	EU-RAR(2003)で引用されたMerck(2013)の値であり、EPI Suite の実験値データベースに登録された値と同値	150.2 ^{3,4)}
蒸気圧	Pa	<u>178.7</u> ¹⁰⁾	Antoine 式を用いた計算値	212.7 ²⁾
水に対する溶解度	mg/L	<u>(1.00×10⁶)</u> ^{2,5,9)}	混和	9.34×10 ⁵ ⁵⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	<u>(-1.5)</u> ²⁾	EU-RAR (2003) で採用された推定値	-1.57 ⁶⁾
ヘンリー係数	Pa·m ³ /mol	0.00075 ²⁾	20°Cにおける測定値	0.00075 ²⁾
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	<u>(1.58)</u> ²⁾	EU-RAR (2003) で採用された推定値	0.043 ⁷⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>(1.4)</u> ²⁾	EU-RAR (2003) で採用された推定値	3.162 ⁷⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ¹¹⁾	1
解離定数	—	<u>11.62</u> ^{2,4)}	EU-RAR (2003) で採用された CRC (2015) の値	— ⁸⁾

43 1) 平成 27 年度第 3 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレ
 44 ビュー会議（平成 27 年 11 月 4 日）で了承された値

45 2) EU-RAR(2003)

46 3) CCD(2007)

47 4) CRC(2015)

48 5) HSDB

49 6) PhysProp

50 7) EPI Suite

51 8) 評価 I においては解離定数は考慮しない

52 9) Merck(2013)

53 10) 化学便覧

54 11) MHLW, METI, MOE(2014)

55 括弧内はモデルを動かすための参考値であることを示す

56

57 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

58 ①融点

59 評価 I では、信頼性の定まった情報源（化審法における物理化学的性状・生分解性・生物
 60 濃縮性データの信頼性評価等について」の「3. 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報

61 源。以下、同じ) EU-RAR (2003) (OECD SIAR の位置付け) の記載 (-0.4 - 0.43 °C) を -0.4 °C
62 ~0.43 °C の範囲であると解釈し、その算術平均値 (0.015 °C) を用いた。しかし、この値は
63 信頼性の定まった情報源 Merck (1989 版) を引用したものであり、Merck (2013) を確認した
64 ところ -0.43 °C と記載されている。なお、このデータ (-0.43 °C) は信頼性の定まった情報
65 源 HSDB でも引用されており、EPI Suite (MPBPWIN v1.43) の実験値データベースにも同じ値
66 (PhysProp と同じ値) が採用されている。他の信頼性の定まった情報源では、CCD (2007)
67 で -0.43 °C、CRC (2013) で -0.41 °C とされていた。

68 評価Ⅱにおいては、EU-RAR (2003) および HSDB で引用されている Merck (2013) の値
69 (-0.43 °C) を用いる。

70

71 ②沸点

72 評価Ⅰでは、CCD (2007) および CRC (2015) に記載された値 (150.2 °C) を用いた。CCD
73 (2007) では記載がない限り 1.01325×10⁵ Pa での沸点が記載されている。

74 EU-RAR (2003) においては、Merck (1989 版) を引用し、150 °C - 152 °C と記載されてい
75 る。しかし、Merck (2013) を確認したところ 152 °C と記載されており、HSDB でもこの値を
76 採用している。なお、この値は EPI Suite (MPBPWIN v1.43) の実験値データベースに登録さ
77 れた値と同じ値 (PhysProp と同じ値) である。

78 評価Ⅱにおいては、EU-RAR (2003) および HSDB で引用されている Merck (2013) の値
79 (152 °C) を用いる。

80

81 ③蒸気圧

82 評価Ⅰでは、EU-RAR (2003) が CRC (2015) に記載された 25 °C における値 (260 Pa) を 300
83 Pa とし、引用した値を 20 °C に補正した値 (212.7 Pa) を用いた。

84 HSDB および信頼性の定まった情報源 PhysProp には 25 °C で 262.6 Pa と記載されており、
85 PhysProp には測定値であると記載されていた。CRC (2015) の別表には、100 Pa (13 °C、外
86 挿値)、1 kPa (45 °C、外挿値)、10 kPa (89.0 °C)、100 kPa (149.8 °C) と記載されていた。

87 また、化学便覧に記載のあったアントワン定数 A (7.96917)、B (1,886.76)、C (220.6)
88 を用いて、25 °C における蒸気圧を計算したところ 258.1 Pa となり、他の値と同じくらの
89 値となった。評価Ⅱにおいてはこのアントワン定数を用いて、計算した 20 °C における値
90 (178.7 Pa) を用いる。

91

92 ④水に対する溶解度

93 評価Ⅰでは HSDB に記載された 25 °C での値 (1.0×10⁶ mg/L) を 20 °C に補正した値 (9.34
94 ×10⁵ mg/L) を用いた。

95 しかし、HSDB の引用元である US EPA (1977) を確認したところ「水に混和」とされてお
96 り、HSDB および EU-RAR (2003) で参照している Merck (2013) でも「混和」とあったため、
97 温度補正は行わない。評価Ⅱにおいては、参考値として 1.0×10⁶ mg/L を用いる。

98

99 ⑤logPow

100 評価Ⅰでは PhysProp に記載された値 (-1.57) を用いた。しかし、この値は推定値であり、
101 信頼性の定まった情報源では、他に測定値が見つからなかった。HSDB の水に対する溶解度の
102 情報源である US EPA (1977) には、実験で求められた logP (-1.42) が示されている。ただ
103 し、この値の出典や実験条件についての情報は示されていなかった。

104 EPI Suite (KOWWIN v1.68) で推計された値は、-1.57 であったが、「INORGANIC Compounds are
105 outside the estimation domain.」と推計時に表示され、推計値の信頼性は低いと考えられ

106 る。

107 EU-RAR (2003)においては、過酸化水素のような親水性で反応性が高い無機化学物質にとっ
108 ては、logPow は重要ではないとし、Degussa AG(デグサ社)による「fragment structure method」
109 を用いた推定値 (-1.5) を用いている。

110 評価Ⅱにおいては、実測値が見つかったものの出典などが不明であることより、参考値と
111 して、専門家のレビューを経た評価書である EU-RAR (2003) に記載されている推定値(-1.5)
112 を用いる。

113

114 ⑥ヘンリー係数

115 評価Ⅰでは、EU-RAR (2003) に記載された Hwang (1985)による 20 °Cでの測定値 (0.00075
116 Pa・m³/mol) を用いた。なお、この試験では 3 °C、10 °C、20 °C、30 °Cでヘンリー係数を測
117 定しており、それぞれ 0.00020 Pa・m³/mol、0.00034 Pa・m³/mol、0.00075 Pa・m³/mol、0.0027
118 Pa・m³/mol である。

119 HSDB および PhysProp には、25 °Cでの測定値 (0.00071 Pa・m³/mol) が記載されている。

120 評価Ⅱにおいても、EU-RAR (2003) に記載された Hwang (1985)による 20 °Cでの測定値
121 (0.00075 Pa・m³/mol) を用いる。

122

123 ⑦Koc

124 評価Ⅰでは KOCWIN(v2.00) による推定値 (0.043 L/kg) を用いた。しかし、推計時に
125 「INORGANIC Compounds are outside the estimation domain.」と表示され、推計値の信頼
126 性は低いと考えられる。信頼性の定まった情報源では、他に測定値が見つからなかった。

127 EU-RAR (2003) においては、過酸化水素のように水への溶解度が高く、極性が非常に高い
128 物質では土壌や底質への顕著な吸着はないであろうとしており、REACH-TGD による疎水性が
129 高い物質以外への QSAR 式 ($\log K_{oc} = 0.52 \cdot \log Pow + 1.02$) を用いた推定値 ($\log K_{oc} = 0.2,$
130 1.58 L/kg) を用いている。なお、REACH-TGD でも、通常、logPow が 3 以下で、イオン化しな
131 い物質もしくは急速に分解する物質については、QSAR やリードアクロスなどで求められた推
132 定値についての確認試験が求められることはないとしている。

133 評価Ⅱにおいては、参考値として EU-RAR (2003) に記載されている推定値 (1.58 L/kg)
134 を用いる。

135

136 ⑧BCF

137 評価Ⅰでは BCFBAF (v3.01) を用いて推定した値 (3.16 L/kg) を用いた。しかし、推計時
138 に「INORGANIC Compounds are outside the estimation domain.」と表示され、推計値の信
139 頼性は低いと考えられる。

140 信頼性の定まった情報源の中に実測値は得られず、過酸化水素は無機物質であることから
141 NITE カテゴリーアプローチ対象外の物質である。

142 EU-RAR (2003) においては、過酸化水素は反応性が高く、寿命が短い極性の物質であり、
143 logPow が低いと推定されていることから生物濃縮はしないと考えられるとされている。

144 評価Ⅱにおいては参考値として EU-RAR (2003) に記載されている推定値 (1.4) を用いる。

145

146 ⑨BMF

147 評価Ⅰでは logPow と BCF の値から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
148 技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に従って設定した値 (1) を用いた。
149 信頼性の定まった情報源に測定値はないため、評価Ⅱにおいてもこの値 (1) を用いる。

150

151 ⑩pKa

152 EU-RAR (2003)においては、CRC (2015) に記載された値 (11.62) を採用している。また、
153 HSDB に記載された値 (11.75) については、測定値か推定値かは明記されていなかった。な
154 お、本物質は無機化学物質のため、ACD/pKa (ACD Labs) では、推計対象外であった。

155 評価Ⅱにおいては、EU-RAR (2003) に記載されている CRC (2015) の値 (11.62) を用いる。
156 pKa=11.62 であるため、水中では pH 7.0、pH 8.0、pH 9.0 において 100 %が、pH 10.0 に
157 において 98 %が非解離体であると推定され、環境中では非解離体として存在すると判断され
158 た。

159

160 1-2 分解性

161 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

162

163

表 1-2 分解に係るデータのまとめ¹⁾

項目		半減期 [*] (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期	1 ²⁾	EU-RAR (2003) による設定値
	機序別の半減期	OH ラジカルとの反応	NA
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	NA
水中	水中における総括分解半減期	5 ²⁾	EU-RAR (2003) による設定値
	機序別の半減期	生分解	NA
		加水分解	NA
		光分解	NA
土壌	土壌における総括分解半減期	0.5 ²⁾	EU-RAR (2003) による設定値
	機序別の半減期	生分解	NA
		加水分解	NA
底質	底質における総括分解半減期	0.5	土壌中の総括分解半減期と同じ値とする。
	機序別の半減期	生分解	NA
		加水分解	NA

164 1) 平成 27 年度第 3 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレ
165 ビュー会議（平成 27 年 11 月 4 日）で了承された値

166 2) EU-RAR (2003)

167 NA: 情報が得られなかったことを示す

168 ※過酸化水素は反応性が高い無機化学物質であり、環境中の条件により分解半減期はおおきくばらつく
169 と考えられる。

170

171 上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、「総括分解半減期」とは、分解の機
172 序を区別しない環境媒体ごとのトータルの半減期のことを示す。

173

174 EU-RAR (2003) には、過酸化水素は一般的にすぐに分解される物質であるが、他の物質
175 と同様に、条件が整うと非常に難分解になりうると記述されており、以下のような知見が示
176 されていた。

177 過酸化水素は金属、活性炭素や酵素などの触媒物質とふれることにより、水と酸素に分解
178 される。分解反応は発熱反応であり、少量の触媒が存在すれば水中でも反応するが、触媒が
179 存在しない場合には、高温のガス態のみで反応する。このため、反応速度は、触媒物質（金
180 属、活性炭素、酵素）への接触や他の要因（熱、太陽光）によって異なる。また、有機化学
181 物質との反応について、過酸化水素は、酸化剤にも還元剤にもなりうるため、多くの基と簡
182 単に反応する。また、鉄（II）の存在により OH ラジカルが生成し、多くの有機化学物質の
183 酸化が可能となる。

184 EU-RAR (2003) においては、環境媒体ごとに総括分解半減期が設定されている。他の信
185 頼性が定まった情報源からは、半減期データを入手することはできなかった。過酸化水素は
186 反応性が高い無機化学物質であり、環境中の条件により分解半減期はおおきくばらつくと考
187 えられる。評価Ⅱにおいては、EU-RAR (2003) による媒体ごとの総括分解半減期を用いる。
188 また、ここでは同情報源に示された情報源を中心にこれらの総括分解半減期が妥当であるこ

189 とを確認した。

190

191 ①大気

192 EU-RAR (2003) によれば、直接光分解は比較的ゆっくりした分解で重要ではないという
193 データがある一方で、大気中 OH ラジカルの 10 %が過酸化水素の直接光分解によるものと
194 という推定結果がある。また、間接光分解 (OH ラジカルと O₂ ラジカル) による有機過酸化物
195 への分解についても、生成物の濃度が過酸化水素濃度よりも低いことから、影響は少ないの
196 ではないかと想定している。

197 EU-RAR (2003) においては、以下の各分解半減期の測定結果を考慮のうえ、半減期 24 時
198 間 (1 日) としている。

199 ・ 直接光分解半減期：2.14 日

200 (非公開データ)

201 ・ 都心の汚染大気中半減期：数時間

202 (Sakugawa (1990) によるデータとあったが、元文献には記載なし)

203 ・ 山頂の汚染されていない大気中半減期：16～20 時間

204 (Olszyna (1988) による大気中濃度の夜間測定値は昼間測定値よりも 26 %低い値
205 であったことから、夜間に過酸化水素は生成しないことと 50 %減衰には 26 %減衰
206 の倍程度の時間がかかることを仮定して推定した値)

207 評価Ⅱにおいては、大気における総括半減期として 1 日 (24 時間) を用いる。

208

209 ②水中

210 EU-RAR (2003) によれば、過酸化水素は、水中では比較的安定である。濃度が高くなれば、
211 安定度も高くなる。純水の中での過酸化水素の安定度は pH による (pH 3.5～4.5 で安
212 定度が一番高く、アルカリ溶液中では分解速度が最も高い)。ほとんどの金属 (特に Fe、Mn、
213 Cu) は水中において過酸化水素の分解に触媒として機能し、自然水中での過酸化水素分解速
214 度に大きな影響を与える。0.2～0.45 μm のフィルターで濾過された自然水中 (分解に関与
215 するバクテリアなどが濾過された状態の水) での分解の実測結果として、半減期 25～100 時
216 間の報告が紹介されている。

217 また、水中での光分解は重要ではなく、生分解性物質である。多くの好気性バクテリアは
218 カタラーゼ酵素 (過酸化水素を水と酸素に分解する酵素) を持っているため、過酸化水素は
219 容易に分解され、分解速度は微生物の個体量によるため富栄養水中では分解が早い。このた
220 め、下水処理場などでは非常に早い分解が予想される。EU-RAR (2003) においては、OECD
221 ガイドライン 209 (活性汚泥呼吸阻害試験) にしたがって GLP ラボで実施された試験によ
222 る 1～1,000 mg/L の過酸化水素の半減期が全て 2 分以下という報告 (非公開データ) や活性
223 土壌における半減期が 0.5～1 分、下水における半減期が 0.5～8.2 分という報告 (過ホウ酸
224 ナトリウムの EU-RAR で引用している非公開データ) などを参考に、下水処理場での半減
225 期は 2 分と設定されている。

226 なお、一般的な易分解試験は、有機化学物質を想定しているため、過酸化水素には直接適
227 用できない。過酸化水素の易分解性試験結果として、菌数 0.6×10⁶ CFU/ml の時に、分解速
228 度定数 0.6 /hr、3.4×10⁷ CFU/ml の時に 7.0 /hr が報告されている。また、殺菌された系で
229 は減衰率が非常に下がることが確認されており、減衰は生分解によるものであろうと考えら
230 れている。なお、OECD 試験ガイドライン (301A-E) での菌数は 0.01～1×10⁶ CFU/ml、
231 汚染された河川での菌数は 5×10⁶ CFU/ml と示されている。

232 EU-RAR (2003)においては、シミュレーション試験結果として、以下のような試験結果を
233 参考に水中での総括半減期が設定されている。いずれの報告も、海や湖などにおいて過酸化

234 水素の濃度が時間や空間によるばらつきがあることについて、自然生成や分解などの影響を
235 解析することを目的とした論文である。なお、自然水中の溶存有機物が太陽光に照射される
236 ことにより、スーパーオキシドが生成され、その不均化により過酸化水素が生成される
237 (Cooper, 1989a)。以下の各試験では、過酸化水素の半減期を求める際には、暗条件下におけ
238 る減衰率の測定が行われている。

239 Cooper (1989b) においては、北米の湖 (EU-RAR (2003) によると貧栄養湖) の湖水を用
240 いて、暗減衰率が測定されている。測定されたのは、夏であり、pH 7.2、過酸化水素濃度は
241 6.8 $\mu\text{g/L}$ であった。

- 242 ・ 濾過無し：半減期 7.8 時間
- 243 ・ 64、12、5 μm フィルター濾過の平均値：半減期 8.6 時間
- 244 ・ 1 μm フィルター濾過：半減期 31 時間
- 245 ・ 0.45 μm フィルター濾過：24 時間後に減衰していなかった

246 なお、以上の結果よりピコプランクトン (0.2~2 μm) による影響が示唆されている。ま
247 た、無機粒子の影響である可能性は否定されないとしている。

248 Cooper (1989a) においては、北米のオンタリオ湖とエリー湖の湖水を用いて、暗条件で減
249 衰率を測定している。EU-RAR (2003) にて参照されているオンタリオ湖のデータに加えて、
250 エリー湖の異なる深度における水を用いて測定された半減期データを表 1-3 にまとめる。
251 半減期は 9.6 時間~21.6 時間であった。

252 なお、Cooper (1989b) と同様に 0.45 μm フィルター濾過後の水については、7 時間後に
253 減衰していなかった。また、堆積物を加えた測定を行った結果、変動が見られなかったこと
254 からバクテリアや藻類による影響が考えられるとしている。

255

256
257

表 1-3 湖深度ごとの過酸化水素半減期 (Cooper, 1989a)

深さ	オンタリオ湖			エリー湖		
	半減期	過酸化水素濃度	クロロフィル a 濃度	半減期	過酸化水素濃度	クロロフィル a 濃度
m	時間	μg/L	μg/L	時間	μg/L	μg/L
0	14.7	3.8	2.7	9.6	6.0	0.4
1	15.1	3.9	2.8	13.3	4.3	0.9
3	14.7	4.4	2.5	11.1	4.7	0.7
5	17.3	3.9	2.2	-	-	-
10	21.6	1.5	2.9	10.2	3.7	0.5
13	-	-	-	11.6	3.6	0.5
15	-	-	-	16.3	2.4	0.5
16.4	-	-	-	20.2	1.8	0.4

258
259
260
261
262
263
264
265
266
267

Johnson (1989) において、海水を用いた 24 時間の実験を行った結果、減衰速度は 3.8 nmol/L/時間 (0.13 μg/L/時間、半減期 5.3 時間) であった。過酸化水素濃度は 3~5 μg/L で、暗条件であった。

この他、EU-RAR (2003) においては、表 1-4 のようにエアークリッド社から提供されたフランスのソーヌ川の水を使った半減期データが記述されており、自然界で存在するよりも高い濃度の場合には自然界の微生物の阻害作用や微生物の死滅より半減期が長くなる可能性がコメントされている。

表 1-4 濃度ごとの過酸化水素半減期 (EU-RAR (2003)、エアークリッド社データより)

過酸化水素濃度 mg/L	半減期 日
10,000	2.5
1,000	8.1
500	8.2 ± 2 (濾過水でより長い半減期)
250	15.2 ± 2.5 (濾過水でより長い半減期)
100	20.1

268
269
270
271
272
273
274
275
276

以上より、EU-RAR (2003) においては、過酸化水素は易分解性であるとされており、現実的な最悪の状況を想定して、半減期は 5 日と設定されている。また、EU-RAR (2003) よりも新しい報告 (Hakkinen, 2014) においては、貧栄養湖の水を用いて過酸化水素の半減期が測定されている。報告された半減期は、1.4~58.2 時間であり、半減期 5 日間の妥当性を裏付ける結果となっている。

評価Ⅱにおいては、水中における総括半減期として 5 日を用いる。

③土壌

277
278
279
280
281
282

EU-RAR (2003) においては、ECETOC (1993) による土壌中半減期は、微生物学的作用のない土壌における半減期 15 時間から、10⁸~10⁹ 細胞/g-総固形物の土壌における半減期数分の範囲でばらついているという記述を引用して、半減期は 12 時間と設定されている。ECETOC (1993) ではこの値を「Personal communication」のデータから引用している。

EU-RAR (2003) において参照されていた Aggarwal (1991) では、汚染サイト (米国フロリダ州の Eglin 空軍基地) でのバイオレメディエーションのための酸素供給源としての過酸

283 化水素の有効性を検討するため、土壌中における過酸化水素の安定性について詳細な解析を
284 行っている。この文献では加圧滅菌された土壌における分解が測定されており、90 分間での
285 分解割合は 9~60 %であった。一次反応を仮定して、半減期を計算すると 11 時間~68 分と
286 なる。同じく EU-RAR (2003) で参照されていた Hinchee (1988)での分解速度定数は 0.1~
287 0.01/分とされており、半減期は 7~70 分となる。また、Pardieck (1992)では、4 時間以下、
288 10 時間以下などの半減期データが記述されている。以上の値は、ECETOC (1993) によって
289 設定された半減期 12 時間の妥当性を裏付ける結果となっている。

290 評価Ⅱにおいては、土壌における総括半減期として 0.5 日 (12 時間) を用いる。

291

292 ④底質

293 情報収集の結果、底質中での総括分解半減期の情報は得られなかった。また、機序別の分
294 解反応に関する情報も得られなかった。EU-RAR (2003) においては、データは得られなかつ
295 たが底質にも触媒物質が高濃度で存在することから、早い分解が想定できるだろうと記述さ
296 れている。

297 評価Ⅱにおいては、底質における総括半減期として、土壌における総括半減期と同じ 0.5
298 日 (12 時間) 日を用いる。

299

300

301 2 【付属資料】

302 2-1 物理化学的性状等一覽

303 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

304

305 出典)

306 Aggarwal(1991): Aggarwal, P. K., Means, J. L., Downey, D. C. and Hincee, R. E. Use of hydrogen
307 peroxide as an oxygen source for *in situ* biodegradation Part II. Laboratory studies. J. Hazard. Mater.,
308 27:301-314. 1991.

309 CCD(2007): Lewis, R. J. Hawley's Condensed Chemical Dictionary 15th ed., John Wiley & Sons, Inc.
310 2007.

311 CRC(2015): Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 96th ed., CRC
312 Press. 2015-2016.

313 Cooper (1989a): Cooper W. J., Lean D. R. S. and Carey J. H. (1989) Spatial and temporal
314 patterns of hydrogen peroxide in lake Waters. Can. J. Fish. Aquat. Sci. 46:1227-1231.
315 1989.

316 Cooper(1989b): Cooper W. J. and Lean D. R. S. (1989b). Hydrogen peroxide concentration
317 in a Northern lake: Photochemical formation and diel variability. Environ. Sci. Technol.
318 23:1425-1428. 1989.

319 EPI Suite(2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11. 2012.

320 EU-RAR(2003): European Union, Institute for Health and Consumer Protection. Risk
321 Assessment Report (EU-RAR), Hydrogen Peroxide. 2nd Priority List, vol.38. 2003.

322 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank.

323 <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search2/f?./temp/~MtLd7q:1>, (2015-09-15 閲覧).

324 Hakkinen(2004): Hakkinen, P. J., Anesio, A. M., Graneli, W. Hydrogen peroxide
325 distribution, production, and decay in boreal lakes. Can. J. Fish. Aquat. Sci.
326 61(8):1520-1527. 2004.

327 Hincee(1988): Hincee, R. E. and Downey D. C. The role of hydrogen peroxide in
328 enhanced bioreclamation. National Water Well Association (29):715-721. 1988.

329 Hwang(1985): Hwang, H. and Dasgupta, P. K. (1985) Thermodynamics of the hydrogen
330 peroxide-water system. Environmental Science and Technology 19:255-258. 1985.

331 Johnson(1989): Johnson K. S., Willason S. W., Wiesenburg D. A., Lohrenz S. E. and
332 Arnone R. A. (1989) Hydrogen peroxide in the western Mediterranean Sea: a tracer for
333 vertical advection. Deep-Sea Res. 36:241-254. 1989.

334 Merck(2013): The Merck Index. 15th ed.

335 MHLW, METI, MOE(2014): 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

- 336 イダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0. 2014.
- 337 Olszyna(1988): Olszyna K. J., Meagher J. F. and Bailey E. M. (1988) Gas-phase, cloud
338 and rain-water measurements of hydrogen peroxide at a high-elevation site. Atmos.
339 Environ. 22:1699-1706. 1988.
- 340 Pardieck(1992): Pardieck D. L., Bouwer E. J. and Stone A. T. (1992) Hydrogen peroxide
341 use to increase oxidant capacity for in situ bioremediation of contaminated soils and
342 aquifers: A review. Journal of Contaminant Hydrology 9:221-242. 1992.
- 343 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2015-09-14 閲覧).
- 344 Sakugawa(1990): Sakugawa, H., Kaplan, I. R., Tsai, W. and Cohen, Y. Atmospheric
345 hydrogen peroxide. Environ. Sci. Technol. 24:1452-1462. 1990.
- 346 U.S.EPA(1977): U.S.EPA Review of The Environmental Fate of Selected Chemicals.
347 EPA-560/5-77-003. 1977.
- 348 化学便覧: 日本化学会編 化学便覧基礎編Ⅱ, 改訂 5 版, 丸善. 2004.
- 349
- 350 **2-2 その他**
- 351 特になし。

情報源略称	詳細等
ACD	ACD/Labs v2015
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, Version 2013, CRC-Press
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUCLID	EU ECB International Uniform Chemical Information Database
Merck	The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
REACH登録情報	EU ECHA Information on Registered Substances
SIDS	OECD: SIDSレポート
化学便覧	化学便覧 基礎編 II 改訂5版. 2004

基本情報

優先通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	融点	-40 °C[50 wt.% in H2O, stabilized]	-40							2B	×			p.1464
2	融点	-40 °C[35 wt.% in H2O]	-40							2B	×			p.1464
3 CCD	凝固点	-0.41 °C	-0.41	-	-	-	-	-	-	2B	×	-	記述なし。詳細不明(実測値かも不明)。	Hydrogen Peroxide
4 CRC	融点	-0.43 °C	-0.43	-	-	-	-	-	-	2B	×	-		Physical Constants of Inorganic Compounds (Section 4)
5	融点	-0.43 °C	-0.43	-	-	-	-	-	-	2B	×	-		Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
6 EPI Suite	融点	205.04 °C	205.04	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	無機化合物のためワーニング		
7 HSDB	融点	-0.43 °C	-0.43							2B	○		Budavari, S. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 1996., p. 822	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
8 IUCLID	融点	-52 °C[H2O2 50 % w/w in water]	-52							4A	×			p.38
9	融点	-40 °C[H2O2 70 % w/w in water]	-40							4A	×			p.38
10	融点	-33 °C[H2O2 35 % w/w in water]	-33							4A	×			p.38
11 Merck	融点	-0.43 °C	-0.43	-	-	-	-	-	-	2B	○		Shanley, E. S. and F. P. Greenspan, "Highly Concentrated Hydrogen Peroxide - Physical and Chemical Properties," Ind. Eng. Chem., 39 1536-43(1947). REVIEW: Hydrogen peroxide, A. C. S. Monograph No. 128. By WALTER C. SCHUMB, CHARLES N. SATTERFIELD, and RALPH L. WENTWORTH. Reinhold	Monograph Number: 0004798

基本情報

優先通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
12 PhysProp	融点	-0.43 °C	-0.43	-	-	-	-	-	-	2B	×	-	記述なし。詳細不明(実測値かも不明)。	-
13 REACH登録 情報	凝固点	-0.43 °C	-0.43		no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result		4A	×		Schumb WC, Satterfield CN, Wentworth RL. Hydrogen peroxide. 1955, American Chemical Society Monograph Series. Reinhold Publishing Corporation, New York.	Exp WoE Melting point/freezing point.001
14	融点	-0.43 °C	-0.43		no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result		4A	×		Goor G, Kunkel W, Weiberg O. Hydrogen peroxide. 1989, In: Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5th completely revised edition, Elvers B, Hawkins S, Ravenscroft M and Schulz G (eds), VCH, Weinheim, Vol. A 13, p. 444.	Exp WoE Melting point/freezing point.002
15	融点	-0.43 °C	-0.43		no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result		4A	×		Lide DR. Physical constants of inorganic compounds. 2005, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 85th edition, ed. David R Lide, CRC Press, Baton Rouge.	Exp WoE Melting point/freezing point.003
16 SIDS	融点	-0.40 ~ 0.43 °C	0.015				key study			2A	○	引用先のMerckの最新版では、-0.43となっていたため、精査結果としては0.43を採用	Budavari SE (ed) (1989). The Merck Index, Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals, Merck and Co., Inc., USA, Rahway, NJ.	p.8

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	126 °C[35 wt.% in H2O]	126									4A	×			p.1464
2 CCD	150.2 °C	150.2	150.2	760 mmHg	-	-	-	-	-	-	2B	×			Hydrogen Peroxide
3 CRC	150.2 °C	150.2	150.2	760 mmHg	-	-	-	-	-	-	2B	×			Physical Constants of Inorganic Compounds (Section 4)
4	150.2 °C	150.2			-	-	-	-	-	-	4A	×			Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
5 EPI Suite	509.73 °C	509.73			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	無機化合物のためワーニ ング		
6 HSDB	152 °C	152									4A	○		Budavari, S. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 1996., p. 822	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
7 IUCLID	108 °C[H2O2 35 % w/w in water]	108	108.00858	1013 hPa							4A	×			p.38
8	114 °C	114									4A	×			p.38
9	114 °C[H2O2 50 % w/w in water]	114	114.00871	1013 hPa							4A	×			p.38
10	120 °C	120									4A	×			p.38
11	125 °C[H2O2 70 % w/w in water]	125	125.00896	1013 hPa							4A	×			p.38
12 Merck	152 °C	152									4A	○		Shanley, E. S. and F. P. Greenspan, "Highly Concentrated Hydrogen Peroxide - Physical and Chemical Properties," Ind. Eng. Chem., 39 1536-43(1947). REVIEW: Hydrogen peroxide, A. C. S. Monograph No. 128. By WALTER C. SCHUMB, CHARLES N. SATTERFIELD, and RALPH L. WENTWORTH. Reinhold	Monograph Number: 0004798
13 PhysProp	152 °C	152							記述なし。た だし、EPI Suiteの実験 値データベ ースに登録さ れている。		4A	○		記述なし。	
14 REACH登録 情報	125 °C	125	125.00896	1013 hPa		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		MCA Chemical Safety Data Sheet, Hydrogen Peroxide.1969.Manufacturing Chemists Association, Washington D.C..	Exp Supporting Boiling point.001

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
15	108 °C	108	108.00858	1013 hPa		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		MCA.Chemical Safety Data Sheet, Hydrogen Peroxide.1969,Manufacturing Chemists Association, Washington D.C.	Exp Supporting Boiling point.002
16	114 °C	114	114.00871	1013 hPa		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		MCA.Chemical Safety Data Sheet, Hydrogen Peroxide.1969,Manufacturing Chemists Association, Washington D.C..	Exp Supporting Boiling point.003
17	150.2 °C	150.2	150.20953	1013 hPa		no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result		4A	×		Lide DR.Physical constants of inorganic compounds.2005.CRC Handbook of Chemistry and Physics, 85th edition, ed. David R Lide, CRC Press, Baton Rouge.	Exp WoE Boiling point.004
18	150.2 °C	150.2	150.20953	1013 hPa		no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result		4A	×		Schumb WC, Satterfield CN, Wentworth RL.Hydrogen peroxide.1955,American Chemical Society Monograph Series. Reinhold Publishing Corporation, New York.	Exp WoE Boiling point.005
19	SIDS 150~152 °C	150						key study			4A	○	引用先のMerckの最新版で は、152となっていたため、精 査結果としては152を採用	Budavari SE (ed) (1989). The Merck Index, Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals, Merck and Co., Inc., USA, Rahway, NJ.	p.8

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

蒸気圧

収集データ

3106.4099

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク	評価IIにおけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	23.3 mmHg	3106.4112	1578.9225	30 °C							2B	×		不明	p.1464
2 CRC	0.26 kPa	260	184.31468	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×		不明	Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
3	100 Pa	100		13°C	外挿							×	蒸気圧ごとの温度の一覧表より	TRC Thermodynamic Tables, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX.	6-90
4	1 kPa	1000		45°C	外挿							×	蒸気圧ごとの温度の一覧表より	TRC Thermodynamic Tables, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX.	6-90
5	10 kPa	10000		89°C								×	蒸気圧ごとの温度の一覧表より	TRC Thermodynamic Tables, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX.	6-90
6	100 kPa	100000		149.8°C								×	蒸気圧ごとの温度の一覧表より	TRC Thermodynamic Tables, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX.	6-90
7 EPI Suite	530 Pa[2B以上の値を用いて推定(2C)]		375.71839	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	無機化合物のためワーニング		
8 HSDB	1.97 mmHg	262.64507	186.18978	25 °C							2B	×		Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
9 IUCLID	0.48 hPa	48	24.397375	30 °C						[Value = H2O2 partial vapour pressure; Total vapour pressure: = 30.70 hPa (water + H2O2)]	4A	×			p.39
10	0.99 hPa	99	50.319586	30 °C						[Value = H2O2 partial vapour pressure; Total vapour pressure: = 24.00 hPa (water + H2O2)]	4A	×			p.39
11	2 hPa	200	101.65573	30 °C						[Value = H2O2 partial vapour pressure; Total vapour pressure: = 14.70 hPa (water + H2O2)]	4A	×			p.39
12	7 mmHg	933.25658									4A	×			p.39
13 Merck	[Distillable in high vacuum]	単位換算不可			-	-	-	-	-		3	×		Shanley, E. S. and F. P. Greenspan, "Highly Concentrated Hydrogen Peroxide – Physical and Chemical Properties," Ind. Eng. Chem., 39 1536-43(1947). REVIEW: Hydrogen peroxide, A. C. S. Monograph No. 128. By WALTER C. SCHUMB, CHARLES N. SATTERFIELD, and RALPH L. WENTWORTH. Reinhold	Monograph Number: 0004798

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

蒸気圧

収集データ 3106.4099

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク	評価IIにおけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
14 PhysProp	1.97 mmHg	262.64507	186.18978	25 °C	-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	-	DAUBERT,TE & DANNER,RP (1989).	-
15 REACH登録情報	2.99 hPa	299	211.96189	25 °C		no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	estimated by calculation		4C	×		Weast RC, Astle MJ, Beyer WH.Vapor pressure - Variation with Temperature, Elements and inorganic compounds.1986,CRC Handbook of Chemistry and Physics, 66th edition, 1985-1986, D-213, Weast RC, Astle MJ, Beyer WH (eds), Boca Raton: CRC Press Inc.	Calc WoE Vapour pressure.001
16	2 hPa	200	101.65573	30 °C		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		MCA.Chemical Safety Data Sheet, Hydrogen Peroxide..1969,Manufacturing Chemists Association, Washington D.C..	Exp Supporting Vapour pressure.002
17	0.48 hPa	48	24.397375	30 °C	[H2O2 35% w/w in water]	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		MCA.Chemical Safety Data Sheet, Hydrogen Peroxide..1969,Manufacturing Chemists Association, Washington D.C..	Exp Supporting Vapour pressure.003
18	0.99 hPa	99	50.319586	30 °C	[hydrogen peroxide in an aqueous solution (50 % w/w)]	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		MCA.Chemical Safety Data Sheet, Hydrogen Peroxide..1969,Manufacturing Chemists Association, Washington D.C..	Exp Supporting Vapour pressure.004
19	1.95 mmHg	259.97862	184.29953	25 °C		no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result		4A	×		Schumb WC, Satterfield CN, Wentworth RL.Hydrogen peroxide.1955,American Chemical Society Monograph Series. Reinhold Publishing Corporation, New York.	Exp WoE Vapour pressure.005
20 SIDS	3 hPa	300	212.67079	25 °C				key study			2A	×	CRCの値を四捨五入した値	Weast CW and Melvin JA (eds) (1981). CRC Handbook of Chemistry and Physics. CRC Press, Inc., Boca Raton.	p.8
21 化学便覧	258.1 Pa	258.1		25	アントワン式							○	アントワン定数:A(7.96917)、B(1886.76)C(220.6)		II-179
22	178.7 Pa	178.7		20	アントワン式							○	アントワン定数:A(7.96917)、B(1886.76)C(220.6)		II-179

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	1000000 mg/L[2B以上の値を用いて推定(2C)]	1000000	933506.438	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×	無機化合物のためワーニング		
2 HSDB	1E+6 mg/L	1000000	933506.438	25 °C								2B	○	原文、確認したところ「miscible with water」	Radding SB et al; Review of The Environmental Fate of Selected Chemicals. NTIS 68-01-2681 (1977)	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
3	[Miscible with water]	単位換算不可										3	×		Budavari, S. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 1996., p. 822	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
4 IUCLID	100 vol%	単位換算不可										3	×			p.40
5	[miscible]	単位換算不可										3	×			p.40
6 REACH登録情報	100000 mg/L[The substance is miscible in water in all proportions.]	100000	100000	20 °C	7		no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result		4A	×		Goor G, Kunkel W, Weiberg O. Hydrogen peroxide. 1989. In: Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5th completely revised edition, Elvers B, Hawkins S, Ravenscroft M and Schulz G (eds), VCH, Weinheim, Vol. A 13, p. 444.	Exp WoE Water solubility.001
7	[Hydrogen peroxide is miscible in water in all proportions.]	単位換算不可					no	2: reliable with restrictions	supporting study	その他,expert statement		3	×		European Commission. European Union Risk Assessment Report, CAS No 7722-84-1, EINECS No 231-765-0. 2003. Joint Research Centre, European Chemicals Bureau, Institute for Health and Consumer Protection, 2nd Priority List, Vol 38.	Other Supporting Water solubility.002
8	100000 mg/L	100000	100000	20 °C	7		no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	その他,statement based on expert knowledge		4A	×		Kirchner J. Hydrogen peroxide. 1979. In: Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 3rd edition, Vol. 13, New York, John Wiley and Sons.	Other WoE Water solubility.003
9 SIDS	[miscible in all proportions]	単位換算不可										3	○		Weast CW and Melvin JA (eds) (1981). CRC Handbook of Chemistry and Physics. CRC Press, Inc., Boca Raton.	p.8
10 PhysProp	1,000,000mg/L		933506.438	25 °C						experimental result			×		Radding, SB et al., 1977	
11 Merck	miscible with water												○		Shanley, E. S. and F. P. Greenspan, "Highly Concentrated Hydrogen Peroxide - Physical and Chemical Properties," Ind. Eng. Chem., 39 1536-43(1947). REVIEW: Hydrogen peroxide, A. C. S. Monograph No. 128. By WALTER C. SCHUMB, CHARLES N. SATTERFIELD, and RALPH L. WENTWORTH. Reinhold	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における ケーススタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるケース スタディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	-1.57	-1.57			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	無機化合物のためワーニング		
2 PhysProp	-1.57	-1.57			-	-	-	-	estimation	-	2B	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1995).	-
3 REACH登録 情報	-1.57	-1.57	20 °C	7	KOWWIN	no	2: reliable with restriction s	supporting study	estimated by calculation		4C	×		2006,2006.03.15.	Calc Supporting Partition coefficient.001
4 SIDS	-1.5	-1.5			fragment structure analyses				estimated by calculation		4C	○	Partition coefficient n- octanol/water is a parameter that is not particularly important for highly hydrophilic reactive inorganic chemicals such as the hydrogen peroxide. No experimental results were located concerning log Kow of hydrogen peroxide	Degussa AG, 1998	p.27
5	-1.57	-1.57			その 他,LOGKOW program				estimated by calculation		4C	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1995).	p.27

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

◀ Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	0.04335 L/kg[2B以上の 値を用いて推 定 (2C)]	0.04335				KOCWIN				(Q)SAR			x	無機化合物のためワーニング		
2 SIDS	logKoc	0.2	1.584893192								(Q)SAR	log Koc = 0.52.log Kow + 1.02	4C	○	「No experimental results were located concerning adsorption and desorption behaviour of H2O2. Being highly soluble in water (in all proportions) and highly polar substance, no remarkable adsorption to soil and sediment is expected (Table 3.5) and the mobility in soil is expected to be high. 」		p.28

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	0.00167 Pa・m ³ /mol	0.00167					(Q)SAR		2C	×	無機化合物のためワーニング		
2 HSDB	7.04E-9 atm・m ³ /mol	0.000713328	25						2B	×		E. A. Betterton, "Henry's Law Constants of Soluble and Moderately Soluble Organic Gases: Effects on Aqueous Phase Chemistry", chapter in "Gaseous Pollutants-Characterization and Cycling", Adv. Environ. Sci. Technol. Series, Ed. J. O. Nriagu, Wiley, New York; 1992; pp1-50.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
3 PhysProp	0.0000000704 atm・m ³ /mol	0.000713328	25		-	-	experimental result		2B	×		E. A. Betterton, "Henry's Law Constants of Soluble and Moderately Soluble Organic Gases: Effects on Aqueous Phase Chemistry", chapter in "Gaseous Pollutants-Characterization and Cycling", Adv. Environ. Sci. Technol. Series, Ed. J. O. Nriagu, Wiley, New York; 1992; pp1-50.	-
4 REACH登録情報	0.00075 Pa・m ³ /mol	0.00075			2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		Hwang H, Dasgupta P. Thermodynamics of the hydrogen-peroxide water system. 1985. Environmental Science and Technology 19(3), 255-258.	Exp Key Henry's Law constant.001
5 SIDS	0.00075 Pa・m ³ /mol	0.00075	20			key study	experimental result		2A	○		Hwang H and Dasgupta PK (1985). Thermodynamics of the hydrogen peroxide-water system. Environmental Science and Technology 19, 255-258.	p.8, 27
6	0.0002 Pa・m ³ /mol	0.0002	3				experimental result					Hwang H and Dasgupta PK (1985). Thermodynamics of the hydrogen peroxide-water system. Environmental Science and Technology 19, 255-258.	p.27

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における ケーススタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにお けるケースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
7	0.00034 Pa・m ³ /mol	0.00034	10				experimental result					Hwang H and Dasgupta PK (1985). Thermodynamics of the hydrogen peroxide-water system. Environmental Science and Technology 19, 255- 258.	p.27
8	0.0027 Pa・m ³ /mol	0.0027	30				experimental result					Hwang H and Dasgupta PK (1985). Thermodynamics of the hydrogen peroxide-water system. Environmental Science and Technology 19, 255- 258.	p.27

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	評価IIにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 CRC	pKa	11.62	算出不可								x			Perrin, DD Ionization Constants of Inorganic Acids and Bases in Aqueous Solution, Second Edition, Pergamon, Oxford, 1982	Dissociation Constants of Inorganic Acids and Bases (Section 5)
2 HSDB	pKa	11.75									x			Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. 4th ed. Volumes 1: New York, NY. John Wiley and Sons, 1991-Present., p. V13 (95) 963	
3 SIDS	pKa	11.62									O			CRC	
4 PYS Prop	pKa	空欄									x				
5 ACD/pKa	pKa	無機化合物のため推計対象外									x				

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1			BCF		3.162 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C)]	3.162	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	x	無機化合物のためワーニング		
2 SIDS					BCF		1.4L/kg		TG数式による推 定				(Q)SAR			○	There are no experimental results on bioaccumulation available. Hydrogen peroxide is reactive and short-lived polar substance and no bioaccumulation is expected. Also the estimated log Kow of about -1.5 indicates negligible potential of bioconcentration in aquatic organisms.		

基本情報

優先評価化学物質通し番号	89
物質名称	過酸化水素
CAS番号	7722-84-1

分解性

収集データ

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
------	-----	-----	------	-------	-------	-----	-------------	------------------	------	---------	----	----	--------