

[5 1] ヒドロキノン

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式

物質名：ヒドロキノン

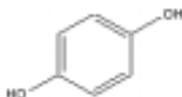
(別の呼称：ハイドロキノン、1,4-ジヒドロキシベンゼン、1,4-ベンゼンジオール、p-ジヒドロキシベンゼン、キノール、ヒドロキトル)

CAS 番号：123-31-9

分子式：C₆H₆O₂

分子量：110.1

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は白色針状結晶で昇華性がある¹⁾。

融点	170 ~ 171 ²⁾
沸点	285 ~ 287 ²⁾
比重	1.332 ²⁾
蒸気圧	6.7 × 10 ⁻⁴ mmHg(25、推定値) ³⁾
換算係数	1ppm=4.58mg/m ³ (気体、20) ⁴⁾
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	0.59 ⁵⁾
加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合なし ⁴⁾
解離定数	pKa=9.96 ⁶⁾ 、pKa=10.85(20) ⁷⁾
水溶性	70,000mg/L(25) ⁸⁾ 、

(3) 環境運命に関する基礎的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

分解性

好氣的：良分解⁹⁾

嫌氣的：ヒドロキノンに順化した嫌気汚泥及び未順化嫌気汚泥による代謝速度は 23.6mg/L・日及び 9.33mg/L・日、ガス発生量はいずれも 5.7 mg/L・日で、ヒドロキノンが完全に無機化されるには 5~8 ヶ月間必要との報告がある(植種源：都市下水処理場の消化汚泥、ヒドロキノン濃度：800mg/L)¹⁰⁾。

非生物的：

(OH ラジカルとの反応性)：大気中での速度定数を 2.3 × 10⁻¹¹ cm³/分子・sec、OH ラジカル濃度 5 × 10⁵ 分子/cm³ とした時の半減期は 16.8 時間と計算される¹¹⁾。

(直接光分解)：ハイドロキノン水溶液 1.0mM に実験室で 5 時間照射したところ、>4.2 μM のオキシダントとスーパーオキシドラジカルアニオン、電子、過酸化水素のいずれかを生成する¹²⁾。酸素存在下でハイドロキノン水溶液を光分解すると、中間体のセミキノリックラジカルを通してキノンを生成する¹³⁾。酸素を暴気した水溶液では、酸化さ

れて着色物が生成される¹⁴⁾。

BOD から算出した分解度：

70% (試験期間：2 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L)⁹⁾

生物濃縮係数 (BCF)：40(Golden ide fish)¹⁵⁾、40～65(藻類)¹⁶⁾

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の平成 12 年における国内生産量は 10,000t(推定)であり、輸入量は 1,073.067t(ヒドロキノン(キノール)およびその塩)である¹⁾。

用途

本物質の主な用途は写真現像薬で、ゴム薬品、染料中間物、有機合成(アブロール)還元剤、メトール原料、有機化合物の重合防止にも用いられている¹⁾。

2. 暴露評価

環境リスクの初期評価のため、水生生物の生存・生育を確保する観点から、実測データをもとに基本的には特定の排出源の影響を受けていない一般環境等からの暴露を評価することとし、安全側に立った評価の観点からその大部分がカバーされる高濃度側のデータによって暴露量の評価を行った。原則として統計的検定の実施を含めデータの信頼性を確認した上で最大濃度を評価に用いている。なお、多数のデータが得られている場合は、95 パーセンタイル値を参考として併記している。

(1) 環境中分布の予測

ヒドロキノンの環境中の分布について、各環境媒体間への移行量の比率を EUSES モデルを用いて算出した結果を表 2.1 に示す。なお、モデル計算においては、面積 2,400km²、人口約 800 万人のモデル地域を設定して予測を行った¹⁾。

表 2.1 ヒドロキノンの各媒体間の分布予測結果

		分布量 (%)
大	気	0.0
水	質	59.6
土	壤	0.3
底	質	40.0

(2) 各媒体中の存在量の概要

ヒドロキノンの水質及び底質中の濃度について情報の整理を行った。各媒体ごとにデータの信頼性が確認された調査例のうち、より広範囲の地域で調査が実施されたものを抽出した結果を表 2.2 に示す。

表 2.2 ヒドロキノンの水質、底質中の存在状況

媒体	幾何平均値	算術平均値	最小値	最大値	検出下限値	検出率	調査地域	測定年	文献
公共用水域・淡水 $\mu\text{g/L}$	<0.36	<0.36			0.36	0/26	全国	1996	2
公共用水域・海水 $\mu\text{g/L}$	<0.36	<0.36			0.36	0/30	全国	1996	2
底質（公共用水域・淡水） $\mu\text{g/g}$	<17	26	<17	180	17	9/26	全国	1996	2
底質（公共用水域・海水） $\mu\text{g/g}$	<17	<17	<17	85	17	6/30	全国	1996	2

注 最大値として 0.17 $\mu\text{g/L}$ の測定値が報告されている(1996)³⁾

(3) 水生生物に対する暴露の推定（水質に係る予測環境中濃度：PEC）

ヒドロキノンの水生生物に対する暴露の推定の観点から、水質中濃度を表 2.3 のように整理した。水質について安全側の評価値として予測環境中濃度（PEC）を設定すると、公共用水域の淡水域では 0.36 $\mu\text{g/L}$ 未満、同海水域でも同様に 0.36 $\mu\text{g/L}$ 未満となった。

表 2.3 水質中のヒドロキノンの濃度

媒体	平均	最大値等
	濃度	濃度
水質		
公共用水域・淡水	0.36 $\mu\text{g/L}$ 未満 (1996)	0.36 $\mu\text{g/L}$ 未満 (1996)
公共用水域・海水	0.36 $\mu\text{g/L}$ 未満 (1996)	0.36 $\mu\text{g/L}$ 未満 (1996)

注)：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。

3. 生態リスクの初期評価

生態リスクの初期評価として、水生生物に対する化学物質の影響（内分泌攪乱作用に関するものを除く）についてのリスク評価を行った。

(1) 生態毒性の概要

本物質の水生生物に対する影響濃度に関する知見の収集を行い、その信頼性を確認したもののについて生物群、毒性分類別に整理すると表 3.1 のとおりとなる。

表 3.1 生態毒性の概要

生物種	急性	慢性	毒性値 [$\mu\text{g/L}$]	生物名	エンドポイント /影響内容	暴露期間 [日]	信頼性			Ref. No.
							a	b	c	
藻類			22	<i>Phaeodactylum tricorutum</i>	EC ₃₅ GRO	3				11882
			610	<i>Dunaliella salina</i>	遊泳細胞の停止	3 時間				7686
			930	<i>Scenedesmus quadricauda</i>	TT	7				5303
			1,000	<i>Anacystis aeruginosa</i>	TT POP	8				15134
			11,000	<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	EC ₅₀ POP	80 時間				17321
			45,000	<i>Nitella</i>	原形質流動阻害	3 時間				7686
甲殻類			70	<i>Streptocephalus rubricaudatus</i>	LC ₅₀ MOR	1				17289

生物種	急性	慢性	毒性値 [μg/L]	生物名	エンドポイント /影響内容	暴露期間 [日]	信頼性			Ref. No.
							a	b	c	
			100	<i>Streptocephalus texanus</i>	LC ₅₀ MOR	1				17289
			130	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				17289
			162	<i>Daphnia pulex</i>	LC ₅₀ MOR	2				569
			290	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM					846
魚類			<u>44</u>	<i>Pimephales promelas</i>	LC ₅₀ MOR	4				569
			97	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	LC ₅₀ MOR	4				569
			240	<i>Jordanella floridae</i>	PELC ₅₀	2 時間				5424
その他			<u>240</u>	<i>Brachionus calyciflorus</i>	LC ₅₀ MOR	1				17289
			11,000	<i>Entosiphon sulcatum</i>	TT	3				5303

太字の毒性値は、PNEC 算出の際に参照した知見として本文で言及したものの、下線を付した毒性値は PNEC 算出の根拠として採用されたものを示す。

信頼性) a : 毒性値は信頼できる値である、b : ある程度信頼できる値である、c : 毒性値の信頼性は低いあるいは不明
 エンドポイント) EC₃₅(35% Effective Concentration) : 35%影響濃度、EC₅₀(Median Effective Concentration) : 半数影響濃度、LC₅₀(Median Lethal Concentration) : 半数致死濃度、PELC₅₀ (Pulse-exposure Concentration Causing 50% Mortality) : 半数致死瞬間濃度、TT(Toxicity Threshold) : 増殖阻害初期濃度
 影響内容) GRO (Growth) : 生長 (植物)、成長 (動物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、POP (Population) : 個体群の変化

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて、信頼できる知見のうち生物群ごとに値の最も低いものを整理し、そのうち最も低い値に対して情報量に応じたアセスメント係数を適用することにより、予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値については、藻類では *Dunaliella salina* の遊泳細胞を停止させる濃度が 610 μg/L、甲殻類では *Streptocephalus rubricaudatus* に対する 24 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 70 μg/L、魚類では *Pimephales promelas* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 44 μg/L、その他の生物ではツボウムシ類 *Brachionus calyciflorus* に対する 24 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 240 μg/L であった。急性毒性値について 3 生物群 (藻類、甲殻類及び魚類) 及びその他の生物の信頼できる知見が得られたため、アセスメント係数として 100 を用いることとし、上記の毒性値のうちその他の生物を除いた最も小さい値 (魚類の 44 μg/L) にこれを適用することにより、急性毒性値による PNEC として 0.44 μg/L が得られた。

慢性毒性値については、信頼できるデータが得られなかった。

本物質の PNEC としては、魚類の急性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 0.44 μg/L を採用する。

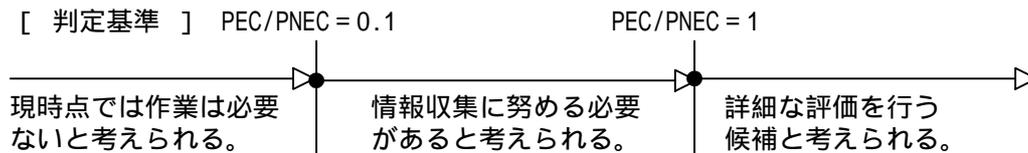
(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

媒体		平均濃度	最大値[95 パーセンタイル値]濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
水質	公共用水域・淡水域	0.36μg/L未満 (1996)	0.36μg/L未満(1996)	0.44 μg/L	<0.8
	公共用水域・海水域	0.36μg/L未満 (1996)	0.36μg/L未満(1996)		

注) : 1) 環境中濃度での () 内の数値は測点年を示す。

2) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。



本物質の公共用水域における濃度は、平均濃度で見ると淡水域・海水域ともに $0.36 \mu\text{g/L}$ 未満であり、検出下限値未満であった。安全側の評価値として設定された予測環境中濃度(PEC)も、淡水域・海水域ともに $0.36 \mu\text{g/L}$ 未満であり、検出下限値未満であった。

予測環境中濃度(PEC)と予測無影響濃度(PNEC)の比は、淡水域・海水域ともに 0.8 未満となるため、現時点では生態リスクの判定はできない。本物質の推定される国内生産量は 10,000t(平成 12 年)であり、約 60%が水質中に分配されると予測されている。また、PNEC 値は $0.44 \mu\text{g/L}$ と小さい値を示している。したがって、今後は、検出下限値を見直した上で、環境中濃度の測定を優先的に行う必要があると考えられる。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 化学工業日報社(2002)：14102 の化学商品
- 2) 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)]
- 3) Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989. [HSDB]
- 4) 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
- 5) Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995. 20. [HSDB]
- 6) McEvoy, G.K. (ed.). AHFS Drug Information 90. Bethesda, MD: American Society of Hospital Pharmacists, Inc., 1990 (Plus Supplements 1990). 2081. [HSDB]
- 7) Pearce PJ, Simkins RJJ; Acid Strengths of Some Substituted Picric Acids. Can J Chem 46:241-8 (1968). [HSDB]
- 8) 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]
- 9) 通産省化学品安全課監修, 化学品検査協会編, 化審法の既存化学物質安全性点検データ集, 日本化学物質安全・情報センター(1992).
- 10) IUCLID(International Uniform Chemical Information Data Base) Data Sheet, EU(1995). [HSDB]
- 11) Meylan WM, Howard PH; Chemosphere 26: 2293-9 (1993). [HSDB]
- 12) Draper WM, Crosby DG; Arch Environ Contam Toxicol 12: 121-6 (1983); Draper WM, Casida JE; J Agric Food Chem 31: 227-31 (1983). [HSDB]
- 13) Perbet G et al; J Chimie Physique 76: 89-96 (1979); Tissot A et al; Chemosphere 14: 1221-30 (1985). [HSDB]
- 14) Grossman A, Kuszniak W; Environ Prot Engineer 1: 151-62 (1975). [HSDB]

- 15) Freitag D et al; Chemosphere 14: 1589-616 (1985); Freitag D et al; Ecotox Environ Saf 6: 60-81 (1982). [HSDB]
- 16) Freitag D et al; Chemosphere 14: 1589-616 (1985); Freitag D et al; Ecotox Environ Saf 6: 60-81 (1982); Geyer HJ et al; Chemosphere 10: 1307-13 (1981). [HSDB]

(2) 暴露評価

- 1: (財)日本環境衛生センター 平成13年度化学物質の暴露評価に関する調査報告書(環境庁請負業務)
- 2:環境庁環境安全課:平成9年版化学物質と環境
- 3:埼玉県:環境白書1997

(3) 生態リスクの初期評価

- 1) データベース: U.S.EPA「AQUIRE」
- 2) 引用文献(Ref. No.: データベースでの引用文献番号)
- 569: DeGraeve, G.M., D.L. Geiger, J.S. Meyer, and H.L. Bergman (1980): Acute and Embryo-Larval Toxicity of Phenolic Compounds to Aquatic Biota. Arch. Environ. Contam. Toxicol. 9(5):557-568.
- 846: Kuhn, R., M. Pattard, K. Pernak, and A. Winter (1989): Results of the Harmful Effects of Selected Water Pollutants (Anilines, Phenols, Aliphatic Compounds) to *Daphnia magna*. Water Res. 23(4):495-499.
- 5303: Bringmann, G., and R. Kuhn (1980): Comparison of the Toxicity Thresholds of Water Pollutants to Bacteria, Algae, and Protozoa in the Cell Multiplication Inhibition Test. Water Res. 14(3):231-241.
- 5424: Holdway, D.A., D.G. Dixon, and K.L.E. Kaiser (1991): The Acute Toxicity of Pulse-Dosed, Para-Substituted Phenols to Larval American Flagfish (*Jordanella floridae*): A Comparison with Toxicity to. Sci.Total Environ. 104:229-237.
- 7686: Stom, D.J. (1977): Influence of Polyphenols and Quinones on Aquatic Plants and Their Blocking of SH-Groups. Acta Hydrochim.Hydrobiol. 5(3):291-298.
- 11882: Florence, T.M., and J.L. Stauber (1986): Toxicity of Copper Complexes to the Marine Diatom *Nitzschia closterium*. Aquat.Toxicol. 8(1):11-26.
- 15134: Bringmann, G., and R. Kuhn (1978): Testing of Substances for Their Toxicity Threshold: Model Organisms *Microcystis (Diplocystis) aeruginosa* and *Scenedesmus quadricauda*. Mitt.Int.Ver.Theor.Angew.Limnol.21:275-284.
- 17289: Crisinel, A., L. Delaunay, D. Rossel, J. Tarradellas, H. Meyer, H. Saiah, P. Vogel, C. Delisle, and C. Blaise (1994): Cyst-Based Ecotoxicological Tests Using Anostracans: Comparison of Two Species of *Streptocephalus*. Environ.Toxicol.Water Qual. 9(4):317-326.
- 17321: Dedonder, A., and C.F. Van Sumere (1971): The Effect of Phenolics and Related Compounds on the Growth and the Respiration of *Chlorella vulgaris*. Z.Pflanzenphysiol. 65:70-80.