

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

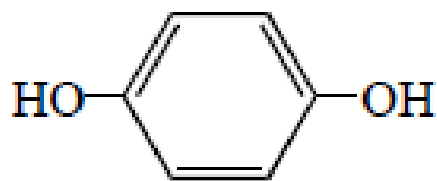
優先評価化学物質のリスク評価(一次)

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

ヒドロキノン

優先評価化学物質通し番号 203



令和5年1月

経済産業省

目 次

| | | |
|----|-----------------------|---|
| 26 | | |
| 27 | | |
| 28 | 1 評価対象物質の性状..... | 1 |
| 29 | 1-1 評価対象物質の設定..... | 1 |
| 30 | 1-2 物理化学的性状及び濃縮性..... | 2 |
| 31 | 1-3 分解性 | 5 |
| 32 | 2 【付属資料】 | 8 |
| 33 | 2-1 物理化学的性状等一覧..... | 8 |
| 34 | 2-2 その他 | 9 |
| 35 | | |
| 36 | | |

37 1 評価対象物質の性状

38 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
39 データを示す。

40


41 1-1 評価対象物質の設定

42 評価対象物質はヒドロキノンとする。

43

44

表 1-1 評価対象物質の構造等

| | |
|--------------|--|
| 評価対象物質構造 |  |
| 評価対象物質名称 | ヒドロキノン |
| 分子式 | C ₆ H ₆ O ₂ |
| 優先評価化学物質通し番号 | 203 |
| CAS 登録番号 | 123-31-9 |

45

46

47 1-2 物理化学的性状及び濃縮性

48 下表にモデル推計に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。なお、表中の下
49 線部は、評価Ⅱにおいて精査した結果、評価Ⅰから変更した値を示している。

50

51 表 1-2 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*

| 項目 | 単位 | 採用値 | 詳細 | 評価Ⅰで 用いた値 (参考) |
|-----------------------------|----------------------------|--|-----------------------|------------------------------------|
| 分子量 | — | 110.11 | — | 110.11 |
| 融点 | °C | 169 ¹⁾ | 測定値 | 169 ¹⁾ |
| 沸点 | °C | 288 ²⁾ | 測定値 (101.3 kPa での測定値) | 288 ²⁾ |
| 蒸気圧 | Pa | 1.7×10^{-7} ¹⁾ | 測定値 (測定値の 20 °C補正值) | 1.7×10^{-7} ¹⁾ |
| 水に対する溶解度 | mg/L | 6.8×10^4 ¹⁾ | 測定値 (測定値の 20 °C補正值) | 6.8×10^4 ¹⁾ |
| 1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow) | — | 0.59 ³⁾ | 測定値 | 0.59 ³⁾ |
| ヘンリー係数 | Pa· m ³ /mol | 3.9×10^{-6} ¹⁾ | 測定値 (25 °Cでの測定値) | 3.9×10^{-6} ¹⁾ |
| 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc) | L/kg | 38 ⁴⁾ | KOCWIN による推計値 | 38 ⁴⁾ |
| 生物濃縮係数 (BCF) | L/kg | 40 ¹⁾ | OECD TG 305 による実測値 | 3.162 ⁴⁾ |
| 生物蓄積係数 (BMF) | — | 1 ⁵⁾ | logPow と BCF から設定 | 1 ⁵⁾ |
| 酸解離定数 (pKa) | — | 9.9 ¹⁾ 、10.85 ³⁾ | 実測値 (測定法の記載なし) | — ⁶⁾ |

52 ※令和3年度第3回化審法のリスク評価等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
53 (令和4年3月1日) で了承された値

1) OECD (2002)

4) EPI Suite (2012)

2) CRC (2020)

5) MHLW, METI, MOE (2014)

3) PhysProp (2017)

6) 評価Ⅰにおいては考慮しない

54

55 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

56 ① 融点

57 評価Ⅰでの採用値169 °Cは、OECD-HPVプログラムのSIARでキースタディとして記載
58 された測定値である (OECD 2002)。評価Ⅱにおいてもこの値、169 °Cを用いる。

59

60 ② 沸点

61 評価Ⅰでの採用値288 °Cは、CRC (2020) に記載されている101.3 kPaでの測定値であ
62 る。CRCは信頼性が高い情報源¹⁾とされており、評価Ⅱにおいてもこの値、288 °Cを用い

¹⁾ 「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「3.1 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源のこと。

63 る。

64 ③ 蒸気圧

65 評価Ⅰでの採用値 1.7×10^{-7} Pa は、OECD-HPVプログラムのSIARでキースタディとし
66 て得られた25 °Cでの測定値 (OECD 2002) を、20 °Cに換算した値である。評価Ⅱにお
67 いてもこの値、 1.7×10^{-7} Paを用いる。

68

69 ④ 水に対する溶解度

70 評価Ⅰでの採用値 6.8×10^4 mg/L は、OECD-HPVプログラムのSIARでキースタディと
71 して得られた25 °Cでの測定値 (OECD 2002) を、20 °Cに換算した値である。評価Ⅱに
72 いてもこの値、 6.8×10^4 mg/Lを用いる。

73

74 ⑤ logPow

75 評価Ⅰでの採用値 0.59 は、PhysProp (2017) に引用されている Hansch らの測定値デー
76 タ (Hansch *et al.*, 1995) である。同様の値は、Sigma-Aldrich (2021) 、EHC (1994) 、HSDB
77 (2017) 、Mackay ら (2006) 、MOE (2011) 、ECHA (2018) などに引用されている。評価Ⅱ
78 においてもこの値、0.59 を用いる。

79

80 ⑥ ヘンリー係数

81 評価Ⅰでの採用値 3.9×10^{-6} Pa·m³/mol は、Howard (1991) により得られた 25 °Cでの測
82 定値で、OECD (2002) に引用されている値である。同様の値は、Mackay (2006) にも引用
83 されている。評価Ⅱにおいてもこの値、 3.9×10^{-6} Pa·m³/mol を用いる。

84

85 ⑦ Koc

86 評価Ⅰでの採用値 38 L/kg は、KOCWIN (v2.00) による logPow からの推計値である。今
87 回調査した文献において測定値は見いだせなかったが、その推計値は 240 L/kg (HSDB
88 (2017) 、MOE (2011))、430 L/kg (NITE (2008))、38.47 L/kg (ECHA (2018))、29.5 L/kg
89 (ECHA (2018))など多岐にわたっている。評価Ⅱでは、推計手法が明確な KOCWIN (v2.00)
90 による推計値、38 L/kg をヒドロキノンの Koc とする。

91

92 ⑧ BCF

93 評価Ⅰでの採用値は、BCFBAF (v3.02) による推計値 (3.162 L/kg) である。一方、OECD
94 (2002) では、OECD TG 305 による実測値、40 L/kg の記載がある。これは、水中濃度が
95 0.05 mg/L の場合、藻類 (*Chlorella fusca*) を用いた1日間の濃縮性試験、魚類 (*Leuciscus*
96 *idus melanotus*) を用いた3日間の濃縮性試験で得られた値である (NITE (2008))。評価Ⅱ
97 では、この実測値 40 L/kg を用いる。

98

99 ⑨ BMF

100 評価Ⅰでの採用値は、logPow (0.59) 及びBCF (3.162 L/kg) から「優先評価化学物質に
101 関するリスク評価の技術ガイダンス」(以下、「技術ガイダンス」という)に従って設定し
102 たものである。BMFの測定値は得られなかったため、評価ⅡにおいてもlogPow (0.59) 及
103 びBCF (40 L/kg) から設定される値(1)を用いる。

104

105 ⑩ 酸解離定数

106 評価Ⅰでは酸解離を考慮しないため、参考値は設定されていない。

107 酸解離定数pKa 9.9および10.85は、HSDB(2017)での採用値である。同様の値は、OECD-
108 SIAR(OECD(2002))のキースタディとして9.9が、PhysProp(2017)では10.85が実測値
109 として記載されている。評価Ⅱでは第一酸解離定数として9.9を、第二酸解離定数10.85
110 を用いる。

111 SPARC(2021)によれば、非解離種の存在比率は、pH 5、6、7、8、9、10で、それぞれ
112 100%、100%、99.9%、98.7%、88.3%及び46.2%である。従って、一般的な環境水
113 中(pH 5~9)ではほとんど解離していない状態で存在していると考えられる。

114

115

116 1-3 分解性

117 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

118

119

表 1-3 分解に係るデータのまとめ*

| 項目 | | 半減期 (日) | 詳細 |
|----|---------------|-------------|------|
| 大気 | 大気における総括分解半減期 | | ND |
| | 機序別の半減期 | OH ラジカルとの反応 | 0.67 |
| | | 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 | | 0.80 |
| | 機序別の半減期 | 生分解 | 7 |
| | | 加水分解 | - |
| | | 酸化反応 | 4.6 |
| | | 光分解 | NA |
| 土壌 | 土壌における総括分解半減期 | | 7 |
| | 機序別の半減期 | 生分解 | 7 |
| | | 加水分解 | NA |
| 底質 | 底質における総括分解半減期 | | NA |
| | 機序別の半減期 | 生分解 | 28 |
| | | 加水分解 | NA |

120 ※ 令和3年度第3回化審法のリスク評価等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
121 (令和4年3月1日)で了承された値

122 ND: 設定しないことを示す

123 NA: 情報が得られなかったことを示す

124 -: 考慮する必要がないと考えられることを示す

1) Howard *et al.* (1991)

4) Mackay (2006)

2) EPI Suite (2012)

5) NITE (2008)

3) MHLW, METI, MOE (2014)

6) HSDB (2017)

125

126 上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、分解に係る情報には、分解の機
127 序ごとの速度定数又は半減期と、分解の機序を区別しない環境媒体ごとのトータルの中
128 減期「総括分解半減期」があり、各環境媒体の「総括分解半減期」に関する情報が得られ
129 ない場合は、分解の機序別の情報を用いる。

130

131 ① 大気

132 Howard (1991)、Mackay (2006)において、大気中のOHラジカルとの気相反応の速度
133 定数の推計値に基づく光酸化反応の半減期を2.6時間から26.1時間と算出している。

134 Howard (1991) はこの半減期を大気中での総括分解半減期としている。この場合の大気中
135 OH ラジカル濃度に関する情報が得られなかったため、この総括分解半減期は採用しない
136 こととした。

137 ① -1 OH ラジカルとの反応の半減期

138 大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値に関する情報は得られなかった
139 ため、AOPWIN (v1.92) (EPI Suite (2012))により推計された $2.32 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ を半
140 減期算出に採用する。この反応速度定数は HSDB (2017) 、PhysProp (2017) にも記載され
141 ている。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスに従い $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$ とした場
142 合、半減期は 0.67 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (0.67 日) を用いる。

143 なお、MOE (2011) 、NITE (2008) においても反応速度定数についての記載があり、同様
144 の計算を行うとそれぞれ 0.67 日、0.71 日となる。

145

146 ② 水中

147 水中での総括分解半減期に関する情報として、Howard (1991) による水中での光酸化の
148 半減期をもとに得られた 23 分から 19.3 時間がある。評価Ⅱでは、水中での総括分解半減
149 期として 0.80 日 (19.3 時間) を用いる。

150 ② -1 生分解の半減期

151 Howard (1991) 、Mackay (2006) において、水中でのスクリーニングテストの試験結果
152 から水中での生分解の半減期を 1~7 日と算出している。評価Ⅱでは生分解による半減期
153 を 7 日とする。

154 なお、MITI (1975) において、被験物質濃度 30 mg/L、活性汚泥濃度 100 mg/L で 14 日
155 間分解度試験を行った結果、BOD 分解度、TOC 分解度、吸光度測定による分解度はそれ
156 ぞれ 70 %、95 %、97.2 %であった。

157 また、OECD (2002) によれば、分解物である 1,4-ベンゾキノンについて、950 mg/L ヒ
158 ドロキノンの酵母培養液中で 0.11 % (1.05 mg/L) が 2 時間で検出されたが、この値をピ
159 ークとして、後の時点では検出されなかったと記載されている。

160 そのため、ヒドロキノンは速やかに分解されるものと予想される。

161

162 ② -2 加水分解の半減期

163 ヒドロキノンには加水分解を受けやすい化学結合はないので、水環境中では加水分解
164 されない (NITE 2008) 。

165

166 ② -3 酸化反応の半減期

167 自動酸化による半減期の測定値として、25 °C の条件下、pH 7、pH 8、pH 9 でそれぞれ
168 111 時間、41 時間、0.8 時間が報告されている (HSDB (2017)、NITE (2008)) 。淡水環境中
169 の pH は中性から弱酸性であることに加え評価の際の安全性を見込み、評価Ⅱでは報告値

170 の最大値である 111 時間（4.6 日）を用いる。

171 ② -4 光分解の半減期

172 水中での光分解（photolysis）の半減期に関する情報は得られなかった。光酸化の半減期
173 に関しては水溶液中のアルキルペルオキシラジカルの測定に基づく値として 23 分から
174 19.3 時間がある（Howard 1991）。

175

176 ③ 土壌

177 土壌での総括分解半減期に関する情報として、Howard (1991) による順応していない状
178 態での水性好気性生分解半減期をもとに得られた 1 日から 7 日がある。評価Ⅱでは、土
179 壌での総括分解半減期として 7 日を用いる。

180 ③ -1 生分解の半減期

181 半減期に関するデータは得られなかったため、評価Ⅱでは、土壌中での生分解半減期は
182 技術ガイダンス(MHLW, METI, MOE (2014))に従って、水中の生分解半減期と同じ 7 日と
183 する。

184

185 ④ 底質

186 底質中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期に関
187 する情報も得られなかった。

188 ④ -1 生分解の半減期

189 半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での生分解半減期は、技術ガイダ
190 ンス (MHLW, METI, MOE (2014))に従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 28 日とす
191 る。

192

193 **2 【付属資料】**

194 **2-1 物理化学的性状等一覧**

195 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

196

197 出典)

198 ECHA: Information on Chemicals – Registered substances. [https://echa.europa.eu/registration-](https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/14417/4/8)
199 [dossier/-/registered-dossier/14417/4/8](https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/14417/4/8) (2018-2-28 閲覧).

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

201 EHC (1994): <https://incchem.org/documents/ehc/ehc/ehc157.htm#PartNumber:2>

202

203 Hansch, C., A. Leo and D. Hoekman. (1995) : Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and
204 Steric Constants. American Chemical Society.

205

206 Howard (1991): Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., and Michalenko,
207 E.M. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New
208 York, Washington DC, Lewis Publishers.

209

210 HSDB (2017) : Pubchem: US NIH. 2017 <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/785>
211 (2017-12-3 閲覧).

212

213 Mackay(2006): Mackay, D., Shiu, W.Y., Ma, K.-C. and Lee, S. C. 2006 Handbooks of
214 Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, 2nd Ed. CRC-Press

215

216 Meylan, W., Howard, P.H. 1991 Bond contribution method for estimating Henry's law
217 constants. *Environ. Toxicol. Chem.* 1283-1293.

218 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
219 ガイダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

220 MITI (1975): ハイドロキノンの分解度試験成績報告書. 既存化学物質点検, 1975.

221 MOE (2011):化学物質の環境リスク初期評価書 2011

222 <http://www.env.go.jp/chemi/report/h24-01/pdf/chpt1/1-2-2-10.pdf>

223 NITE (2008) : 化学物質の初期リスク評価書(2008) Ver. 1.0 No.114 ヒドロキノン 製品
224 評価技術基盤機構、化学物質評価研究機構、新エネルギー・産業技術総合開発機構.

- 225 OECD (2002): Hydroquinone SIDS Initial Assessment Report for SIAM 4.
226
227 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-12-11 閲覧).
228 Rumble, J.R., Bruno T.J. and Doa, M. J. 2020-2021 CRC Handbook of Chemistry and Physics,
229 101th ed., CRC Press, Washington, D.C.
230 SPARC 2021 : ARChem's physicochemical calculator <http://www.archemcalc.com/sparc.html>
231
232 Sigma-Aldrich 2021 <https://www.sigmaaldrich.com/JP/ja/sds/sial/h9003>
233
234 **2-2 その他**
235 特になし。
236

| 情報源略称 | 詳細等 |
|--------------|---|
| Aldrich | Sigma-Aldrich試薬カタログ |
| CCD | Hawley' s Condensed Chemical Dictionary, 16th, John Wiley & Sons |
| CRC | CRC Handbook of Chemistry and Physics, 97th, CRC-Press |
| ECHA | Information on Chemicals - Registered substances. |
| EHC | WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」 |
| EPI Suite | U.S.EPA EPI Suite |
| Howard Deg | Handbook of Environmental Degradation Rates |
| HSDB | Hazardous Substances Data Bank (HSDB) |
| Mackay | Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition |
| Merck | The Merck Index, 15th Ed, Merck & Co, RSC Publishing |
| MOE初期評価 | 環境省環境リスク評価室:「化学物質の環境リスク評価」 |
| NITE初期リスク評価書 | (独)製品評価技術基盤機構:「化学物質の初期リスク評価書」 |
| PhysProp | SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009 |
| SIDS | OECD: SIDSレポート |
| SPARC | SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry |
| 既存点検事業 | 化審法既存点検事業の試験結果 |

基本情報

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

分子量

収集データ

| 情報源名 | 値 | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-----------------|---------|----|--|---|
| 1 Aldrich | 110.11 | | | |
| 2 CCD | | | | 737 |
| 3 CRC | | | | Flammability of Chemical Substances, 16-25 |
| 4 CRC | | | | Dissociation Constants of Organic Acids and Bases, 5-91 |
| 5 CRC | | | | Enthalpy of Fusion, 6-156 |
| 6 CRC | 110.111 | | | Physical Constants of Organic Compounds, 3-304 |
| 7 CRC | 110.111 | | | Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds, 5-153 |
| 8 CRC | 110.111 | | | Physical Constants of Organic Compounds 等 |
| 9 EHC | 110.11 | | | |
| 10 EPI Suite | 110.11 | | | |
| 11 HSDB | 110.11 | | O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2013., p. 891 | 8.2 Molecular Weight |
| 12 Mackay | 110.111 | | | 2964 |
| 13 Merck | 110.11 | | | 891 |
| 14 MOE初期評価 | 110.11 | | - | p.1 |
| 15 MOE初期評価 | 110.1 | | - | p.1 |
| 16 NITE初期リスク評価書 | 110.11 | | | p.1 |
| 17 PhysProp | 110.11 | | | http://esc.syrres.com/fatepointer/webprop.asp?CAS=123319 |
| 18 ECHA | | | | Substance identity |
| 19 SIDS | 110.11 | | | p.8 |
| 20 既存点検事業 | | | | |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|----------------|----|----------------------|--------------|---------|-----|-------------|--------------------------|--------|----------------|---------------------|------------------------|------------------------|----|--|---|
| 1 Aldrich | 融点 | 172~175 ° C[lit.] | 173.5 | - | | | | - | | 2B | × | × | | | |
| 2 Aldrich | 融点 | 171~175 ° C | 173 | - | | | | - | | 2B | × | × | | | |
| 3 CCD | 融点 | 170 °C | 170 | - | | | | - | | 2B | × | × | | | 737 |
| 4 CRC | 融点 | 173 ° C[173(2)] | 173 | - | | | | - | | 2B | × | × | | | 98th Physical Constants of Organic Compounds |
| 5 CRC | 融点 | 173 °C | 173 | - | | | | - | | 2B | × | × | | | 98th Enthalpy of Fusion |
| 6 EHC | 融点 | 173~174 ° C | 173.5 | - | - | | | - | | 2B | × | × | | | |
| 7 EPI Suite | 融点 | 45.73 °C | 45.73 | MPBPWIN | | | | (Q)SAR | Weighted Value | 2C | × | × | | | |
| 8 HSDB | 融点 | 172.3 °C | 172.3 | | | | | - | | 2B | × | × | | ACGIH Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices. 7th ed. Cincinnati, OH: American Conference of Governmental Industrial Hygienists, 2014 | 8.16 Other Experimental Properties (Complete) |
| 9 HSDB | 融点 | 173 °C | 173 | | | | | - | | 2B | × | × | | Haynes, W.M. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 94th Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2013-2014, p. 3-304 | 8.7 Melting Point |
| 10 HSDB | 融点 | 170~171 ° C | 170.5 | | | | | - | | 2B | × | × | | O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2013., p. 891 | 8.7 Melting Point |
| 11 Mackay | 融点 | 172.4 °C | 172.4 | - | | | | - | | 2B | ○ | × | | Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, Boca Raton, Florida. | 2964 |
| 12 Merck | 融点 | 170~171 ° C | 170.5 | - | | | | - | | 2B | × | × | | | 891 |
| 13 MOE初期評 価 | 融点 | 170~171 ° C | 170.5 | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | O'Neil, M.J. ed. (2001): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc. (CD- ROM).. | p.1 |
| 14 MOE初期評 価 | 融点 | 170~171 ° C | 170.5 | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | The Merck Index. 13th Ed (2001): Merck and Co. Inc.. | p.1 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|------|---------|----|--------------|-------|-----|-------------|--------------------------|------|---------|---------------------|------------------------|------------------------|----|--|--------|
| 15 | MOE初期評価 | 融点 | 172.4 °C | 172.4 | - | - | - | - | - | 2B | × | × | | Lide, D.R. ed. (2005): CRC Handbook of Chemistry and Physics, CD-ROM Version 2005, Boca Raton, CRC Press. (CD-ROM).. | p.1 |
| 16 | MOE初期評価 | 融点 | 172 °C | 172 | - | - | - | - | - | 2B | × | × | | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 244.. Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).. | p.1 |
| 17 | MOE初期評価 | 融点 | 170~171 °C | 170.5 | - | - | - | - | - | 2B | × | × | | Budavari, S. (ed.). The Merck Index - Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals. Rahway, NJ: Merck and Co., Inc., 1989. 763. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]. | p.1 |
| 18 | MOE初期評価 | 融点 | 172 °C | 172 | | | | | | 2B | × | × | | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 244. Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM). | p.1 |
| 19 | MOE初期評価 | 融点 | 170~171 °C | 170.5 | | | | | | 2B | × | × | | O'Neil, M.J. ed. (2001): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc. (CD-ROM). | p.1 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------------------|----|----------------|--------------|-------|---------|-------------------------------------|--------------------------|------------------------|---------|---------------------|------------------------|------------------------|----|---|---|
| 20 MOE初期評 価 | 融点 | 172.4 °C | 172.4 | | | | | - | | 2B | ○ | × | | Lide, D.R. ed. (2005): CRC Handbook of Chemistry and Physics, CD-ROM Version 2005, Boca Raton, CRC Press. (CD-ROM). | p.1 |
| 21 NITE初期リ スク評価書 | 融点 | 170~171 ° C | 170.5 | | | | | その他 (測定 値) | | 2B | × | × | | Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ. | p.2 |
| 22 PhysProp | 融点 | 170~171 ° C | 170.5 | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | | http://esc.syrres.com/fatepointer/webprop.asp?CAS=123319 |
| 23 ECHA | 融点 | 172.3 °C | 172.3 | - | no data | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | 4A | × | × | | review article or handbook. Handbook of Data on Organic Compounds, 3rd Edition, Vol. I. Lide DR, Milne GWA (Ed.) (1994) CRC Press, Boca Raton, Ann Arbor, London, Tokyo | Exp Key Melting point / freezing point 001 |
| 24 ECHA | 融点 | 172.3 °C | 172.3 | - | no data | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | 4A | × | × | | other: database. SRC PhysProp-database. Syracuse Research Corporation (2010) Syracuse Research Corporation, http://esc.syrres.com/interkow/webprop.exe?CAS=123-31-9 | Exp Key Melting point / freezing point 002 |
| 25 SIDS | 融点 | 169 °C | 169 | - | no | | | experimental result | | 2B | × | ○ | | Material Safety Data Sheet, Eastman Chemical Company. | p.4;p.44 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-------------|--------------------|--------------|-------------------------------|---|---------|-----|-------------|--------------------------|--------|--------------------------------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|----|---|--|
| 1 Aldrich | 285 °C[(lit.)] | 285 | | | - | | | | - | | 4A | × | × | | | |
| 2 Aldrich | 285 °C | 285 | | | - | | | | - | | 4A | × | × | | | |
| 3 CCD | 285 °C | 285 | | | - | | | | - | | 4A | × | × | | | 737 |
| 4 CRC | 288 °C | 288 | 288 | 101.325 kPa | - | | | | - | | 2B | ○ | ○ | | | 98th Flammability of Chemical Substances |
| 5 CRC | 288 ° C[288(5)] | 288 | 288 | 101.325 kPa[760 mmHg (101.325 kPa)] | - | | | | - | | 2B | ○ | ○ | | | 98th Physical Constants of Organic Compounds |
| 6 EHC | 287 °C | 287 | | | - | - | | | - | | 4A | × | × | | | |
| 7 EPI Suite | 229.69 °C | 229.69 | | | MPBPWIN | | | | (Q)SAR | Adapted Stein and Brown Method | 2C | × | × | | | |
| 8 HSDB | 286 °C | 286 | | | - | - | - | - | - | | 4A | × | × | | ACGIH Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices, 7th ed. Cincinnati, OH: American Conference of Governmental Industrial Hygienists, 2014] | 65/88 |
| 9 HSDB | 285~287 °C | 286 | | | - | - | - | - | - | | 4A | × | × | | O'Neil, M.J. (ed.), The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2013., p. 891 | 62/88 |
| 10 HSDB | 288 °C | 288 | | | - | - | - | - | - | | 4A | × | × | | Haynes, W.M. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics, 94th Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2013- 2014, p. 3-304] | 65/88 |
| 11 HSDB | 285~287 °C | 286 | | | - | - | - | - | - | | 4A | × | × | | O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2013., p. 891 | 8.6 Boiling Point |
| 12 HSDB | 286 °C | 286 | | | - | - | - | - | - | | 4A | × | × | | ACGIH Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices, 7th ed. Cincinnati, OH: American Conference of Governmental Industrial Hygienists, 2014 | 8.16 Other Experimental Properties (Complete) |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------------------|------------|--------------|-------------------------------|------------|-------|-----|-------------|--------------------------|--------------|---------|---------------------|------------------------|------------------------|----|--|---|
| 13 Mackay | 285 °C | 285 | | | - | | | | - | | 4A | × | × | | Weast, R.C., Editor (1982-83) Handbook of Chemistry and Physics. 63th ed., CRC Press, Boca Raton, Florida.; Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, Boca Raton, Florida. | 2964 |
| 14 Merck | 285~287 °C | 286 | | | - | | | | - | | 4A | × | × | | | 891 |
| 15 MOE初期評 価 | 218.2 °C | 218.2 | | | | | | | - | | 4A | × | × | | Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM). | p.1 |
| 16 MOE初期評 価 | 287 °C | 287 | | | | | | | - | | 4A | × | × | | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 244. | p.1 |
| 17 MOE初期評 価 | 285~287 °C | 286 | | | | | | | - | | 4A | × | × | | O'Neil, M.J. ed. (2001): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc. (CD-ROM). | p.1 |
| 18 MOE初期評 価 | 285 °C | 285 | 285 | 760 mmHg | | | | | - | | 2B | × | × | | Lide, D.R. ed. (2005): CRC Handbook of Chemistry and Physics, CD-ROM Version 2005, Boca Raton, CRC Press. (CD-ROM). | p.1 |
| 19 NITE初期リ スク評価書 | 285~287 °C | 286 | | | | | | | その他(測 定値) | | 4A | × | × | | Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ. | p.2 |
| 20 PhysProp | 286 °C | 286 | | | - | - | - | - | - | | 4A | × | × | | | http://esc.syres.com/fat/epointer/webprop.asp?CAS=123319 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|----|------|--------|--------------|-------------------------------|------------|-------|------------|-------------------------------------|--------------------------|------------------------|---------|---------------------|-----------------------|-----------------------|----|--|------------------------------|
| 21 | ECHA | 287 °C | 287 | 287.0126 | 1013 hPa | - | no data | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | 4A | × | × | | other: database. PhysProp database. Syracuse Research Corporation (2010) Syracuse Research Corporation, http://esc.syrres.com/interkow/webprop.exe?CAS=123-31-9 | Exp Key Boiling point 001 |
| 22 | ECHA | 287 °C | 287 | 287.0126 | 1013 hPa | - | no data | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | 4A | × | × | | review article or handbook. Encyclopedia of Chemical Technology (3rd ed., Vol. 13). Kirk-Othmer (1984) John Wiley & Sons, New York, pp 39 - 69 | Exp Key Boiling point 002 |
| 23 | SIDS | 286 °C | 286 | | | - | no | | | experimental result | | 4A | × | × | | Material Safety Data Sheet, Eastman Chemical Company. | p.4;p.44 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

蒸気圧

収集データ

| 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Ⅰ) | キースタ ディー該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディー該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-------------|---------------|-----------|------------------|----------|---------|-----|-------------|--------------------|---------|---|---------------|------------------|------------------|----|---|---|
| 1 Aldrich | 1 mmHg | 133.3224 | 0.459142 | 132 °C | - | | | | - | | 4A | × | × | | | |
| 2 EHC | 8 kPa | 8000 | 3.012102 | 203 °C | - | - | | | - | | 4A | × | × | | | |
| 3 EHC | 0.533 kPa | 533 | 0.976218 | 150 °C | - | - | | | - | | 4A | × | × | | | |
| 4 EHC | 0.133 kPa | 133 | 0.451375 | 132.4 °C | - | - | | | - | | 4A | × | × | | | |
| 5 EHC | 2.4E-3 Pa | 0.0024 | 1.70E-03 | 25 °C | - | - | | | - | | 2B | × | × | | | |
| 6 EPI Suite | 0.00225 Pa | 0.00225 | 1.60E-03 | 25 °C | MPBPWIN | | | | (Q)SAR | Modified Grain Method | 2C | × | × | | | |
| 7 HSDB | 200 mmHg | 26664.47 | 4.227829 | 238 °C | | | | | - | | 4A | × | × | | Verschuere, K. Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. Volumes 1-2. 4th ed. John Wiley & Sons. New York, NY. 2001, p. V2: 1291 | 8.16 Other Experimental Properties (Complete) |
| 8 HSDB | 2.4E-005 mmHg | 3.20E-03 | | | | | | | - | | 4A | × | × | | Daubert TE, Danner RP; Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, DC: Taylor and Francis (1989) | 6.5 Environmental Fate (Complete) |
| 9 HSDB | 4.0 mmHg | 533.2895 | 0.976748 | 150 °C | | | | | - | | 4A | × | × | | Verschuere, K. Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. Volumes 1-2. 4th ed. John Wiley & Sons. New York, NY. 2001, p. V2: 1291 | 8.16 Other Experimental Properties (Complete) |
| 10 HSDB | 40 mmHg | 5332.895 | 2.706828 | 192 °C | | | | | - | | 4A | × | × | | Verschuere, K. Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. Volumes 1-2. 4th ed. John Wiley & Sons. New York, NY. 2001, p. V2: 1291 | 8.16 Other Experimental Properties (Complete) |
| 11 HSDB | 1.9E-005 mmHg | 2.53E-03 | 1.80E-03 | 25 °C | | | | | - | | 2B | × | × | | Jones AH; J Chem Eng Data 5: 196-200 (1960) | 8.14 Vapor Pressure |
| 12 Mackay | 0.00255 Pa | 0.00255 | 1.81E-03 | 25 °C | - | | | | 内挿 (補間) | Ps, interpolated, Antoine eq. | 2B | ○ | × | | Stephenson, RM., Malanowski, A. (1987) Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. Elsevier, New York. | 2964 |
| 13 Mackay | 0.03940 Pa | 0.0394 | 0.027931 | 25 °C | - | | | | 外挿 (補外) | extrapolated - liquid, Antoine eq., temp range 159.1-286 °C | 2B | × | × | | Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1984) The Vapour Pressures of Pure Substances. 2nd ed., Elsevier, Amsterdam, The Netherlands. | 2964 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

蒸気圧

収集データ

| 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Ⅰ) | キースタ ディー該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディー該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|------------------|---|-----------|------------------|----------|-------|-----|-------------|--------------------|------------------|---|---------------|------------------|------------------|----|---|--------|
| 14 Mackay | 0.00276 Pa | 0.00276 | 1.96E-03 | 25 °C | - | | | | 外挿 (補 外) | gas saturation, extrapolated - Antoine eq., measured range 68-126°C | 2B | × | × | | Bender, R., Bieling, V., Maurer, G. (1983) The vapor pressures of solids: anthracene, hydroquinone, and resorcinol. J. Chem. Thermodyn. 15, 585-594. | 2964 |
| 15 Mackay | 133.3 Pa | 133.3 | 0.452393 | 132.4 °C | - | | | | - | | 4A | × | × | | Stull, D.R. (1947) Vapor pressure of pure substances: Organic compounds. Ind. Eng. Chem. 39(4), 517-560. | 2964 |
| 16 MOE初期評 価 | 0.00067 mmHg[6.7 0×10 ⁻⁴ mmHg (=0.0893 Pa) (外挿 | 8.93E-02 | 6.33E-02 | 25 °C | - | - | - | - | 外挿 (補 外) | | 4C | × | × | | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 244.. | p.1 |
| 17 MOE初期評 価 | 0.00067 mmHg | 8.93E-02 | 6.33E-02 | 25 °C | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Daubert, T.E. and R.P. Danner (1991): Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals. Data Compilation. Hemisphere Pub Co.. | p.1 |
| 18 MOE初期評 価 | 0.00067 mmHg | 8.93E-02 | 6.33E-02 | 25 °C | - | - | - | - | その他 (推 定値), 推 定値 | | 4C | × | × | | Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989. [HSDB]. | p.1 |
| 19 MOE初期評 価 | 6.70E-004 mmHg[0.0 893Pa 情報 源の記載 のまま] | 8.93E-02 | 6.33E-02 | 25 °C | | | | | 外挿 (補 外) | | 4C | × | × | | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 244. | p.1 |
| 20 NITE初期リ スク評価書 | 0.12 Pa | 0.12 | 0.12 | 20 °C | | | | | その他 | | 2B | × | × | | IPCS, International Programme on Chemical Safety (2002) ICSC, International Chemical Safety Cards. Geneva. | p.2 |
| 21 NITE初期リ スク評価書 | 530 Pa | 530 | 0.970724 | 150 °C | | | | | その他 | | 4A | × | × | | Verschuereen, K. (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, NY. | p.2 |
| 22 NITE初期リ スク評価書 | 5.3 kPa | 5300 | 2.690132 | 192 °C | | | | | その他 | | 4A | × | × | | Verschuereen, K. (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, NY. | p.2 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

蒸気圧

収集データ

| 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 I) | キースタディ-該非 (評価 I) | キースタディ-該非 (評価 II) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-----------------|--------------------------------------|-----------|------------------|--------|-------|-----|-------------------------------|------------------|--------------------------|-------------------|---------------|------------------|-------------------|----|---|---|
| 23 NITE初期リスク評価書 | 27 kPa | 27000 | 4.281029 | 238 °C | | | | | その他 | | 4A | × | × | | Verschueren, K. (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, NY. | p.2 |
| 24 PhysProp | 0.000024 mmHg | 3.20E-03 | 2.27E-03 | 25 °C | - | - | - | - | 外挿 (補外) | Extrapolated Data | 4C | × | × | | DAUBERT,TE & DANNER,RP (1991) | http://esc.syrres.com/fat/epointer/webprop.asp?CAS=123319 |
| 25 ECHA | 0 hPa[Converted from 0.000024 mm Hg] | 0 | 0 | 25 °C | - | - | 2: reliable with restrictions | key study | estimated by calculation | | 4C | × | × | | other: database. PhysProp-database. Syracuse Research Corporation (2010) Syracuse Research Corporation, http://esc.syrres.com/interkow/webprop.exe?CAS=123-31-9 | Calc Key Vapour pressure 001 |
| 26 SIDS | 2.34E-10 kPa | 2.34E-07 | 1.66E-07 | 25 °C | - | no | | | experimental result | | 2B | × | ○ | | Material Safety Data Sheet, Eastman Chemical Company. | p.4;p.44 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS_F 等 | 203000 |
| PACS_Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA_IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度 | 統一表記 [mg/L] | 20°C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 I) | キースタ ディ-該非 (評価 I) | キースタ ディ-該非 (評価 II) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|--------------|--------------------------------------|----------------|----------------------------|------------|----|----------|-----|-------------|--------------------------|--------|---------|----------------------|-------------------------|--------------------------|----|--|---|
| 1 Aldrich | 50 g/L | 50000 | | | | - | | | | - | | 4A | x | x | | | |
| 2 Aldrich | 50 mg/mL[clear | 単位換算不可 | | | | - | | | | - | | 3 | x | x | | | |
| 3 CCD | [Soluble in water] | 単位換算不可 | | | | - | | | | - | | 3 | x | x | | | 737 |
| 4 CRC | [soluble] | 単位換算不可 | | | | - | - | - | - | - | | 3 | x | x | | | Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) |
| 5 CRC | 7.42 mass % | 80146.89998 | 74817.6471 | 25 °C | | - | - | - | - | - | | 2B | x | x | | Stephen, H., and Stephen, T., Solubilities of Organic and Inorganic Compounds, MacMillan, New York, 1963. | Aquarius Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5) |
| 6 CRC | 80.1 g/Kg | 80100 | 74773.8657 | 25 °C | | - | - | - | - | - | | 2B | x | x | | Stephen, H., and Stephen, T., Solubilities of Organic and Inorganic Compounds, MacMillan, New York, 1963. | Aquarius Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5) |
| 7 CRC | [soluble in H2O] | 単位換算不可 | | | | - | | | | - | | 3 | x | x | | | 98th Physical Constants of Organic Compounds |
| 8 CRC | 80.1 g/kg | 80100 | 74773.8657 | 25 °C | | - | | | | - | | 2B | x | x | | Stephen, H., and Stephen, T., Solubilities of Organic and Inorganic Compounds, MacMillan, New York, 1963. | 98th Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds |
| 9 EHC | 59 g/L | 59000 | 63353.6655 | 15 °C | | - | - | | | - | | 2B | x | x | | | |
| 10 EHC | 94 g/L | 94000 | 84293.0675 | 28 °C | | - | - | | | - | | 2B | x | x | | | |
| 11 EHC | 70 g/L | 70000 | 65345.4506 | 25 °C | | - | - | | | - | | 2B | x | x | | | |
| 12 EPI Suite | 2.877e+004 mg/L | 28770 | 26856.9802 | 25 °C | | WSKOWWIN | | | | (Q)SAR | | 2C | x | x | | | |
| 13 HSDB | 3.85 g/L | 3850 | 5199.1397 | 0 °C | | - | - | - | - | - | | 4A | x | x | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 63/88 |
| 14 HSDB | 66.4 g/L | 66400 | 27551.4099 | 100 °C | | - | - | - | - | - | | 4A | x | x | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 63/88 |
| 15 HSDB | 46.8 g/L | 46800 | 23307.7974 | 80 °C | | - | - | - | - | - | | 4A | x | x | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 63/88 |
| 16 HSDB | 25.9 g/L[25/9 g/L at 60 deg C] | 25900 | 15825.3589 | 60 °C | | - | - | - | - | - | | 4A | x | x | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 63/88 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS_F 等 | 203000 |
| PACS_Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA_IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度 | 統一表記 [mg/L] | 20°C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 I) | キースタ ディ-該非 (評価 I) | キースタ ディ-該非 (評価 II) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------|--|----------------|----------------------------|------------|----|-------|-----|-------------|--------------------------|------|---------|----------------------|-------------------------|--------------------------|----|--|----------------------------|
| 17 HSDB | 11.5 g/L | 11500 | 8848.96904 | 40 °C | - | - | - | - | - | - | | 4A | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 63/88 |
| 18 HSDB | 8.76 g/L | 8760 | 7651.1106 | 30 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 63/88 |
| 19 HSDB | 5.12 g/L | 5120 | 5918.36061 | 10 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 63/88 |
| 20 HSDB | 72000 mg/L [in water, 72,000 mg/L at 25 deg C] | 72000 | 67212.4635 | 25 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Granger FS, Nelson JM; J Am Chem Soc 43: 1403-7 (1921) | 63/88 |
| 21 HSDB | 6.72 g/L | 6720 | 6720 | 20 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 63/88 |
| 22 HSDB | 8.3 g/100 g solvent | 単位換算不可 | | 30 °C | - | - | - | - | - | - | | 3 | × | × | | Hudnall PM; Hydroquinone. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 7th ed. (1999-2014). New York, NY: John Wiley & Sons. Online Posting Date: 15 Jun 2000 | 63/88 |
| 23 HSDB | 7 % [7% soluble in water at 25 deg C] | 70000 | 65345.4506 | 25 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Cavender FL, O'Donohue J; Phenol and Phenolics. Patty's Toxicology. 6th ed. (1999-2014). New York, NY: John Wiley & Sons, Inc. On-line posting date: 17 Aug 2012 | 63/88 |
| 24 HSDB | 5.40 g/L | 5400 | 5798.47108 | 15 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 63/88 |
| 25 HSDB | 46.8 g/L | 46800 | 23307.7974 | 80 °C | - | - | - | - | - | - | | 4A | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 8.12 Solubility (Complete) |
| 26 HSDB | 25.9 g/L | 25900 | 15825.3589 | 60 °C | - | - | - | - | - | - | | 4A | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 8.12 Solubility (Complete) |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS_F 等 | 203000 |
| PACS_Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA_IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度 | 統一表記 [mg/L] | 20°C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 I) | キースタ ディ-該非 (評価 I) | キースタ ディ-該非 (評価 II) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-----------|------------|----------------|----------------------------|------------|----|-------|-----|-------------|--------------------------|------|---------|----------------------|-------------------------|--------------------------|----|--|----------------------------|
| 27 HSDB | 11.5 g/L | 11500 | 8848.96904 | 40 °C | | | | | | - | | 4A | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 8.12 Solubility (Complete) |
| 28 HSDB | 8.76 g/L | 8760 | 7651.1106 | 30 °C | | | | | | - | | 2B | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 8.12 Solubility (Complete) |
| 29 HSDB | 5.40 g/L | 5400 | 5798.47108 | 15 °C | | | | | | - | | 2B | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 8.12 Solubility (Complete) |
| 30 HSDB | 5.12 g/L | 5120 | 5918.36061 | 10 °C | | | | | | - | | 2B | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 8.12 Solubility (Complete) |
| 31 HSDB | 3.85 g/L | 3850 | 5199.1397 | 0 °C | | | | | | - | | 4A | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 8.12 Solubility (Complete) |
| 32 HSDB | 6.72 g/L | 6720 | 6720 | 20 °C | | | | | | - | | 2B | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 8.12 Solubility (Complete) |
| 33 HSDB | 72000 mg/L | 72000 | 67212.4635 | 25 °C | | | | | | - | | 2B | × | × | | Granger FS, Nelson JM; J Am Chem Soc 43: 1403-7 (1921) | 8.12 Solubility (Complete) |
| 34 HSDB | 66.4 g/L | 66400 | 27551.4099 | 100 °C | | | | | | - | | 4A | × | × | | Yalkowsky, S.H., He, Yan, Jain, P. Handbook of Aqueous Solubility Data Second Edition. CRC Press, Boca Raton, FL 2010, p. 254 | 8.12 Solubility (Complete) |
| 35 HSDB | 7% | 70000 | 65345.4506 | 25 °C | | | | | | - | | 2B | × | × | | Cavender FL, O'Donohue J; Phenol and Phenolics, Patty's Toxicology. 6th ed. (1999-2014). New York, NY: John Wiley & Sons, Inc. On-line posting date: 17 Aug 2012 | 8.12 Solubility (Complete) |
| 36 Mackay | 80750 mg/L | 80750 | 75380.6448 | 25 °C | | | | | | - | | 2B | × | × | | Tsonopoulos, C., Prausnitz, J.M. (1971) Activity coefficients of aromatic solutes in dilute aqueous solutions. Ind. Eng. Chem. Fundam. 10, 593-600. Supplementary materials. | 2964 |
| 37 Mackay | 86450 mg/L | 86450 | 80701.6315 | 25 °C | | | | | | - | | 2B | × | × | | Windholz, M., Editor (1983) The Merck Index. 10th Edition, Merck & Co., Rahway, New Jersey. | 2964 |

| | |
|------------|-----------------|
| PACS_F等 | 203000 |
| PACS_Name等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA_IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度 | 統一表記 [mg/L] | 20°C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Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|----------------|-----------------------------------|----------------|----------------------------|------------|----|-------|-----|-------------|--------------------------|-------------------------|--------------------------------|---------------------|------------------------|------------------------|----|--|--------|
| 38 Mackay | 70000 mg/L | 70000 | 65345.4506 | 25 °C | - | | | | | - | | 2B | × | × | | Rott, B., Viswanathan, R., Freitag, D., Korte, F. (1982) Vergleichende untersuchung der anwendbarkeit von umweltchemikalien. Chemosphere 11, 531-538.; Verschueren, K. (1983) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. 2nd ed., Van Nostrand Reinhold Co., New York. Dean, J. (1985) Lange's Handbook of Chemistry. 13th ed., McGraw-Hill, New York. | 2964 |
| 39 Mackay | 70000 mg/L | 70000 | 67613.0233 | 20~25 °C | - | | | | | - | | 2B | ○ | × | | Geyer, H., Viswanathan, R., Freitag, D., Korte, F. (1981) Relationship between water solubility of organic chemicals and their bioaccumulation by the Alga chlorella. Chemosphere 10, 1307-1313. | 2964 |
| 40 Mackay | 73700 mg/L | 73700 | 68799.4245 | 25 °C | - | | | | | experimenta l result | synthetic method | 2B | × | × | | Walker, W.H., Collett, A.R., Lazzell, C.L. (1931) The solubility relations of the isomeric dihydroxybenzenes. J. Phys. Chem. 35, 3259 | 2964 |
| 41 Mackay | 80140 mg/L | 80140 | 74811.2059 | 25 °C | - | | | | | experimenta l result | shake flask- interferometry | 2B | × | × | | Korman, S., La Mer, V.K (1936) Deuterium exchange equilibria in solution and the quinhydrone electrode. J. Am. Chem. Soc. 58, 1396-1403. | 2964 |
| 42 Mackay | 80000 mg/L | 80000 | 74680.515 | 25 °C | - | | | | | - | | 2B | × | × | | Fieser, L.F., Fieser, M. (1958) Introduction to Organic Chemistry. D.C. Heath & Co., Boston, Mass.; Morrison & Boyd 1959 | 2964 |
| 43 Merck | 0.14[Sol in 14 parts water] | 単位換算不可 | | | - | | | | | - | | 3 | × | × | | | 891 |
| 44 MOE初期評 価 | 59000 mg/L | 59000 | 63353.6655 | 15 °C | - | | | | | - | | 2B | × | × | | Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).. | p.1 |
| 45 MOE初期評 価 | 73300 mg/L | 73300 | 68426.0219 | 25 °C | - | | | | | - | | 2B | × | × | | J. Knox and M. B. Richards (1919): The Basic Properties of Oxygen in Organic Acids and Phenols; and the Quadrivalency of Oxygen, Journal of Chemical Society, 115: 508-531.. | p.1 |

| | |
|------------|-----------------|
| PACS_F等 | 203000 |
| PACS_Name等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA_IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度 | 統一表記 [mg/L] | 20°C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Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------------------|-------------------|----------------|----------------------------|------------|----|-------|-----|-------------|--------------------------|-------------------------|-------------------|---------------------|------------------------|------------------------|----|---|---|
| 46 MOE初期評 価 | 70000 mg/L | 70000 | 65345.4506 | 25 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Verschuere, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).. | p.1 |
| 47 MOE初期評 価 | 94000 mg/L | 94000 | 84293.0675 | 28 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Verschuere, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).. | p.1 |
| 48 MOE初期評 価 | 73.3 g/L | 73300 | 68426.0219 | 25 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | The AQUASOL DATABASE of Aqueous Solubility, 5th Ed. (1992): Univ Az, College of Pharmacy.. | p.1 |
| 49 MOE初期評 価 | 70000 mg/L | 70000 | 65345.4506 | 25 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd. Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(1996). [財団法 人化学物質評価研究機構(2000): 化 学物質安全性(ハザード)評価シート].. | p.1 |
| 50 MOE初期評 価 | 7.0E+004 mg/L | 70000 | 65345.4506 | 25 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Verschuere, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, C | p.1 |
| 51 MOE初期評 価 | 7.33E+004 mg/L | 73300 | 68426.0219 | 25 °C | - | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 244. J. Knox and M. B. Richards (1919): The Basic Properties of Oxygen in Organic Acids and Phenols; and the Quadrivalency of Oxygen, Journal of Chemical Society, 115: 508-531. | p.1 |
| 52 NITE初期リ スク評価書 | 70 g/L | 70000 | 65345.4506 | 25 °C | - | - | - | - | - | その他(測 定値) | | 2B | × | × | | Verschuere, K. (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, NY. | p.2 |
| 53 PhysProp | 72000 mg/L | 72000 | 67212.4635 | 25 °C | - | - | - | - | - | experimenta l result | Experimental Data | 2B | × | × | | GRANGER,FS & NELSON,JM (1921) | http://esc.syrres.com/fatepointer/webprop.asp?CAS=123319 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS_F 等 | 203000 |
| PACS_Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA_IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度 | 統一表記 [mg/L] | 20°C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Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------|----------|----------------|----------------------------|------------|--|-------|---------|-------------------------------------|--------------------------|------------------------|--|---------------------|------------------------|------------------------|----|---|---------------------------------|
| 54 ECHA | 71 g/L | 71000 | 66278.9571 | 25 °C | 2- | | no | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | Solubility based upon averages of at least 2 trials. pH's of 2, 1, and 0 were calculated from 0.01 M HCl, 0.1 HCL and 1.0 M HCl solutions, respectively. | 4C | × | × | | publication. Oxidation and reduction of hydroquinone and quinone from the standpoint of electromotive-force measurement. Granger FS & Nelson JM (1921) Journal of the American Chemical Society. No.43 pp.1401- 1415 | Exp Key Water solubility 001 |
| 55 ECHA | 69.6 g/L | 69600 | 64972.0481 | 25 °C | 1- | | no | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | Solubility based upon averages of at least 2 trials. pH's of 2, 1, and 0 were calculated from 0.01 M HCl, 0.1 HCL and 1.0 M HCl solutions, respectively. | 4C | × | × | | publication. Oxidation and reduction of hydroquinone and quinone from the standpoint of electromotive-force measurement. Granger FS & Nelson JM (1921) Journal of the American Chemical Society. No.43 pp.1401- 1415 | Exp Key Water solubility 001 |
| 56 ECHA | 54.4 g/L | 54400 | 50782.7502 | 25 °C | 0- | | no | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | Solubility based upon averages of at least 2 trials. pH's of 2, 1, and 0 were calculated from 0.01 M HCl, 0.1 HCL and 1.0 M HCl solutions, respectively. | 4C | × | × | | publication. Oxidation and reduction of hydroquinone and quinone from the standpoint of electromotive-force measurement. Granger FS & Nelson JM (1921) Journal of the American Chemical Society. No.43 pp.1401- 1415 | Exp Key Water solubility 001 |
| 57 ECHA | 72 g/L | 72000 | 67212.4635 | 25 °C | [No informa tion on pH given.] | | no data | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | 4A | × | × | | other: database. Hazardous Substances Data Bank. National Library of Medicine (2010) TOXNET http://toxnet.nlm.nih.gov | Exp Key Water solubility 002 |
| 58 ECHA | 72 g/L | 72000 | 67212.4635 | 25 °C | [No informa tion on pH given.] | | no data | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | 4A | × | × | | other: database. PhysProp-database. Syracuse Research Corporation (2010) Syracuse Research Corporation, http://esc.syrres.com/interkow/webpr op.exe?CAS=123-31-9 | Exp Key Water solubility 003 |
| 59 ECHA | 71 g/L | 71000 | 66278.9571 | 25 °C | 4~6 | | no | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | Solubility based upon averages of at least 2 trials. pH's of 2, 1, and 0 were calculated from 0.01 M HCl, 0.1 HCL and 1.0 M HCl solutions, respectively. | 4C | × | × | | publication. Oxidation and reduction of hydroquinone and quinone from the standpoint of electromotive-force measurement. Granger FS & Nelson JM (1921) Journal of the American Chemical Society. No.43 pp.1401- 1415 | Exp Key Water solubility 001 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS_F 等 | 203000 |
| PACS_Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA_IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度 | 統一表記 [mg/L] | 20°C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Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------|------------|----------------|----------------------------|------------|----|-------|-----|-------------|--------------------------|------------------------|---------|---------------------|------------------------|------------------------|----|---|----------|
| 60 SIDS | 73000 mg/L | 73000 | 68145.97 | 25 °C | | - | no | | | experimental result | | 2B | × | ○ | | Sterner, J.H., Oglesby, F.L., and Anderson, B. (1947). Quinone Vapors and Their Harmful Effects. I. Corneal and Conjunctival Injury, J. Ind. Hyg. Toxicol. 29, 60-73. | p.4.p.45 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 | 信頼性ラ ンク (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-------------|--------|--------|------------|----|---------------------------------|-----|-------------|--------------------------|------------------------|------------------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|----|--|------------------------|
| 1 Aldrich | 0.59 | 0.59 | | | - | - | - | - | - | | 2B | ○ | × | | | Product Number: H17902 |
| 2 EHC | 0.59 | 算出不可 | | | - | - | | | - | | 3 | × | × | | | |
| 3 EPI Suite | 1.0326 | 1.0326 | | | KOWWIN | | | | (Q)SAR | | 2C | × | × | | | |
| 4 HSDB | 0.59 | 0.59 | | | | | | | - | | 2B | ○ | × | | Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995., p. 20 | 8.11 LogP |
| 5 Mackay | 0.99 | 0.99 | | | - | | | | experimental result | HPLC-RT correlation | 2B | × | × | | Fujisawa, S., Masuhara, E. (1981) Determination of partition coefficients of acrylates, methacrylates, and vinyl monomers using high performance liquid chromatography (HPLC). J. Biomed. Mat. Res. 15, 787-793. | 2965 |
| 6 Mackay | 0.59 | 0.59 | | | - | | | | experimental result | shake flask-GC | 2B | ○ | × | | Kurihara, N., Fujita, T., Nakajima, M. (1973) Studies of BHC isomers and related compounds. V. Some physicochemical properties of BHC isomers. Pestic. Biochem. Physiol. 2, 383-390. | 2965 |
| 7 Mackay | 0.61 | 0.61 | 20 °C | | - | | | | experimental result | shake flask | 2B | × | × | | Korenman, Ya. I. (1974) Extraction of 2-halophenols from aqueous solutions. J. Appl. Chem. USSR (Engl. Translation) 47, 1663-1666. | 2965 |
| 8 Mackay | 0.55 | 0.55 | | | その他, OECD 1981 Guidelines | | | | experimental result | shake flask | 2B | × | × | | Geyer, H., Politzki, G., Freitag, D. (1984) Prediction of ecotoxicological behaviour of chemicals: relationship between n-octanol/water partition coefficient and bioaccumulation of organic chemicals by Alga chlorella. Chemosphere 13: 269-284. | 2965 |
| 9 Mackay | 0.59 | 0.59 | | | その他, OECD 1981 Guidelines | | | | experimental result | shake flask | 2B | ○ | × | | Geyer, H., Politzki, G., Freitag, D. (1984) Prediction of ecotoxicological behaviour of chemicals: relationship between n-octanol/water partition coefficient and bioaccumulation of organic chemicals by Alga chlorella. Chemosphere 13: 269-284. | 2965 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 | 信頼性ラ ンク (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-----------|-------|-------|------------|------|-------|-----|-------------|--------------------------|-------------------------|---|---------------------|-----------------------|-----------------------|----|---|--------|
| 10 Mackay | 0.495 | 0.495 | | 5.62 | - | | | | experimental result | shake flask-UV | 2B | × | × | | Umeyama, H., Nagai, T., Nogami, H. (1971) Mechanism of adsorption of phenols by carbon black from aqueous solution. Chem. Pharm. Bull. 19, 1714-1721. | 2965 |
| 11 Mackay | 0.59 | 0.59 | | | - | | | | - | | 2B | ○ | × | | Leo, A., Hansch, C., Elkins, D. (1971) Partition coefficients and their uses. Chem. Rev. 71, 525-616. | 2965 |
| 12 Mackay | 0.54 | 0.54 | | | - | | | | experimental result | shake flask-HPLC | 2B | × | × | | Nahum, A., Horvath, C. (1980) Evaluation of octanol-water partition coefficients by using high-performance liquid chromatography. J. Chromatogr. 192, 315-322. | 2965 |
| 13 Mackay | 0.5 | 0.5 | | | - | | | | experimental result | shake flask, Log P Database | 4C | × | × | | Hansch, C., Leo, A. (1987) Medchem Project, Pomona College, Claremont, CA. | 2965 |
| 14 Mackay | 0.5 | 0.5 | | | - | | | | experimental result | centrifugal partition chromatography CPC | 2B | × | × | | Berthod, A., Han, Y.I., Armstrong, D.W. (1988) Centrifugal partition chromatography. V. Octanol-water partition coefficients, direct and indirect determination. J. Liq. Chromatogr. 11, 1441-1456. | 2965 |
| 15 Mackay | 0.59 | 0.59 | | | - | | | | experimental result | shake flask | 2B | ○ | × | | Wang, L., Xu, L., Xu, O., Tian, L., Zhang, Z. (1989) Determination of partition coefficients of organic acids and bases and the correlation of partition coefficients in different systems. Huanjing Kezue Xuebao 9, 418-424. | 2965 |
| 16 Mackay | 0.59 | 0.59 | | | - | | | | その 他,recommend ed | | 2B | ○ | × | | Sangster, J. (1993) LOGKOW Databank, Sangster Research Laboratory, Montreal, Quebec. | 2965 |
| 17 Mackay | 0.59 | 0.59 | | | - | | | | その 他,recommend ed | | 2B | ○ | × | | Hansch, C., Leo, A.J., Hoekman, D. (1995) Exploring QSAR, Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, Washington, DC. | 2965 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 | 信頼性ラ ンク (評価 I) | キースタ ディ-該非 (評価 I) | キースタ ディ-該非 (評価 II) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|----------------|------|------|------------|----|-------|-----|-------------|--------------------------|------------------------|------------------------|----------------------|-------------------------|--------------------------|----|---|--------|
| 18 Mackay | 0.61 | 0.61 | | | - | | | | experimental result | HPLC-RT correlation | 2B | × | × | | Nahum, A., Horvath, C. (1980) Evaluation of octanol-water partition coefficients by using high- performance liquid chromatography. J. Chromatogr. 192, 315-322. | 2965 |
| 19 MOE初期評 価 | 0.59 | 0.59 | | | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 244.. Verschuereen, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).. | p.1 |
| 20 MOE初期評 価 | 0.5 | 0.5 | | | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Verschuereen, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).. | p.1 |
| 21 MOE初期評 価 | 0.59 | 0.59 | | | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995. 20. [HSDB]. | p.1 |
| 22 MOE初期評 価 | 0.59 | 0.59 | | | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Hansch, C., A. Leo and D. Hoekman (1995): Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. American Chemical Society.. | p.1 |
| 23 MOE初期評 価 | 0.5 | 0.5 | | | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | Verschuereen, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM). | p.1 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 | 信頼性ラ ンク (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|--------------------|------|------|------------|----|--------|-----|-------------|--------------------------|---------------------|-------------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|----|---|---|
| 24 MOE初期評価 | 0.59 | 0.59 | | | | | | | - | | 2B | ○ | × | | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 244. Verschuere, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM). Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 20. | p.1 |
| 25 NITE初期リスクリスク評価書 | 0.59 | 0.59 | | | KOWWIN | | | | experimental result | | 2B | ○ | × | | SRC, Syracuse Research Corporation (2004) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY. | p.2 |
| 26 NITE初期リスクリスク評価書 | 1.03 | 1.03 | | | KOWWIN | | | | (Q)SAR | | 4C | × | × | | SRC, Syracuse Research Corporation (2004) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY. | p.2 |
| 27 PhysProp | 0.59 | 0.59 | | | - | - | - | - | experimental result | Experimental Data | 2B | ○ | ○ | | HANSCH,C ET AL. (1995) | http://esc.syrres.com/fatepointer/webprop.asp?CAS=123319 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 | 信頼性ラ ンク (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------|--|-------|------------|----|-------|-----|-------------------------------|--------------------------|---------------------|---------|---------------------|-----------------------|-----------------------|----|--|-----------------------------------|
| 28 ECHA | 0.59[Temperature and pH not given. Room temperature (20-25 °C) was assumed.] | 0.59 | | | - | - | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | 4A | × | × | | review article or handbook. Exploring QSAR. Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. ACS Professional Reference Book. Hansch C, Leo A, & Hoekman D (1995) American Chemical Society, Washington, pp 20 | Exp Key Partition coefficient 001 |
| 29 SIDS | 0.50~0.61 | 0.555 | 25 °C | | - | no | | | experimental result | | 2B | × | × | | Hansch, C., and Leo, A. (1979). Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology, John Wiley and Sons, New York. | p.4;p.44-45 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|--------------------|-----|-------------------------------|----------------|------------|----|------|--------------------------|-----|-------------------------------------|--------------------------|-----------------------------|------------------------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|----|--|---|
| 1 EPI Suite | Koc | 38.47 L/kg | 38.47 | | | | KOCWIN | | | | (Q)SAR | Koc Estimate from Log Kow | 2C | ○ | ○ | | | |
| 2 HSDB | Koc | 240 | 240 | | | | | | | | estimated by calculation | | 4C | × | × | | US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Nov, 2012. Available from, as of Aug 4, 2014: https://www.epa.gov/oppt/expo sure/pubs/episutedl.htm (2) Swann RL et al; Res Rev 85: 17-28 (1983) (3) Truong H et al; Environ Sci Technol 44: 1933-1939 (2010) | 6.5 Environmental Fate (Complete) |
| 3 MOE初期評価 | Koc | 240 | 240 | | | | KOCWIN | | | | (Q)SAR | | 4C | × | × | | U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00. | p.2 |
| 4 NITE初期リス ク評価書 | Koc | 430 | 430 | | | | KOCWIN | | | | その他(推定 値) | | 4C | × | × | | SRC, Syracuse Research Corporation (2004) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY. | p.2 |
| 5 ECHA | Koc | 38.47[log Koc = 1.585] | 38.47 | | | | KOCWIN | no | 2: reliable with restrictions | key study | estimated by calculation | | 4C | × | × | | review article or handbook. Schutz vor weiteren anthropogenen Organika- Eintraegen. In: Handbuch des Bodenschutzes. Bodenoekologie und - belastung. Vorbeugende und abwehrende Schutzmassnahmen. Blume HP (ed.). Litz N (1990) Ecomed, Landsberg, 579 - 584 | Calc Key Adsorption / desorption 002 |
| 6 ECHA | Koc | 9~50[log Koc = 0.97 - 1.7] | 29.5 | | | | その他, QSAR calculation | no | 2: reliable with restrictions | key study | estimated by calculation | | 4C | × | × | | review article or handbook. Adsorption coefficient for soils and sediment. In: Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Lyman WJ, Reehl WF & Rosenblatt DH (eds.). Lyman WJ (1982) McGraw-Hill Book Co., pp 4-1 to 4-33 review article or handbook. Schutz vor weiteren anthropogenen Organika- Eintraegen. In: Handbuch des Bodenschutzes. Bodenoekologie und - belastung. Vorbeugende und abwehrende Schutzmassnahmen. Blume HP (ed.). Litz N (1990) Ecomed, Landsberg, 579 - 584 | Calc Key Adsorption / desorption 001 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA_IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------------------|--|----------------------------------|------------|----|-------------|--------------------------|-----------------------------|--|---------------------|-----------------------|-----------------------|----|--|--------------------------------------|
| 1 EPI Suite | 5.91E-006 Pa・ m ³ /mol | 0.00000591 | 25 °C | | | | estimated by calculation | Bond Estimation Method | 2C | × | × | | | |
| 2 EPI Suite | 3.21E-006 Pa・ m ³ /mol | 0.00000321 | 20 °C | | | | その他（測定 値） | Experimental Data from Physprop Database | 2C | × | × | | | |
| 3 HSDB | 4.73E-11 atm・ m ³ /mol | 4.79267E-06 | 25 °C | | - | - | (Q)SAR | | 4C | × | × | | US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite, Ver. 4.11. Nov, 2012. Available from, as of Aug 4, 2014: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.html | 58/88 |
| 4 HSDB | 4.7E-11 atm・m ³ /mol | 4.76228E-06 | | | - | - | estimated by calculation | | 4C | × | × | | SRC | 58/88 |
| 5 HSDB | 4.7E-011 atm・ m ³ /mol | 4.76228E-06 | | | | | estimated by calculation | | 4C | × | × | | Daubert TE, Danner RP; Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, DC: Taylor and Francis (1989) | 6.5 Environmental Fate (Complete) |
| 6 Mackay | 3.89E-6 Pa・m ³ /mol | 0.00000389 | 25 °C | | | | その他,quoted | | 2B | ○ | ○ | | Meylan, W., Howard, P.H. (1991) Bond contribution method for estimating Henry's law constants. Environ. Toxicol. Chem. 10, 1283-1293. | 2965 |
| 7 Mackay | 5.91E-6 Pa・m ³ /mol | 0.00000591 | 25 °C | | | | estimated by calculation | estimated-bond contribution | 4C | × | × | | Meylan, W., Howard, P.H. (1991) Bond contribution method for estimating Henry's law constants. Environ. Toxicol. Chem. 10, 1283-1293. | 2965 |
| 8 Mackay | 4.00E-6 Pa・m ³ /mol | 0.000004 | 25 °C | | | | estimated by calculation | calculated-P/C, this work | 4C | × | × | | | 2965 |
| 9 NITE初期リス ク評価書 | 0.0000000000473 atm・m ³ /mol | 4.79267E-06 | 25 °C | | - | - | その他（推定 値）,推定値 | | 4C | × | × | | SRC, Syracuse Research Corporation (2004) HenryWin Estimation Software, ver. 3.10, North Syracuse, NY.. | P. 2 |
| 10 NITE初期リス ク評価書 | 0.00000479 Pa・ m ³ /mol | 0.00000479 | 25 °C | | - | - | その他（推定 値）,推定値 | | 4C | × | × | | SRC, Syracuse Research Corporation (2004) HenryWin Estimation Software, ver. 3.10, North Syracuse, NY.. | P. 2 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA_IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------------------|---|----------------------------------|------------|----|-------------------------------------|--------------------------|-----------------------------|----------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|----|---|---|
| 11 NITE初期リス ク評価書 | 4.79E-6 Pa· m ³ /mol[(4.73E-11 atm·m ³ /mol)] | 0.00000479 | 25 °C | | | | その他(推定 値) | | 4C | × | × | | SRC, Syracuse Research Corporation (2004) HenryWin Estimation Software, ver. 3.10, North Syracuse, NY. | p.2 |
| 12 PhysProp | 0.000000000473 atm·m ³ /mol | 4.79267E-06 | 25 °C | | - | - | estimated by calculation | Estimated Data | 4C | × | × | | VP/WSOL | http://esc.syrres.com/fatepointer/webprop.asp?CAS=123319 |
| 13 ECHA | 4.7927E-6 Pa· m ³ /mol | 4.7927E-06 | 25 °C | | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | 4A | × | × | | review article or handbook. Estimation Program Interface (EPI) Suite, Version 4.00. EpiSuite (2010) http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm | Exp Key Henry's Law constant 001 |
| 14 SIDS | 0.000000000384 atm·m ³ /mol | 3.89088E-06 | | | - | - | - | | 2B | ○ | ○ | | Meylan, W. M., and Howard, P.H. (1991). Bond contribution method for estimating Henry's law constants. Environmental Toxicology and Chemistry 10:1263-1293.. | p.14 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 の是非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ ンク (評価 I) | キースタ ディー該非 (評価 I) | キースタ ディー該非 (評価 II) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-------------|----|-----------|--------------|------|-----|-------|-------------------|----------------|-----------|-----|-------------|--------------------------|-----------------------------|------------------------------------|----------------------|-------------------------|--------------------------|----|--|--------|
| 1 EHC | | 1 | | | BCF | | 40 | 40 | | | | | experimental result | | 2B | ○ | × | | Freitag D, Ballhorn L, Geyer H, & Korte F (1985) Environmental hazard profile of organic chemicals. Chemosphere, 14: 1589-1616. | |
| 2 EPI Suite | | 1 | | | BCF | | 3.162 L/kg | 3.162 | BCFBAFWIN | | | | (Q)SAR | Equation Used to Make BCF estimate | 2C | × | × | | | |
| 3 Mackay | | 1 | | | | | 2.93[log BCF] | 2.93 | | | | | experimental result | | 2B | × | × | | Freitag, D., Scheunert, I., Korte, F. (1987) Correlation between the bioconcentration potential of organic environmental chemicals in humans and their n-octanol/water partition coefficients. Chemosphere 16, 239-252. | 2965 |
| 4 Mackay | | 1 | | | | | 1.54[log BCF] | 1.54 | | | | | experimental result | wet weight basis after 1 d | 2B | × | × | | Geyer, H., Politzki, G., Freitag, D. (1984) Prediction of ecotoxicological behaviour of chemicals: relationship between n-octanol/water partition coefficient and bioaccumulation of organic chemicals by Alga chlorella. Chemosphere 13: 269-284. | 2965 |
| 5 Mackay | | 1 | | | BCF | | 1.81[log BCF] | 1.81 | | | | | experimental result | exposure to 50 µg/L for 24 h | 2B | × | × | | Geyer, H., Viswanathan, R., Freitag, D., Korte, F. (1981) Relationship between water solubility of organic chemicals and their bioaccumulation by the Alga chlorella. Chemosphere 10, 1307-1313. | 2965 |
| 6 Mackay | | 1 | | | | | 0.95[log BCF] | 0.95 | | | | | estimated by calculation | calculated-S | 4C | × | × | | Geyer, H., Viswanathan, R., Freitag, D., Korte, F. (1981) Relationship between water solubility of organic chemicals and their bioaccumulation by the Alga chlorella. Chemosphere 10, 1307-1313. | 2965 |
| 7 Mackay | | 1 | | | | | 1.60[log BCF] | 1.6 | | | | | experimental result | | 2B | × | × | | Freitag, D., Geyer, H., Kraus, A., Viswanathan, R., Kotzias, D., Attar, A., Klein, W. Korte, F. (1982) Ecotoxicological profile analysis. VII. Screening chemicals for their environmental behavior by comparative evaluation. Ecotoxicol. Environ. Saf 14, 60-81. | 2965 |
| 8 Mackay | | 1 | | | | | 1.60[log BCF] | 1.6 | | | | | experimental result | | 2B | × | × | | | 2965 |
| 9 Mackay | | 1 | | | | | 0.602[log BCF] | 0.602 | | | | | estimated by calculation | calculated-Kow | 4C | × | × | | | |
| 10 Mackay | | 1 | | | | | 1.60[log BCF] | 1.6 | | | | | experimental result | | 2B | × | × | | Freitag et al. 1984 | 2965 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 I) | キースタ ディ該非 (評価 I) | キースタ ディ該非 (評価 II) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------------------|------|-----------|--------------|------|-----|-------|---|----------------|---|---------|-------------------------------------|--------------------------|-----------------------------|--|----------------------|------------------------|-------------------------|----|---|---|
| 11 Mackay | | 1 | | | | | 2.72(log BCF) | 2.72 | | | | | experimental result | | 2B | x | x | | Freitag, D., Geyer, H., Kraus, A., Viswanathan, R., Kotzias, D., Attar, A., Klein, W. Korte, F. (1982) Ecotoxicological profile analysis. VII. Screening chemicals for their environmental behavior by comparative evaluation. Ecotoxicol. Environ. Saf 14, 60-81. | 2965 |
| 12 MOE初期評価 | 低濃縮性 | 1 | | | BCF | - | 40 | 40 | | | | | experimental result | | 2B | x | x | | D. Freitag et al. (1985): Environmental hazard profile of organic chemicals : An experimental method for the assessment of the behaviour of organic chemicals in the ecosphere by means of simple laboratory tests with 14C labelled chemicals, Chemosphere, 14(10), 1589-1616. | 2p |
| 13 NITE初期リス ク評価書 | 低濃縮性 | 1 | | | BCF | | 40 | 40 | | | | - | - | | 2B | x | x | | Freitag, D., Ballhorn, L., Geyer, H. and Korte, F. (1985) Environmental hazard profile of organic chemicals, Chemosphere, 14, 1589-1616. | p.7-8 |
| 14 NITE初期リス ク評価書 | 低濃縮性 | 1 | | | BCF | | 40 | 40 | | | | - | - | | 2B | x | x | | Freitag, D., Ballhorn, L., Geyer, H. and Korte, F. (1985) Environmental hazard profile of organic chemicals, Chemosphere, 14, 1589-1616. | p.7-8 |
| 15 ECHA | | 1 | | | BCF | - | 3.162 L/kg(log Kow used: 0.59) | 3.162 | | no | 2: reliable with restrictions | key study | estimated by calculation | calculation of BCF via EPISUITE 4.00 (BCFBAF v3.00) | 4C | x | x | | | Calc Key Bioaccumulation: aquatic / sediment |
| 16 ECHA | | 1 | | | BCF | - | 40 L/kg | 40 | その他, Test conducted similar to Korte et al. 1978 | no data | 3: not reliable | not applicable | experimental result | | 4A | x | x | | publication, Ecotoxicological Profile Analysis. Freitag D, Geyer H, Kraus A, Viswanathan R, Kotzias D, Attar A, Klein W & Korte F (1982) Ecotoxicol Environ Saf 6, 60 - 81 | Exp disregarded Bioaccumulation: aquatic / sediment 002 |
| 17 SIDS | | 1 | | | BCF | - | 40 | 40 | その他, Similar to OECD Guideline 305E. | no | | | experimental result | | 2B | x | ○ | | Freitag, D., Ballhorn, L., Geyer, H., and Korte, F. (1985). Environmental Hazard Profile of Organic Chemicals. An Experimental Method for the Assessment of the Behaviour of Organic Chemicals in the Ecosphere by Means of Simple Laboratory Test with 14C- Labelled Chemicals. Chemosphere 14, 1580-1616. | p.13.p.50 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 | キースタ ディ該 非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------------|-----|-----------|-------|------------|----|-------|-----|-------------|--------------------------|------|---------|---------------------------|----|---|--|
| 1 CRC | pKa | 11.4 | 11.4 | 25 °C | | - | | | | - | | x | | | 98th Dissociation Constants of Organic Acids and Bases |
| 2 CRC | pKa | 9.85 | 9.85 | 25 °C | | - | | | | - | | x | | | 98th Dissociation Constants of Organic Acids and Bases |
| 3 EHC | pK | 11.6[pK2] | 11.6 | | | - | - | | | - | | x | | | |
| 4 EHC | pK | 9.9[pK1] | 9.9 | | | - | - | | | - | | x | | | |
| 5 HSDB | pKa | 10.85 | 10.85 | 25 °C | | - | - | - | - | - | | ○ | | Pearce PJ, Simkins RJJ; Can J Chem 46: 241-8 (1968) | 63/88 |
| 6 HSDB | pKa | 9.96 | 9.96 | | | - | - | - | - | - | | ○ | | McEvoy, G.K. (ed.). AHFS Drug Information 90. Bethesda, MD: American Society of Hospital Pharmacists, Inc., 1990 (Plus Supplements 1990)., p. 2081 | 63/88 |
| 7 Mackay | pKa | 9.9 | 9.9 | | | - | | | | - | | x | | McLeese, D.W., Zitko, V., Peterson, M.R. (1979) Structure-lethality relationships for phenols, anilines and other aromatic compounds in shrimp and clams. Chemosphere 2, 53-57. | 2964 |
| 8 MOE初期評 価 | pKa | 9.85 | 9.85 | 25 °C | | - | - | - | - | - | | x | | Lide, D.R. ed. (2005); CRC Handbook of Chemistry and Physics, CD-ROM Version 2005, Boca Raton, CRC Press. (CD-ROM).. | p.1 |
| 9 MOE初期評 価 | pKa | 10.85 | 10.85 | 20 °C | | - | - | - | - | - | | x | | Pearce PJ, Simkins RJJ; Acid Strengths of Some Substituted Picric Acids. Can J Chem 46:241-8 (1968). [HSDB]. | p.1 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 キースター ディの該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | キースター ディ該 非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|------|---------|-----|------------|------------|-------|-------|-----|-------------|---------------------------|------|---------|----------------------------|----|--|--------|
| 10 | MOE初期評価 | pKa | 11.4 | 11.4 | 25 °C | - | - | - | - | - | | x | | Lide, D.R. ed. (2005): CRC Handbook of Chemistry and Physics, CD-ROM Version 2005, Boca Raton, CRC Press. (CD-ROM).. | p.1 |
| 11 | MOE初期評価 | pKa | 9.96 | 9.96 | | - | - | - | - | - | | x | | McEvoy, G.K. (ed.). AHFS Drug Information 90. Bethesda, MD: American Society of Hospital Pharmacists, Inc., 1990 (Plus Supplements 1990). 2081. [HSDB]. | p.1 |
| 12 | MOE初期評価 | pKa | 10.85 | 10.85 | 25 °C | | | | | - | | x | | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 244. | p.1 |
| 13 | MOE初期評価 | pKa | 11.4[pKa2] | 11.4 | 25 °C | | | | | - | | x | | Lide, D.R. ed. (2005): CRC Handbook of Chemistry and Physics, CD-ROM Version 2005, Boca Raton, CRC Press. (CD-ROM). | p.1 |
| 14 | MOE初期評価 | pKa | 9.85[pKa1] | 9.85 | 25 °C | | | | | - | | x | | Lide, D.R. ed. (2005): CRC Handbook of Chemistry and Physics, CD-ROM Version 2005, Boca Raton, CRC Press. (CD-ROM). | p.1 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 | キースタ ディ該 非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|---------------------|-----|-------|-------|------------|-----------|-------|-----|---|--------------------------|------------------------|-------------------|---------------------------|----|--|---|
| 15 NITE初期リ スク評価書 | pKa | 11.4 | 11.4 | 25 °C | | | | | | その他 | | × | | Lide, D.R. (2003) CRC Handbook of Chemistry and Physics, 84th ed., CRC Press, Washington, D.C. | p.2 |
| 16 NITE初期リ スク評価書 | pKa | 9.85 | 9.85 | 25 °C | | | | | | その他 | | × | | Lide, D.R. (2003) CRC Handbook of Chemistry and Physics, 84th ed., CRC Press, Washington, D.C. | p.2 |
| 17 PhysProp | pKa | 10.85 | 10.85 | 25 °C | | - | - | - | - | experimental result | Experimental Data | × | | PEARCE,PJ & SIMKINS,RJJ (1968) | http://esc.syrres.com/fatepointer/webprop.asp?CAS=123319 |
| 18 ECHA | pKa | 9.91 | 9.91 | 20 °C | | - | no | 2: reliable with restriction s | key study | experimental result | | × | | secondary source. IUPAC Chemical Data Series No 23, Ionisation constants of organic acids in aqueous solution. Serjeant EP & Dempsey B (1979) Pergamon Press, Oxford, pp 162 - 163 | Exp Key Dissociation constant 001 |
| 19 ECHA | pKa | 11.56 | 11.56 | 20 °C | | - | no | 2: reliable with restriction s | key study | experimental result | | × | | secondary source. IUPAC Chemical Data Series No 23, Ionisation constants of organic acids in aqueous solution. Serjeant EP & Dempsey B (1979) Pergamon Press, Oxford, pp 162 - 163 | Exp Key Dissociation constant 001 |
| 20 SIDS | pKa | 9.9 | 9.9 | | 4.00~4.70 | - | no | | | experimental result | | × | | Technical data bulletin, Eastman Chemical Products, Inc.,1975. | p.4;p.45-46 |
| 21 SPARC | pKa | 11.87 | 11.87 | 20 °C | | SPARC | | | | (Q)SAR | | × | | | |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 | キースタ ディ-該 非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|----------|-----|------|------|------------|----|-------|-----|-------------|--------------------------|--------|---------|----------------------------|----|----|--------|
| 22 SPARC | pKa | 9.88 | 9.88 | 20 °C | | SPARC | | | | (Q)SAR | | x | | | |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 |
|----------|-----------------------|--|-----------------|-------|-------|-----|-------------|------------------|---------------------|--|----|--|---|
| 1 EHC | readily biodegradable | 97.5 % [BOD5/COD =0.37 BOD5/COD =0.53] | TOC removal | | | | | | - | | | Neujahr H & Varga JM (1970) Degradation of phenols by intact cells and cell-free preparations of Trichosporon cutaneum. Eur J Biochem, 13: 37-44. Dore M, Brunet N, & Legube B (1975) Participation de différents composés organiques à la valeur des critères globaux de pollution. Trib CEBEDEAU, 374: 3-11. Young RHF, Ryckman DW, & Buzzell JC Jr (1968) An improved tool for measuring biodegradability. J Water Pollut Control Fed, 40: 354-370. | |
| 2 HSDB | readily biodegradable | 95% | O_2 consumption | | 化審法TG | | | | experimental result | | | NITE; Chemical Risk Information Platform (CHRIP). Biodegradation and Bioconcentration. Tokyo, Japan: Natl Inst Tech Eval. Available from, as of Aug 4, 2014: https://www.safe.nite.go.jp/english/db.html Kawasaki M; Ecotox Environ Safety 4: 444-54 (1980) Kitano M; Biodegradation & Bioaccumulation Test on Chemical Substances OECD Tokyo Meeting Reference Book TSU-No. 3 Sasaki K et al; Bull Environ Contam Toxicol 27: 775-82 (1981) | 6.6 Environmental Biodegradation (Complete) |
| 3 HSDB | - | | O_2 consumption | | | | | | experimental result | | | Pitter P; Water Res 10: 231-5 (1976) | 6.6 Environmental Biodegradation (Complete) |
| 4 Mackay | | 54.2 mg COD/g/h | | | | | | | experimental result | based on measurements of COD decrease using activated sludge inoculum with 20 d of adaptation to the substrate | | Pitter, P. (1976) Determination of biological degradability of organic substances. Water Res. 10, 231-235. quoted, Scow, KM. (1982) Chapter 9, Rate biodegradation. In: Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Environmental Behaviour of Organic Compounds. Lyman, W.J., Reehl, W.F., Rosenblatt, D.H., Editors, McGraw-Hill, New York. | 2965 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 |
|-----------------|-----------------------|---------------------------------------|-----------------|-------|-------|-----|-------------|------------------|---------------------|---------|----|--|--------|
| 5 Mackay | | 95 %[in mixed bacteria cultures] | | | | | | | | | | Tabak, H.H., Chambers, C.W., Kabler, P.W. (1964) Microbial metabolism of aromatic compounds. I. Decomposition of phenolic compounds and aromatic hydrocarbons by phenol-adapted bacteria. J. Bacteriology 87, 910-919. | 2965 |
| 6 MOE初期評価 | その他 | [嫌気的な下水処理において、生物的分解を受ける物質であると報告されている] | その他 | | | | | | | | | Chou WL et al. (1979): Biotech Bioeng Symp.8: 391-414 . [[Hazardous Substances Data Bank (http://toxnet.nlm.nih.gov/ ,2011.8.11 現在)]. | 2p |
| 7 MOE初期評価 | readily biodegradable | 70% | O_2 consumption | | | | | | experimental result | | | 厚生労働省, 経済産業省, 環境省: 化審法データベース (J-CHECK), (http://www.safe.nite.go.jp/jcheck , 2011.08.10 現在). | p.1 |
| 8 MOE初期評価 | readily biodegradable | 95.00% | TOC removal | | | | | | experimental result | | | 厚生労働省, 経済産業省, 環境省: 化審法データベース (J-CHECK), (http://www.safe.nite.go.jp/jcheck , 2011.08.10 現在). | p.1 |
| 9 MOE初期評価 | readily biodegradable | 97.20% | その他,UV-VIS | | | | | | experimental result | | | 厚生労働省, 経済産業省, 環境省: 化審法データベース (J-CHECK), (http://www.safe.nite.go.jp/jcheck , 2011.08.10 現在). | p.1 |
| 10 NITE初期リスク評価書 | readily biodegradable | 95% | TOC removal | | 化審法TG | | | | experimental result | | | 通商産業省 (1975) 通商産業公報 (1975年8月27日), 製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報 (http://www.nite.go.jp から引用) | p.6 |
| 11 NITE初期リスク評価書 | readily biodegradable | 97% | その他,吸光測定 | | 化審法TG | | | | experimental result | | | 通商産業省 (1975) 通商産業公報 (1975年8月27日), 製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報 (http://www.nite.go.jp から引用) | p.6 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 |
|-----------------|-----------------------|---|-----------------|-------|--------------|---------|-------------------------------|------------------|---------------------|---------|----|---|---|
| 12 NITE初期リスク評価書 | readily biodegradable | 97.5 % [1,4-ベンゾキノン、2-ヒドロキシ-1,4-ベンゾキノン、β-ケトアジピン酸等の生分解性物が確認され、最終的には、ヒドロキノンは残留しなかった] | TOC removal | | | | | | experimental result | | | Harbison KG and Belly RT (1982) The biodegradation of hydroquinone. Environ Toxicol Chem, 1, 9-15 | p.6 |
| 13 NITE初期リスク評価書 | - | [BOD5/COD = 0.37 [BOD5/COD = 0.53] | その他, BOD5/COD | | | | | | - | | | Dore, M., Brunet, N. and Legube, B. (1975) Participation of various organic compounds in the evaluation of global pollution criteria. Trib. Cebedeau 28, 3-11 Young, R.H.F., Ryckman, D.W. and Buzzell, J.C.Jr. (1968) An improved tool for measuring biodegradability. J Water Pollut Control Fed, 40, 354-370. | p.6 |
| 14 NITE初期リスク評価書 | - | 5.7 mg/L [未馴化の微生物] | | | | | | | | | | Young, R.Y. and Rivera, M.D. (1985) Methanogenic degradation of four phenolic compounds, water Res., 19, 1325-1332. | |
| 15 NITE初期リスク評価書 | - | 23.6 mg/L [馴化した微生物] | | | | | | | | | | Young, R.Y. and Rivera, M.D. (1985) Methanogenic degradation of four phenolic compounds, water Res., 19, 1325-1332. | |
| 16 NITE初期リスク評価書 | readily biodegradable | 70% | O_2 consumption | | 化審法TG | | | | experimental result | | | 通商産業省 (1975) 通商産業公報 (1975年8月27日), 製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報 (http://www.nite.go.jp から引用) | p.6 |
| 17 ECHA | readily biodegradable | 70 % [% degradation (O2 consumption)] | | | OECD TG 301C | no data | 2: reliable with restrictions | supporting study | experimental result | | | publication. A correlation study of biodegradability determinations with various chemicals in various tests. Gerike P & Fischer WK (1979) Ecotoxicol Environ Saf 3, 159 - 173 | Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests 004 |

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

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 |
|-----------|-----------------------|--|--------------------|-------|--------------------------------------|---------|-------------------------------|------------------|---------------------|---------|----|---|---|
| 18 ECHA | readily biodegradable | 70 % [other: test substance proved to be readily biodegradable and fulfilling the 14 d window criterion] | O_2 consumption | | OECD TG 301C | no data | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | | | Exp Key Biodegradation in water: screening tests 001 |
| 19 ECHA | readily biodegradable | 86 % [% degradation (DOC removal)] | | | OECD TG 301C | no data | 2: reliable with restrictions | supporting study | experimental result | | | publication. A correlation study of biodegradability determinations with various chemicals in various tests. Gerike P & Fischer WK (1979) Ecotoxicol Environ Saf 3, 159 - 173 | Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests 004 |
| 20 SIDS | readily biodegradable | 1.15 g/g O2[BOD20] | | | その他, Similar to OECD Guideline 301D. | no | | | experimental result | | | | p.4:p.47-48 |
| 21 SIDS | readily biodegradable | 1.00 g/g O2 | | | その他, Similar to OECD Guideline 301D | no | | | experimental result | | | | p.4:p.47-48 |
| 22 既存点検事業 | readily biodegradable | 70% | O_2 consumption | | | | | | experimental result | | | | p.1 |
| 23 既存点検事業 | readily biodegradable | 97.20% | Test mat. analysis | | | | | | experimental result | | | | p.1 |
| 24 既存点検事業 | readily biodegradable | 95.00% | TOC removal | | | | | | experimental result | | | | p.1 |

基本情報

| | |
|-------------|-----------------|
| PACS F 等 | 203000 |
| PACS Name 等 | |
| CASRN | 123-31-9 |
| CA IN | 1,4-Benzenediol |
| その他番号 | |
| その他名称 | ヒドロキノン |
| SMILES | |

環境中運命

収集データ

| 情報源名 | 相 | 機序 | 分解速度定数 | 反応速度定数 | ラジカル濃度 | 半減期 | 分解度 | 統一表記半減期[day] | 測定条件温度 | ph | 試験方法等 | BIOWIN | 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 | キースタディ該非(評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|--------------|----|------------|--------|-------------|--------|----------------|-------------|--------------|--------|----|--------|--------|-----|-------------|------------------|---------------------|---|---------------|----|--|--------|
| 1 EHC | 大気 | 直接光分解 | | | | | 15 % [0.5h] | | | | | | | | | experimental result | | × | | Tissot A, Boule P, Lemaire J, Lambert S, & Palla JC (1985) Photochimie et environnement. X. Evaluation de la toxicité des produits de phototransformation de l'hydroquinone et des chlorophénols en milieu aqueux. Chemosphere, 14: 1221-1230. | |
| 2 EHC | 大気 | 直接光分解 | | | | | 49 % [4h] | | | | | | | | | experimental result | | × | | Tissot A, Boule P, Lemaire J, Lambert S, & Palla JC (1985) Photochimie et environnement. X. Evaluation de la toxicité des produits de phototransformation de l'hydroquinone et des chlorophénols en milieu aqueux. Chemosphere, 14: 1221-1230. | |
| 3 EHC | 大気 | 直接光分解 | | | | | 80 % [22h] | | | | | | | | | experimental result | | × | | Tissot A, Boule P, Lemaire J, Lambert S, & Palla JC (1985) Photochimie et environnement. X. Evaluation de la toxicité des produits de phototransformation de l'hydroquinone et des chlorophénols en milieu aqueux. Chemosphere, 14: 1221-1230. | |
| 4 EHC | 大気 | 直接光分解 | | | | | | | | | | | | | | experimental result | | × | | Tissot A, Boule P, Lemaire J, Lambert S, & Palla JC (1985) Photochimie et environnement. X. Evaluation de la toxicité des produits de phototransformation de l'hydroquinone et des chlorophénols en milieu aqueux. Chemosphere, 14: 1221-1230. | |
| 5 EPI Suite | 大気 | OHラジカルとの反応 | | 23.2235E-12 | | | | | | | AOPWIN | | | | | (Q)SAR | | ○ | | | |
| 6 EPI Suite | 水域 | 生分解 | | | | | | | | | BIOWIN | Weeks | | | | (Q)SAR | Biowin3 Ultimate Biodegradation | × | | | |
| 7 Howard Deg | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | 168 時間 [7days] | | | | | その他 | | | | | experimental result | Scientific judgement based upon aqueous screening test data | ○ | | | 484 |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|------------|----|------------|--|--|--------------------|-----------------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--------------------------|---|---|--|--|--|-----|
| 8 | Howard Deg | 大気 | OHラジカルとの反応 | | | 3E5 molecule/c m^3 | 26.1 時間 | | | | | | | | | | estimated by calculation | Scientific judgement based upon an estimated rate constant for vapor phase reaction with hydroxyl radicals in air | x | | | | 485 |
| 9 | Howard Deg | 大気 | OHラジカルとの反応 | | | 3E6 molecule/c m^3 | 2.6 時間 | | | | | | | | | | estimated by calculation | Scientific judgement based upon an estimated rate constant for vapor phase reaction with hydroxyl radicals in air | x | | | | 485 |
| 10 | Howard Deg | 水域 | 光分解 | | | | 19.3 時間 | | | | | | | | | | experimental result | Scientific judgement based upon measured rate data for alkylperoxyl radicals in aqueous solution | x | | | | 485 |
| 11 | Howard Deg | 水域 | 光分解 | | | | 0.39 時間 [23min] | | | | | | | | | | experimental result | Scientific judgement based upon measured rate data for alkylperoxyl radicals in aqueous solution | x | | | | 485 |
| 12 | Howard Deg | 水域 | 生分解 (嫌氣的) | | | | 96 時間 [4days] | | | | | | | | | | estimated by calculation | Scientific judgement based upon estimated unacclimated aqueous aerobic biodegradation half-life. | x | | | | 484 |
| 13 | Howard Deg | 土壌 | 総括分解 | | | | 24 時間 [1day] | | | | | | | | | | estimated by calculation | Scientific judgement based upon estimated unacclimated aqueous aerobic biodegradation half-life. | x | | | | 484 |
| 14 | Howard Deg | 水域 | 総括分解 | | | | 19.3 時間 | | | | | | | | | | その他 | | o | | | | 484 |
| 15 | Howard Deg | 水域 | 総括分解 | | | | 0.39 時間 [23min] | | | | | | | | | | その他 | | x | | | | 484 |
| 16 | Howard Deg | 大気 | 総括分解 | | | | 26.1 時間 | | | | | | | | | | estimated by calculation | Scientific judgement based upon estimated photooxidation half-life in air. | x | | | | 484 |
| 17 | Howard Deg | 大気 | 総括分解 | | | | 2.6 時間 | | | | | | | | | | estimated by calculation | Scientific judgement based upon estimated photooxidation half-life in air. | x | | | | 484 |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|------------|----|---------------|--|--|--------------------|--|--|--|---|--|--|--|--|--------------------------------|---|---|--|--|---|-----|
| 18 | Howard Deg | 土壤 | 総括分解 | | | 168 時間 [7days] | | | | その他 | | | | | estimated by calculation | Scientific judgement based upon estimated unacclimated aqueous aerobic biodegradation half-life. | o | | | | 484 |
| 19 | Howard Deg | 水域 | 生分解 (好 氣的) | | | 24 時間 [1day] | | | | その他 | | | | | experimen tal result | Scientific judgement based upon aqueous screening test data | x | | | | 484 |
| 20 | Howard Deg | 水域 | 生分解 (嫌 氣的) | | | 672 時間 [28days] | | | | その他 | | | | | estimated by calculation | Scientific judgement based upon estimated unacclimated aqueous aerobic biodegradation half-life. | x | | | | 484 |
| 21 | HSDB | 水域 | 生分解 (好 氣的) | | | | 7.5 %[in 5 days when inoculated with an activated sludge seed] | | | その他,Hydroquinone at a concentration of 0.05 mg/L underwent 7.5% removal in 5 days when inoculated with an activated sludge seed | | | | | experimen tal result | | x | | Freitag D et al; Chemosphere 14: 1589- 616 (1985) Freig D et al; Ecotox Environ Saf 6: 60-81 (1982) | 6.6 Environmental Biodegradation (Complete) | |
| 22 | HSDB | 水域 | 生分解 (好 氣的) | | | | 25.3 %[hydroquin one had a 5 day theoretical BOD of 25.3%] | | | その他,In a screening study using a sewage seed, hydroquinone had a 5 day theoretical BOD of 25.3%(6) | | | | | experimen tal result | | x | | Heukelekian H, Rand MC; J Water Pollut Contr Assoc 29: 1040-53 (1955) | 6.6 Environmental Biodegradation (Complete) | |
| 23 | HSDB | 水域 | 生分解 (好 氣的) | | | | 54.2 %[COD underwent 54.2% removal (less than 120 hours)] | | | その他,Hydroquinone at an initial concentration of 200 mg/L, using a thickened adapted activated sludge under aerobic conditions | | | | | experimen tal result | | x | | Pitter P; Water Res 10: 231-5 (1976) | 6.6 Environmental Biodegradation (Complete) | |
| 24 | HSDB | 水域 | 生分解 (好 氣的) | | | | 3 %[theoretical oxidation when inoculated with an activated sewage sludge seed acclimated to phenol] | | | その他,Hydroquinone at an initial concentration of 500 mg/L underwent 3%, 4% and 25% theoretical oxidation when inoculated with an activated sewage sludge seed acclimated to phenol, benzoic acid and catechol | | | | | experimen tal result | | x | | McKinney RE et al; Sew Ind Wastes 28: 547-57 (1956) Ludzack FJ, Ettinger MB; J Water Pollut Control Fed 32: 1173- 1200 (1960) | 6.6 Environmental Biodegradation (Complete) | |
| 25 | HSDB | 水域 | 生分解 (好 氣的) | | | | 4 %[theoretical oxidation when inoculated with an activated sewage sludge seed acclimated to benzoic acid] | | | その他,Hydroquinone at an initial concentration of 500 mg/L underwent 3%, 4% and 25% theoretical oxidation when inoculated with an activated sewage sludge seed acclimated to phenol, benzoic acid and catechol | | | | | experimen tal result | | x | | McKinney RE et al; Sew Ind Wastes 28: 547-57 (1956) Ludzack FJ, Ettinger MB; J Water Pollut Control Fed 32: 1173- 1200 (1960) | 6.6 Environmental Biodegradation (Complete) | |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|------|----|----------------|--|--|--|--------|----|--|--|--|--|--|--|---------------------|---|--|--|--|
| 26 | HSDB | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | | 25 % [theoretical oxidation when inoculated with an activated sewage sludge seed acclimated to catechol] | | | | | | experimental result | x | | McKinney RE et al; Sew Ind Wastes 28: 547-57 (1956) Ludzack FJ, Ettinger MB; J Water Pollut Control Fed 32: 1173-1200 (1960) | 6.6 Environmental Biodegradation (Complete) |
| 27 | HSDB | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | | 37 % [theoretical BOD of 37% under aerobic conditions] | | | | | | experimental result | x | | Dore M et al; Trib Cebedeau 28: 3-11 (1975) | 6.6 Environmental Biodegradation (Complete) |
| 28 | HSDB | 土壌 | その他, oxidation | | | | | <9 | | | | | | | その他 | x | | Morrill LG et al; Toxic Chemicals in the Soil Environment Vol. 2. Defense Tech Info Center Dugway Proving Ground. Utah NTIS AD-A158-215 (1985) | 6.7 Environmental Abiotic Degradation (Complete) |
| 29 | HSDB | 大気 | OHラジカルとの反応 | 2.32E-011 cm ³ /mole/cule/sec[at 25 °C] | | | | | | | | | | | (Q)SAR | x | | US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.11. Nov, 2012. Available from, as of Aug 4, 2014: https://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episutedl.htm | 8.16 Other Experimental Properties (Complete) |
| 30 | HSDB | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | | 53 % [underwent a 5 day theoretical biological oxygen demand (BOD) of 53%] | | | | | | experimental result | x | | Young RHF et al; J Water Pollut Contr Fed 40: 354-68 (1968) | 6.6 Environmental Biodegradation (Complete) |
| 31 | HSDB | 大気 | 硝酸ラジカルとの反応 | | | | | | | | | | | | その他 | x | | Meylan WM, Howard PH; Chemosphere 26: 2293-99 (1993) | 6.7 Environmental Abiotic Degradation (Complete) |
| 32 | HSDB | 水域 | その他 | | | | 0.8 時間 | | | | | | | | experimental result | x | | Moussavi M; Water Res 13: 1125-1128 (1979) | 6.7 Environmental Abiotic Degradation (Complete) |
| 33 | HSDB | 水域 | その他 | | | | 41 時間 | | | | | | | | experimental result | x | | Moussavi M; Water Res 13: 1125-1128 (1979) | 6.7 Environmental Abiotic Degradation (Complete) |
| 34 | HSDB | 水域 | その他 | | | | 111 時間 | | | | | | | | experimental result | o | | Moussavi M; Water Res 13: 1125-1128 (1979) | 6.7 Environmental Abiotic Degradation (Complete) |
| 35 | HSDB | 水域 | 光分解 | | | | | | 75 % [at 44 hours] | | | | | | experimental result | x | | Knoevenagel K et al; Arch Environ Contam Toxicol 4: 324-33 (1976) | 6.7 Environmental Abiotic Degradation (Complete) |
| 36 | HSDB | 水域 | 光分解 | | | | | | 50 % [after 23 hours] | | | | | | experimental result | x | | Knoevenagel K et al; Arch Environ Contam Toxicol 4: 324-33 (1976) | 6.7 Environmental Abiotic Degradation (Complete) |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|--------|----|--|--|---------------------------------|--------------|--|---|-----------|----------------------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|---|--|--|--|
| 37 | HSDB | 水域 | 光分解 | | | | | 25 %[photooxidation occurred after 10 hours] | | | | | | | | その他,90 to 95 °C under a UV lamp in aqueous media | | | experimental result | | x | | Knoevenagel K et al; Arch Environ Contam Toxicol 4: 324-33 (1976) | 6.7 Environmental Abiotic Degradation (Complete) |
| 38 | HSDB | 大気 | OHラジカルとの反応 | 2.3E-011 cm ³ /molecule/sec[at 25 °C] | 5E+005 molecule/cm ³ | 17 時間 | | | 0.6976119 | | | | | | | | | | estimated by calculation | | x | | Meylan WM, Howard PH; Chemosphere 26: 2293-99 (1993) | 6.7 Environmental Abiotic Degradation (Complete) |
| 39 | HSDB | 大気 | その他,oxidation of hydroquinone by alkylperoxy radicals (present in sunlit waters) in organic solvents | | | 12 分 | | | | | | | | | | | | | | | x | | Mill T; Environ Toxicol Chem 1: 135-41 | 6.7 Environmental Abiotic Degradation (Complete) |
| 40 | Mackay | 大気 | その他,Oxidation | <2E2 L/mol/sec | | | | | | 25 °C[t1/2 > 100 yr] | | | | | | | | | その他,for the reaction with singlet oxygen at 25°C in aquatic systems with t1/2 > 100 yr | | x | | Foote, C.S. (1976) Free Radicals in Biology; Pryor, W.A., Editor, Academic Press, New York.; Mill, T. (1979) Structure Reactivity Correlations for Environmental Reactions. EPA Final Report, EPA 560/11-79-012.; quoted, Mill, T. (1982) Hydrolysis and oxidation processes in the environment. Environ. Toxicol. Chem. 1, 135-141. | 2965 |
| 41 | Mackay | 大気 | その他,photooxidation | | | 6~26.1 時間 | | | | | | | | | | | | | その他 (推定値) | based on estimated rate constant for the vapor-phase reaction with hydroxyl radical in air | x | | Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Editors (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan. | 2966 |
| 42 | Mackay | 水域 | その他,aqueous photooxidation | | | 0.39~19.3 時間 | | | | | | | | | | | | | experimental result | based on measured rate data for the reaction with alkylperoxyl radical in aqueous solution | x | | Mill, T. (1982) Hydrolysis and oxidation processes in the environment. Environ. Toxicol. Chem. 1, 135-141.; quoted, Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Editors (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan. | 2966 |
| 43 | Mackay | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | 48~336 時間 | | | | | | | | | | | | | その他 (推定値) | based on estimated unacclimated aqueous aerobic biodegradation half-life | x | | Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Editors (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan. | 2966 |
| 44 | Mackay | 土壌 | 生分解 (好氣的) | | | 24~168 時間 | | | | | | | | | | | | | その他 (推定値) | based on estimated unacclimated aqueous aerobic biodegradation half-life | x | | Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Editors (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan. | 2966 |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|--------|----|--|--|--|--------------|--|--|--|--|--|--|--|---------------------|--|---|--|---|------|
| 45 | Mackay | 水域 | その他, aqueous photooxidation | | | 0.39~19.3 時間 | | | | | | | | experimental result | based on measured rate data for the reaction with alkyl peroxy radical in aqueous solution | × | | Mill, T. (1982) Hydrolysis and oxidation processes in the environment. Environ. Toxicol. Chem. 1, 135-141.; selected, Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Editors (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan. | 2965 |
| 46 | Mackay | 大気 | その他, photooxidation | | | 6~26.1 時間 | | | | | | | | その他 (推定値) | based on estimated rate constant for the vapor-phase reaction with hydroxyl radical in air | × | | Atkinson, R. (1987) Structure-activity relationship for the estimation of rate constants for the gas-phase reactions of OH radicals with organic compounds. Intl. J. Chem. Kinetics 19, 799-828.; selected, Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Editors (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan. | 2965 |
| 47 | Mackay | 大気 | その他, 5 h of illumination with a 250 W tungsten lamp by photo-Fenton reaction | | | | 98 % [72.1 mg/L of total organic carbon] | | | | | | | experimental result | 5 h of illumination with a 250 W tungsten lamp by photo-Fenton reaction | × | | Ruppert, G., Bauer, R., Heisler, G., Voalic, S. (1993) Mineralization of cyclic organic water contaminants by the photo-Fenton reaction-influence of structure and substituents. Chemosphere 27(8), 1339-1347. | 2965 |
| 48 | Mackay | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | 24~168 時間 | | | | | | | | experimental result | based on aqueous screening test data | ○ | | Ludzack, F.J., Ettinger, M.B. (1960) Chemical structures resistant to aerobic biochemical stabilization. J. Pollut. Control Fed. 32, 1173-1200. Belly, R.T., Goodhue, C.T. (1976) A radiorespirometric technique for measuring the biodegradation of specific components in a complex effluent. In: Proc. Intl Biodegrad. Symposium 3rd., pp. 1130-1137. Gerike, P., Fischer, W.K. (1979) A correlation study of biodegradability determinations with various chemicals in various tests. Ecotoxicol. Environ. Saf 3, 159-173. selected, Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Editors (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan. | 2965 |
| 49 | Mackay | 水域 | 生分解 (嫌氣的) | | | 96~672 時間 | | | | | | | | その他 (測定値) | based on estimated unacclimated aqueous aerobic biodegradation half-life | × | | Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Editors (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan. | 2965 |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|--------------|----|----------------|--|---------------------------------------|-----------------------------------|-----------|--|--|---|--|--|--|--|--|---|--|---|---------------------|---|------|--|-----|
| 50 | Mackay | 大気 | その他, Oxidation | | 1E6 L/mol/sec | | | | | 30°C [t1/2=12min] | | | | | | その他, or the reaction with RO2 radical at 30°C in aquatic systems with t1/2 = 12 min | | x | | Howard, J.A. (1972) Absolute rate constants for reactions of oxy radicals. Adv. Free Radical Chem. 4, 49-173.; Hendry, D.G., Mill, T., Piszkwicz, L., Howard, J.A., Eigenmann, H.K. (1974) Critical review of hydrogen-atom transfer in the liquid phase. Chlorine atom, alkyltrichloromethyl, alkoxy, and alkyl peroxy radicals. J. Phys. Chem. Ref Data 3, 937-978.; quated, Mill, T. (1982) Hydrolysis and oxidation processes in the environment. Environ. Toxicol. Chem. 1, 135-141. | 2965 | | |
| 51 | MOE初期評価 | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | | | 97.2 % [UV-VIS] | | | | | | OECD TG 301C | | | experimental result | x | | 厚生労働省, 経済産業省, 環境省 : 化審法データベース (J-CHECK), (http://www.safe.nite.go.jp/jcheck , 2011.08.10 現在). | p.1 |
| 52 | MOE初期評価 | 大気 | OHラジカルとの反応 | | 23E-12 cm ³ /mole/cule/sec | 3E+005~3E+006 mol/cm ³ | 2.8~28 時間 | | | | | | | | | AOPWIN | | | (Q)SAR | x | | U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.92. Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., and Michalenko, E.M. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv. | p.2 |
| 53 | MOE初期評価 | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | | | 95 % [TOC] | | | | | | OECD TG 301C | | | experimental result | x | | 厚生労働省, 経済産業省, 環境省 : 化審法データベース (J-CHECK), (http://www.safe.nite.go.jp/jcheck , 2011.08.10 現在). | p.1 |
| 54 | MOE初期評価 | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | | | 70 % [BOD] | | | | | | OECD TG 301C | | | experimental result | x | | 厚生労働省, 経済産業省, 環境省 : 化審法データベース (J-CHECK), (http://www.safe.nite.go.jp/jcheck , 2011.08.10 現在). | p.1 |
| 55 | MOE初期評価 | 水域 | 加水分解 | | | | | | | | | | | | | | | | - | x | | Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., and Michalenko, E.M. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: 484-485. | p.1 |
| 56 | NITE初期リスク評価書 | 水域 | 光分解 | | | | | | | 57.4 % [シリカゲルに吸着させた100 ng/gのヒドロキノン は、290 nmの光を照射すると17時間後には57.4%が光分解された] | | | | | | その他, シリカゲルに吸着させた100 ng/gのヒドロキノン は、290 nmの光を照射すると17時間後には57.4%が光分解された | | | experimental result | x | | Freitag, D., Ballhorn, L., Geyer, H. and Kortr, F. (1985) Environmental hazard profile of organic chemicals, Chemosphere, 14, 1589-1616. | p.6 |
| 57 | NITE初期リスク評価書 | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | | | 95 % [全有機炭素 (TOC) 測定] | | | | | | 化審法 TG | | | experimental result | x | | 通商産業省 (1975) 通商産業公報 (1975年8月27日), 製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報 (http://www.nite.go.jp から引用) | p.6 |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|------------------|----|---------------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|---|---|---|--|---|--|-----|
| 58 | NITE初期リス ク評価書 | 水域 | 生分解 (嫌 氣的) | | | | | | | | | | | | | その他、都市下水の消化汚泥か ら分離した微生物を用いた嫌 氣的なメタン発酵条件下での 実験 | | | | experimen tal result | x | | Young, R.Y. and Rivera, M.D. (1985) Methanogenic degradation of four phenolic compounds, water Res., 19, 1325-1332. | p.6 | | |
| 59 | NITE初期リス ク評価書 | 水域 | 生分解 | | | | | | | | | | | | | | | | | そ 他、BOD5/ COD (5日 間のBOD/ 化学的酸 素消費量) が0.53 | x | | Young, R.H.F., Ryckman, D.W. and Buzzell, J.C.Jr. (1968) An improved tool for measuring biodegradability. J Water Pollut Control Fed, 40, 354-370. | p.6 | | |
| 60 | NITE初期リス ク評価書 | 水域 | 生分解 | | | | | | | | | | | | | | | | | そ 他、BOD5/ COD (5日 間のBOD/ 化学的酸 素消費量) が0.37 | x | | Dore, M., Brunet, N. and Legube, B. (1975) Participation of various organic compounds in the evaluation of global pollution criteria. Trib. Cebedeau, 28, 3- 11. | p.6 | | |
| 61 | NITE初期リス ク評価書 | 水域 | 生分解 | | | | | | | | | | | | | | | | | そ 他、BOD5/ COD (5日 間のBOD/ 化学的酸 素消費量) が0.38 | x | | Dore, M., Brunet, N. and Legube, B. (1975) Participation of various organic compounds in the evaluation of global pollution criteria. Trib. Cebedeau, 28, 3- 12. | p.7 | | |
| 62 | NITE初期リス ク評価書 | 水域 | 生分解 (好 氣的) | | | | | | | | | | | | | 97 % [吸光測 定] | | | | 化審法TG | | x | | 通商産業省 (1975) 通商産業公報 (1975年8月27日), 製品評価技術基 盤機構 化学物質管理情報 (http://www.nite.go.jpから引用) | p.6 | |
| 63 | NITE初期リス ク評価書 | 水域 | 光分解 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | x | | Choudhry, G.G. and Webater, G.R.B. (1985) Protocol guidelines for the investigations of photochemical fate of pesticides in water, air and solids, Res. Rev., 96, 79-136. | p.6 | |
| 64 | NITE初期リス ク評価書 | 水域 | その他 | | | | | | | | | | | | | 0.8 時間 | | | | 25 °C | 9 | | x | | EU, European Union (2000) IUCLID, International Uniform Chemical Information Database, ver. 3.1.1. | p.6 |
| 65 | NITE初期リス ク評価書 | 水域 | その他 | | | | | | | | | | | | | 41 時間 | | | | 25 °C | 8 | | x | | EU, European Union (2000) IUCLID, International Uniform Chemical Information Database, ver. 3.1.1. | p.6 |
| 66 | NITE初期リス ク評価書 | 水域 | その他 | | | | | | | | | | | | | 111 時間 | | | | 25 °C | 7 | | o | | EU, European Union (2000) IUCLID, International Uniform Chemical Information Database, ver. 3.1.1. | p.6 |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|------------------|----|----------------|--|--|---|--------------|--|--|-------|--|---|--|---------|-------------------------------------|---------------------|--------------------------------|------------------------------------|---|--|--|--|
| 67 | NITE初期リ スク評価書 | 大気 | OHラジカ ルとの反応 | | 2.21E-011 cm ³ /mol/ sec | 5E+005~ 1E+006 molecule/c m ³ | 0.5~1 日 | | | 25 °C | | AOPWIN | | | | | (Q)SAR | | x | | SRC, Syracuse Research Corporation (2004) AopWin Estimation Software, ver. 1.90, North Syracuse, NY. | p.5 |
| 68 | NITE初期リ スク評価書 | 水域 | 生分解 (好 氣的) | | | | | | | | | 化審法TG | | | | | experimen tal result | | x | | 通商産業省 (1975) 通商産業公報 (1975年8月27日) . 製品評価技術基 盤機構 化学物質管理情報 (http://www.nite.go.jpから引用) | p.6 |
| 69 | PhysProp | 大気 | OHラジカ ルとの反応 | | 0.0000000 00023224 cm ³ /mole cule/sec | | | | | 25 °C | | 記載なし | | - | - | - | estimated by calculation | Estimated Data | x | | MEYLAN,W.M & HOWARD,PH (1993) | http://esc.syrres.co m/fatepointer/webpr op.asp?CAS=12331 9 |
| 70 | ECHA | 水域 | 生分解 (好 氣的) | | | | | | | | | OECD TG 301C | | no data | 2: reliable with restrictions | key study | experimen tal result | | x | | Reference Type: study report. Title: Unnamed. Year: 1992. | Exp Key Biodegradation in water: screening tests 001 |
| 71 | ECHA | 大気 | OHラジカ ルとの反応 | | | 0.5E6 molecule/c m ³ | 16.58 時 間 | | | | | AOPWIN | | | 2: reliable with restrictions | key study | estimated by calculation | calculation using AopWin v.1.92 | x | | | Calc Key Phototransformation in air 001 |
| 72 | ECHA | 水域 | 生分解 (嫌 氣的) | | | | | | | | | その他.The hydroquinone biodegradation is followed in an anaerobic fixed-bed reactor. | | no data | 2: reliable with restrictions | supporting study | experimen tal result | | x | | Reference Type: publication. Title: Methanogenic degradation of hydroquinone in an anaerobic fixed-bed reactor. Author: Szewzyk U & Schink B. Year: 1989 Bibliographic source: Appl Microbiol Biotechnol 32, 346 - 349 | Exp supporting Biodegradation in water: screening tests 005 |
| 73 | ECHA | 水域 | 生分解 (好 氣的) | | | | | | | | | OECD TG 301C | | no data | 2: reliable with restrictions | supporting study | experimen tal result | | x | | Reference Type: publication. Title: A correlation study of biodegradability determinations with various chemicals in various tests. Author: Gerike P & Fischer WK. Year: 1979 Bibliographic source: Ecotoxicol Environ Saf 3, 159 - 173 | Exp supporting Biodegradation in water: screening tests 004 |
| 74 | ECHA | 水域 | 生分解 (好 氣的) | | | | | | | | | OECD TG 301C | | no data | 2: reliable with restrictions | supporting study | experimen tal result | | x | | Reference Type: publication. Title: A correlation study of biodegradability determinations with various chemicals in various tests. Author: Gerike P & Fischer WK. Year: 1979 Bibliographic source: Ecotoxicol Environ Saf 3, 159 - 173 | Exp supporting Biodegradation in water: screening tests 004 |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|------|----|-----------|--|--|--|--|--|--|----------|--|--|--|---------|-------------------------------|------------------|---------------------|--|---|--|---|--|
| 75 | ECHA | 水域 | 生分解 (好氮的) | | | | | | 97.5 % [5d, at influent concentration of 750 mg/L] | | | その他. In this publication the biodegradation pathway of hydroquinone was investigated. Hydroquinone-utilizing organisms were enriched by incubation of soil or sludges in basal salts medium. The sludges were sampled from a pilot photographic waste treatment system receiving color photographic wastes and from laboratory activated sludge units operating on synthetic photographic waste or domestic wastes. Cultures showing visible growth were streaked onto agar plates containing basal salts and 750 mg/L hydroquinone. Isolated microbial colonies were purified by at least three successive streak-transfers on the same medium. Isolates were identified by standard taxonomic methods. | | no data | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | x | | Reference Type: publication. Title: The biodegradation of hydroquinone. Author: Harbison KG & Belly RT. Year: 1982 Bibliographic source: Environ Toxicol Chem 1, 9 - 15 | Exp Key Biodegradation in water: screening tests 003 |
| 76 | ECHA | 水域 | 生分解 (好氮的) | | | | | | 80 % [28d] | | | その他. The anaerobic metabolism of hydroquinone under methanogenic conditions was investigated. | | no data | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | x | | Reference Type: publication. Title: Methanogenic degradation of four phenolic compounds. Author: Young LY & Rivera MD. Year: 1985 Bibliographic source: Water Res 19, 1325 - 1332 | Exp Key Biodegradation in water: screening tests 002 |
| 77 | ECHA | 水域 | 光分解 | | | | | | 50 % [Sampling time: 22.9 h] | 90~95 °C | | その他. The photooxidative degradation of organic compounds by UV light (high pressure mercury-vapor lamp) was estimated by the quantitative determination of the carbon dioxide formed during the reaction. Curves for the degradation extent depending on irradiation time were drawn, based on the CO2 evolution found at different time points. | | - | 3: not reliable | supporting study | experimental result | | x | | publication. Degradation of compounds containing carbon atoms by photooxidation in the presence of water. Knoevenagel and Himmelreich (1976) Archives of Environmental Contamination and Toxicology, 4, 324-333 | Exp supporting Phototransformation in water 004 |
| 78 | ECHA | 水域 | 光分解 | | | | | | 25 % [Sampling time: 10.3 h] | 90~95 °C | | その他. The photooxidative degradation of organic compounds by UV light (high pressure mercury-vapor lamp) was estimated by the quantitative determination of the carbon dioxide formed during the reaction. Curves for the degradation extent depending on irradiation time were drawn, based on the CO2 evolution found at different time points. | | - | 3: not reliable | supporting study | experimental result | | x | | publication. Degradation of compounds containing carbon atoms by photooxidation in the presence of water. Knoevenagel and Himmelreich (1976) Archives of Environmental Contamination and Toxicology, 4, 324-333 | Exp supporting Phototransformation in water 004 |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|------|----|--|--|------------------|------------|-----|-----------------------------------|--|--|----------|---|--|---------|-------------------------------|------------------|---------------------|--|---|--|--|---|
| 79 | ECHA | 水域 | 光分解 | | | | | 15 %[Sampling time: 0.5 h] | | | | その他 Hydroquinone is phototransformed in water in the presence of oxygen at 295 +/- 5 nm over 22 hours. The time course of degradation is monitored by determination of pH and HPLC analysis. To evaluate aquatic toxicity of the mixture of reaction products, acute toxicity (24 hours EC50) to Daphnia magna was determined at 0, 0.5, 4, and 22 hours. | | no data | 2: reliable with restrictions | supporting study | experimental result | | x | | publication. Photochimie et environnement. X - Evaluation de la toxicite des produits de phototransformation de l'hydroquinone et des chlorophenols en milieu aqueux. Tissot A, Boule P, Lemaire J, Lambert S & Palla JC (1985) Chemosphere 14, 1221 - 1230 | Exp supporting Phototransformation in water 002 |
| 80 | ECHA | 水域 | 光分解 | | | | | 49 %[Sampling time: 4 h] | | | | その他 Hydroquinone is phototransformed in water in the presence of oxygen at 295 +/- 5 nm over 22 hours. The time course of degradation is monitored by determination of pH and HPLC analysis. To evaluate aquatic toxicity of the mixture of reaction products, acute toxicity (24 hours EC50) to Daphnia magna was determined at 0, 0.5, 4, and 22 hours. | | no data | 2: reliable with restrictions | supporting study | experimental result | | x | | publication. Photochimie et environnement. X - Evaluation de la toxicite des produits de phototransformation de l'hydroquinone et des chlorophenols en milieu aqueux. Tissot A, Boule P, Lemaire J, Lambert S & Palla JC (1985) Chemosphere 14, 1221 - 1230 | Exp supporting Phototransformation in water 002 |
| 81 | ECHA | 水域 | 光分解 | | | | | 80 %[Sampling time: 22 h] | | | | その他 Hydroquinone is phototransformed in water in the presence of oxygen at 295 +/- 5 nm over 22 hours. The time course of degradation is monitored by determination of pH and HPLC analysis. To evaluate aquatic toxicity of the mixture of reaction products, acute toxicity (24 hours EC50) to Daphnia magna was determined at 0, 0.5, 4, and 22 hours. | | no data | 2: reliable with restrictions | supporting study | experimental result | | x | | publication. Photochimie et environnement. X - Evaluation de la toxicite des produits de phototransformation de l'hydroquinone et des chlorophenols en milieu aqueux. Tissot A, Boule P, Lemaire J, Lambert S & Palla JC (1985) Chemosphere 14, 1221 - 1230 | Exp supporting Phototransformation in water 002 |
| 82 | ECHA | 水域 | 光分解 | | 1E6 L/mol/sec | 1E-9 mol/L | 12分 | | | | | その他 | | no | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | x | | publication. Photochemical transformations. Mill T & Mabey W (1985) In: Environmental exposure from chemicals, Neely W & Blau G (eds.) Vol. I, CRC Press, Inc., Boca Raton, Florida, 175 - 216 publication, Free-Radical Oxidants in Natural Waters. Mill, Theodore; Hendry, Dale G.; Richardson, Harold (1980) Science 207:886-887 grey literature Unnamed (1982) | Exp Key Phototransformation in water 001 |
| 83 | ECHA | 水域 | 光分解 | | | | | 75 %[Sampling time: 43.7 h] | | | 90~95 °C | その他 The photooxidative degradation of organic compounds by UV light (high pressure mercury-vapor lamp) was estimated by the quantitative determination of the carbon dioxide formed during the reaction. Curves for the degradation extent depending on irradiation time were drawn, based on the CO2 evolution found at different time points. | | - | 3: not reliable | supporting study | experimental result | | x | | publication. Degradation of compounds containing carbon atoms by photooxidation in the presence of water. Knoevenagel and Himmelreich (1976) Archives of Environmental Contamination and Toxicology, 4, 324-333 | Exp supporting Phototransformation in water 004 |
| 84 | ECHA | 大気 | その他, Photomineralization with UV light | | | | | 57.4 %[Sampling time: 17 h] | | | | その他 Photomineralization with UV light was tested in the adsorbed phase | | no | 3: not reliable | not applicable | experimental result | | x | | | Exp disregarded Phototransformation in air 002 |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|------|----|-----------|--|--|--|--|--------------------|--|--------------------|--|--|--|---|--------------|--|----|--|--|-----------------------------|--|---|--|--|--------------|
| 85 | ECHA | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | | | 1.00 g/g O2[BOD5] | | | | | OECD TG 301D | | no | | | experimen tal result | | x | | Young, R.H.F., Ryckman, D.W., and Buzzell, Jr., J.C. (1968). An Improved Tool for Measuring Biodegradability, J. Water Pollut. Control Fed. 40, 354-368. | p.4;p.47-48 |
| 86 | ECHA | 水域 | 加水分解 | | | | | 41 時間 | | | | | | 8 | OECD TG 111 | | no | | | experimen tal result | | x | | Moussavi, M. (1979). Effect of Polar Substitution on Autoxidation of Phenols, Water Res. 13, 1125-1128. | p.4; p.49-50 |
| 87 | ECHA | 水域 | 加水分解 | | | | | 0.8 時間 | | | | | | 9 | OECD TG 111 | | no | | | experimen tal result | | x | | Moussavi, M. (1979). Effect of Polar Substitution on Autoxidation of Phenols, Water Res. 13, 1125-1128. | p.4; p.49-50 |
| 88 | ECHA | 水域 | 加水分解 | | | | | 111 時間 | | | | | | 7 | OECD TG 111 | | no | | | experimen tal result | | x | | Moussavi, M. (1979). Effect of Polar Substitution on Autoxidation of Phenols, Water Res. 13, 1125-1128. | p.4; p.49-50 |
| 89 | ECHA | 大氣 | 直接光分解 | | | | | >240 週[in January] | | | | | | | | | no | | | estimated by calculation | | x | | Devillers, J., Boule, P., Vasseur, P., Prevot, P., Steiman, R., Seigle-Murandi, F., Benoit-Guyod, J.L., Nendza, M., Grioni, C., Dive, D., and Chambon, P. (1990). Environmental and Health Risks of Hydroquinone, Ecotoxicol. Environ. Safety 19, 327-354. | p.4; p.49 |
| 90 | ECHA | 大氣 | 直接光分解 | | | | | ≤5 週[in June] | | | | | | | | | no | | | estimated by calculation | | x | | Devillers, J., Boule, P., Vasseur, P., Prevot, P., Steiman, R., Seigle-Murandi, F., Benoit-Guyod, J.L., Nendza, M., Grioni, C., Dive, D., and Chambon, P. (1990). Environmental and Health Risks of Hydroquinone, Ecotoxicol. Environ. Safety 19, 327-354. | p.4; p.49 |
| 91 | ECHA | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | | | 1.89 g/g | | | | | OECD TG 301D | | no | | | experimen tal result | | x | | Young, R.H.F., Ryckman, D.W., and Buzzell, Jr., J.C. (1968). An Improved Tool for Measuring Biodegradability, J. Water Pollut. Control Fed. 40, 354-368. | p.4;p.47-48 |
| 92 | ECHA | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | | | 1.15 g/g O2[BOD20] | | | | | OECD TG 301D | | no | | | experimen tal result | | x | | Young, R.H.F., Ryckman, D.W., and Buzzell, Jr., J.C. (1968). An Improved Tool for Measuring Biodegradability, J. Water Pollut. Control Fed. 40, 354-368. | p.4;p.47-48 |
| 93 | ECHA | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | | | 1.83 g/g | | | | | OECD TG 301D | | no | | | experimen tal result | | x | | Young, R.H.F., Ryckman, D.W., and Buzzell, Jr., J.C. (1968). An Improved Tool for Measuring Biodegradability, J. Water Pollut. Control Fed. 40, 354-368. | p.4;p.47-48 |