

ペルフルオロ（オクタン-1-スルホン酸）の環境リスク初期評価
 （化学物質の環境リスク評価（第6巻） 抜粋）

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：	ペルフルオロオクタンスルホン酸及びその塩 (Perfluorooctane Sulfonate : PFOS)
CAS 番号：	1763-23-1 (酸) 29081-56-9 (アンモニウム塩) 70225-14-8 (ジエタノールアミン(DEA)塩) 2795-39-3 (カリウム塩) 29457-72-5 (リチウム塩)
化審法官報公示整理番号：	2-1595 (パーフルオロオクタンスルホン酸)、2-2810 (パーフルオアルキル(C=4~12)スルホン酸塩 (Na, K, Li))
化管法政令番号：	
RTECS 番号：	RG9701600(酸)、RG9701850(カリウム塩)、RG9701750(リチウム塩)
分子式：	C ₈ F ₁₇ O ₃ SX(X は H, K など)
分子量：	500.13 (酸)
換算係数：	1 ppm = 20.46 mg/m ³ (酸、気体、25°C)
構造式：	$\text{F}_3\text{C}-(\text{CF}_2)_7-\text{S}(=\text{O})_2-\text{OX}$ <p style="text-align: right;">X=H, K など</p>

(2) 物理化学的性状

本物質のカリウム塩は白色の粉末である¹⁾。

融点	>400°C ²⁾
沸点	
比重	~0.6 ³⁾ 、~1.1 (リチウム塩) ³⁾ 、~1.1 (アンモニウム塩) ³⁾ 、~1.1 (ジエタノールアミン塩) ³⁾
蒸気圧	6.4×10 ⁻³ mmHg (酸、25°C、MPBPWIN ⁴⁾ により計算) (=0.85 Pa)、 1.43×10 ⁻¹¹ mmHg (25°C、MPBPWIN ⁴⁾ により計算) (=1.9×10 ⁻⁹ Pa)
分配係数(1-オクタノール/水) (log Kow)	
解離定数(pKa)	
水溶性(水溶解度)	519 mg/L (20±0.5°C) ¹⁾ 、680 mg/L (24~25°C) ¹⁾ 、 570 mg/L ³⁾ 、370 mg/L (淡水) ³⁾ 、 12.4 mg/L (未ろ過海水) ³⁾ 、25 mg/L (ろ過海水) ³⁾ 、 12.4 mg/L (天然海水、22~23°C) ³⁾ 20.0 mg/L (3.5%NaCl 溶液、22~24°C) ³⁾

備考 特に断りがない限りカリウム塩としての値