

フルオロ酢酸

Fluoroacetic acid

IUPAC 名：2-フルオロ酢酸、2-Fluoroacetic acid

別名：モノフルオール酢酸、モノフルオロ酢酸

Monofluoacetic acid, Monofluoroacetic acid

ジフルオロ酢酸

Difluoroacetic acid

IUPAC 名：2,2-ジフルオロ酢酸、2,2- Difluoroacetic acid

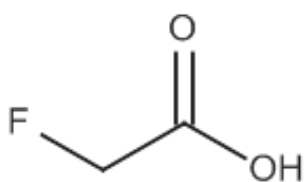
トリフルオロ酢酸

Trifluoroacetic acid

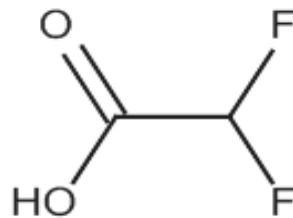
IUPAC 名：2,2,2-トリフルオロ酢酸、2,2,2- Trifluoroethanoic acid

別名：トリフロロ酢酸、Trifloroacetic acid

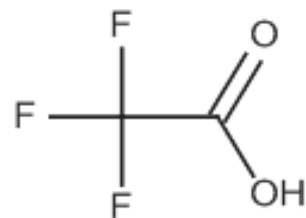
【対象物質の構造】



CAS 番号：144-49-0
分子式：C₂H₃FO₂



CAS 番号：381-73-7
分子式：C₂H₂F₂O₂



CAS 番号：76-05-1
分子式：C₂HF₃O₂

【物理化学的性状】

物質名	フルオロ酢酸	ジフルオロ酢酸	トリフルオロ酢酸
分子量	78.04 ¹⁾	96.03 ³⁾	114.0 ²⁾
モライトビ [°] ック質量	78.0117	96.0023	113.9929
融点	35.2°C ¹⁾	0°C ⁴⁾	-15°C ²⁾
沸点	165°C ¹⁾	135°C ⁴⁾	73°C ⁴⁾
水溶解度	—	混和 ⁴⁾	混和 ⁴⁾
蒸気圧	—	—	15.1kPa (25°C) ⁴⁾
比重又は密度	1.3693 ¹⁾	1.52 ⁴⁾	1.49 ⁴⁾
log P _{ow}	0.061 (概算値) ²⁾	—	-2.1 ⁴⁾

【毒性、用途】

〔毒性〕

フルオロ酢酸¹⁾

健康影響	急性毒性	経口：LD ₅₀ 4.68-7 mg/kg (ラット、マウス) 皮下：LD ₅₀ 5 mg/kg (ラット)
------	------	---

ジフルオロ酢酸⁴⁾

健康影響	急性毒性	静脈内：LD ₅₀ 180 mg/kg (マウス)
------	------	--------------------------------------

トリフルオロ酢酸⁴⁾

健康影響	急性毒性	吸入：LD ₅₀ 10 g/m ³ (ラット) 静脈内：LD ₅₀ 1200 mg/kg (マウス)
------	------	--

〔用途〕

フルオロ酢酸	：殺鼠剤原料 ⁵⁾
ジフルオロ酢酸	：有機合成用試薬 ⁶⁾
トリフルオロ酢酸	：医薬・農薬中間体、触媒、核磁気共鳴分析試薬 ⁵⁾

出典

- 1) Sigma Aldrich SDS
- 2) 国際化学物質安全性カード (国立医薬品食品衛生研究所)
- 3) 富士フィルム和光純薬工業 SDS
- 4) 東京化成工業 SDS
- 5) 独立行政法人製品評価技術基盤機構：化学物質総合情報提供システム

(CHRIP)

6) Chemical Book

§1 分析法

(1) 分析法の概要

水質試料に塩酸を添加し、酢酸エチルで液々抽出を行う。抽出液にヘキサン及び無水硫酸ナトリウムを加えて脱水したのち、濃縮して LC/MS/MS-SRM 法で定量する。

(2) 試薬・器具

【試薬】

フルオロ酢酸	: Sigma-Aldrich 製 (250 mg、含有量 95%)
ジフルオロ酢酸	: 東京化成工業製 (>97.0%)
トリフルオロ酢酸ナトリウム	: 東京化成工業製 (>98.0%)
トリフルオロ酢酸ナトリウム- ¹³ C ₂	: Toronto Research Chemicals 製 (>97.0%)
精製水	: 関東化学製 LC/MS 用 蒸留水
ギ酸	: 富士フィルム和光純薬製 特級
ヘキサン	: 関東化学製 残留農薬試験・PCB 試験用
メタノール	: 関東化学製 LC/MS 用
酢酸エチル	: 富士フィルム和光純薬製 残留農薬試験・PCB 試験用
無水硫酸ナトリウム	: 富士フィルム和光純薬製 ダイオキシン類分析用
塩酸	: 富士フィルム和光純薬製 精密分析用
ジメチルスルホキシド(DMSO)	: 富士フィルム和光純薬製 特級

【試薬の調製】

[5 mol/L 塩酸]

精製水 126 mL に塩酸 100 mL を加えて混合し、5 mol/L 塩酸とする（塩酸濃度が 35%の場合）。

[0.2%ギ酸溶液]

精製水 500 mL にギ酸 1 mL を加えて混合し、0.2%ギ酸溶液とする。

【標準液の調製】

〔標準原液〕

フルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸、トリフルオロ酢酸ナトリウムをそれぞれ正確に 100 mg、100 mg 及び 119 mg を別々のポリプロピレン (PP) 製メスフラスコに量り取り、メタノールで 100 mL として、1000 µg/mL の標準原液を調製する。

〔サロゲート内標準液〕

トリフルオロ酢酸ナトリウム-¹³C₂ の標準品 1.19 mg (トリフルオロ酢酸-¹³C₂ として 1.00 mg) を PP 製メスフラスコに正確に量り取り、メタノールで 10 mL として、トリフルオロ酢酸-¹³C₂ 100 µg/mL のサロゲート内標準原液を作成する。サロゲート内標準原液をメタノールで正確に希釈し、1.0 µg/mL のサロゲート内標準液を調製する。

〔検量線用標準液〕

フルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸、トリフルオロ酢酸の 1000 µg/mL 標準原液及び 1.0 µg/mL サロゲート内標準液を酢酸エチルで適宜希釈したものを検量線用標準液とする。各濃度の標準液は、フルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸、トリフルオロ酢酸として 0.50 ng/mL～500 ng/mL、トリフルオロ酢酸-¹³C₂ として 20 ng/mL に相当するようにする。

【器具】(注 1)

ガラス繊維ろ紙 : GC-50

振とう器 : SR-2DW

PP 製漏斗、PP 製分液漏斗 (注 2)、PP 製メスフラスコ、ホールピペット (注 3)、マイクロピペット (注 4)、マイクロシリンジ (注 4)、PP 製バイアル

(3) 分析方法

【試料の採取及び保存等】

環境省「化学物質環境実態調査実施の手引き」(平成 28 年 3 月)に従う。試料は PP 製容器(200 mL) (注 5) に採取後、速やかに試験操作を行う。速やかに行えない場合は、冷暗所に保存する。

【試料の前処理及び試験液の調製】

PP 製容器内の水質試料 (200 mL 全量) に 5 mol/L 塩酸 10 mL 及び 1.0 µg/mL のサロゲート内標準液を 20 µL 加える。この溶液を孔径 0.5 µm 程度のガラス繊維ろ紙をセットした PP 製漏斗で自然ろ過後、500 mL 容 PP 製分液漏斗に移す。PP 製容器を酢酸エチル 10 mL 程度で 2 回洗い込み、先の PP 製分液漏斗に移す (注 6)。酢酸エチル 80 mL を加え、10 分間振とう後、10 分間静置する。下層の溶液を別の PP 製分液漏斗に移し、酢酸エチル層を PP 製容器に移す。新しい酢酸エチル 80 mL により液々抽出操作をさらに 2 回繰り返し行い、酢酸エチル層を先の PP 製容器に分取する。分取した酢酸エチル層を 500 mL 容 PP 製分液漏斗に移し、ヘキサン 40 mL 及び無水硫酸ナトリウム 20 g を加えて、5 分間振とうして脱水する。

溶液を、ジメチルスルホキシドを 100 µL 添加した 300 mL の PP 製容器に移し、窒素気流下で数 mL 程度まで濃縮する。その後、PP 製 10 mL 容遠心管に移し、窒素気流下で 0.5 mL まで濃縮して、酢酸エチルを加えて 1 mL に定容し、試験液とする (注 7)。

【空試験液の調製】

試料と同量の精製水を用いて、【試料の前処理及び試験液の調製】の項に従って操作し、得られた試験液を空試験液とする。

【測定】

〔LC/MS/MS 測定条件〕 (注 8)

〔LC 条件〕

機種	: Agilent Technologies 製 1260 Infinity
カラム	: Waters 製 HSS T3 (150 mm × 3.0 mm, 2.5 µm)
移動相	: A : 0.2%ギ酸水溶液、 B : メタノール
	0→3 min A : B = 90 : 10
	3→9 min A : 90→5、 B : 10→95% linear gradient
	9→12 min A : B = 5 : 95
	12→12.1 min A : 5→90、 B : 95→10% linear gradient
	12.1→27 min A : B = 90 : 10
カラム流量	: 0.2 mL/min
カラム温度	: 40°C
試料注入量	: 20 µL

〔MS 条件〕

機種	: Sciex 製 4500QT
イオン化法	: ESI-negative

ターボガス温度(TEM)	: 700°C
カーテンガス(CUR)	: 8 psi
イオンスプレー電圧(IS)	: -4500 V
ネブライザーガス(GS1)	: 30 psi
ターボガス(GS2)	: 80 psi
コリジョンガス(CAD)	: 8

物質名	モニターイオン (<i>m/z</i>)	ドリフト電圧 (DP)(V)	コリジョン電圧 (CE)(V)
フルオロ酢酸	76.9 > 76.9	-10	-10
ジフルオロ酢酸	94.9 > 50.9	-5	-15
トリフルオロ酢酸	112.9 > 68.9	-10	-15
トリフルオロ酢酸- ¹³ C ₂	114.9 > 70.0	-10	-15

〔検量線〕

検量線用標準液 20 μL を LC/MS/MS に注入し、フルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸については、対象物質の濃度と得られたピーク面積から検量線を作成する。トリフルオロ酢酸については、対象物質とサロゲート内標準との濃度比及びピーク面積比から検量線を作成する。

〔定量〕

試験液 20 μL を LC/MS/MS に注入し、フルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸については、得られた対象物質ピーク面積から試験液中の対象物質濃度を求める。トリフルオロ酢酸については、得られた対象物質とサロゲート内標準とのピーク面積比から試験液中の対象物質濃度を求める。

〔濃度の算出〕

〔フルオロ酢酸及びジフルオロ酢酸〕

試料水中濃度 *C* (μg/L) は次式により算出する。

$$\text{試料水中濃度 } (\mu\text{g/L}) = \text{検出濃度 } (\text{ng/mL}) \times \text{最終液量 } (\text{mL}) / \text{試料量(L)} / 1000$$

〔トリフルオロ酢酸〕

試料水中濃度 *C* (μg/L) は次式により算出する。

$$C = R \cdot Q/V / 1000$$

R : 検量線から求めたサロゲート内標準に対する対象物質の濃度比

Q : 試料中に添加したサロゲート内標準の量(ng)

(= 添加したサロゲート内標準の濃度(ng/mL)×添加したサロゲート内標準の液量(mL))

V : 試料水量(L)

本分析方法に従った場合、以下の数値を使用する。

$Q = 20$ (ng)

(= 添加したサロゲート内標準の濃度(1000 ng/mL)×添加したサロゲート内標準の液量(0.02 mL))

$V = 0.200$ (L)

即ち、

$$C = R / 10 (\mu\text{g/L})$$

[装置検出下限値 (IDL)]

本分析に用いた LC/MS/MS の IDL を表 1 に示す (注 9)。

表 1 IDL の算出結果

物質名	IDL (pg)	試料量 (L)	最終液量 (mL)	IDL 試料換算値 ($\mu\text{g/L}$)
フルオロ酢酸	4.1	0.20	1.0	0.0010
ジフルオロ酢酸	2.0	0.20	1.0	0.00049
トリフルオロ酢酸	10	0.20	1.0	0.0026

[分析方法の検出下限値 (MDL)及び定量下限値 (MQL)]

本分析方法における MDL 及び MQL を表 2 に示す。

表 2 MDL 及び MQL の算出結果 (注 10)

物質名	試料	試料量 (L)	最終液量 (mL)	MDL ($\mu\text{g/L}$)	MQL ($\mu\text{g/L}$)
フルオロ酢酸	河川水	0.20	1.0	0.00087	0.0022
ジフルオロ酢酸	河川水	0.20	1.0	0.0017	0.0043
トリフルオロ酢酸	河川水	0.20	1.0	0.0087	0.022

注 解

- (注 1) トリフルオロ酢酸はガラス容器に吸着しやすいため、試料容器、標準液の調製、試料の前処理操作には PP (ポリプロピレン) 製の容器及び器具を使用する。
- (注 2) 液々抽出操作に用いる PP 製分液漏斗は、使用后 40°C 程度の温水で洗浄し、1 mol/L 塩酸溶液に一晩漬け込む。使用前に希塩酸溶液から分液漏斗を取り出し、水道水ですすいだ後、1 mol/L 塩酸、酢酸エチルの順で 3 回ずつ洗浄したものを使用する。
- (注 3) JIS R 3505 に記載のクラス A のガラス器具を使用する。
- (注 4) マイクロピペット及びマイクロシリンジを使用する場合には精度管理ないしバリデーションされたものを用いることを基本とし、測定誤差 2%以下となることを担保しておくことが望ましい。
- (注 5) 試料は PP 製の容器(200 mL)に採取する。試料量は採取前に容器重量を測る、容器に目盛りを付ける (例えば有栓メスシリンダー) 等を行い、試料採取量を確認し、試料の全量を前処理に用いる。
- (注 6) 試料容器に対象物質が吸着しやすいため、洗い込みを行う。
- (注 7) 必要に応じて、pH 試験紙で最終溶液の pH がほぼ中性域にあることを確認する。
- (注 8) LC/MS/MS の測定条件は、本分析に使用した機種特有のものである。

(注9) IDLは、「化学物質環境実態調査実施の手引き」(平成28年3月)に従って表3のとおりに算出した。また、図1-1~1-3にIDL測定時のクロマトグラムを示す。

表3 IDLの算出結果

物質名	フルオロ酢酸	ジフルオロ酢酸	トリフルオロ酢酸
試料量 (L)	0.200	0.200	0.200
最終液量 (mL)	1.0	1.0	1.0
注入液濃度 (ng/mL)	1.0	0.50	2.0
注入量 (pg)	20	20	20
装置注入量 (μL)	20	20	20
結果 1 (pg)	19.5	7.32	39.6
結果 2 (pg)	19.2	7.59	40.4
結果 3 (pg)	21.8	7.16	34.8
結果 4 (pg)	18.5	7.20	41.8
結果 5 (pg)	19.6	7.89	38.4
結果 6 (pg)	20.3	7.42	42.8
結果 7 (pg)	19.8	6.27	37.6
平均値 (pg)	19.82	7.264	39.34
標準偏差 (pg)	1.04	0.506	2.70
IDL (pg)*	4.1	2.0	10
IDL 試料換算値 (μg/L)	0.0010	0.00049	0.0026
S/N	7.9	10.2	6.9
CV (%)	5.3	7.0	6.9

*: $IDL = t(n-1, 0.05) \times \sigma_{n-1} \times 2$

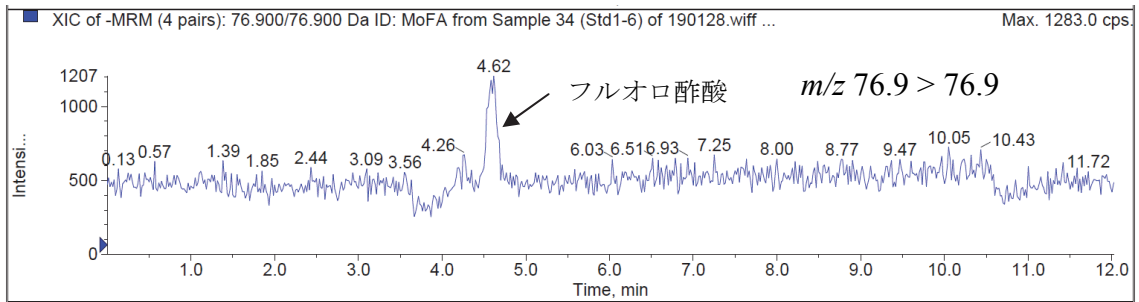


図 1-1 フルオロ酢酸 IDL 測定時(1.0 ng/mL)のクロマトグラム

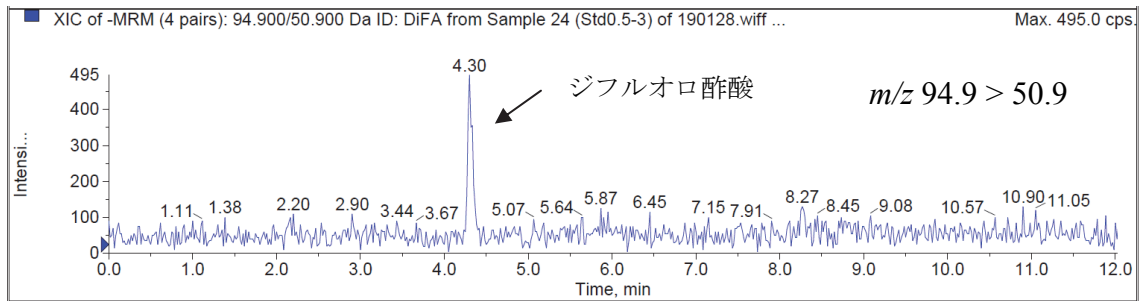


図 1-2 ジフルオロ酢酸 IDL 測定時(0.50 ng/mL)のクロマトグラム

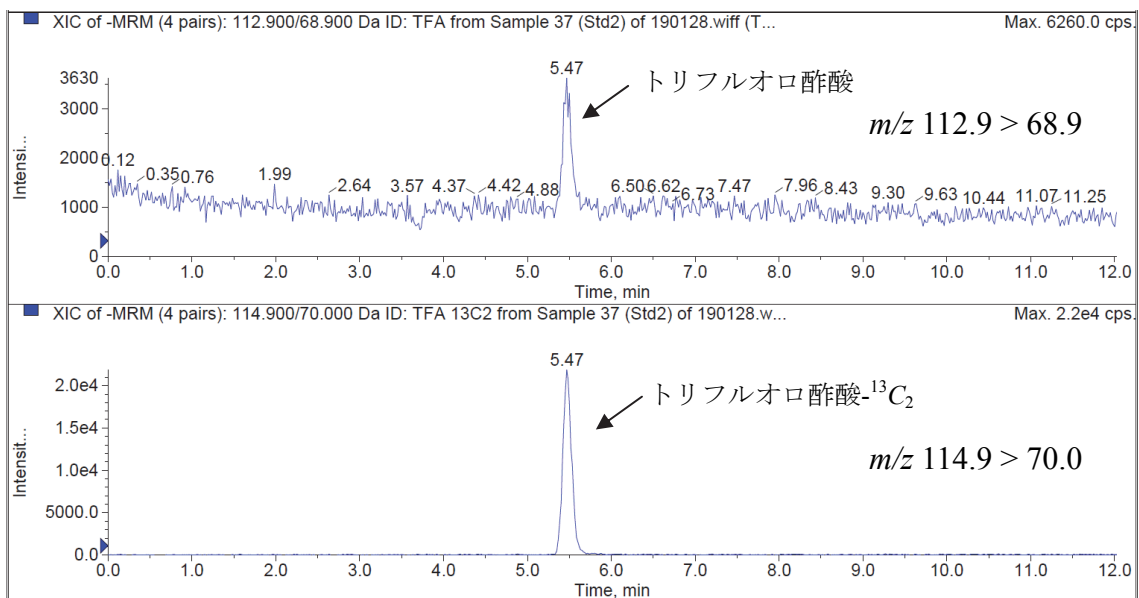


図 1-3 トリフルオロ酢酸 IDL 測定時(2.0 ng/mL)のクロマトグラム

(注 10) MDL は、「化学物質環境実態調査実施の手引き」(平成 28 年 3 月)に従って表 4-1~4-3 のとおりに算出した。また、図 2-1~2-6 に MDL 測定時のクロマトグラムを示す。操作ブランクはトリフルオロ酢酸で検出され、フルオロ酢酸及びジフルオロ酢酸は不検出であった。トリフルオロ酢酸の操作ブランクの標準偏差は 0.00143 $\mu\text{g/L}$ 、環境試料の標準偏差は河川水が 0.00224 $\mu\text{g/L}$ 、海水が 0.00209 $\mu\text{g/L}$ で環境試料の方が大きな値であった。なお、使用した環境試料中から IDL の 5 倍以上のトリフルオロ酢酸が検出されたため、精製水で希釈(河川水:40 倍希釈、海水:20 倍希釈)して用いた。MDL 及び MQL は河川水及び海水の試料を用いて算出し、トリフルオロ酢酸、フルオロ酢酸及びジフルオロ酢酸ともに値の大きかった河川水の値を採用した。

表 4-1 MDL 及び MQL の算出結果 (河川水)

物質名	フルオロ酢酸	ジフルオロ酢酸	トリフルオロ酢酸 ^{*4*7*8}
試料 ^{*1}	河川水	河川水	河川水
試料量 (L)	0.200	0.200	0.200
標準添加量 (ng)	1.0	1.0	0
試料換算濃度 (μg/L)	0.0050	0.0050	—
最終液量 (mL)	1.0	1.0	1.0
注入液濃度 (ng/mL)	1.0	1.0	—
装置注入量 (μL)	20	20	20
操作ブランク平均 (μg/L) ^{*2}	< 0.00087	< 0.0017	0.015 (79)
無添加平均 (μg/L) ^{*3}	< 0.00087	< 0.0017	0.39 (77)
結果 1 (μg/L)	0.00381	0.00519	0.0233(92)
結果 2 (μg/L)	0.00347	0.00564	0.0243 (93)
結果 3 (μg/L)	0.00312	0.00484	0.0274 (90)
結果 4 (μg/L)	0.00346	0.00464	0.0283 (88)
結果 5 (μg/L)	0.00365	0.00530	0.0267 (89)
結果 6 (μg/L)	0.00371	0.00566	0.0234 (92)
結果 7 (μg/L)	0.00346	0.00573	0.0230 (93)
平均値 (μg/L)	0.003525	0.005286	0.02519 (91.2)
標準偏差 (μg/L)	0.000224	0.000426	0.00224
MDL (μg/L) ^{*5}	0.00087	0.0017	0.0087
MQL (μg/L) ^{*6}	0.0022	0.0043	0.022
S/N	13	24	25
CV (%)	6.4	8.1	8.9

*1: 瑞梅寺川 河川水

*2: 空試験液を測定した値の平均値 (n=7)

*3: 試料に標準を添加していない状態で含まれる濃度の平均 (n=2)

*4: トリフルオロ酢酸は 40 倍希釈試料の結果である。

*5: $MDL = t(n-1, 0.05) \times \sigma_{n-1} \times 2$

*6: $MQL = \sigma_{n-1} \times 10$

*7: 定量結果の濃度はサロゲート補正後の値

*8: 括弧内の数値はサロゲート回収率

表 4-2 MDL 及び MQL の算出結果 (海水)

物質名	フルオロ酢酸	ジフルオロ酢酸	トリフルオロ酢酸 ^{*4*7*8}
試料 ^{*1}	海水	海水	海水
試料量 (L)	0.200	0.200	0.200
標準添加量 (ng)	1.0	1.0	0
試料換算濃度 (μg/L)	0.0050	0.0050	—
最終液量 (mL)	1.0	1.0	1.0
注入液濃度 (ng/mL)	1.0	1.0	—
装置注入量 (μL)	20	20	20
操作ブランク平均 (μg/L) ^{*2}	< 0.00077	< 0.0016	0.015 (79)
無添加平均 (μg/L) ^{*3}	< 0.00077	< 0.0016	0.15 (88)
結果 1 (μg/L)	0.00383	0.00450	0.0206 (83)
結果 2 (μg/L)	0.00374	0.00454	0.0252 (78)
結果 3 (μg/L)	0.00352	0.00410	0.0234 (80)
結果 4 (μg/L)	0.00389	0.00387	0.0219 (80)
結果 5 (μg/L)	0.00330	0.00355	0.0194 (83)
結果 6 (μg/L)	0.00370	0.00415	0.0246 (80)
結果 7 (μg/L)	0.00365	0.00354	0.0226 (82)
平均値 (μg/L)	0.003661	0.004037	0.02253 (80.9)
標準偏差 (μg/L)	0.000199	0.000407	0.00209
MDL (μg/L) ^{*5}	0.00077	0.0016	0.0081
MQL (μg/L) ^{*6}	0.0020	0.0041	0.021
S/N	12	24	28
CV (%)	5.4	10.1	9.3

*1: 博多湾 海水

*2: 空試験液を測定した値の平均値(n=7)

*3: 試料に標準を添加していない状態で含まれる濃度の平均 (n=2)

*4: トリフルオロ酢酸は 20 倍希釈試料の結果である。

*5: $MDL = t(n-1, 0.05) \times \sigma_{n-1} \times 2$

*6: $MQL = \sigma_{n-1} \times 10$

*7: 定量結果の濃度はサロゲート補正後の値

*8: 括弧内の数値はサロゲート回収率

表 4-3 MDL 及び MQL の算出結果 (操作ブランク)

物質名	トリフルオロ酢酸
試料	精製水
試料量 (L)	0.200
最終液量 (mL)	1.0
装置注入量 (μL)	20
結果 1 (μg/L)	0.0146 (65)
結果 2 (μg/L)	0.0164 (83)
結果 3 (μg/L)	0.0130 (89)
結果 4 (μg/L)	0.0173 (71)
結果 5 (μg/L)	0.0162 (73)
結果 6 (μg/L)	0.0150 (84)
結果 7 (μg/L)	0.0146 (91)
平均値 (μg/L)	0.01531 (79.4)
標準偏差 (μg/L)	0.00143
MDL (μg/L) ^{*1}	0.0055
MQL (μg/L) ^{*2}	0.014
S/N	18
CV (%)	9.3

*1: $MDL = t(n-1, 0.05) \times \sigma_{n-1} \times 2$

*2: $MQL = \sigma_{n-1} \times 10$

*3: 定量結果の濃度はサロゲート補正後の値

*4: 括弧内の数値はサロゲート回収率

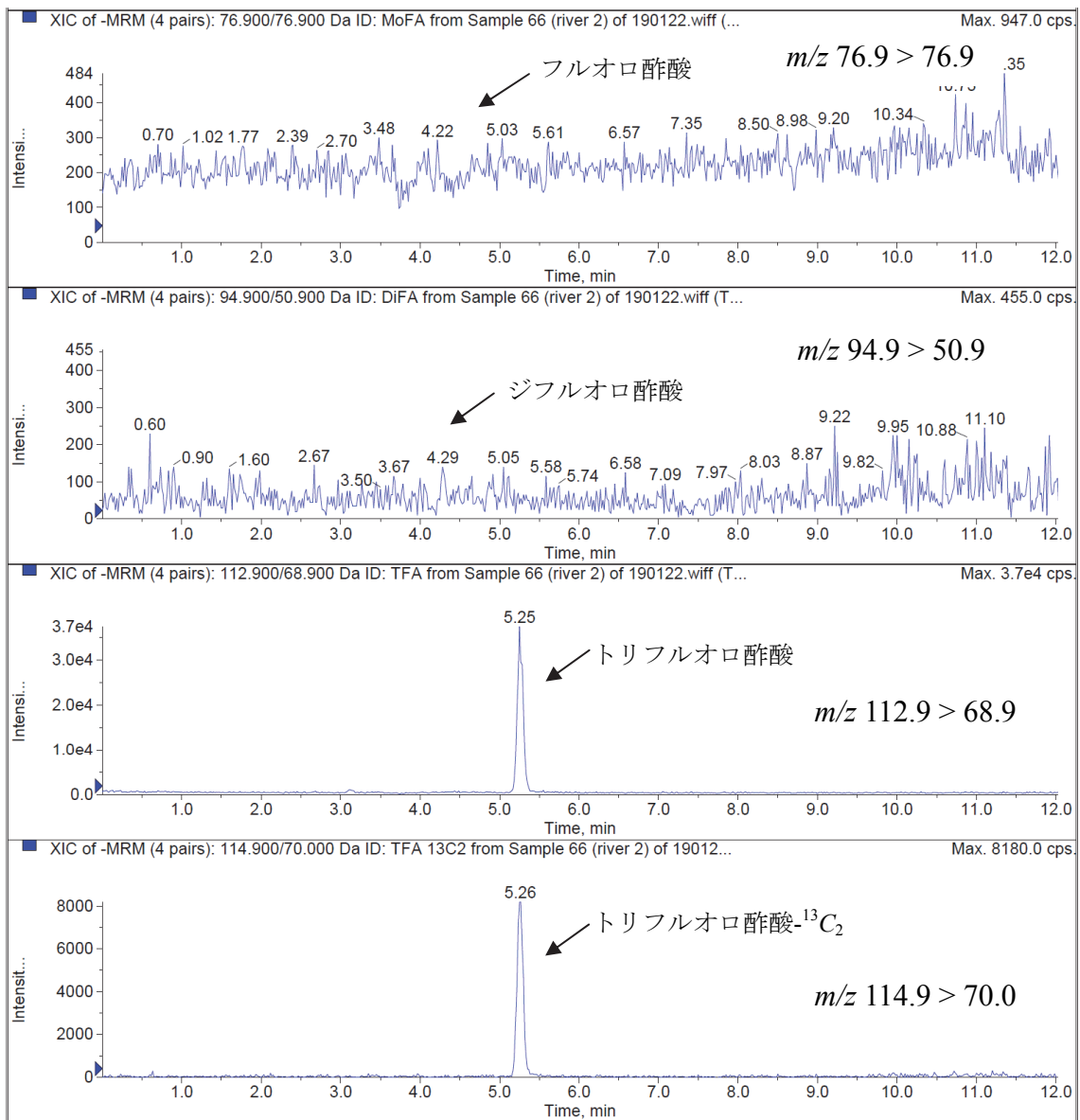


図 2-1 河川水（瑞梅寺川）MDL 測定時の無添加試料クロマトグラム

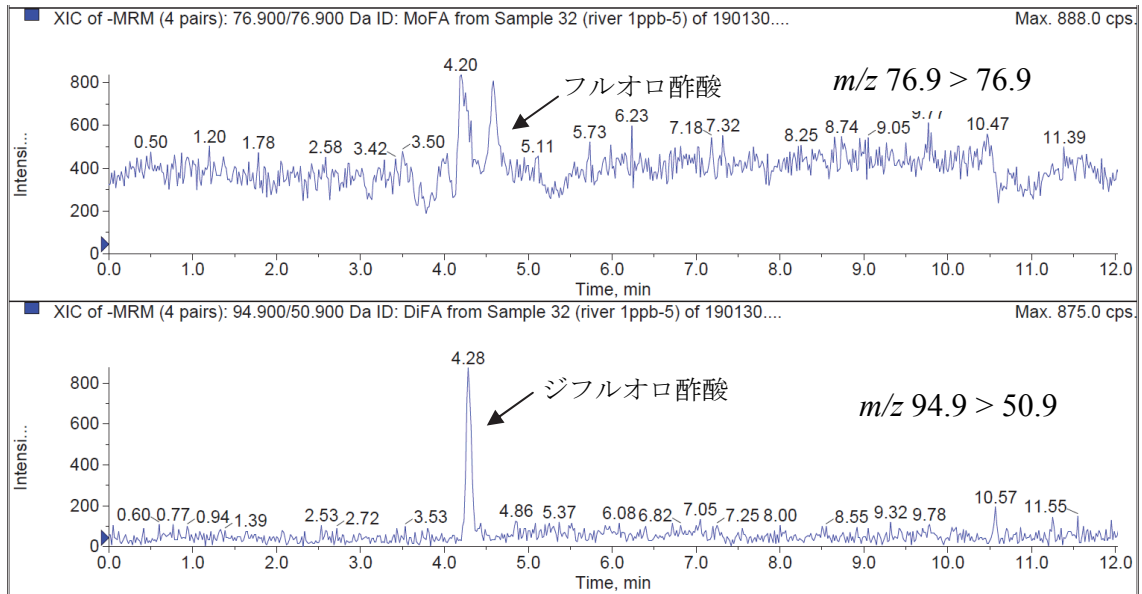


図 2-2 河川水（瑞梅寺川）MDL 測定クロマトグラム
 （添加量：フルオロ酢酸 1.0 ng、ジフルオロ酢酸 1.0 ng）

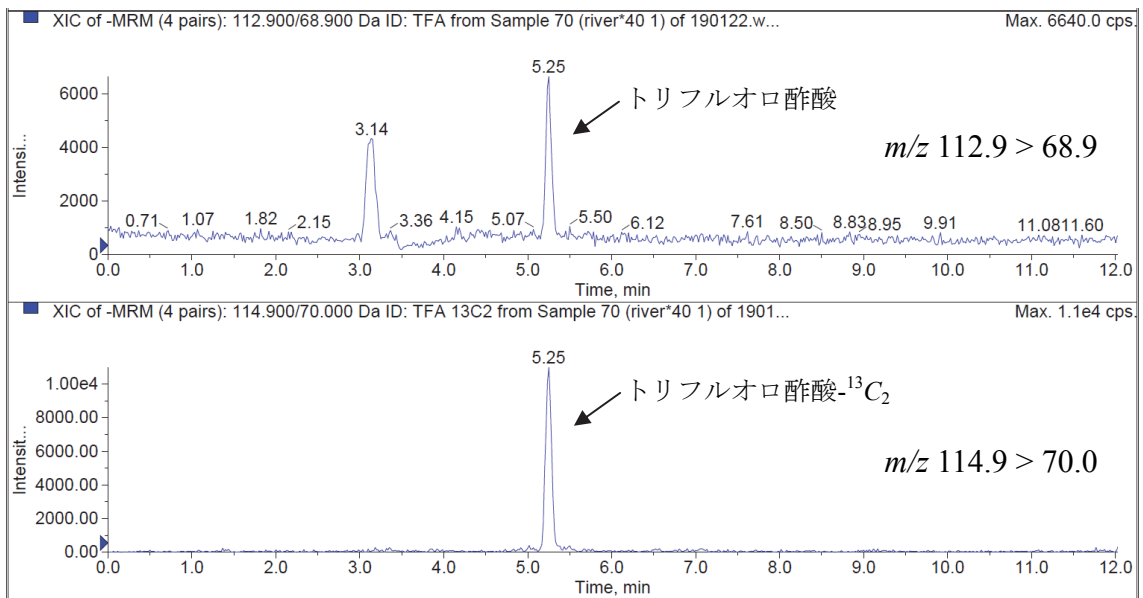


図 2-3 河川水（瑞梅寺川）MDL 測定クロマトグラム
 （無添加試料の 40 倍希釈液）

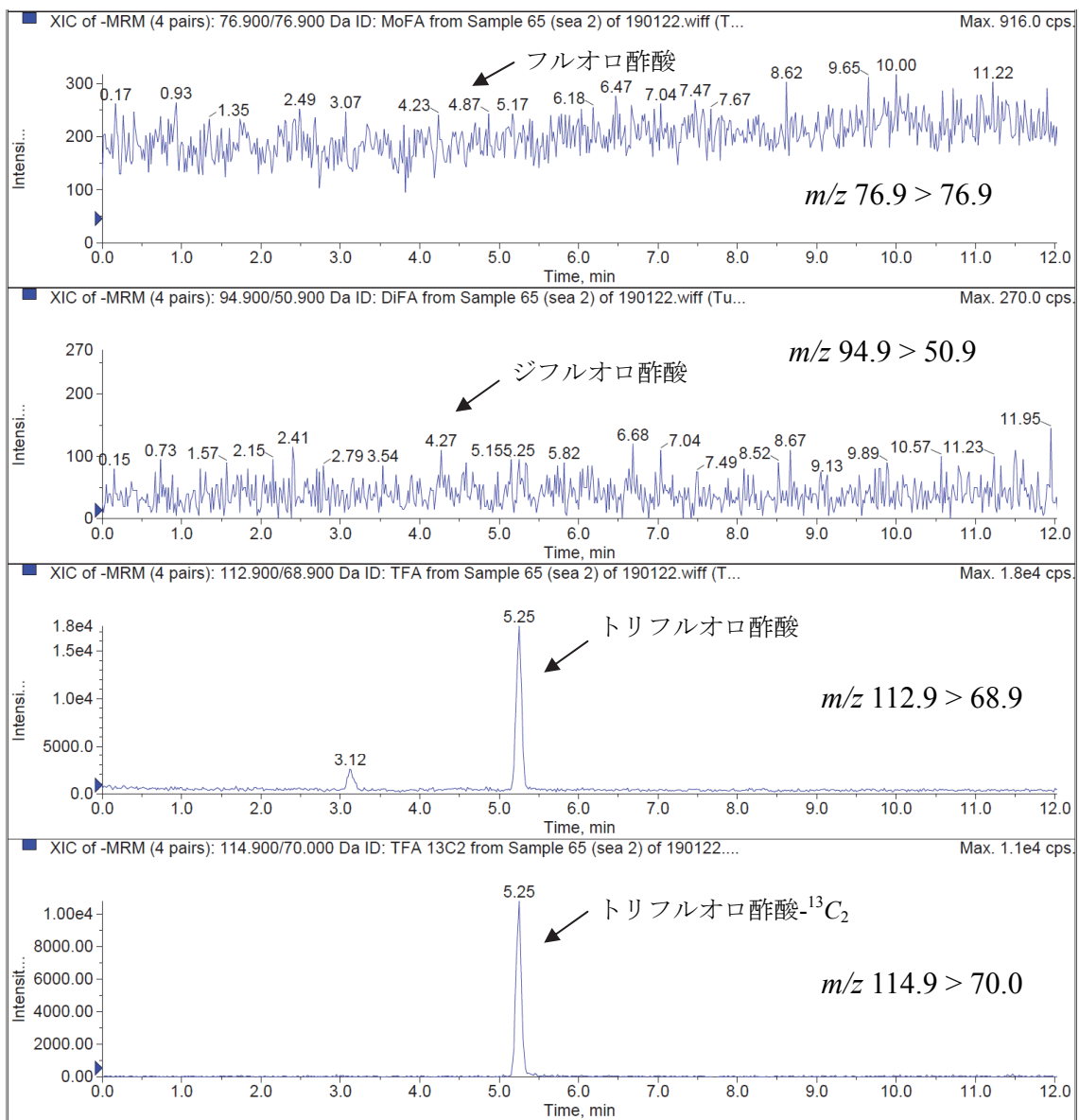


図 2-4 海水（博多湾）MDL 測定時の無添加試料クロマトグラム

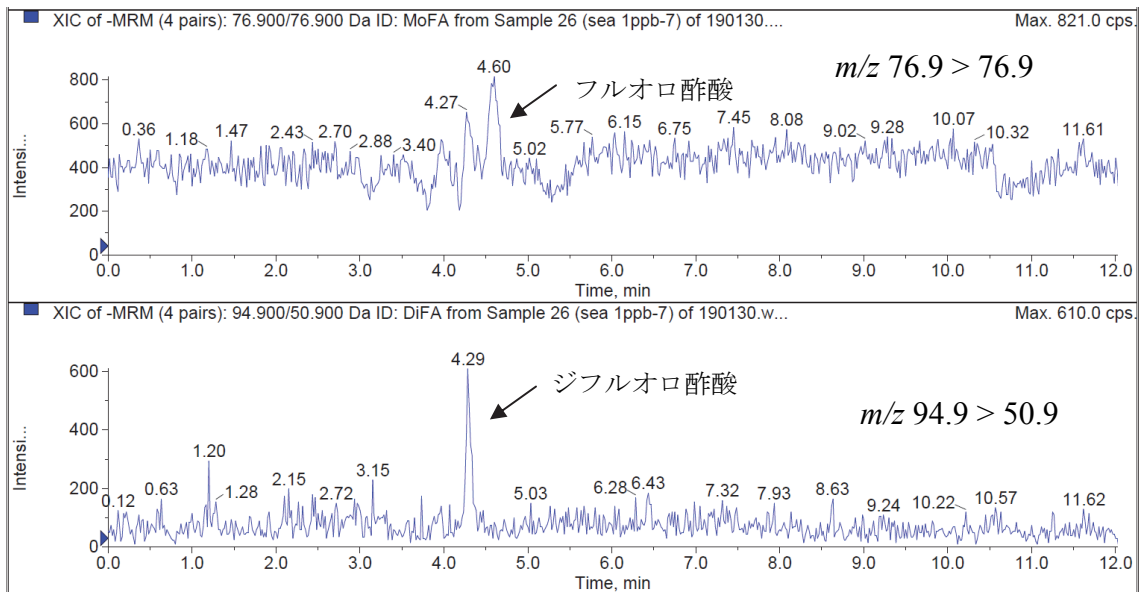


図 2-5 海水（博多湾）MDL 測定クロマトグラム
 (添加量：フルオロ酢酸 1.0 ng、ジフルオロ酢酸 1.0 ng)

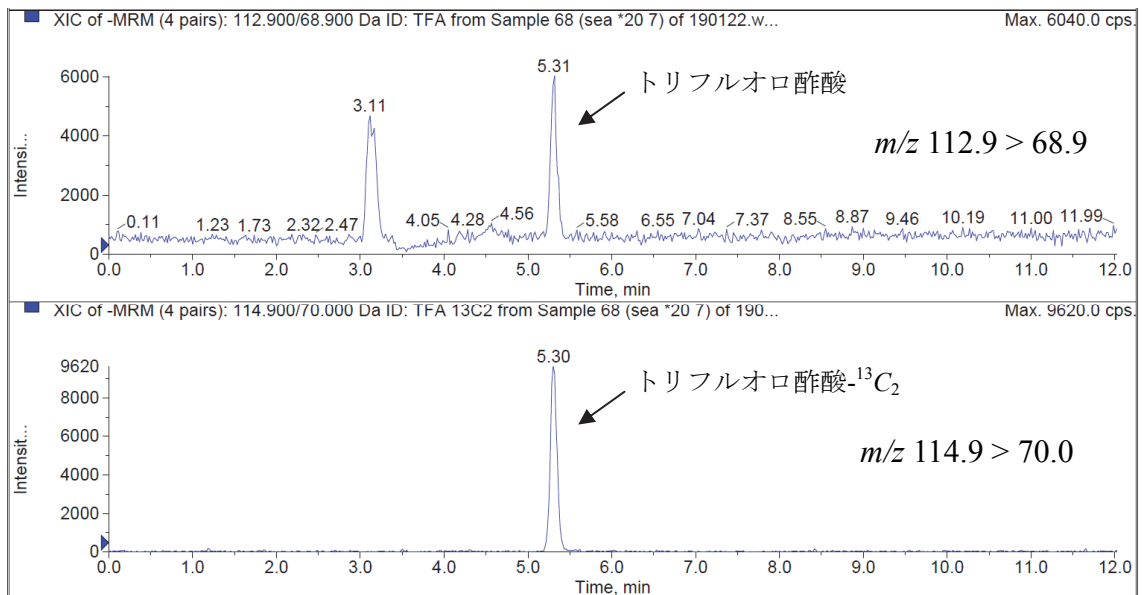


図 2-6 海水（博多湾）MDL 測定クロマトグラム
 (無添加試料の 20 倍希釈液)

§2 解 説

【分析法】

〔フローチャート〕

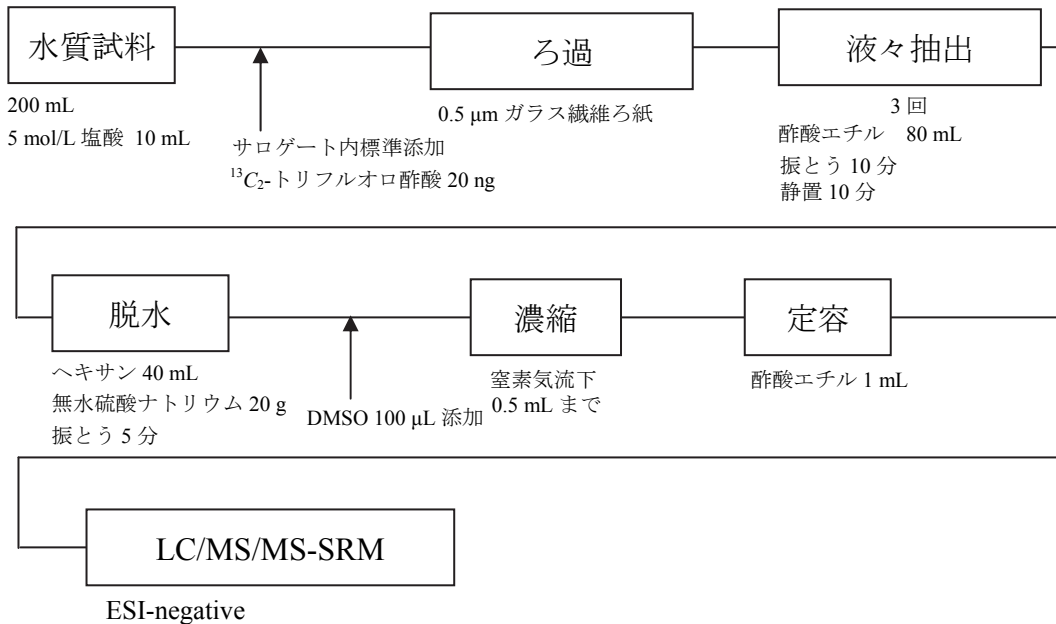


図3 分析法のフローチャート

〔検量線〕

検量線を図 4-1～図 4-3 に、検量線作成データを表 5-1 及び 5-2 に示す。トリフルオロ酢酸の検量線において、対象物質濃度 500 ng/mL 以上の高濃度域でイオン化の抑制が原因と見られるサロゲート内標準の応答値の減衰が見られた。トリフルオロ酢酸の検量線を作成する際は、サロゲート内標準のイオン化を抑制しない濃度範囲とする。

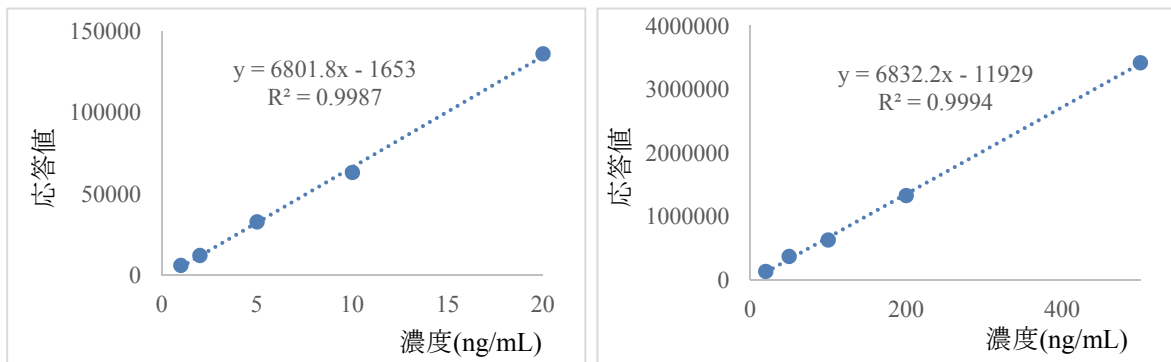


図 4-1 フルオロ酢酸の検量線

(1.0 ng/mL～20 ng/mL (左図) ; 20 ng/mL～500 ng/mL (右図))

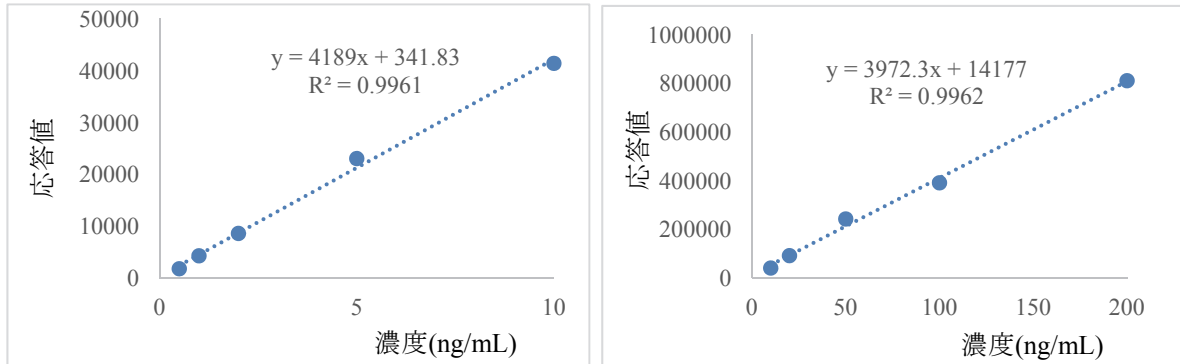


図 4-2 ジフルオロ酢酸の検量線
(0.50 ng/mL～10 ng/mL (左図) ; 10 ng/mL～200 ng/mL (右図))

表5-1 検量線作成用データ (フルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸)

標準液濃度 (ng/mL)	応答値	
	フルオロ酢酸 <i>m/z</i> 76.9 > 76.9	ジフルオロ酢酸 <i>m/z</i> 94.9 > 50.9
0.50	-	1807
1.0	6163	4303
2.0	12260	8615
5.0	32870	23060
10	63110	41420
20	135800	92430
50	371400	243100
100	630200	391800
200	1329000	811600
500	3418000	-

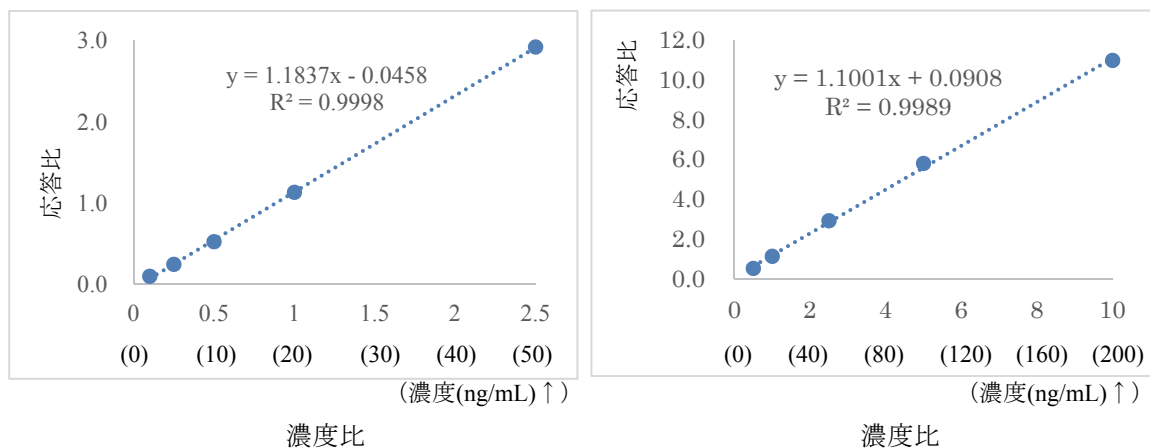


図 4-3 トリフルオロ酢酸の検量線
 (2.0 ng/mL～50 ng/mL (左図) ; 10 ng/mL～200 ng/mL (右図))
 (サロゲート内標準物質 トリフルオロ酢酸-¹³C₂ : 20 ng/mL)

表5-2 検量線作成用データ (トリフルオロ酢酸)

濃度比	標準液濃度 (ng/mL) (C _s)	応答値		応答比 (A _s /A _{is})
		トリフルオロ酢酸 (A _s) (m/z 112.9 > 68.9)	サロゲート内標準物質(A _{is}) トリフルオロ酢酸- ¹³ C ₂ (m/z 114.9 > 70.0)	
0.10	2.0	28250	285400	0.09898
0.25	5.0	75390	307200	0.2454
0.50	10	145000	276600	0.5242
1.0	20	312500	276100	1.1318
2.5	50	800300	274100	2.9197
5.0	100	1463000	252200	5.8010
10	200	2557000	232900	10.9790

サロゲート内標準濃度: 20 ng/mL

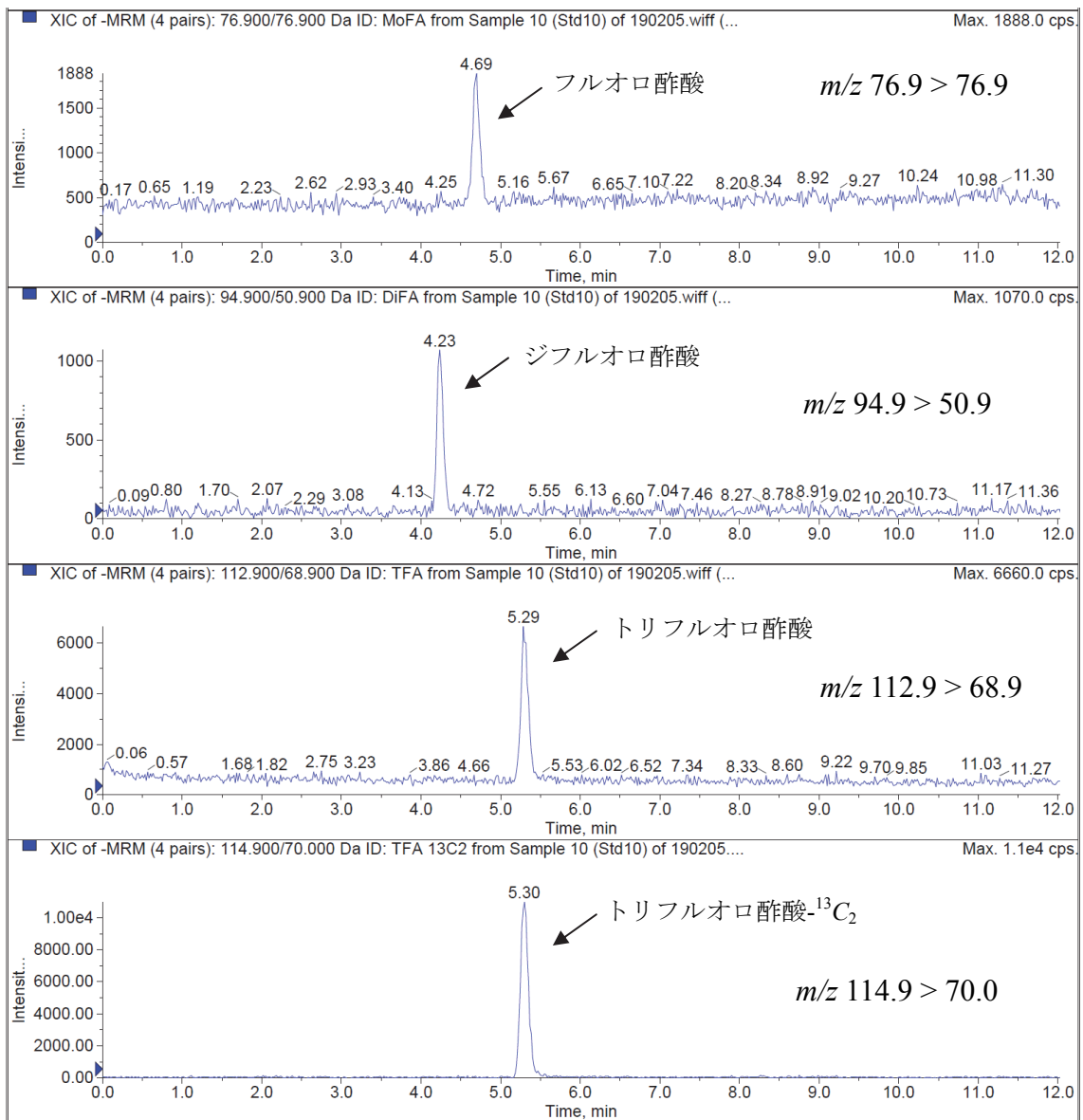


図5 標準液のSRMクロマトグラム (各 10 ng/mL)

[マススペクトル]

フルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸、トリフルオロ酢酸、トリフルオロ酢酸- $^{13}\text{C}_2$ のマススペクトル及びプレカーサーイオンに対するプロダクトイオンを図 6-1～図 6-4 に示す。

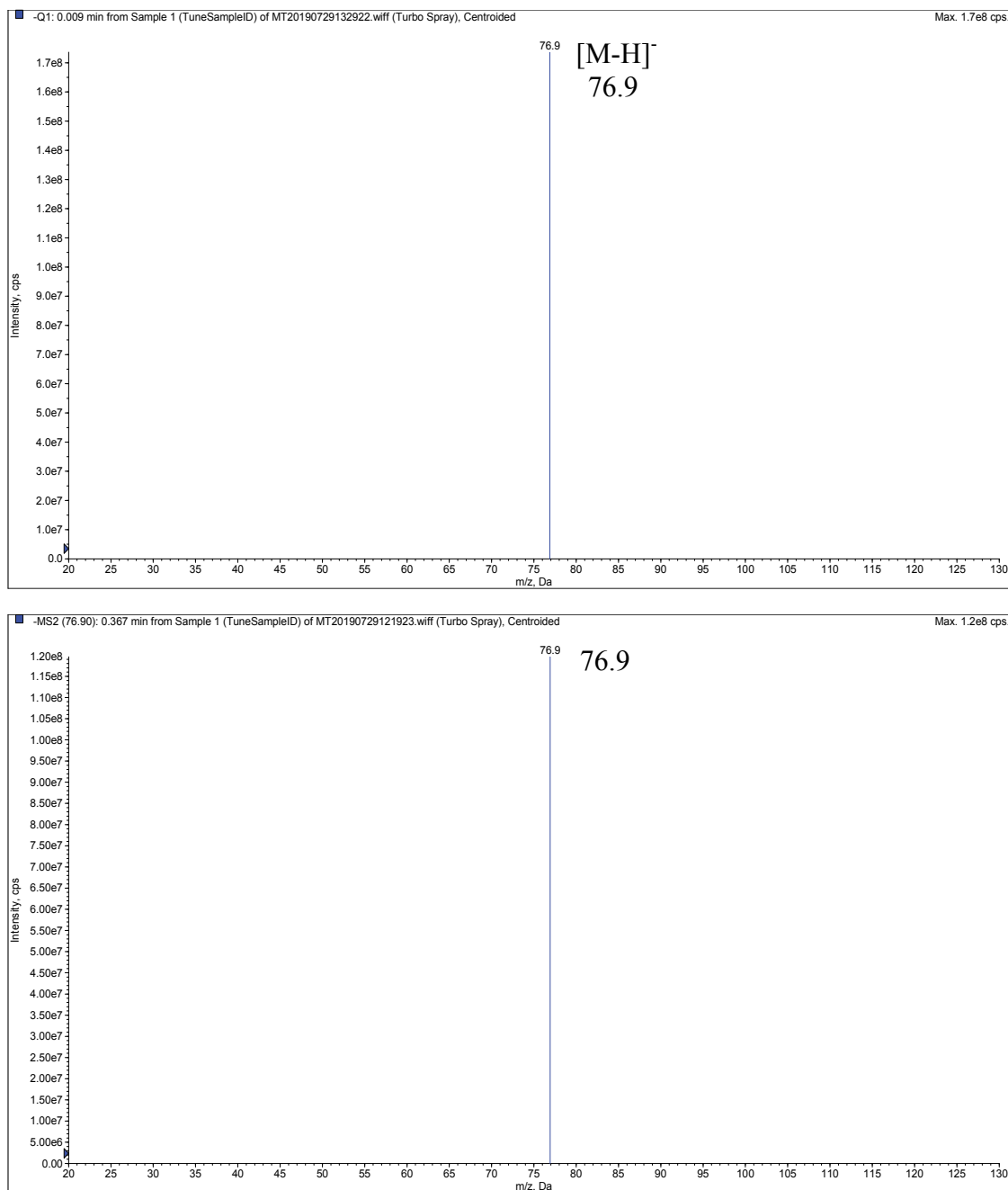


図 6-1 フルオロ酢酸のマススペクトル(上段)及びプレカーサーイオン m/z 76.9 に対するプロダクトイオン (下段)

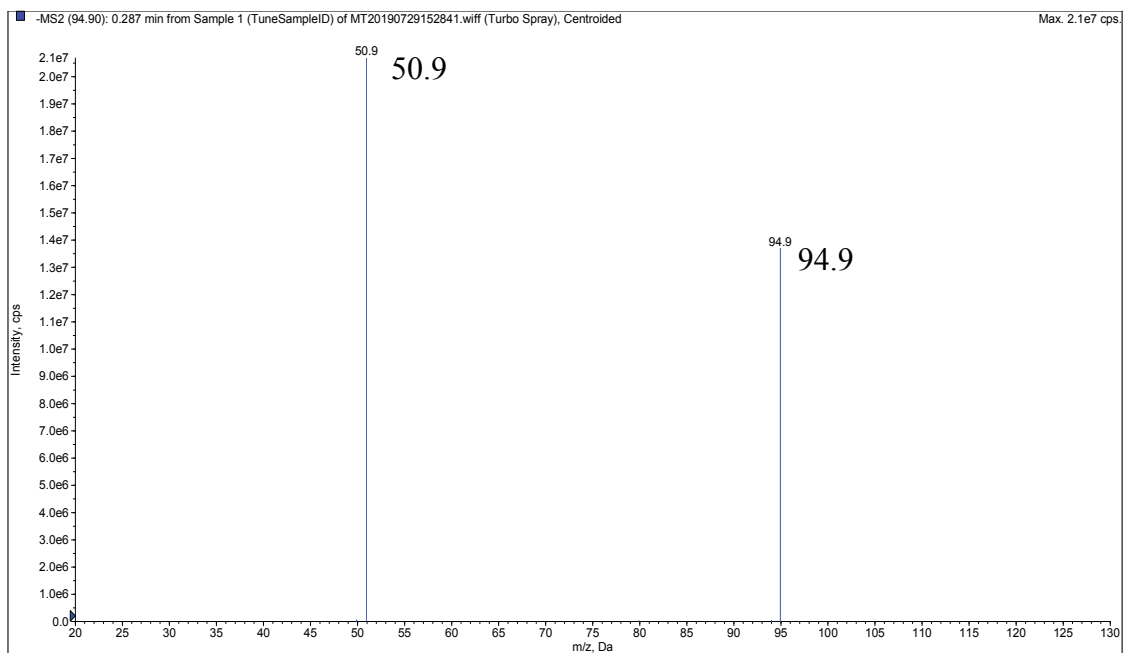
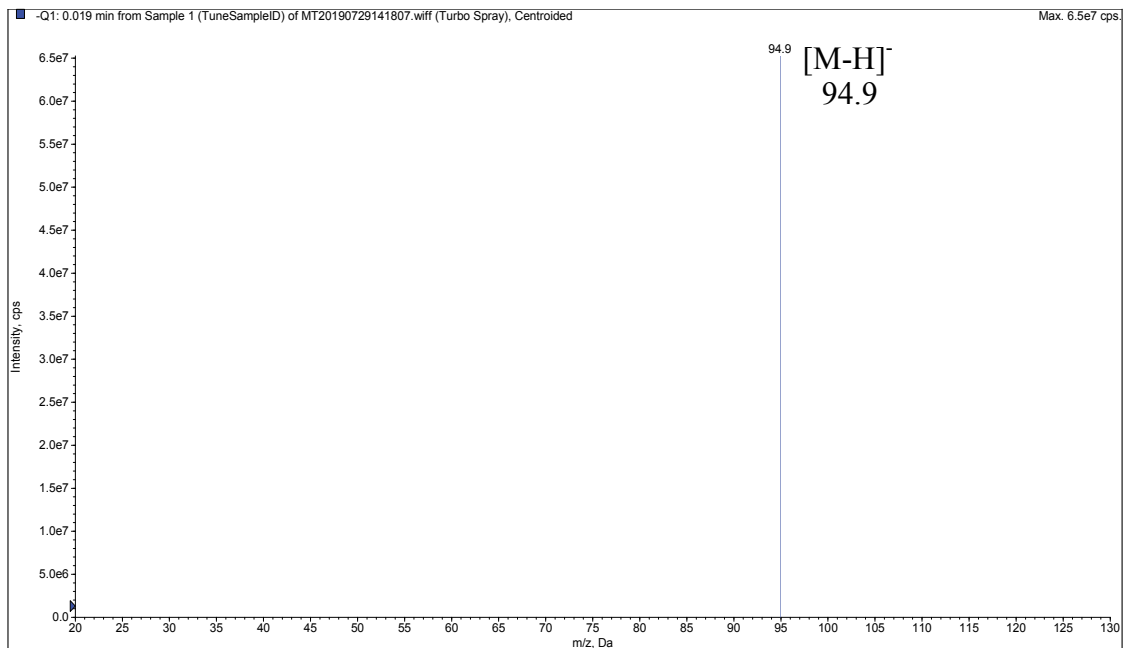


図 6-2 ジフルオロ酢酸のマススペクトル（上段）及びプレカーサーイオン m/z 94.9 に対するプロダクトイオン（下段）

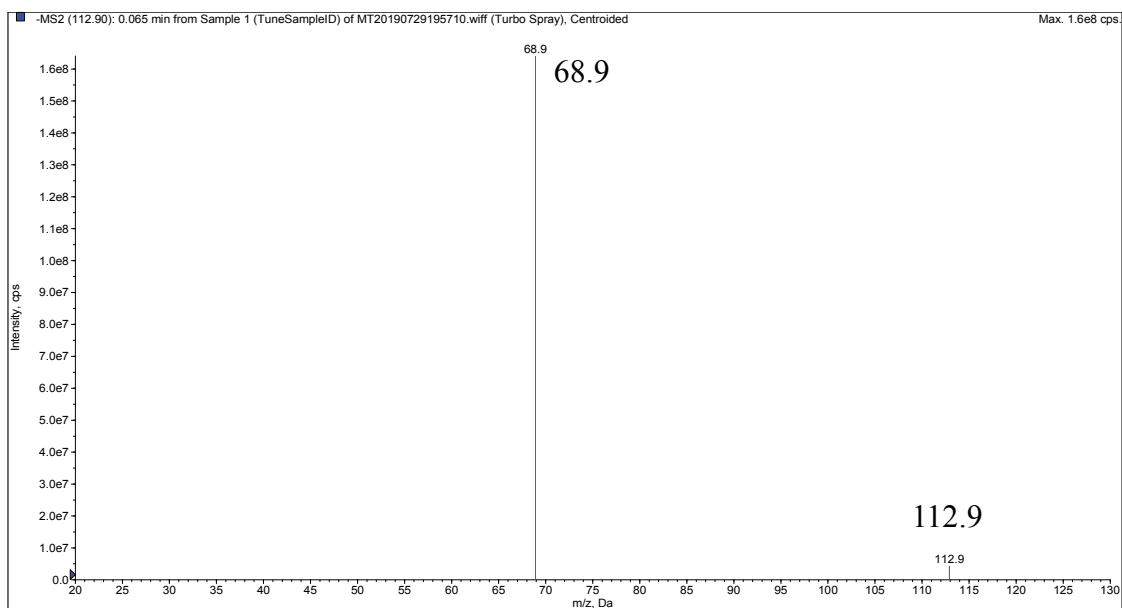
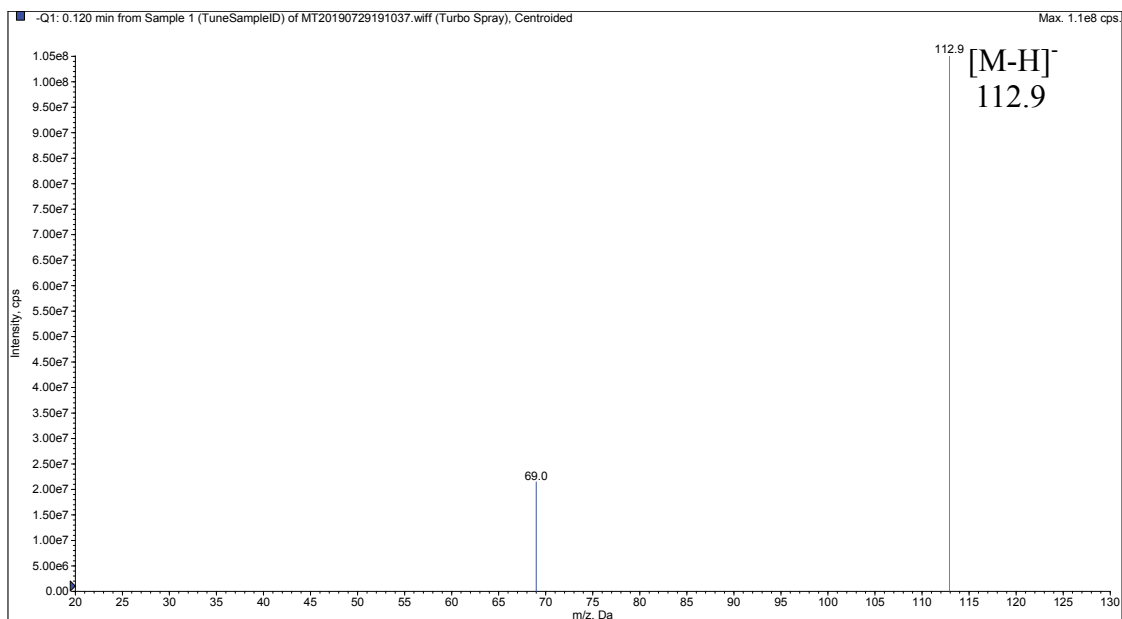


図 6-3 トリフルオロ酢酸のマススペクトル (上段) 及びプレカーサーイオン m/z 112.9 に対するプロダクトイオン (下段)

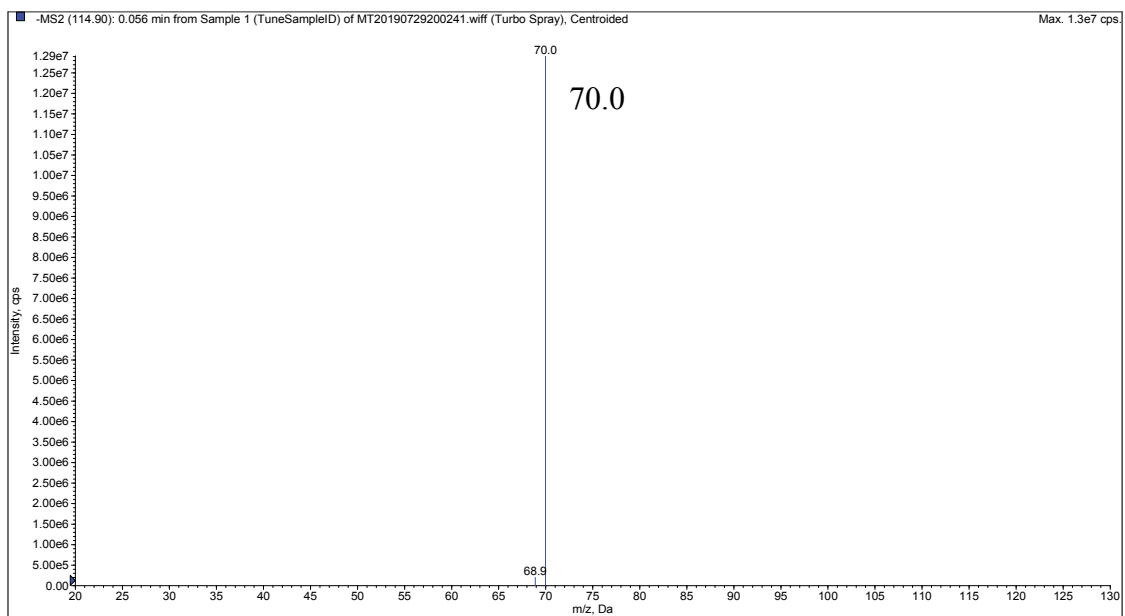
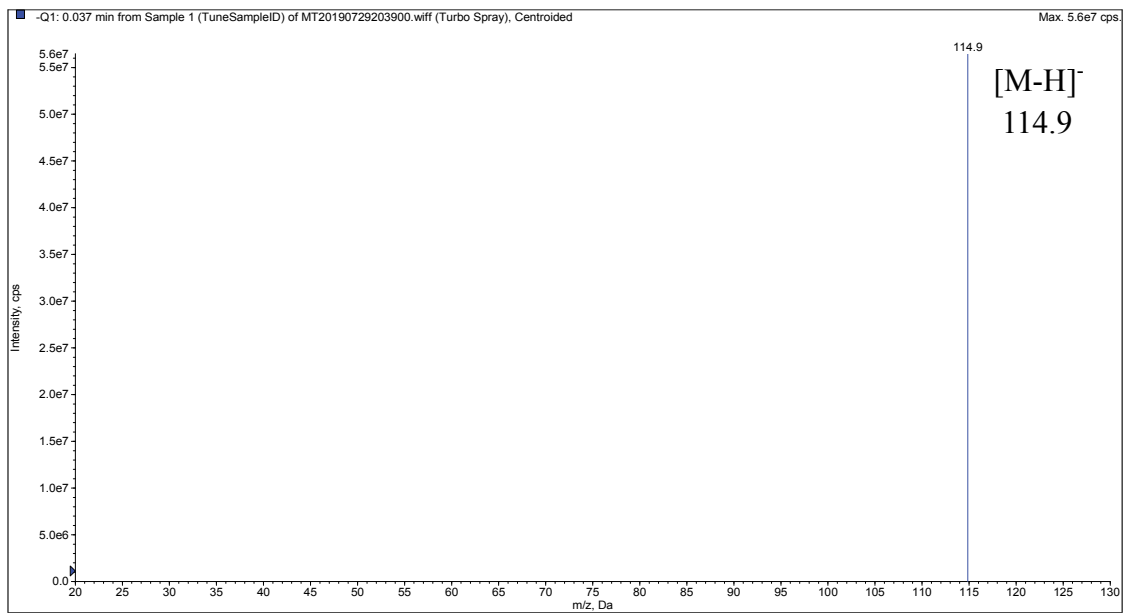


図 6-4 トリフルオロ酢酸-¹³C₂ のマススペクトル (上段) 及びプレカーサーイオン m/z 114.9 に対するプロダクトイオン (下段)

〔操作ブランク試験〕

操作ブランクのクロマトグラムを図7に示す。フルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸はMDL未満、トリフルオロ酢酸は0.015 µg/L 検出された。

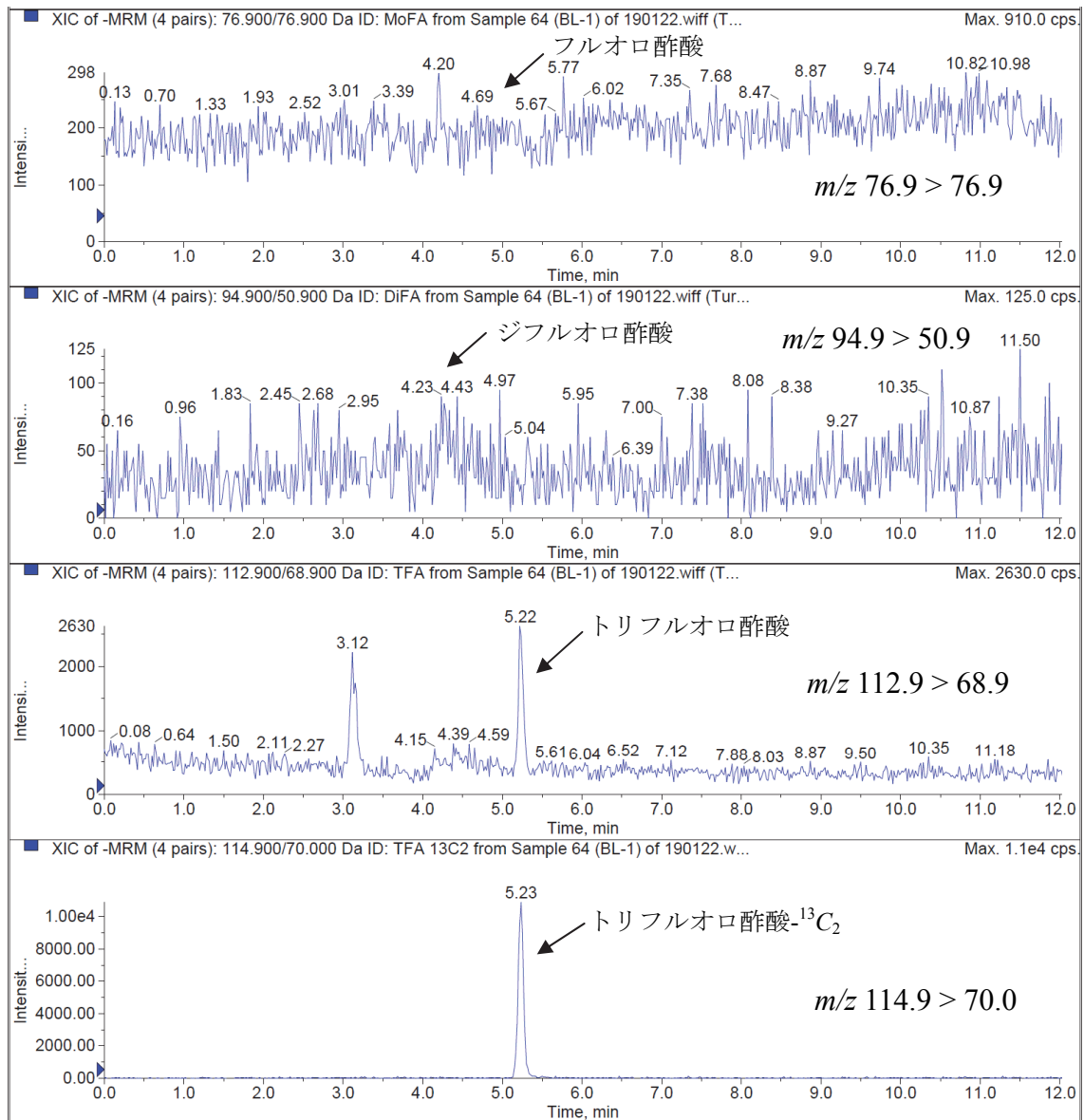


図7 操作ブランク試験のクロマトグラム

〔添加回収試験〕

河川水（瑞梅寺川）及び海水（博多湾）への添加回収試験の結果を表6に示す。また測定時のクロマトグラムを図8-1～8-4に示す。河川水及び海水における回収率は、フルオロ酢酸が83%及び79%、ジフルオロ酢酸が89%及び87%、及びトリフルオロ酢酸が100%及び98%であった。

表6 添加回収試験の結果

物質名	試料	試料量 (mL)	添加量 (ng)	最終 液量 (mL)	試 験 数	検出濃度* (µg/L)	回収率* (%)	変動 係数 (%)	サロゲ ート回 収率 (%)
フルオロ 酢酸	河川水	200	0	1	2	<0.00087	-	-	-
		200	50	1	5	0.208	83	9.6	-
	海水	200	0	1	2	<0.00087	-	-	-
		200	50	1	5	0.198	79	7.7	-
ジフルオ ロ酢酸	河川水	200	0	1	2	<0.0017	-	-	-
		200	50	1	5	0.222	89	10.1	-
	海水	200	0	1	2	<0.0017	-	-	-
		200	50	1	5	0.217	87	8.5	-
トリフル オロ酢酸	河川水	200	0	1	2	0.377	-	-	-
		200	500	1	5	2.87	100	8.4	72
	海水	200	0	1	2	0.165	-	-	-
		200	200	1	5	1.14	98	6.6	79

*：トリフルオロ酢酸の検出濃度及び回収率はサロゲート補正後の値

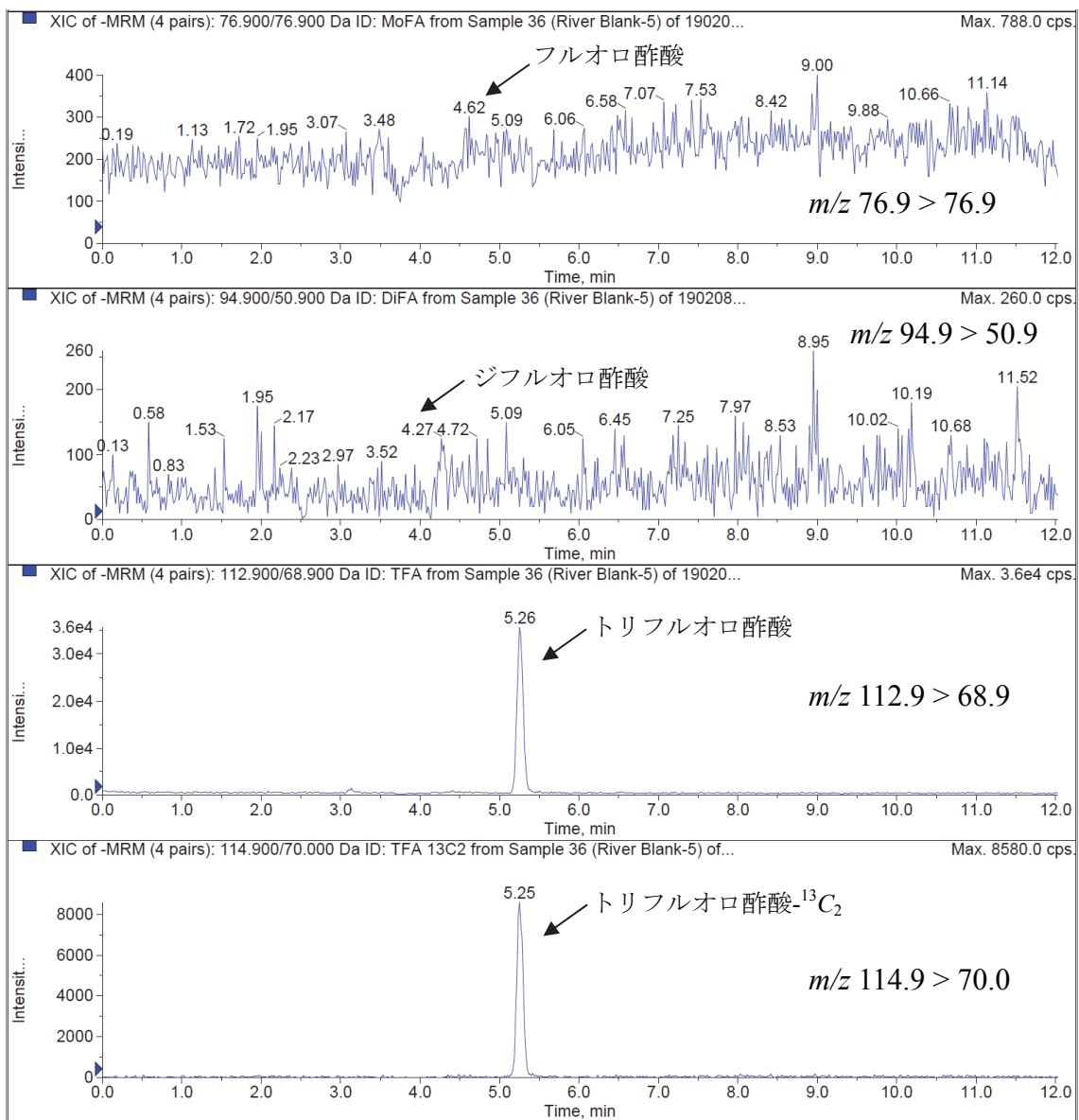


図 8-1 添加回収試験のクロマトグラム (河川水) (無添加)

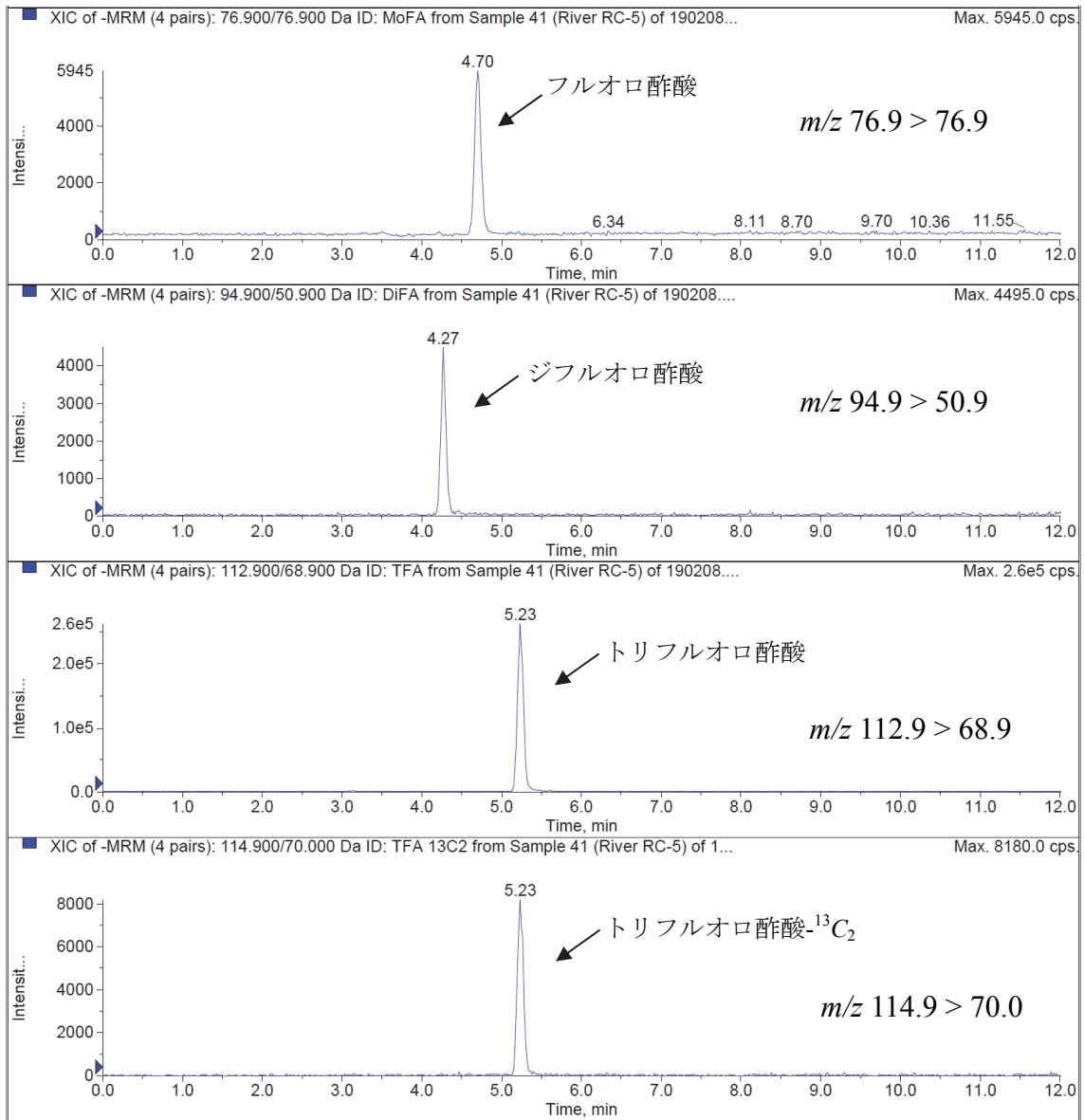


図 8-2 添加回収試験のクロマトグラム (河川水) (添加量: フルオロ酢酸 50 ng、ジフルオロ酢酸 50 ng、トリフルオロ酢酸 500 ng)

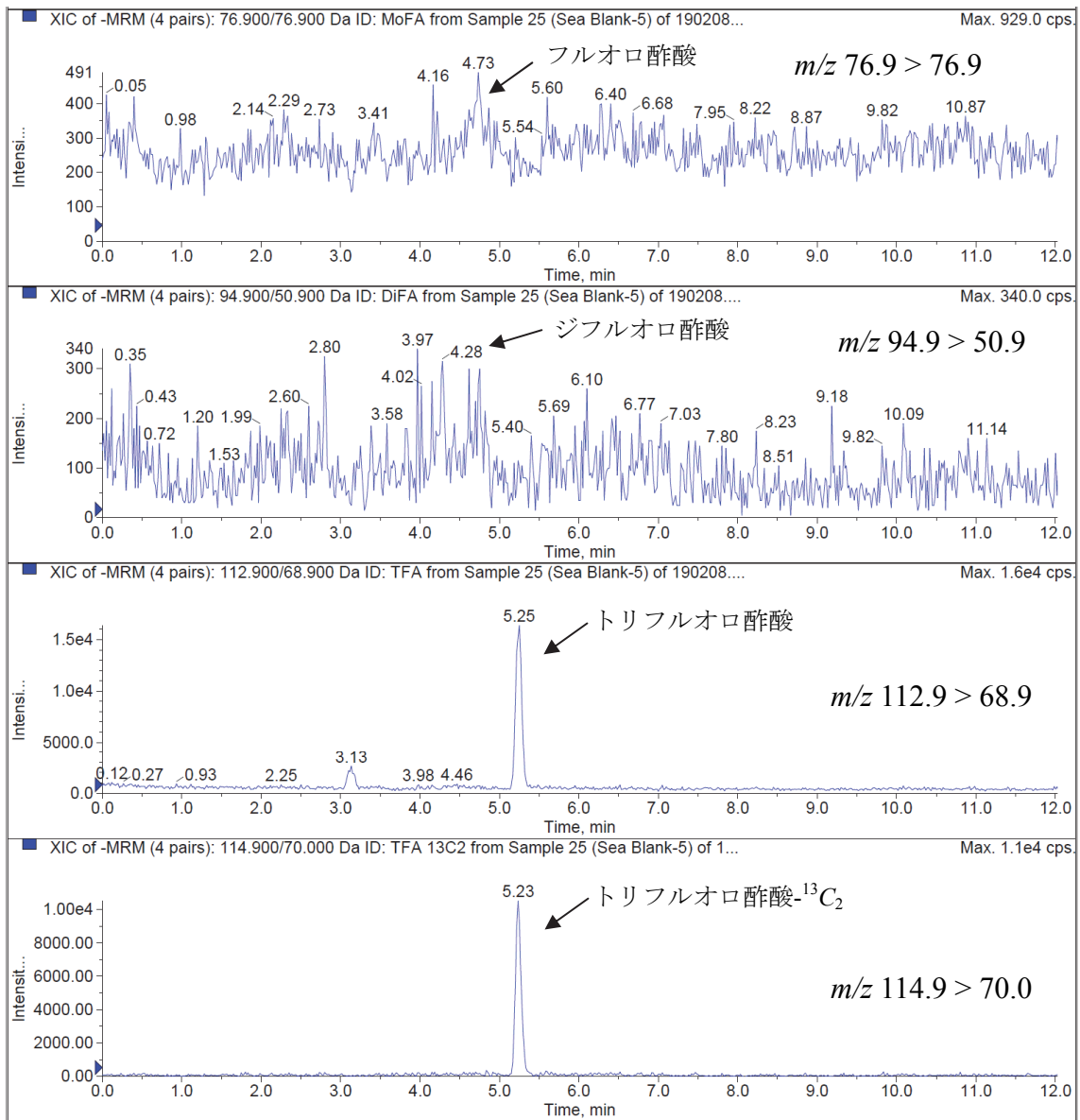


図 8-3 添加回収試験のクロマトグラム (海水) (無添加)

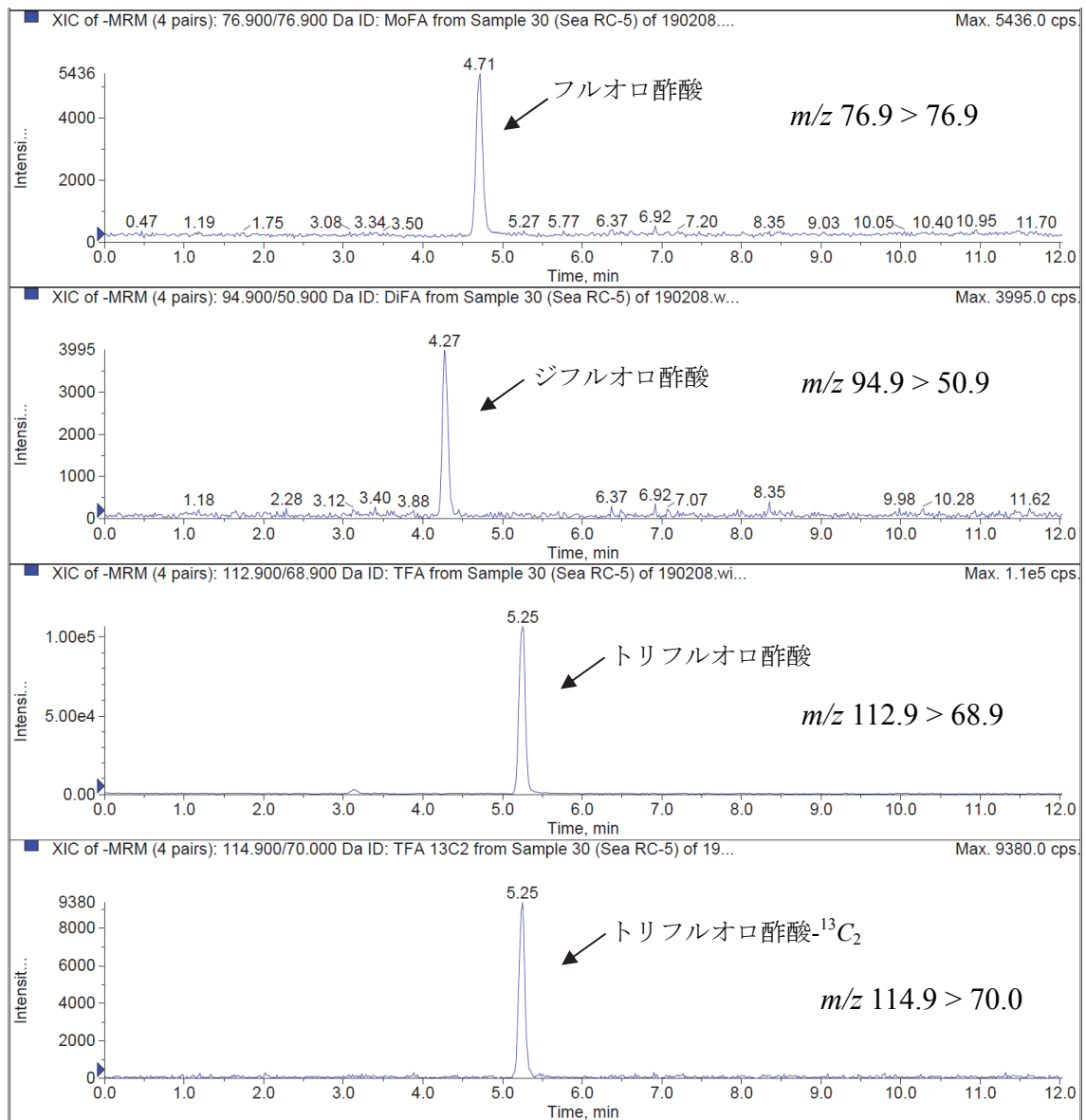


図 8-4 添加回収試験のクロマトグラム (海水) (添加量 : フルオロ酢酸 50 ng、ジフルオロ酢酸 50 ng、トリフルオロ酢酸 200 ng)

〔分解性スクリーニング試験〕

分解性スクリーニング試験の結果を表7に示す。1時間放置後の各pHにおける残存率は、添加回収試験における回収率と同様の結果であった。7日間放置後の各pHにおける残存率は、1時間放置後と同様の値を示した。

表7 分解性スクリーニング試験の結果

物質名	pH	試験数	調製濃度 ($\mu\text{g/L}$)	検出濃度($\mu\text{g/L}$) (残存率(%))*		
				1時間後	7日後	
					暗所	明所
フルオロ酢酸	5	3	0.25	0.176 (70)	0.172 (69)	-
	7	3	0.25	0.174 (70)	0.159 (64)	0.163 (65)
	9	3	0.25	0.176 (71)	0.160 (64)	-
ジフルオロ酢酸	5	3	0.25	0.219 (88)	0.211 (84)	-
	7	3	0.25	0.205 (82)	0.219 (88)	0.227 (91)
	9	3	0.25	0.216 (87)	0.213 (85)	-
トリフルオロ酢酸	5	3	0.25	0.272 (109)	0.274 (110)	-
	7	3	0.25	0.273 (109)	0.269 (108)	0.257 (103)
	9	3	0.25	0.275 (110)	0.256 (102)	-

*: 調製濃度に対する検出濃度の割合

〔保存性試験〕

保存性試験（保存容器はPP製容器、保存温度は4℃）の結果を表8に示す。試料の7日間保存後の対象物質の残存率は、保存当日の81%以上であった。粗抽出液の14日間保存後の対象物質の残存率は、保存当日の70%以上であった。

表8 保存性試験の結果

物質名	試料	調製濃度 (ng/mL)	検出濃度(μg/L) (残存率 (%)*1)				
			当日	7日間	14日間	1ヶ月	
フルオロ酢酸	河川水	試料	0.10	0.0681 (68)	0.0632(63) [93] ^{*2}	-	-
		粗抽出液	20	0.0681 (68)	-	0.0634(63) [93] ^{*2}	-
	海水	試料	0.10	0.0689 (69)	0.0654(65) [95] ^{*2}	-	-
		粗抽出液	20	0.0689 (69)	-	0.0637(64) [93] ^{*2}	-
	標準液	検量線最高濃度	200	-	-	-	188(94)
	ジフルオロ酢酸	河川水	試料	0.10	0.0759 (76)	0.0616(62) [81] ^{*2}	-
粗抽出液			20	0.0759 (76)	-	0.0533(53) [70] ^{*2}	-
海水		試料	0.10	0.0719 (72)	0.0627(63) [87] ^{*2}	-	-
		粗抽出液	20	0.0719 (72)	-	0.0601(60) [84] ^{*2}	-
標準液		検量線最高濃度	200	-	-	-	190(95)
トリフルオロ酢酸		河川水	試料	-	0.360	0.338[94] ^{*2}	-
	粗抽出液		-	0.360	-	0.357[99] ^{*2}	-
	海水	試料	-	0.154	0.157[102] ^{*2}	-	-
		粗抽出液	-	0.154	-	0.153[99] ^{*2}	-
	標準液	検量線最高濃度	1000	-	-	-	946(95)

*1 () : 調製濃度に対する検出濃度の割合

*2 [] : 保存性試験開始当日の検出濃度に対する保存後の検出濃度の割合

〔固相の検討〕

〔1〕破過試験(フルオロ酢酸)

フルオロ酢酸の保持について5種類の固相カートリッジで確認した。精製水250 mLにフルオロ酢酸標準液を試料換算濃度が10 µg/Lとなるよう添加して各固相を通し、通水後の試料水を測定した。結果を表9に示す。

Sep-Pak C18 Plus 及び Oasis HLB Plus でフルオロ酢酸の破過率が高く、Sep-Pak AC-2 及び Oasis WAX では破過率が低い結果であった。なお、各カラムのコンディショニングは実施していない。

表9 固相カートリッジの破過率(精製水)

固相カートリッジ	フルオロ酢酸 破過率(%)
Sep-Pak C18 Plus (360 mg)	99
Oasis HLB Plus (225 mg)	90
Sep-Pak AC-2 (400 mg)	0
Oasis WAX (225 mg)	12
Oasis WAX (500 mg)	10

〔2〕河川水への添加回収試験(フルオロ酢酸)

河川水にフルオロ酢酸標準液を添加(試料換算濃度:10 µg/L)して、各固相を通した後の試料水の濃度を測定し、破過率を算出した。分析フローを図9、結果を表10に示す。

5種類の固相カートリッジの破過率は、2~15%であり、精製水を用いた場合と同様の結果であった。



図9 河川水への添加回収試験における分析フロー

表 10 固相カートリッジの検討（河川水）

固相カートリッジ	フルオロ酢酸 破過率(%)
Sep-Pak AC-2 (400 mg)	2
Oasis WAX (225 mg)	5
Oasis MAX (150 mg)	15
ENVI-CARB PLUS (400 mg)	5
Reversible Tube 60/80 Carboxen (100 mg)	10

* 河川水（無添加）の検出濃度は 1.0 µg/L 以下。

[3] 海水への添加回収試験（フルオロ酢酸）

海水にフルオロ酢酸標準液を添加（試料換算濃度：0.20 µg/L）して、各固相に通水後、5%アンモニア含有メタノールで溶出（5 mL）させ、濃縮せずに測定した。分析フローを図 10、結果を表 11 に示す。

海水の場合、5 種類の固相カートリッジ全てにおいて回収率が 10%未満であり、前処理方法として固相抽出の採用は困難と考えられた。

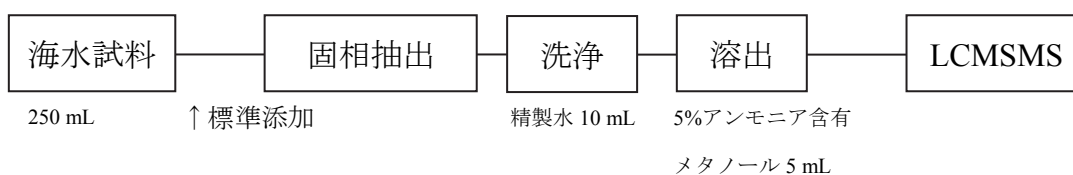


図 10 海水への添加回収試験における分析フロー

表 11 固相カートリッジの検討（海水）

固相カートリッジ	フルオロ酢酸 回収率 (%)
Sep-Pak AC-2 (400 mg)	6
Oasis WAX (225 mg)	5
Oasis MAX (150 mg)	4
ENVI-CARB PLUS (400 mg)	5
Reversible Tube 60/80 Carboxen (100 mg)	2

* 河川水中の濃度は 1.0 µg/L 以下。

〔液々抽出の検討〕

〔1〕抽出溶媒の検討（フルオロ酢酸）

4種類の溶媒を用いて液々抽出時のフルオロ酢酸の回収率を算出した。分析フローを図11、結果を表12に示す。

フルオロ酢酸の回収率は、ヘキサンで1%、*t*-メチルブチルエーテルで46%、酢酸エチルで37%、及び酢酸メチルで60%であった。フルオロ酢酸は水溶解度が高いため、無極性溶媒よりも、微極性溶媒を用いた場合に回収率が高くなると考えられた。

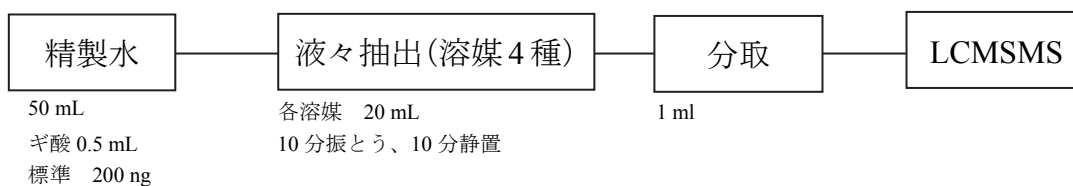


図11 抽出溶媒の検討における分析フロー

表12 溶媒の種類における回収率

抽出溶媒	フルオロ酢酸 回収率 (%)
ヘキサン	1
<i>t</i> -メチルブチルエーテル	46
酢酸エチル	37
酢酸メチル	60

〔2〕液々抽出時のギ酸濃度の検討（フルオロ酢酸）

溶出溶媒に酢酸エチルを用いて、ギ酸の効果を確認した。分析フローを図12、結果を表13に示す。

ギ酸を添加しない場合、フルオロ酢酸の回収率は0%であった。試料溶液中のギ酸濃度を0.01%~1%とした場合、ギ酸濃度が高くなるに従い、回収率が高くなる傾向が見られた。

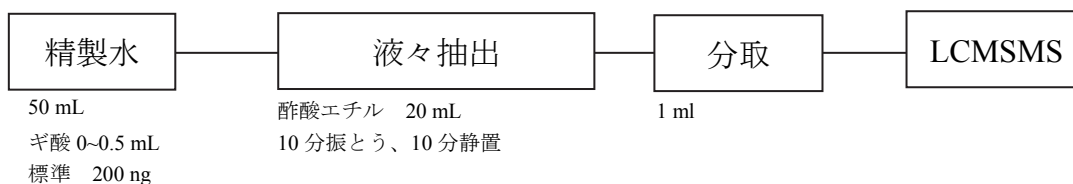


図12 液々抽出時のギ酸濃度の検討における分析フロー

表 13 液々抽出時の試料液中のギ酸濃度と回収率

条 件	フルオロ酢酸 回収率 (%)
ギ酸 0%	0
ギ酸 0.01%	38
ギ酸 0.1%	55
ギ酸 1%	58

[3] 酢酸エチルを用いた液々抽出条件の検討 (フルオロ酢酸)

ギ酸を加えた精製水を試料として、溶出溶媒に酢酸エチルを用いて液々抽出の回収率を算出した。抽出後の酢酸エチルは濃縮せず、1～3回の抽出操作毎に抽出液を分取して回収率を求めた。分析フローを図 13、結果を表 14 に示す。

検討の結果から、試料液にギ酸を 1% になるように添加し、溶出溶媒に酢酸エチルを用いて 3 回抽出することで抽出は可能であると考えられた。

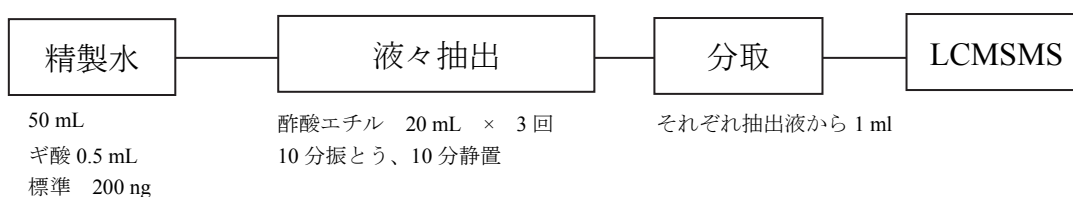


図 13 酢酸エチルを用いた液々抽出条件の検討における分析フロー

表 14 酢酸エチルを用いた液々抽出による回収率

抽出回数	フルオロ酢酸回収率(%)	
	抽出液毎	合計
1 回目	52	-
2 回目	18	70
3 回目	10	80

[液々抽出時における酸の添加の検討]

[1] 抽出時に添加する酸の種類と酸濃度(1～20%) の検討

試料水 100 mL に酢酸、ギ酸、硝酸及び硫酸を段階的に添加し、酢酸エチル 40 mL で 2 回液々抽出をして各回収率を確認した。分析フローを図 14、結果を表 15 に示す。

酢酸及びギ酸を添加の場合、3 物質ともに酸濃度が高くなるに従い、回収率が

高くなる傾向が見られた。硝酸及び硫酸を添加の場合、フルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸では酸濃度が高くなるに従い、回収率の低下が見られた。トリフルオロ酢酸の回収率は、酸濃度に関わらずほぼ一定であった。

ギ酸 2%及び 10%量添加時にフルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸、トリフルオロ酢酸の回収率がいずれも 60%以上となったが、ギ酸を 10%量添加時には、トリフルオロ酢酸のピーク形状が著しく悪化した。この場合、トリフルオロ酢酸の回収率にバラつきがあり、回収率が 50%を下回る場合があった。pKa が 0.2 であるトリフルオロ酢酸の液々抽出には、試料の pH をギ酸使用時よりも低くする必要があると考えられた。しかしながら、硝酸(1+1)または硫酸(1+1)を添加した場合でも 3 物質ともに良好な回収率は得られなかった。

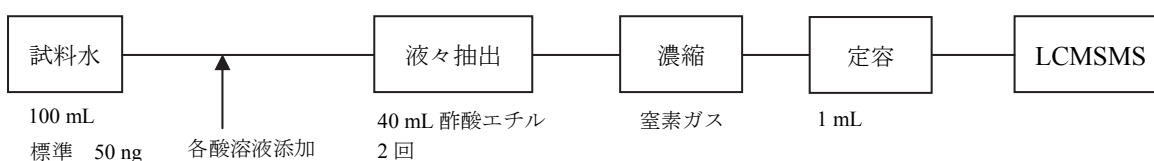


図 14 抽出時に添加する酸の種類と酸濃度(1~20%)の検討における分析フロー

表 15 液々抽出時の添加回収試験 (添加量 50 ng) 結果 (単位: %)

酸の種類	酸の濃度 (%)	フルオロ酢酸	ジフルオロ酢酸	トリフルオロ酢酸
酢酸	1%	36	28	13
	2%	35	33	23
	10%	50	56	47
	20%	44	60	48
ギ酸	1%	49	40	34
	2%	62	63	69
	10%	62	69	75
	20%	55	68	83
硝酸 (1+1)	1%	42	45	56
	2%	30	33	52
	10%	15	20	47
	20%	8	12	45
硫酸 (1+1)	1%	43	50	38
	2%	25	31	45
	10%	12	20	50
	20%	16	23	55

[2] 抽出時に添加する酸の種類と酸濃度 (0.50～5.0 mol/L) の検討

次に、添加する酸濃度を 1 mol/L 程度と薄くし、硝酸、塩酸、硫酸を用いて添加回収率を確認した。添加回収率は抽出毎に分取した抽出液の回収率の合計とした。分析フローを図 15、結果を表 16-1 に示す。

硝酸及び塩酸添加時に、3 物質ともに回収率が 70%以上となった。硝酸添加時には、フルオロ酢酸のピーク近傍のベースラインに落ち込みが見られ、測定値に影響を及ぼす可能性が考えられたため、硝酸の使用は不適切であると考えられた。

塩酸の最適の添加濃度を確認するため、塩酸濃度を 0.50～5.0 mol/L として添加回収率を確認した。結果を表 16-2 に示す。

フルオロ酢酸、及びジフルオロ酢酸の回収率は、塩酸濃度に関わらずほぼ一定であった。トリフルオロ酢酸の回収率は、塩酸濃度が高くなるに従い高くなる傾向が見られた。3 物質ともに回収率が良好な 5.0 mol/L を添加する塩酸の濃度とした。

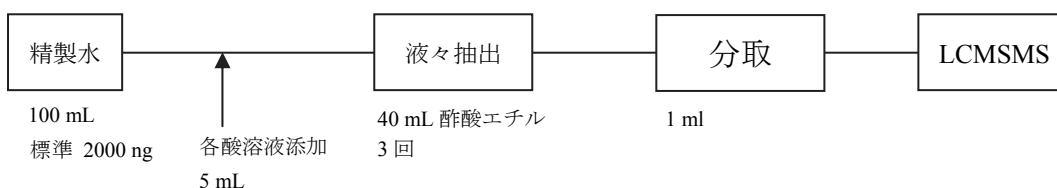


図 15 抽出時に添加する酸の種類と酸濃度(0.50～5.0 mol/L)の検討における分析フロー

表 16-1 3 種の酸を用いた添加回収試験結果 (単位：%)

酸溶液	フルオロ酢酸	ジフルオロ酢酸	トリフルオロ酢酸
1.0 mol/L 硝酸	72	109	80
0.50 mol/L 硫酸	72	97	57
1.0 mol/L 塩酸	73	110	74

表 16-2 塩酸を用いた液々抽出時の添加回収試験結果 (単位：%)

酸溶液	フルオロ酢酸	ジフルオロ酢酸	トリフルオロ酢酸
0.50 mol/L 塩酸	75	106	63
1.0 mol/L 塩酸	78	112	79
2.0 mol/L 塩酸	79	121	92
5.0 mol/L 塩酸	80	115	103

〔窒素気流下での濃縮による回収率の検討（キーパーの添加）〕

濃縮時のキーパーとして、ジメチルスルホキシド (DMSO) 及びアセトニトリルを液々抽出後の抽出液に添加し、窒素気流下での濃縮後の添加回収率を求めた。分析フローを図 16、結果を表 17 に示す。

フルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸、トリフルオロ酢酸の回収率は、キーパーを添加しない場合 30～50%であり、窒素気流下の濃縮時に低下することが確認された。アセトニトリル添加時には、未添加時と比較して若干の回収率の向上が見られたがいずれも未添加時と同程度であった。ジメチルスルホキシドを添加した場合、3 物質ともに回収率は概ね 70%以上であった。

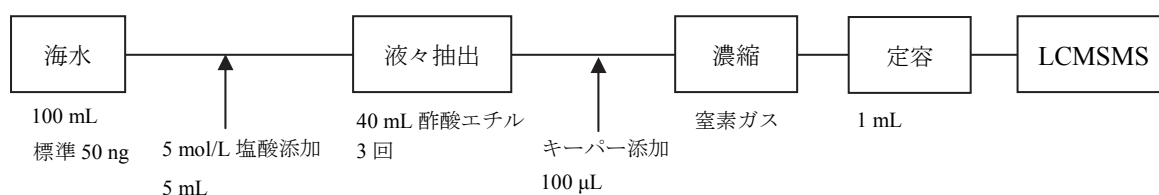


図 16 窒素気流下での濃縮による回収率の検討における分析フロー

表 17 キーパー添加時の添加回収試験結果（単位：％）

キーパー	フルオロ酢酸	ジフルオロ酢酸	トリフルオロ酢酸
未添加	40	53	31
DMSO	74	67	84
アセトニトリル	47	58	39

〔容器の洗い込みの検討〕

保存容器を試料の分取後、溶媒洗浄することで回収率が向上するか検討した。当日の結果を表 18-1、18 日間保存後の結果を表 18-2 に示す。

保存性試験開始当日に溶媒による洗い込みを実施した結果、回収率は、フルオロ酢酸で 4%及び 5%、ジフルオロ酢酸で 4%及び 14%、トリフルオロ酢酸で 1%及び 9%増加した。18 日間保存後に溶媒による洗い込みを実施した結果、保存性試験開始当日と同程度の回収率の増加が見られた。このことから、対象物質の容器への吸着は 5%程度生じ、その吸着量は経時的に増加しないことが確認された。

表 18-1 試料容器洗い込み時の保存性試験結果(当日)

対象物質	試料	残存率(%)		
		洗い込み無	洗い込み有	増減
フルオロ酢酸	河川水	65	69	4
	海水	66	71	5
ジフルオロ酢酸	河川水	99	103	4
	海水	86	100	14
トリフルオロ酢酸	河川水	95 (66)	96 (67)	1
	海水	90 (72)	99 (76)	9

*1：対象物質の添加量: 20 ng

*2：括弧内の数値はサロゲート回収率

表 18-2 試料容器洗い込み時の保存性試験結果(18 日間保存後)

対象物質	試料	残存率(%)		
		洗い込み無	洗い込み有	増減
フルオロ酢酸	河川水	60	62	2
	海水	61	63	2
ジフルオロ酢酸	河川水	80	83	3
	海水	75	79	4
トリフルオロ酢酸	河川水	81 (79)	86 (84)	5
	海水	86 (86)	91 (84)	5

*1：対象物質の添加量: 20 ng

*2：括弧内の数値はサロゲート回収率

〔環境試料の分析〕

本法を用いて河川水（貫川）及び海水（諫早湾）を分析した時のクロマトグラムを図 17-1 及び 17-2 に示す。河川水中のフルオロ酢酸及びジフルオロ酢酸濃度は MDL 未満、トリフルオロ酢酸濃度は、 $0.33 \mu\text{g/L}$ 、海水中のフルオロ酢酸及びジフルオロ酢酸濃度は MDL 未満、トリフルオロ酢酸濃度は $0.13 \mu\text{g/L}$ であった。

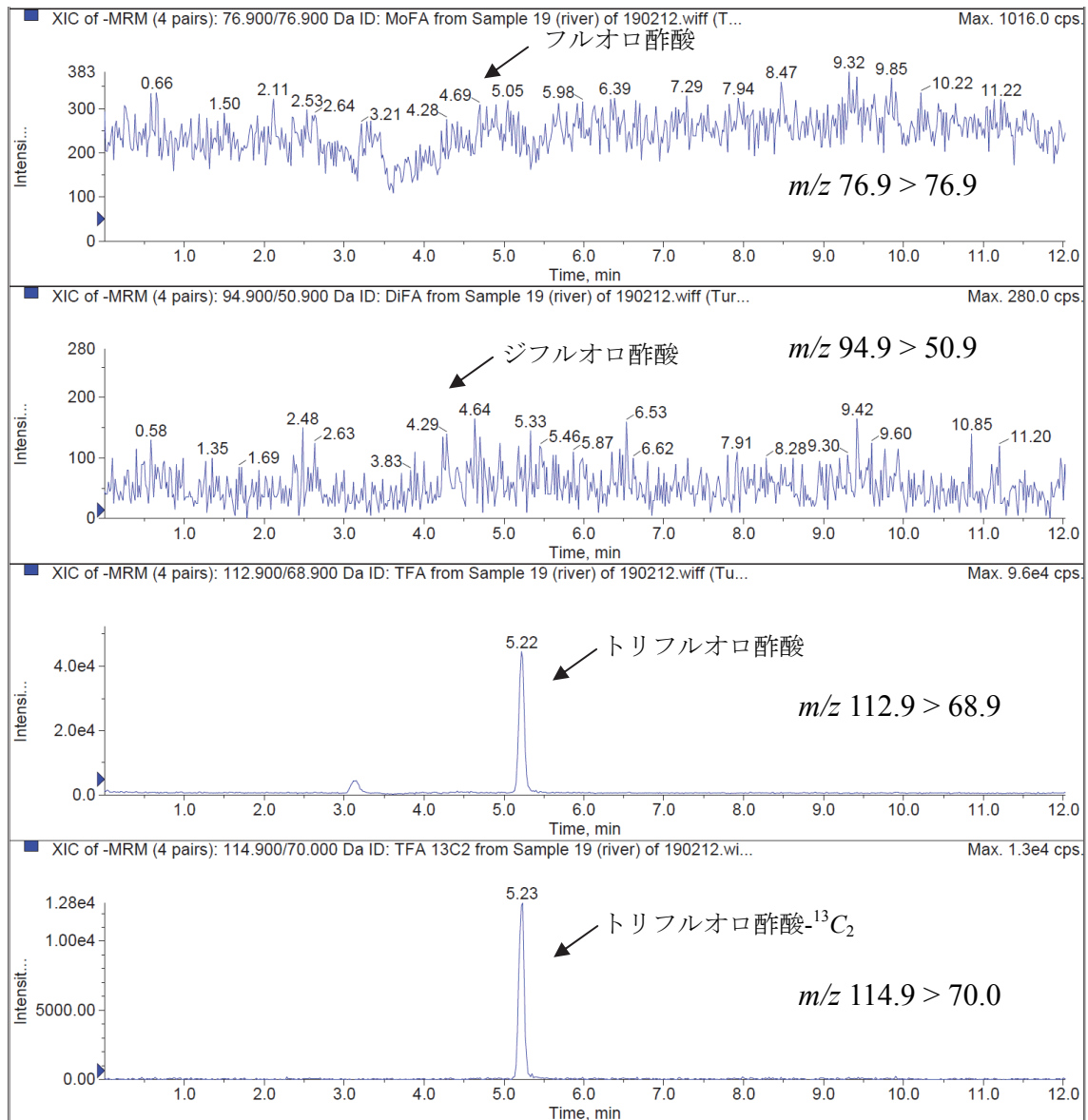


図 17-1 河川水の測定クロマトグラム

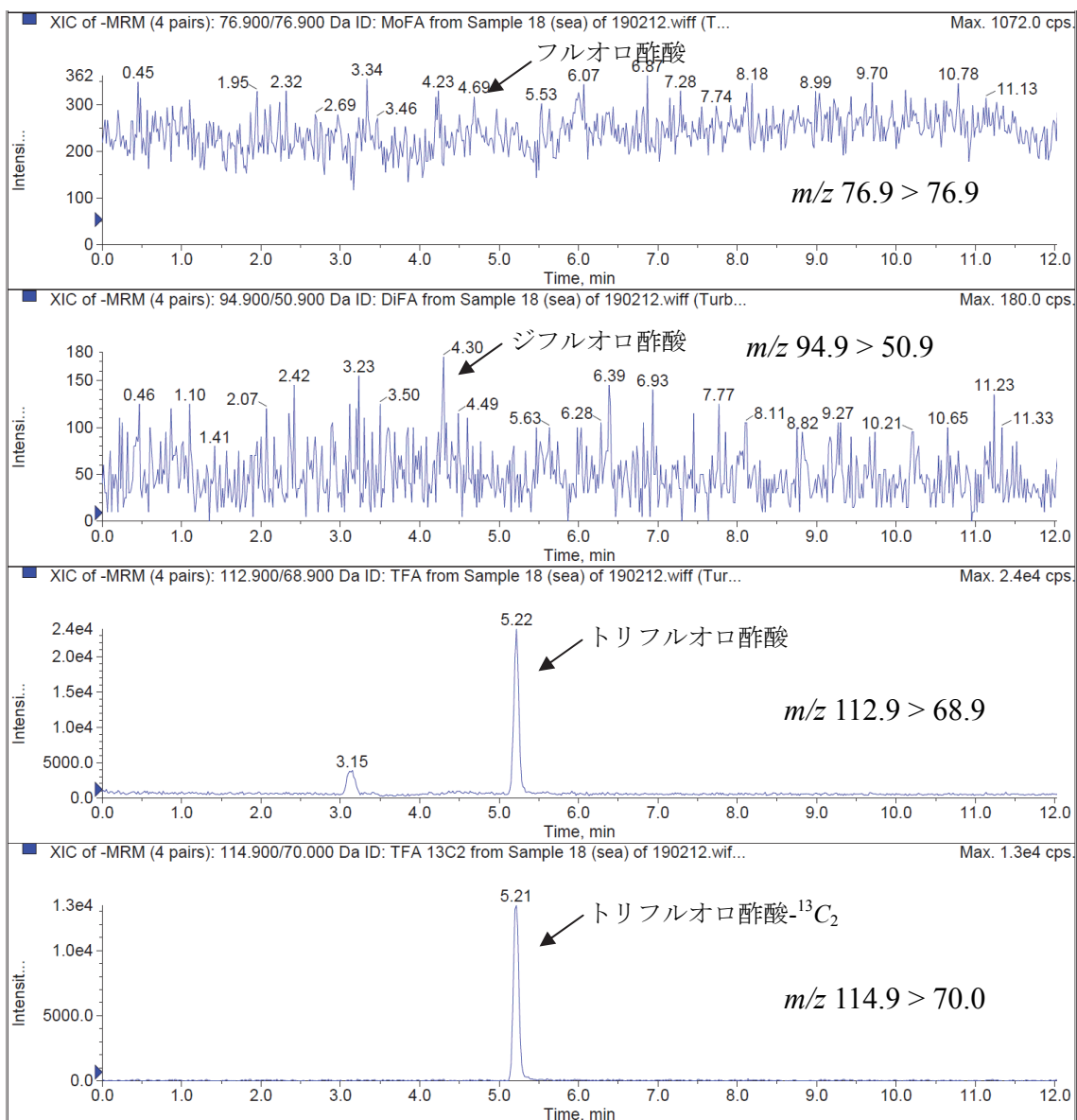


図 17-2 海水の測定クロマトグラム

【評価】

本分析法で用いた LC/MS/MS-SRM によるフルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸及びトリフルオロ酢酸の IDL はそれぞれ、4.1 pg (試料換算値は 0.0010 µg/L)、2.0 pg (試料換算値は 0.00049 µg/L)、及び 10 pg (試料換算値は 0.0026 µg/L) であった。フルオロ酢酸は 1.0~500 ng/mL、ジフルオロ酢酸は 0.50~200 ng/mL 及びトリフルオロ酢酸は 2.0~200 ng/mL の範囲で検量線の直線性が確認された。本法における水質試料のフルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸及びトリフルオロ酢酸の MDL はそれぞれ 0.00087 µg/L、0.0017 µg/L、及び 0.0087 µg/L であった。河川水及び海水に対象物質を 50~500 ng 添加した際の回収率は 70%以上であった。本法で環境試料を分析した結果、河川水 (貫川) 及び海水 (諫早湾) のフルオロ酢酸及びジフルオロ酢酸濃度は、いずれも MDL 未満であり、トリフルオロ酢酸濃度は、0.33 µg/L 及び 0.13 µg/L であった。

以上の結果から、本法は、水質試料中のフルオロ酢酸、ジフルオロ酢酸及びトリフルオロ酢酸をそれぞれ 0.0009 µg/L、0.002 µg/L、及び 0.009 µg/L の濃度レベルで検出可能であると判断される。

【参考文献】

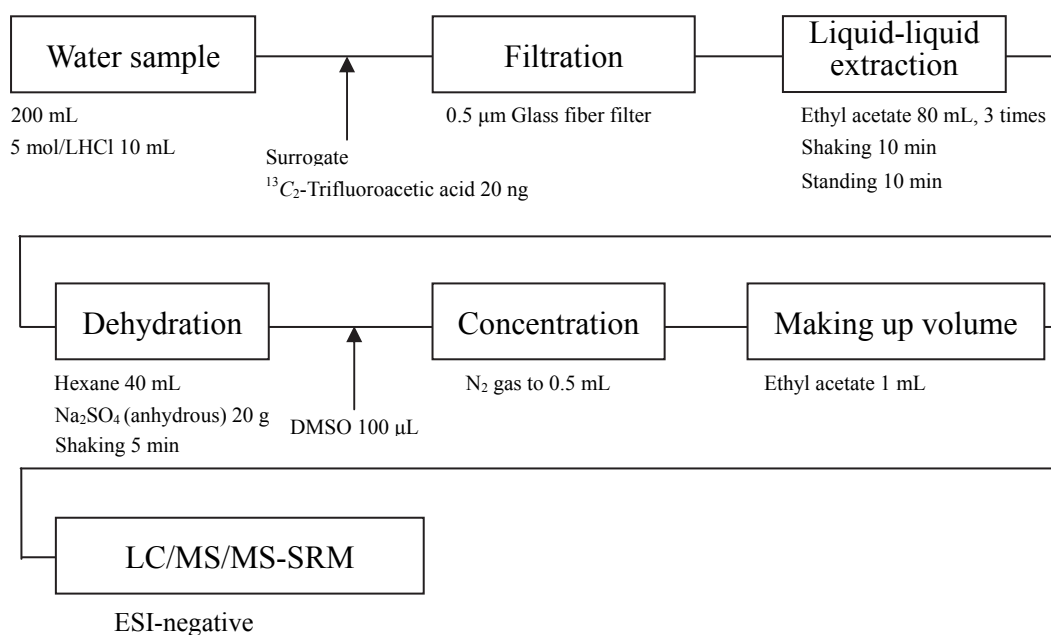
- 1) Analysis of trifluoroacetic and other short-chain perfluorinated acids (C2-C4) in precipitation by liquid chromatography-tandem mass spectrometry: Comparison to patterns of long-chain perfluorinated acid (C5-C18), S. Taniyasu et al., *Analytica chimica acta* 619 (2008) 221-230.
- 2) クロロ酢酸及びクロロ酢酸ナトリウム 兵庫県環境研究センター 化学物質分析法開発調査報告書 (平成 27 年度)
- 3) 栗原 正憲, 吉澤 正, 清水 明: 海水や最終処分場浸出水に含まれる有機フッ素化合物の前処理条件の最適化, 千葉県環境研究センター年報

【担当者連絡先】

所属先名称 : 一般財団法人九州環境管理協会
所属先住所 : 〒813-0004 福岡市東区松香台 1 丁目 10 番 1 号
TEL : 092-662-0410 FAX : 092-662-0990
担当者名 : 常深 慎、上田 守男
E-mail : tsnemi@keea.or.jp, ueda@keea.or.jp

Fluoroacetic acid, Difluoroacetic acid, Trifluoroacetic acid

The method has been developed for the determination of fluoroacetic acid, difluoroacetic acid and trifluoroacetic acid in environmental waters by liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC/MS/MS-SRM). A water sample (200 mL) is added with 10 mL of 5 mol/L hydrochloric and is filtered with a 0.5 μm glass fiber filter paper. The filtrate is spiked with trifluoroacetic acid- $^{13}\text{C}_2$ as a surrogate. The analytes in the sample are extracted with 80 mL of ethyl acetate 3 times. Forty mL of hexane and 20 g of sodium sulfate are added to ethyl acetate layer. The extract is concentrated to 0.5 mL with N_2 gas after adding 100 μL of DMSO. Then the concentrate is added with 1 mL of ethyl acetate. The final solution is measured by LC/MS/MS-SRM. The method detection limit (MDL) and method quantification limit (MQL) of fluoroacetic acid, difluoroacetic acid and trifluoroacetic acid in water samples are 0.00087 and 0.0022 $\mu\text{g/L}$, 0.0017 and 0.0043 $\mu\text{g/L}$, 0.0087 and 0.022 $\mu\text{g/L}$, respectively. The average of recoveries ($n=5$) in river water sample and seawater sample were 83 and 79% (coefficient of variation: 9.6 and 7.7%) for fluoroacetic acid, 89 and 87% (coefficient of variation: 10.1 and 8.5%) for difluoroacetic acid, 100 and 98% (coefficient of variation: 8.4 and 6.6%) for trifluoroacetic acid, respectively. By the developed method, fluoroacetic acid and difluoroacetic acid were not detected in a river water sample in Fukuoka prefecture and a seawater sample in Nagasaki prefecture. But trifluoroacetic acid was detected in the same samples at 0.33 and 0.13 $\mu\text{g/L}$, respectively.



物質名	分析法フローチャート	備考
<p>[1] フルオロ酢酸 IUPAC名： 2-フルオロ酢酸 別名：モノフルオール酢酸</p> <p>[2] ジフルオロ酢酸 IUPAC名： 2,2-ジフルオロ酢酸</p> <p>[3] トリフルオロ酢酸 IUPAC名： 2,2,2-トリフルオロ酢酸 別名：トリフロロ酢酸</p>	<p>【水質】</p> <pre> graph TD A["水質試料 200 mL 5 mol/L 塩酸 10 mL"] --> B["ろ過 0.5 μm ガラス 繊維ろ紙"] B --> C["サロゲート内標準 (¹³C₂-トリフルオロ酢酸 20 ng)"] C --> A D["液々抽出 3回 酢酸エチル 80 mL 振とう 10分 静置 10分"] --> E["脱水 ヘキサン 40 mL 無水硫酸ナトリウム 20 g 振とう 5分"] F["DMSO 100 μL"] --> E G["濃縮 窒素気流下 0.5 mL まで"] --> H["定容 酢酸エチル 1 mL"] H --> I["LC/MS/MS-SRM ESI-negative"] </pre>	<p>分析原理： LC/MS/MS-SRM ESI-negative</p> <p>検出下限値： 【水質】 (μg/L) [1] 0.00087 [2] 0.0017 [3] 0.0087</p> <p>分析条件： 機器 LC: Agilent 1260 Infinity MS: Sciex 4500QT</p> <p>カラム： Waters 製 HSS T3 150 mm × 3.0 mm, 2.5 μm</p>