

[1] ジフルオロ酢酸

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：ジフルオロ酢酸

CAS 番号：381-73-7

化審法官報公示整理番号：

化管法政令番号：

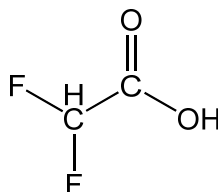
RTECS 番号：AG9900000

分子式：C₂H₂F₂O₂

分子量：96.03

換算係数：1 ppm = 3.93 mg/m³ (気体、25°C)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は液体である¹⁾。

融点	-1°C ¹⁾
沸点	133°C (101 kPa) ¹⁾
密度	1.526 g/cm ³ (25°C) ¹⁾
蒸気圧	1.17×10 ³ Pa (25°C) (MPBVPWIN ²⁾ により計算)
分配係数 (1-オクタノール/水) (log Kow)	0.60097 (37°C) (pH=2.03) ³⁾
解離定数 (pKa)	1.34 (25°C) ⁴⁾
水溶性 (水溶解度)	1×10 ⁶ mg/L (37°C) ³⁾

(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。

生物分解性

好氣的分解

生分解性の情報は得られなかった。

化学分解性

OH ラジカルとの反応性 (大気中)

反応速度定数：0.53×10⁻¹² cm³/(分子・sec) (AOPWIN⁵⁾により計算)

半減期：10 ~ 100 日 (OH ラジカル濃度を 3×10⁶~3×10⁵ 分子/cm³⁶⁾と仮定し、一日を 12 時間として計算)

加水分解性

加水分解性の情報は得られなかった。

生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF) : 3.2 (BCFBAF⁷⁾ により計算)

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc) : 2.3 (KOCWIN⁸⁾ により計算)

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の生産量・輸入量等の情報は、得られなかった。

② 用途

本物質の主な用途は、試薬である⁹⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

特になし。

2. 曝露評価

生態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水生生物の生息が可能な環境を保持すべき公共用水域における化学物質の曝露を評価することとし、データの信頼性を確認した上で安全側に立った評価の観点から原則として最大濃度により評価を行っている。

(1) 環境中への排出量

本物質は化学物質排出把握管理促進法（化管法）の第一種指定化学物質ではないため、排出量及び移動量は得られなかった。

(2) 媒体別分配割合の予測

化管法に基づく排出量及び下水道への移動量が得られなかったため、Mackay-Type Level III Fugacity Model¹⁾により媒体別分配割合の予測を行った。結果を表 2.1 に示す。

表 2.1 Level III Fugacity Model による媒体別分配割合 (%)

排出媒体	大 気	水 域	土 壤	大気/水域/土壌
排出速度 (kg/時間)	1,000	1,000	1,000	1,000 (各々)
大 気	16.4	0.1	0.7	2.6
水 域	41.1	99.5	41	57.5
土 壤	42.4	0.2	58.2	39.8
底 質	0.1	0.2	0.1	0.1

注：環境中で各媒体別に最終的に分配される割合を質量比として示したものの。

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の環境中等の濃度について情報の整理を行った。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 2.2.1、表 2.2.2 に示す。

表 2.2.1 各媒体中の存在状況（国による調査結果）

媒 体	幾何 平均値 ^{a)}	算術 平均値	最小値	最大値 ^{a)}	検出 下限値	検出率	調査地域	測定年度	文 献
公共用水域・淡水	µg/L	<0.00032	<0.00032	<0.00032	0.00032	0/16	全国	2019	2)
公共用水域・海水	µg/L	<0.00032	<0.00032	<0.00032	0.00032	0/12	全国	2019	2)
底質(公共用水域・淡水)	µg/g								
底質(公共用水域・海水)	µg/g								
魚類(公共用水域・淡水)	µg/g								

媒体	幾何 平均値 ^{a)}	算術 平均値	最小値	最大値 ^{a)}	検出 下限値	検出率	調査地域	測定年度	文献
魚類(公共用水域・海水) μg/g									

注：a) 最大値または幾何平均値の欄の太字で示した数字は、曝露の推定に用いた値を示す。

表 2.2.2 各媒体中の存在状況（国以外の調査結果）

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	測定年度	文献
公共用水域・淡水 μg/L									
公共用水域・海水 μg/L									
底質(公共用水域・淡水) μg/g									
底質(公共用水域・海水) μg/g									
魚類(公共用水域・淡水) μg/g									
魚類(公共用水域・海水) μg/g									

(4) 水生生物に対する曝露の推定（水質に係る予測環境中濃度：PEC）

本物質の水生生物に対する曝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、海水域ともに 0.00032 μg/L 未満程度となった。

表 2.3 公共用水域濃度

水域	平均	最大値
淡水	0.00032 μg/L 未満程度(2019)	0.00032 μg/L 未満程度(2019)
海水	0.00032 μg/L 未満程度(2019)	0.00032 μg/L 未満程度(2019)

注：1) 環境中濃度での（）内の数値は測定年度を示す。

2) 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

水生生物の生態リスクに関する初期評価を行った。

(1) 水生生物に対する毒性値の概要

本物質の水生生物に対する毒性値に関する知見を収集し、その信頼性及び採用の可能性を確認したものを生物群（藻類等、甲殻類等、魚類及びその他の生物）ごとに整理すると表 3.1 のとおりとなった。

表 3.1 水生生物に対する毒性値の概要

生物群	急性	慢性	毒性値 [µg/L]	生物名	生物分類/和名	エンドポイント /影響内容	曝露期間 [日]	試験の 信頼性	採用の 可能性	文献 No.
藻類等		○	<u>18.9</u> ^{*1,2}	<i>Raphidocelis subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO (RATE)	3	A	A	1)
	○		>12,000 ^{*1}	<i>Raphidocelis subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)	3	C	C	2)-2015134
	○		62,000 ^{*1}	<i>Raphidocelis subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)	3	A	C	1)
	○		>101,000 ^{*3}	<i>Raphidocelis subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)	3	A	A	1)
	○		>120,000 ^{*3}	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)	3	B	B	2)-2015134
甲殻類等	○		75,000 ^{*1}	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	A	C	1)
	○		>100,000 ^{*3,4}	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	A	A	1)
魚類	○		>100,000 ^{*3,5}	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	A	A	1)
その他			—	—	—	—	—	—	—	—

毒性値 (太字) : PNEC 導出の際に参照した知見として本文で言及したもの

毒性値 (太字下線) : PNEC 導出の根拠として採用されたもの

試験の信頼性 : 本初期評価における信頼性ランク

A : 試験は信頼できる、B : 試験は条件付きで信頼できる、C : 試験の信頼性は低い、D : 信頼性の判定不可

E : 信頼性は低くないと考えられるが、原著にあたって確認したものではない

採用の可能性 : PNEC 導出への採用の可能性ランク

A : 毒性値は採用できる、B : 毒性値は条件付きで採用できる、C : 毒性値は採用できない、

— : 採用の可能性は判断しない

エンドポイント

EC₅₀ (Median Effective Concentration) : 半数影響濃度、LC₅₀ (Median Lethal Concentration) : 半数致死濃度、

NOEC (No Observed Effect Concentration) : 無影響濃度

影響内容

GRO (Growth) : 生長 (植物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、

毒性値の算出方法

RATE : 生長速度より求める方法 (速度法)

*1 pH は無調整

*2 試験溶液の pH の低下は見られなかった

- *3 pH を中性付近に調整
- *4 最高濃度区においても影響が見られなかった
- *5 限度試験（毒性値を求めるのではなく、定められた濃度において影響の有無を調べる試験）により得られた値

評価の結果、採用可能とされた知見のうち、生物群ごとに急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて最も小さい毒性値を予測無影響濃度 (PNEC) 導出のために採用した。その知見の概要は以下のとおりである。

1) 藻類等

環境省¹⁾は、「新規化学物質等に係る試験の方法について（化審法テストガイドライン）」(2011)に準拠して、緑藻類 *Raphidocelis subcapitata* (旧名 *Pseudokirchneriella subcapitata*) の生長阻害試験を、GLP 試験として実施した。設定試験濃度は、0 (対照区)、0.0194、0.0427、0.0939、0.207、0.455、1.00 mg/L (公比 2.2、pH 無調整) 及び 0 (対照区)、0.626、1.25、12.5、25.0、50.0、100 mg/L (pH を中性付近に調整) であった。被験物質の実測濃度（時間加重平均値）は、それぞれ<0.01 (対照区)、0.0189、0.0393、0.0846、0.185、0.402、0.889 mg/L 及び<0.01 (対照区)、0.621、1.22、11.8、26.7、53.4、101 mg/L であった。それぞれ設定濃度の 85.5~98.5%及び 93.0~110%であり、毒性値の算出には実測濃度が用いられた。速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は、pH を調整した試験から 101,000 µg/L 超とされた。速度法による 72 時間無影響濃度 (NOEC) は、pH 無調整の試験から 18.9 µg/L であった。なお、NOEC 付近での pH の低下は見られなかった。

2) 甲殻類等

環境省¹⁾は「新規化学物質等に係る試験の方法について（化審法テストガイドライン）」(2011)に準拠して、オオミジンコ *Daphnia magna* の急性遊泳阻害試験を、GLP 試験として実施した。試験は止水式（密閉容器使用）で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区)、9.5、17.1、30.9、55.6、100 (pH を中性付近に調整) mg/L (公比 1.8) であった。試験には Elendt M4 培地が用いられた。被験物質の実測濃度（算術平均値）は、<0.01 (対照区)、9.94、15.0、34.2、61.1、102 mg/L であり、試験開始時及び終了時において、それぞれ設定濃度の 93.1~118%及び 82.2~114%であった。pH を対照区と同等に調整すると最高濃度区でも遊泳阻害は見られず、48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は設定濃度に基づき 100,000 µg/L 超とされた。

3) 魚類

環境省¹⁾は「新規化学物質等に係る試験の方法について（化審法テストガイドライン）」(2011)に準拠して、メダカ *Oryzias latipes* の急性毒性試験を、GLP 試験として実施した。試験は半止水式（48 時間後換水）で行われ、0 (対照区)、100 (pH を中性付近に調整) mg/L (限度試験) であった。試験用水には硬度 36 mg/L (CaCO₃ 換算) の脱塩素水道水が用いられた。被験物質の実測濃度（時間加重平均値）は、<0.01 (対照区)、103 mg/L であり、試験溶液調製時と換水後及び換水直前と終了時において、それぞれ設定濃度の 95.0~118%及び 90.9~109%であった。被験物質曝露による死亡は見られず、96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) は、設定濃度に基づき 100,000 µg/L 超とされた。

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性及び慢性毒性のそれぞれについて、上記本文で示した最小毒性値に情報量に応じたアセスメント係数を適用し、予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値

藻類等	<i>Raphidocelis subcapitata</i>	72 時間 EC ₅₀ (生長阻害)	101,000 µg/L 超
甲殻類等	<i>Daphnia magna</i>	48 時間 EC ₅₀ (遊泳阻害)	100,000 µg/L 超
魚 類	<i>Oryzias latipes</i>	96 時間 LC ₅₀	100,000 µg/L 超

アセスメント係数：100 [3 生物群 (藻類等、甲殻類等、魚類) について信頼できる知見が得られたため]

これらの毒性値のうち、小さい方の値 (甲殻類等及び魚類の 100,000 µg/L 超) をアセスメント係数 100 で除することにより、急性毒性値に基づく PNEC 値 1,000 µg/L 超が得られた。

慢性毒性値

藻類等	<i>Raphidocelis subcapitata</i>	72 時間 NOEC (生長阻害)	18.9 µg/L
-----	---------------------------------	-------------------	-----------

アセスメント係数：100 [1 生物群 (藻類等) の信頼できる知見が得られたため]

得られた値 (藻類等の 18.9 µg/L) をアセスメント係数 100 で除することにより、慢性毒性値に基づく PNEC 値 0.18 µg/L が得られた。

本物質の PNEC としては、藻類等の慢性毒性値から得られた 0.18 µg/L を採用する。

(3) 生態リスクの初期評価結果

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 0.00032 µg/L 未満程度であった。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 0.00032 µg/L 未満程度であった。

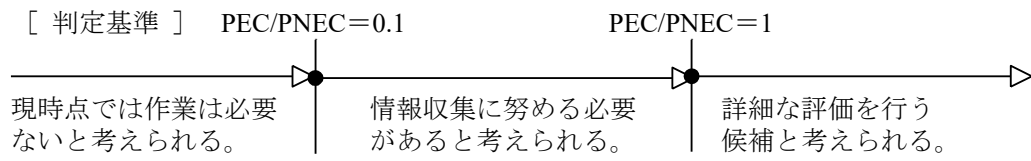
予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域及び海水域ともに 0.002 未満であった。

したがって、生態リスクの判定としては、本物質について現時点では作業の必要はないと考えられた。総合的な判定も同様とした。

表 3.2 生態リスクの判定結果

水 質	平均濃度	最大濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
公共用水域・淡水	0.00032 µg/L未満程度 (2019)	0.00032 µg/L未満程度 (2019)	0.18 µg/L	<0.002
公共用水域・海水	0.00032 µg/L未満程度 (2019)	0.00032 µg/L未満程度 (2019)		<0.002

- 注：1) 環境中濃度での（ ）内の数値は測定年度を示す
 2) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む



4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) Haynes, W.M.ed. (2013) : CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, (Version 2013), CRC Press.
- 2) U.S. Environmental Protection Agency, MPBVPWIN™ v.1.43.
- 3) European Chemicals Agency : Registered Substances, Difluoroacetic acid (<https://www.echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/11679>, 2021.05.10 現在).
- 4) J. L. Kurz and J. M. Farrar(1969) : The entropies of dissociation of some moderately strong acids. Journal of the American Chemical Society. 91:6057-6062.
- 5) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.92.
- 6) 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.
- 7) U.S. Environmental Protection Agency, BCFBAF™ v.3.01.
- 8) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00.
- 9) 環境省 : 化学物質情報検索支援システム (http://www.chemicoco.env.go.jp/detail.html?word=381-73-7&chem_id=3651&n_id=21, 2021.05.10 現在).

(2) 曝露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™v.4.11.
- 2) 環境省環境保健部環境安全課 (2021) : 令和2年度版化学物質と環境 (2019年度(令和元年度)化学物質環境実態調査 調査結果報告書) , (<https://www.env.go.jp/chemi/kurohon/>).

(3) 生態リスクの初期評価

- 1) 環境省 (2017) : 平成28年度 生態影響試験
- 2) その他

2015134 : Berends, AG, J. C. Boutonnet, C. G. De Rooij, and R. S. Thompson (1999): Toxicity of Trifluoroacetate to Aquatic Organisms. Environ. Toxicol. Chem.,18(5): 1053-1059.