

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

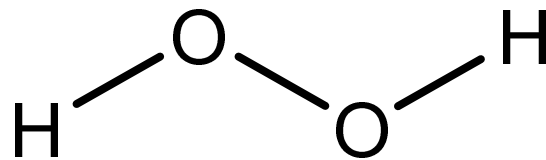
優先評価化学物質のリスク評価(一次)

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

目 次

1		
2	1 評価対象物質の性状	1
3	1-1 物理化学的性状及び濃縮性	1
4	1-2 分解性	5
5	2 【付属資料】	10
6	2-1 物理化学的性状等一覧	10
7	2-2 その他	11
8		
9		

1 評価対象物質の性状

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ータを示す。

1-1 物理化学的性状及び濃縮性

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⁾

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、蓄積性等のレビュー会議（平成 27 年 11 月 4 日）で了承された値

2) EU-RAR (2003)

3) CCD (2007)

4) CRC (2015)

5) HSDB

6) PhysProp

7) EPI Suite

8) 評価 I においては解離定数は考慮しない

9) Merck (2013)

10) 化学便覧

11) MHLW, METI, MOE (2014)

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

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

①融点

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

1 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
2 ~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
3 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
4 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
5 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
6 (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)
7 で -0.43 °C、CRC (2013) で -0.41 °C とされていた。

8 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
9 (-0.43 °C) を用いる。

11 ②沸点

12 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
13 (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。

14 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
15 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
16 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
17 れた値と同じ値 (PhysProp と同じ値) である。

18 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
19 (152 °C) を用いる。

21 ③蒸気圧

22 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
23 Pa として引用した値を 20 °C に補正した値 (212.7 Pa) を用いた。

24 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、
25 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
26 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。

27 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)
28 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
29 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
30 (178.7 Pa) を用いる。

32 ④水に対する溶解度

33 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
34 ×10⁵ mg/L) を用いた。

35 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
36 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、
37 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。

39 ⑤logPow

40 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、
41 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
42 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
43 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。

44 EPI Suite (KOWWIN v1.68) で推計された値は、-1.57 であったが、「INORGANIC Compounds are
45 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

1 る。

2 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
3 ては、logPow は重要ではないとし、Degussa AG(デグサ社)による「fragment structure method」
4 を用いた推定値 (-1.5) を用いている。

5 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
6 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)
7 を用いる。

8

9 ⑥ヘンリー係数

10 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
11 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
12 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
13 Pa・m³/mol である。

14 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。

15 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
16 (0.00075 Pa・m³/mol) を用いる。

17

18 ⑦Koc

19 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
20 「INORGANIC Compounds are outside the estimation domain.」と表示され、推計値の信頼
21 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。

22 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
23 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
24 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 ($\log K_{oc} = 0.2,$
25 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
26 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
27 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。

28 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)
29 を用いる。

30

31 ⑧BCF

32 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
33 に「INORGANIC Compounds are outside the estimation domain.」と表示され、推計値の信
34 頼性は低いと考えられる。

35 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
36 NITE カテゴリーアプローチ対象外の物質である。

37 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、
38 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。

39 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。

40

41 ⑨BMF

42 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
43 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。
44 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。

45

1 ⑩pKa

2 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、
3 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
4 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。

5 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。
6 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
7 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
8 た。

9

1 1-2 分解性

2 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

3
4

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

5 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
6 ビュー会議（平成 27 年 11 月 4 日）で了承された値

7 2) EU-RAR (2003)

8 NA: 情報が得られなかったことを示す

9 ※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
10 と考えられる。

11

12 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
13 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。

14

15 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
16 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
17 されていた。

18 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
19 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
20 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
21 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
22 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
23 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
24 酸化が可能となる。

25 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
26 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
27 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
28 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。
29 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

1 とを確認した。

2
3 ①大気

4 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
5 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
6 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
7 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
8 ではないかと想定している。

9 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
10 間 (1 日) としている。

- 11 ・ 直接光分解半減期：2.14 日
12 (非公開データ)
 - 13 ・ 都心の汚染大気中半減期：数時間
14 (Sakugawa (1990) によるデータとあったが、元文献には記載なし)
 - 15 ・ 山頂の汚染されていない大気中半減期：16～20 時間
16 (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
17 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
18 の倍程度の時間がかかることを仮定して推定した値)
- 19 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。

20
21 ②水中

22 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、
23 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
24 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、
25 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
26 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
27 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
28 間の報告が紹介されている。

29 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
30 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
31 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
32 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
33 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
34 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
35 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
36 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
37 期は 2 分と設定されている。

38 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
39 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
40 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
41 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
42 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、
43 汚染された河川での菌数は 5×10⁶ CFU/ml と示されている。

44 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
45 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

1 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
2 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
3 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
4 (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
5 る減衰率の測定が行われている。

6 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
7 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
8 6.8 $\mu\text{g/L}$ であった。

- 9 ・ 濾過無し：半減期 7.8 時間
- 10 ・ 64、12、5 μm フィルター濾過の平均値：半減期 8.6 時間
- 11 ・ 1 μm フィルター濾過：半減期 31 時間
- 12 ・ 0.45 μm フィルター濾過：24 時間後に減衰していなかった

13 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
14 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。

15 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
16 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、
17 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。
18 半減期は 9.6 時間~21.6 時間であった。

19 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
20 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
21 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。

22

1
2

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

3

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。

4
5
6
7
8
9
10

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。

11

12 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

13

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。

14
15
16
17
18

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。

19

20
21 ③土壌

22
23
24
25

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。

26
27

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

1 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
2 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
3 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
4 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～
5 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、
6 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
7 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。

8 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。

9

10 ④底質

11 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
12 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
13 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
14 れている。

15 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
16 日 (12 時間) 日を用いる。

17

18

2 【付属資料】

2-1 物理化学的性状等一覽

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

出典)

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

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

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

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

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

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

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

HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank.
<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search2/f?./temp/~MtLd7q:1>, (2015-09-15 閲覧).

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

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

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

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

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

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

- 1 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.
- 2 Olszyna(1988): Olszyna K. J., Meagher J. F. and Bailey E. M. (1988) Gas-phase, cloud
3 and rain-water measurements of hydrogen peroxide at a high-elevation site. Atmos.
4 Environ. 22:1699-1706. 1988.
- 5 Pardieck(1992): Pardieck D. L., Bouwer E. J. and Stone A. T. (1992) Hydrogen peroxide
6 use to increase oxidant capacity for in situ bioremediation of contaminated soils and
7 aquifers: A review. Journal of Contaminant Hydrology 9:221-242. 1992.
- 8 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2015-09-14 閲覧).
- 9 Sakugawa(1990): Sakugawa, H., Kaplan, I. R., Tsai, W. and Cohen, Y. Atmospheric
10 hydrogen peroxide. Environ. Sci. Technol. 24:1452-1462. 1990.
- 11 U.S.EPA(1977): U.S.EPA Review of The Environmental Fate of Selected Chemicals.
12 EPA-560/5-77-003. 1977.
- 13 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.
- 14
- 15 **2-2 その他**
- 16 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	評価 I にお ける信頼性 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	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
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

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	評価Ⅰにお ける信頼性 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	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	-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	評価Iにお ける信頼性 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	108.0086	1013 hPa							4A	×			p.38
8	114 °C	114									4A	×			p.38
9	114 °C [H2O2 50 % w/w in water]	114	114.0087	1013 hPa							4A	×			p.38
10	120 °C	120									4A	×			p.38
11	125 °C [H2O2 70 % w/w in water]	125	125.009	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。	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	125.009	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
15	108 °C	108	108.0086	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	114.0087	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

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 誤非	値の種類	値の種類の詳細	評価 I にお ける信頼性 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
17	150.2 °C	150.2	150.2095	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	150.2095	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	評価 I における信頼性ランク	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
14 PhysProp	1.97 mmHg	262.64507	186.18978	25 °C					experimental result		2B	×		DAUBERT,TE & DANNER,RP (1989).	-

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是非	値の種類	値の種類の詳細	評価 I における信頼性ランク	評価 II におけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
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 ケーススタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	評価Ⅰにお ける信頼性 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	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「mixible 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 キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	評価 I にお ける信頼性 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	-1.57	-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	評価 I における 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	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	評価Iにお ける信頼性 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	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
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

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	評価 I にお ける信頼性 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
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	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									○			CRC	
4 PhysProp	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	評価Ⅰにお ける信頼性 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		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.		

参考情報

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
------	-----	-----	------	-------	-------	-----	-------------	------------------	------	---------	----	----	--------