

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

(案)

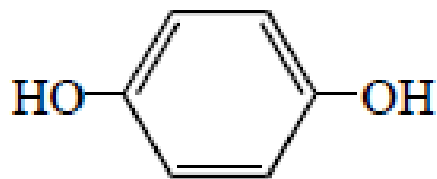
優先評価化学物質のリスク評価(一次)

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 \cdot 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 \cdot 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-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	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-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
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[6.70×10 ⁻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[0.0893Pa 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	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	×	×		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
47 MOE初期評 価	94000 mg/L	94000	84293.0675	28 °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
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	×	×		Verschueren, 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	×	×		Verschueren, 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, <a href="http://esc.syrres.com/interkow/webpr
op.exe?CAS=123-31-9">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: <a href="https://www.epa.gov/oppt/expo
sure/pubs/episutedl.htm">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-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 cm ³ /mole cule/sec							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																		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																		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																		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)																		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												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												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												o		EU, European Union (2000) IUCLID, International Uniform Chemical Information Database, ver. 3.1.1.	p.6

67	NITE初期リスクリスク評価書	大気	OHラジカルとの反応		2.21E-011 cm ³ /mol/sec	5E+005~1E+006 molecule/cm 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初期リスクリスク評価書	水域	生分解 (好氣的)					70 % [生物化学的酸素消費量 (BOD) 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
69	PhysProp	大気	OHラジカルとの反応		0.00000000023224 cm ³ /molecule/sec					25 °C		記載なし		-	-	-	estimated by calculation	Estimated Data	x		MEYLAN,W.M & HOWARD,PH (1993)	http://esc.syrres.com/fatepointer/webprop.asp?CAS=123319
70	ECHA	水域	生分解 (好氣的)					70 % [14d]				OECD TG 301C		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental 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/cm 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)					100%				その他.The hydroquinone biodegradation is followed in an anaerobic fixed-bed reactor.		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental 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)					70 % [14d, (O2 consumption)]				OECD TG 301C		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental 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)					86 % [14 d, (DOC removal)]				OECD TG 301C		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental 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