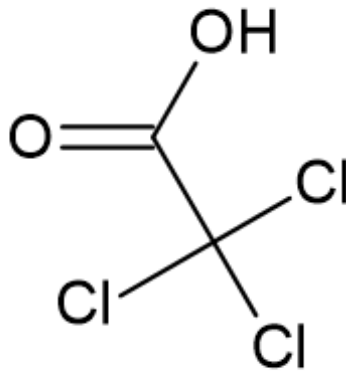




Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

Trichloreddikesyre (TCA)

CAS nr. 76-03-9



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	52 µg/L
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	5,2 µg/L
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	162 µg/L
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	16,2 µg/L
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{ferskvand}	91 µg/kg tørvægt (5% OC)* 1820 µg/kg tørvægt x foc
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{saltvand}	9,1 µg/kg tørvægt (5% OC)* 182 µg/kg tørvægt x foc
Biota-kvalitetskriterium, sekundær forgiftning	BKK _{sek.forgiftn.}	Ikke relevant
Biota-kvalitetskriterium, human konsum	HKK	Ikke relevant

Februar 2023

*SKK betragtes som indikative værdier, da de er bestemt ud fra ligevægtsbetragtning (EqP-metoden).

Indholdsfortegnelse

FORORD	3
ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS	4
1 INDLEDNING	7
2 FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	9
3 SKÆBNE I MILJØET	10
3.1 NEDBRYDELIGHED	10
3.2 BIOAKKUMULERING	10
3.3 NATURLIG FOREKOMST	10
4 TOKSICITETSDATA	11
4.1 TOKSICITET OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	11
4.2 TOKSICITET OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	12
4.3 TOKSICITET OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	12
4.4 TOKSICITET OVER FOR MENNESKER	12
5 ANDRE EFFEKTER	13
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	14
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	14
6.1.1 <i>Ferskvand</i>	14
6.1.2 <i>Saltvand</i>	14
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	15
6.2.1 <i>Ferskvand</i>	15
6.2.2 <i>Saltvand</i>	15
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	16
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA, SEKUNDÆR FORGIFTNING (BKK _{SEK.FORGIFTN.})	17
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMANKONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	17
6.6 VANDKVALITETSKRITERIUM BASERET PÅ BKK _{SEK.FORGIFTN.} OG HKK	17
7 KONKLUSION	18
8 REFERENCER	19

Bilag A: Test data for trichloreddikesyre

Bilag B: EPI Suite for CAS 76-03-9

Forord

Et kvalitetskriterium i vandmiljøet er det højeste koncentrationsniveau, ved hvilket der skønnes, ikke at forekomme uacceptable negative effekter på vandøkosystemer.

Miljøstyrelsen (MST) udarbejder kvalitetskriterier for kemikalier i vandsøjlen, i sediment, i dyr og planter (biota) og for humant konsum.

Miljøstyrelsen bruger kvalitetskriterierne som det faglige grundlag til at kunne fastsætte miljøkvalitetskrav, hvorved der forstås den endelige koncentration af et bestemt forurenende stof i vand, sediment eller biota, som ikke må overskrides af hensyn til beskyttelsen af miljøet og menneskers sundhed.

Metodikken, der anvendes til udarbejdelse af miljøkvalitetskrav, er harmoniseret i EU og baserer sig på vandrammedirektivet (EU 2000), EU's vejledning til fastsættelse af kvalitetskriterier i vandmiljøet (EU 2018) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen 2004). Metodikken er endvidere i overensstemmelse med EU's vejledning til risikovurdering under REACH forordningen (EU 2008).

Den sidste litteratursøgning er foretaget februar 2023.

English Summary and conclusions

Trichloroacetic acid (TCA) is widely used in industry and by professional users. It is used for the production of herbicides, for treatment of metallic and non-metallic surfaces and used in laboratory chemicals, pH regulators, water purification products, pharmaceuticals, cosmetics and personal care products.

Derivation of environmental quality standards (EQS) for the aquatic environment is following the EU Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards, TGD (EU 2018).

The ecotoxicity data used in the derivation of the EQS are presented in Appendix A.

AA-EQS for water

The chronic toxicity of TCA is determined based on long-term tests where valid data for the combined dataset has been found for seven species within the three taxonomic groups: algae, macrophytes and fish. Data show that macrophytes and algae are the most sensitive organisms with the lowest NOEC reported at 3.0 mg Na-TCA/L (2.6 mg TCA/L) for the macrophyte *Myriophyllum sibiricum*. For the algae the lowest effect value is NOEC of 3.0 mg/L (Roberts et al. 2010).

According to the TGD (EU 2018) the deterministic approach using assessment factors (AF) shall be used for the derivation of EQS, for datasets of limited data (< 10 different species representing 8 taxonomic groups). Therefore, this approach is followed for derivation of the EQS for TCA.

The lowest NOEC value of 2.6 mg TCA/L for the macrophyte *M. sibiricum* is used in the derivation of AA-EQS for both freshwater and saltwater.

According to the TGD (EU 2018) an AF of 50 and 500 for freshwater and saltwater respectively shall be applied on the lowest EC₁₀ or NOEC-value, when data are available for long-term tests at two different trophic levels and data include testing on the most sensitive organism:

$$\text{AA-EQS}_{\text{freshwater}} = 2.6 \text{ mg/L} / 50 = 0.052 \text{ mg/L} = 52 \text{ }\mu\text{g/L}$$

$$\text{AA-EQS}_{\text{saltwater}} = 2.6 \text{ mg/L} / 500 = 0.0052 \text{ mg/L} = 5.2 \text{ }\mu\text{g/L}$$

MAC-EQS for water

Valid data (Klimisch code 2) are available for the short-term toxicity of TCA for ten freshwater species within the six taxonomic groups: algae, crustaceans (branchiopoda and copepod), fish, amphibians and macrophytes. Algae is the most sensitive taxonomic group with EC₅₀ values measured for biomass of 4.7-4.9 mg/L and 16-68 mg/L for growth.

MAC-EQS for freshwater is derived based on the highest toxicity for algae experimentally determined with EC₅₀ for growth of 16.2 mg/L (growth is preferred over biomass) for the algae *Raphidocelis subcapitata*. According to the TGD (EU 2018) an AF of 100 shall be applied to the

lowest E(L)C₅₀ value when short-term data are available for three trophic levels unless the standard deviation of log₁₀ transformed data is lower than 0.5 (this is calculated to be 0.9):

$$\text{MAC-EQS}_{\text{freshwater}} = 16.2 \text{ mg/L} / 100 = 0.162 \text{ mg/L} = 162 \text{ }\mu\text{g/L}$$

For saltwater valid data is only available for one algae species, *Isochrysis galbana*. Therefore, freshwater data is also included. For saltwater an AF of 1000 shall be applied to the lowest E(L)C₅₀ (16.2 mg/L) value when short-term data are available for three trophic levels and the standard deviation of log₁₀ transformed data is higher than 0.5 (this is calculated to be 0.9):

$$\text{MAC-EQS}_{\text{saltwater}} = 16.2 \text{ mg/L} / 1000 = 0.0162 \text{ mg/L} = 16.2 \text{ }\mu\text{g/L}$$

QS for sediment

Based on a high toxicity to aquatic organisms and the related harmonized classification (Aquatic Acute 1, H400; Aquatic Chronic 1, H410), it is relevant to derive a QS for sediment. This, in spite of a log K_{OW} < 3 (1.33) and a K_{oc} < 500-1000 L/kg (2.93 L/kg) for TCA.

As no data are available for the toxicity of TCA for sediment-dwelling organisms, the toxicity for sediment-dwelling organisms is determined by means of equilibrium calculation based on the toxicity in the aquatic environment according to the EqP method stated in TGD (EU 2018). For the purpose of deriving sediment QS, the derived water quality criteria for freshwater (0.052 mg/L) and saltwater (0.0052 mg/L) are used, both of which are based on available data for the most sensitive organism in the aquatic environment, as well as the geometric mean of the K_{oc} values found (2.93 L/kg).

For

$$\begin{aligned} K_{\text{sed-water}} &= F_{\text{water}_{\text{sed}}} + F_{\text{solid}_{\text{sed}}} \times (F_{\text{oc}_{\text{sed}}} \times K_{\text{OC}}) / 1000 \times \text{RHO}_{\text{solid}} \\ &= 0.8 + 0.2 \times (0.05 \times 2.93) / 1000 \times 2500 = 0.873 \text{ m}^3/\text{m}^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{QS}_{\text{freshwater sediment}} &= (K_{\text{sed-water}} / \text{RHO}_{\text{sed}}) \times 1000 \times \text{QS}_{\text{freshwater}} \\ &= (0.873 \text{ m}^3/\text{m}^3 / 1300 \text{ kg wet weight}/\text{m}^3) \times 1000 \times 0.052 \text{ mg/L} \\ &= 0.035 \text{ mg/kg wet weight} = 35 \text{ }\mu\text{g/kg wet weight} \\ &= 35 \text{ }\mu\text{g/kg wet weight} \times 2.6 \text{ kg wet weight}/\text{kg dry weight} \\ &= \mathbf{91 \text{ }\mu\text{g/kg dry weight (5\%OC)}} \\ &= \mathbf{1820 \text{ }\mu\text{g/kg dry weight} \times f_{\text{oc}}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{QS}_{\text{saltwater sediment}} &= (K_{\text{sed-water}} / \text{RHO}_{\text{sed}}) \times 1000 \times \text{QS}_{\text{saltwater}} \\ &= (0.873 \text{ m}^3/\text{m}^3 / 1300 \text{ kg wet weight}/\text{m}^3) \times 1000 \times 0.0052 \text{ mg/L} \\ &= 0.0035 \text{ mg/kg wet weight} = 3.5 \text{ }\mu\text{g/kg wet weight} \\ &= 3.5 \text{ }\mu\text{g/kg wet weight} \times 2.6 \text{ kg wet weight}/\text{kg dry weight} \\ &= \mathbf{9.1 \text{ }\mu\text{g/kg dry weight (5\%OC)}} \\ &= \mathbf{182 \text{ }\mu\text{g/kg dry weight} \times f_{\text{oc}}} \end{aligned}$$

QS for secondary poisoning

There are no valid values for the bioaccumulation potential (BMF or BCF (BAF)) of TCA therefore, whether a QS for secondary poisoning (QS_{sec. pois.}) is relevant, is determined using log K_{OW}. According to TGD (EU 2018), it is relevant to derive QS_{sec. pois.} for a substance when log K_{OW} ≥ 3. Calculation in EPI Suite based on log K_{OW} of 1.33 gives a BCF value equal to 3.2 and data from

the REACH registration indicates a BCF <4.5. From this it is concluded that a derivation of a $QS_{\text{sec. pois.}}$ is not relevant.

QS for human health

According to TGD (EU 2018), a QS for human consumption of fishery products is relevant if the substance has relevant human hazard properties. TCA is not considered to have such properties and a criterion for human consumption is not assessed relevant.

The following EQS have been derived for TCA:

AA-EQS _{freshwater}	= 52 µg/L
AA-EQS _{saltwater}	= 5.2 µg/L
MAC-EQS _{freshwater}	= 162 µg/L
MAC-EQS _{saltwater}	= 16.2 µg/L
QS _{sediment, freshwater}	= 91 µg/kg dry weight (5%OC) = 1820 µg/kg dry weight × f_{oc}
QS _{sediment, saltwater}	= 9.1 µg/kg dry weight (5%OC) = 182 µg/kg dry weight × f_{oc}
QS _{sec. pois.}	= Not relevant
QS _{human health}	= Not relevant

1 Indledning

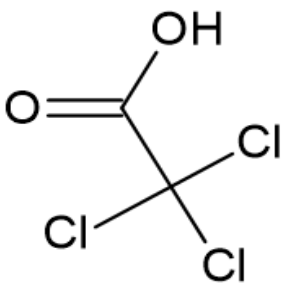
Nærværende datablad vedrører trichloreddikesyre (TCA) med CAS-nummer 76-03-9.

Identiteten af TCA fremgår af Tabel 1.1.

Ifølge REACH registreringen fremstilles/importeres TCA i en tonnage på 100-1000 tons per år i EU. Ifølge registreringsdossieret har stoffet en udbredt anvendelse både industrielt og af professionelle brugere, herunder i laboratoriekemikalier, pH-regulatorer, vandrensningsprodukter, farmaceutiske produkter, kosmetik samt plejeprodukter. Yderligere, anvendes TCA i produkter til behandling af metalliske og ikke-metalliske overflader (ECHA 2021). TCA forekommer ligeledes som et biprodukt fra klorering af drikkevand og svømmehaller (Fisher *et al.* 2014, OECD 2001), og er tidligere blevet anvendt som herbicid (Lewis *et al.* 2004).

Stoffet har flere harmoniseret klassificeringer, hvoraf to vedrører vandmiljøet (Tabel 1.1); Aquatic Acute 1 (H400) og Aquatic Chronic 1 (H410). Selvklassificeringerne er de samme kategorier, som de harmoniserede.

Tabel 1.1. Identitet af TCA

IUPAC navn	2,2,2-trichloroacetic acid
Strukturformel	
CAS nr.	76-03-9
EINECS nr.	200-927-2
Kemisk formel	C ₂ HCl ₃ O ₂
SMILES	O=C(O)C(Cl)(Cl)Cl
Harmoniseret klassificering	Aquatic Acute 1, H400 (meget giftig for vandlevende organismer) Aquatic Chronic 1, H410 (meget giftig med langvarige virkninger for vandlevende organismer) Skin Corr. 1A, H314 (forårsager svære ætsninger af huden og øjenskader)

Selvklassificering	Aquatic Acute 1; H400 (meget giftig for vandlevende organismer) Aquatic Chronic 1; H410 (meget giftig med langvarige virkninger for vandlevende organismer) Skin Corr. 1A; H314 (forårsager svære ætsninger af huden og øjenskader)
--------------------	---

2 Fysisk-kemiske egenskaber

De fysisk-kemiske egenskaber for TCA fremgår af Tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk-kemiske egenskaber for TCA

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	163,39	EPI Suite 2021 (se bilag B)
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	56 - 59	ECHA 2021
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	196	ECHA 2021
Damptryk, P_v (Pa)	8 ¹	ECHA 2021
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)	0,36 ¹	ECHA 2021
Vandopløselighed, S_w ($\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	1300 ²	ECHA 2021
Dissociationskonstant, pK_a	0,7 ²	ECHA 2021
Octanol/vand fordelingskoefficient, \log K_{ow}	1,33 ³ 1,33-1,44 ⁴	Hansch <i>et al.</i> 1995 ECHA 2021
Sediment/vand fordelingskoefficient, normaliseret til organisk karbon, K_{oc} ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)	1 ² 3,231 ⁵ 7,787 ⁵ 2,93	ECHA 2021 EPI Suite 2021 (MCI metode) (se bilag B) EPI Suite 2021 (Kow metode) (se bilag B) Beregnet geometrisk gns.

¹ ved 25 $^{\circ}\text{C}$

² ved 20 $^{\circ}\text{C}$

³ Eksperimentel værdi refereret i EPI Suite (2021).

⁴ ved 5 $^{\circ}\text{C}$

⁵ Estimeret værdi

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

På baggrund af den kemiske struktur og fravær af hydrolyserbare funktionelle grupper forventes TCA ikke at hydrolyseres i miljøet (ECHA 2021).

Jævnfør oplysninger i registreringsdossieret baseret på sammenholdelse af (Q)SAR estimering og eksperimentelle resultater er TCA vurderet til ikke at være let bionedbrydelig i vand. Ligeledes vurderes bionedbrydning i jord ikke til at være en vigtig proces for TCA, da eksperimentelle resultater viser en DT_{50} på 119,6 dage (ECHA 2021).

Med stoffets lave K_{oc} værdi på 1 L/kg taget i betragtning, anses TCA for at være meget mobil i jord. Derfor udgør migration i våd jord en vigtig proces for TCA, der ikke er tilbøjelig til at absorberes i jorden. Dette understøttes af den høje vandopløselighed på 1300 g/L ved stuetemperatur.

Henry's lov konstant, H , på $0,36 \text{ Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$ angiver en lav flygtighedsrate for TCA og derved må det antages, at fordampning af TCA ikke spiller en væsentlig rolle for stoffet i miljøet.

3.2 Bioakkumulering

I registreringsdossieret for TCA angives en BCF-værdi på 3,5 og 4,5 L/kg baseret på en ”vægtning af data” tilgang (Weight Of Evidence). Dermed konkluderes det, at TCA har et lavt potentiale for akkumulering i akvatiske organismer (ECHA 2021). Dette støttes af en estimering i EPI Suite baseret på $\log K_{ow}$ (1,33), der giver en BCF-værdi på 3,162 L/kg vådvægt.

3.3 Naturlig forekomst

TCA kan forekomme i atmosfæren som resultat af fotooxidation af tetrachlorethylen og 1,1,1-trichlorethan (OECD 2001). TCA er ligeledes fundet i nåletræer i det nordlige Finland, i nedbør, tåge, is, sedimenter, løvblade og i organismer ved flodudmundinger (Lewis *et al.* 2004).

4 Toksicitetsdata

Der er søgt data i let tilgængelige oversigtsværker og sammenfattende rapporter:

- ECOTOX: US EPA ECOTOX (cfpub.epa.gov)
- eChemPortal (www.echemportal.org/echemportal) - metadatabase med flere relevante databaser inkluderet ECHA CHEM, ETOX, J-Check, US EPA ECOTOX, OECD SIDS, NICNA
- ECHA-databasen (ECHA.europa.eu) indeholder data fra industriens REACH registreringer samt rapporter fra ECHA's vurderingskomiteer.
- SETAC's database for sediment-levende organismer (SETAC Sediment Advisory Group (SEDAG), Spiked Sediment Toxicity Database)
- Generel søgning efter data via Google og via Science Direct (stofnavn og CAS nr.).

Troværdigheden af studierne er vurderet ved tildelingen af en Klimisch kode fra 1 til 4 (Klimisch *et al.* 1997). Kode 1 angiver, at studiet kan anvendes uden forbehold, mens kode 2 angiver, at studiet kan anvendes med forbehold, f.eks. at der er tilstrækkelige oplysninger, selvom studiet ikke er udført i forhold til guideline. Studier, som ikke er tilstrækkeligt beskrevet, tildeles kode 3 eller 4, hvor kode 4 tildeles studier, hvor det ikke er muligt at vurdere kvaliteten og dermed troværdigheden. Estimerede værdier tildeles koden 3, da de ikke bør anvendes direkte i beregningerne af miljøkvalitetskriterier jf. EU vejledningen (EU 2018).

4.1 Toksicitet over for vandlevende organismer

TCA er toksisk over for planter. Toksiciteten over for fytoplankton og alger er undersøgt og rapporteret i litteraturen og viser den højeste toksicitet af TCA over for grønalger (Lewis *et al.* 2004).

OECD's gennemgang af studier (OECD 2001) fremhæver alger som de mest følsomme organismer med den højeste toksicitet i kroniske test med *Chlorella pyrenoidosa* angivet som 14-dages NOEC for Na-TCA på 0,01 mg/L svarende til 0,0088 mg TCA/L¹. Højeste toksicitet over for invertebrater finder OECD til 0,01 mg/L, dog i mindre valide studier på nymfer af guldsmede, idet testvarighed ikke er angivet. På baggrund af data for alger udleder OECD en PNEC-værdi på 0,17 µg/l ved brug af en usikkerhedsfaktor på 50. I REACH registreringsdossieret for TCA er der ligeledes udledt en PNEC-værdi på 0,17 µg/l ved brug af en usikkerhedsfaktor på 50. Det fremgår ikke tydeligt, hvilke toksicitetsdata, der ligger bag (ECHA 2021).

Der er fundet akutte toksicitetsdata for ti ferskvandslevende arter (*Raphidocelis subcapitata*, *Scenedesmus subspicatus*, *Daphnia magna*, *Nitocra spinipes*, *Xenopus laevis*, *Alburnus alburnus*, *Danio rerio*, *Lemna gibba*, *Myriophyllum spicatum* og *Myriophyllum sibiricum*), som repræsenterer de seks taksonomiske grupper, når der skelnes mellem forskellige krebsdyr: alger, krebsdyr (branchiopoda og copepoda), amphibia, fisk og makrofytter. For saltvandslevende organismer er der

¹ Konc. TCA = Konc. Na-TCA × molvægt TCA/molvægt Na-TCA = 0,01×163/185

kun fundet valide akutte data for én art (*Isochrysis galbana*), som repræsenterer den taksonomiske gruppe: alger.

Valide data (Klimisch kode 2) for akut toksicitet af TCA viser, at alger er de mest følsomme arter med EC₅₀-værdier på 16-68 mg/L målt for vækst og 4,7-4,9 mg/L målt for biomasse (Roberts *et al.* 2010).

Der er videre fundet kroniske data for fem ferskvandslevende arter: (*Raphidocelis subcapitata*, *Scenedesmus subspicatus*, *Lemna gibba*, *Myriophyllum spicatum* og *Myriophyllum sibiricum*), som repræsenterer de to taksonomiske grupper: alger og makrofyter. For saltvandslevende organismer er der kun fundet valide kroniske data for to arter (*Isochrysis galbana* og *Cyprinodon variegatus*), som repræsenterer de to taksonomiske grupper: alger og fisk.

Dertil er der for fire ferskvandsalger (*Ankistrodesmus minutissimus*, *Chlorococcum* sp., *Dictosphaerium pulchellum* og *Scenedesmus acutus*), som er vurderet valide i OECD 2001, kun angivet EC₅₀-værdier. Da EC₅₀ ikke indgår i beregningen af vandkvalitetskriterier, VKK, medtages de ikke i vurderingen.

Data for kronisk toksicitet viser ligeledes, at alger, samt makrofyter er de mest følsomme organismer med laveste NOEC for algen *Raphidocelis subcapitata* på 3,0 mg/L (Roberts *et al.* 2010) og laveste NOEC for makrofytten *Myriophyllum sibiricum* på 2,6 mg/L (Hanson & Solomon 2004).

Effektkoncentrationer over for vandlevende organismer er sammenstillet i Bilag A.

4.2 Toksicitet over for sedimentlevende organismer

Der er ikke fundet data for toksiciteten over for sedimentlevende organismer.

Til brug for udledning af sedimentkvalitetskriterier bestemmes toksiciteten for sedimentlevende organismer derfor ved hjælp af ligevægtsberegning ud fra toksiciteten i vandmiljøet.

4.3 Toksicitet over for pattedyr og fugle

Der er ikke søgt efter data for toksiciteten over for pattedyr og fugle. Ifølge vejledningen (EU 2018) skal der udledes et biota-kvalitetskriterie for stoffer med potentiale for bioakkumulering eller høj toksicitet over for pattedyr og fugle. TCA vurderes ikke at være potentiel bioakkumulerbar og vurderes ikke at være farlig over for fugle og pattedyr (ingen relevant CLP-klassificering).

4.4 Toksicitet over for mennesker

Der er ikke søgt efter data for toksiciteten over for mennesker, idet udledning af et kvalitetskriterie for humant konsum (af fisk) ikke er relevant. Jævnfør vejledningen (EU 2018) er dette relevant at udlede, hvis stoffet har relevante humane egenskaber. TCA vurderes ikke at have sådanne egenskaber (ingen relevant CLP-klassificering).

5 Andre effekter

TCA er vurderet i REACH registreringen som et stof, der ikke opfylder egenskaberne som et PBT eller vPvB stof. Dog er stoffet registreret som værende meget persistent (vP) og toksisk (T), men ikke bioakkumulerende (B) (ECHA 2021).

Det er vurderet, at TCA ikke har yderligere andre relevante effekter.

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

Kvalitetskriterierne er fastsat i overensstemmelse med EU's Guidance Document no. 27: Technical Guidance Document (TGD) for Deriving Environmental Quality Standards (EU, 2018).

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

På trods af det omfattende datasæt for toksiciteten af TCA over for vandlevende organismer er der ikke tilstrækkelige valide data til at lave en artsfordelingsanalyse (SSD – Species Sensitivity Distribution). Metoden kræver jævnfør TGD (EU 2018) minimum 10 forskellige arter fordelt på minimum 8 taksonomiske grupper. For det kroniske datasæt haves der samlet for fersk- og saltvand kun syv arter fordelt på tre taksonomiske grupper. Derfor anvendes den deterministiske metode med anvendelse af usikkerhedsfaktorer til udledning af vandkvalitetskriterier for TCA.

Jf. vejledningen (EU, 2018) kan data for fersk- og saltvand slås sammen. Der er ikke nok valide data tilgængelig til at lave en robust statistisk analyse af om der er sensitivitetsforskel mellem fersk- og saltvand, men for begge haves de laveste effektværdier for alger (og makrofytter), hvorfor det vurderes at data kan slås sammen.

6.1.1 Ferskvand

Det samlede datasæt fra langtidstest viser den højeste toksicitet over for makrofytter og alger med den laveste NOEC-værdi for makrofytten *Myriophyllum sibiricum* på 3,0 mg/L for Na-TCA svarende til 2,6 mg TCA/L². Vandkvalitetskriteriet for ferskvandsorganismer udledes på baggrund af denne værdi.

Jævnfør vejledningen (EU 2018) kan der anvendes en usikkerhedsfaktor (UF) på 50 på den laveste kroniske effektværdi, hvis der er data tilgængeligt for langtidstest på to forskellige trofiske niveauer (her alger/makrofytter og fisk), og data omfatter test på den mest følsomme organisme.

Herved beregnes VKK for ferskvand til:

$$\text{VKK}_{\text{ferskvand}} = 2,6 \text{ mg/L} / 50 = 0,052 \text{ mg/L} = 52 \text{ } \mu\text{g/L}$$

6.1.2 Saltvand

Da datasættet for fersk- og saltvand er slået sammen bestemmes vandkvalitetskriteriet for saltvand ligeledes ud fra samme effektværdi som $\text{VKK}_{\text{ferskvand}}$ med EC_{10} på 2,6 mg TCA/L.

²Konc. TCA = Konc. Na-TCA × molvægt TCA (163) / molvægt Na-TCA (185)

For udledning af vandkvalitetskriteriet for saltvand, kan der jævnfør vejledningen (EU 2018) anvendes en UF på 500 på den laveste kroniske effektværdi, hvis der er valide data tilgængeligt for langtidstest med ferskvands- eller saltvandsorganismer på to forskellige trofiske niveauer (her alger/makrofyter og fisk) og data omfatter test på den mest følsomme organisme.

Herved beregnes VKK for saltvand til:

$$\text{VKK}_{\text{saltvand}} = 2,6 \text{ mg/L} / 500 = 0,0052 \text{ mg/L} = 5,2 \text{ }\mu\text{g/L}$$

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

6.2.1 Ferskvand

For akut toksicitet for ferskvandsorganismer er de laveste effektkoncentrationer fundet for algen *Raphidocelis subcapitata* med en EC₅₀ for biomasse på 4,9 mg/L og for vækst på 16,2 mg/L. Korttidsvandkvalitetskriterie for ferskvandsorganismer udledes på baggrund af EC₅₀ for vækst, da denne værdi jf. vejledningen (EU 2018) vil være den mest robuste.

Der haves valide akutte data for seks taksonomiske grupper (alger, krebsdyr (branchiopoda og copepoda), amphibia, fisk og makrofyter) og basissættet er opfyldt (tre trofiske niveauer; alger, krebsdyr og fisk). Jævnfør vejledningen (EU 2018) skal der derved anvendes en UF på 100 på den laveste valide E(L)C₅₀-værdi. Der er mulighed for at sænke denne til 10, hvis standardafvigelsen mellem log₁₀ transformerede data for de forskellige arter er mindre end 0,5. Da dette ikke er tilfældet for data på TCA (standardafvigelsen beregnet til 0,9), benyttes en UF på 100. Herved beregnes KVKK for ferskvand til:

$$\text{KVKK}_{\text{ferskvand}} = 16,2 \text{ mg/L} / 100 = 0,162 \text{ mg/L} = 162 \text{ }\mu\text{g/L}$$

6.2.2 Saltvand

For saltvand er datasættet yderst begrænset og består kun af eksperimentelle data fra valide korttidstest på én alge. Idet der ikke er valide data tilgængelige for akut toksicitet over for krebsdyr og fisk i saltvand, er basissættet ikke opfyldt, hvorfor data for ferskvandslevende organismer inddrages. Derved udledes korttidsvandkvalitetskriteriet for saltvand også på baggrund af EC₅₀ på 16,2 mg/L bestemt for ferskvandsalgen *R. subcapitata*.

Jævnfør vejledningen (EU 2018) anvendes der en UF på 1000 på den laveste E(L)C₅₀-værdi ved data tilgængeligt for korttidstest på de tre trofiske niveauer (basissæt); alger, krebsdyr og fisk. Ligeledes for saltvand, er der også mulighed for at sænke UF, hvis standardafvigelsen mellem log₁₀ transformerede data for de forskellige arter er større end 0,5. Dette er ikke tilfældet (standardafvigelsen beregnet til 0,9), hvorved KVKK for saltvand beregnes til:

$$\text{KVKK}_{\text{saltvand}} = 16,2 \text{ mg/L} / 1000 = 0,0162 \text{ mg/L} = 16,2 \text{ }\mu\text{g/L}$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Jævnfør vejledningen (EU 2018) er det relevant at udlede et sedimentkvalitetskriterie (SKK) for et stof, når $\log K_{ow} \geq 3$ (TCA: 1,33 jf. tabel 2.1) eller $\log K_{oc} \geq 3$ (TCA: 0-0,9 jf. tabel 2.1). Begge værdier er under 3 for TCA, hvoraf det umiddelbart konkluderes, at udledning af SKK ikke er relevant for TCA. Dog er en høj toksicitet mod vandlevende organismer også en trigger for udledning af SKK jf. vejledningen (EU 2018). Der er ikke fundet data for toksiciteten overfor bentiske organismer, og der er ikke fundet data, der tyder på en ophobning af TCA i sedimentet. Stoffet vurderes som meget toksisk for vandlevende organismer og meget toksisk med langvarige virkninger for vandlevende organismer på baggrund af de harmoniserede klassificeringer og samtidig med de ovenfor udledte VKK og KVKK på henholdsvis 52 og 162 $\mu\text{g/L}$ for ferskvand, vurderes det, at der bør udledes et SKK.

Idet der ikke er tilgængelige data for toksiciteten af TCA for sedimentlevende organismer bestemmes toksiciteten for sedimentlevende organismer derfor ved hjælp af ligevægtsberegning ud fra toksiciteten i vandmiljøet jævnfør EqP-metoden angivet i vejledningen (EU 2018). Til brug for udledning af SKK anvendes de udledte vandkvalitetskriterier (VKK) for ferskvand (0,052 mg/L) og saltvand (0,0052 mg/L), som begge er baseret på tilgængelige data for den mest følsomme organisme i vandmiljøet, samt det geometriske gennemsnit af de fundne K_{oc} -værdier på 2,93 L/kg.

Jævnfør vejledningen (EU 2018) for udledning af kvalitetskriterie for sediment, beregnes

$$K_{\text{sed-water}} = F_{\text{water}_{\text{sed}}} + F_{\text{solid}_{\text{sed}}} \times (F_{\text{oc}_{\text{sed}}} \times K_{\text{OC}}) / 1000 \times \text{RHOSolid}$$

Hvor,

$F_{\text{water}_{\text{sed}}}$ er volumenbrøken af vand i sediment (0,8),

$F_{\text{solid}_{\text{sed}}}$ er volumenbrøken af faststof (0,2),

$F_{\text{oc}_{\text{sed}}}$ er det organiske kulstofindhold i sedimentet (0,05),

RHOSolid er densiteten af faststof (2500), dvs.

$$K_{\text{sed-water}} = 0,8 + 0,2 \times (0,05 \times 2,93) / 1000 \times 2500 = 0,873 \text{ m}^3/\text{m}^3$$

Vådvægtensiteten af sediment, RHO_{sed} er 1300 kg vådvægt/ m^3 jævnfør vejledningen.

Herefter beregnes SKK for ferskvand og saltvand til:

$$\begin{aligned} \text{SKK}_{\text{ferskvand}} &= (K_{\text{sed-water}} / \text{RHO}_{\text{sed}}) \times \text{VKK}_{\text{ferskvand}} \times 1000 = (0,873 \text{ m}^3/\text{m}^3 / 1300 \text{ kg}/\text{m}^3) \times 0,052 \\ &\text{mg/L} \times 1000 = 0,035 \text{ mg/kg vådvægt} = 35 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt} \\ &= 35 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt} \times 2,6 \text{ kg vådvægt/kg tørvægt} = 91 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt (5\% OC)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{SKK}_{\text{saltvand}} &= (K_{\text{sed-water}} / \text{RHO}_{\text{sed}}) \times \text{VKK}_{\text{saltvand}} \times 1000 = (0,873 \text{ m}^3/\text{m}^3 / 1300 \text{ kg}/\text{m}^3) \times 0,0052 \\ &\text{mg/L} \times 1000 = 0,0035 \text{ mg/kg vådvægt} = 3,5 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt} \\ &= 3,5 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt} \times 2,6 \text{ kg vådvægt/kg tørvægt} = 9,1 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt (5\% OC)} \end{aligned}$$

Omregning af vådvægt til tørvægt af sediment er foretaget med $\text{CONV}_{\text{sed}} = 2,6$ jævnfør vejledningen (side 104).

Endelig omregnes SKK-værdierne til organisk kulstof:

$$\begin{aligned} \text{SKK}_{\text{ferskvand}} &= 91 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt (5\% OC)} \\ &= 1820 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt} \times f_{\text{oc}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{SKK}_{\text{saltvand}} &= 9,1 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt (5\% OC)} \\ &= 182 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt} \times f_{\text{oc}} \end{aligned}$$

Ved anvendelse af EqP-metoden antages at der er ligevægt mellem sediment og vand, hvorved det også forventes at kriterierne for sediment sikre beskyttelse af vandlevende organismer og omvendt. Det bør dog noteres at overstående kriterier er fastsat på baggrund af en harmoniseret klassificering for vandlevende organismer, og ikke grundet evidens for høj toksicitet over for bentiske organismer. Derfor bør værdierne anses som værende foreløbige.

6.4 Kvalitetskriterium for biota, sekundær forgiftning ($\text{BKK}_{\text{sek.forgiftn.}}$)

Der foreligger ikke valide værdier for TCA's potentiale for bioakkumulering (BMF eller BCF (BAF)), og hvorvidt et kriterie for biota er relevant afgøres derfor med anvendelse af $\log K_{\text{ow}}$. Jævnfør vejledningen (EU 2018) er det relevant at udlede biotakvalitetskriterier for et stof, når $\log K_{\text{ow}} \geq 3$. Estimering i EPI Suite baseret på $\log K_{\text{ow}}$ på 1,33 giver en BCF-værdi på 3,2, mens data gengivet i REACH registreringen angiver en $\text{BCF} < 4,5$. En udledning af et biotakriterie vurderes derfor ikke relevant.

6.5 Kvalitetskriterium for humankonsum af vandlevende organismer (HKK)

Et kvalitetskriterie for human konsum af fiskeriprodukter er i følge vejledningen (EU 2018) relevant at udlede, hvis stoffet har relevante humane fareegenskaber (nærmere specificeret i vejledningen afsnit 2.4.3.2). Stoffer som forårsager effekter på reproduktion, fertilitet og udvikling er af særlig vigtighed, da disse har langsigtede effekter, som kan have en indflydelse på populationer. TCA vurderes ikke at have sådanne egenskaber, hvorfor et kriterie for human konsum ikke er relevant.

6.6 Vandkvalitetskriterium baseret på $\text{BKK}_{\text{sek.forgiftn.}}$ og HKK

Der er ikke udledt $\text{BKK}_{\text{sek.forgiftn.}}$ og HKK jf. ovenfor. På baggrund af manglende potentiale for bioakkumulering og humane fareegenskaber er det realistisk at antage, at vandkvalitetskriteriet også sikrer beskyttelse af biota og human konsum.

7 Konklusion

Følgende kvalitetskriterier for vandmiljøet er udregnet for TCA:

Vandkvalitetskriterium

VKK _{ferskvand}	52 µg/l
VKK _{saltvand}	5,2 µg/l

Korttidsvandkvalitetskriterium

KVKK _{ferskvand}	162 µg/l
KVKK _{saltvand}	16,2 µg/l

Sedimentkvalitetskriterium *

SKK _{ferskvand}	91 µg/kg tørvægt (5% OC)
	1820 µg/kg tørvægt x f _{oc}
SKK _{saltvand}	9,1 µg/kg tørvægt (5% OC)
	182 µg/kg tørvægt x f _{oc}

Biotakvalitetskriterium, sekundær forgiftning

BKK _{sek.forgiftn.}	Ikke relevant
------------------------------	---------------

Biotakvalitetskriterium, human konsum

HKK	Ikke relevant
-----	---------------

*Det bemærkes at SKK er fastsat ved ligevægtsbetragtning (EqP-metoden).

8 Referencer

Danish (Q)SAR Database (2021), November 2021. <http://qsar.food.dtu.dk>

ECHA (2021). ECHA registreringsdossier for trichloreddikesyre CAS 76-03-9. Data hentet december 2021. <https://echa.europa.eu/da/substance-information/-/substanceinfo/100.000.844>

ECHA ED Assessment (2021). <https://echa.europa.eu/da/ed-assessment>

Edlists.org (2021). [Substances considered, by the evaluating National Authority, to have endocrine disrupting properties | Endocrine Disruptor List \(edlists.org\)](https://edlists.org/the-ed-lists) (<https://edlists.org/the-ed-lists>).

EPI Suite (2021), December 2021. EPI-Suite calculation (EPIWEB version 4.11 US-EPA).

EU (2000). Europa-Parlamentets og Rådets Direktiv 2000/60/EF om fastsættelse af en ramme for fællesskabets vandpolitiske foranstaltninger af 23. oktober 2000.

EU (2008). ECHA: Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.10: Characterisation of dose [concentration]-response for environment (https://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r10_en.pdf/bb902be7-a503-4ab7-9036-d866b8ddce69)

EU (2018). Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards.

(<https://circabc.europa.eu/sd/a/ba6810cd-e611-4f72-9902-f0d8867a2a6b/Guidance%20No%2027%20-%20Deriving%20Environmental%20Quality%20Standards%20-%20version%202018.pdf>)

Fisher D., Yonkos L., Ziegler G., Friedel E. & Burton D. (2014) Acute and chronic toxicity of selected disinfection byproducts to *Daphnia magna*, *Cyprinodon variegatus*, and *Isochrysis galbana*. Water Research 55 (2014) 233-244.

Hanson M.L. & Solomon K.R. (2004). Haloacetic acids in the aquatic environment. Part I: macrophyte toxicity. Environmental Pollution 130 (2004) 371-383.

Klimisch, H., Andreae, M. & Tillmann, U. (1997). A systematic approach for evaluating the quality of experimental toxicological and ecotoxicological data. Regul. Toxicol. Pharm., 25, 1-5.

Lewis T.E., Wolfinger T.F. & Barta M.L. (2004) The ecological effects of trichloroacetic acid in the environment. Environment International 30 (2004) 1119-1150.

Linden E., Bengtsson B-E., Svanberg O. & Sundström G. (1979). The acute toxicity of 78 chemicals and pesticide formulations against two brackish water organisms, the bleak (*Alburnus alburnus*) and the harpacticoid *Nitocra spinipes*. Chemosphere 11/12, 843-851.

Miljøstyrelsen (2004). Principper for fastsættelse af vandkvalitetskriterier for stoffer i overfladevand. Vejledning fra Miljøstyrelsen nr. 4, 2004.

OECD (2001). OECD SIDS Trichloroacetic acid, CAS No. 76-03-9.

<https://hpvchemicals.oecd.org/UI/handler.axd?id=55962502-1722-4682-97dc-6ee4b7cfff02>

Roberts J.F., Egmond R., & Price O.R. (2010). Toxicity of haloacetic acids to freshwater algae. Ecotoxicology and Environmental Safety 73 (2010) 56–61.

Bilag A

Toksicitet over for vandorganismer (EC₅₀, NOEC, EC_x, PNEC osv.)

Ferskvandsorganismer

Akut toksicitet

Art	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Bemærkning	Reference	Troværdighed (1-4)
Alger Blandet kultur af Chlorococcales	Na-TCA	Nej	24 timer	EC ₁₀	>1000 ¹ (>881)	Hæmning af iltproduktion, ingen kontrol af pH	Krebs 1991	3
<i>Raphidocelis subcapitata</i> ²	TCA	Ja	72 timer	EC ₅₀ (vækst) EC ₅₀ (biomasse)	16,2 4,9		Roberts <i>et al.</i> 2010	2
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	TCA	Ja	72 timer	EC ₅₀ (vækst) EC ₅₀ (biomasse)	67,9 4,7		Roberts <i>et al.</i> 2010	2
Krebsdyr Branchiopoda <i>Daphnia magna</i>	Neutraliseret	Nej	24 timer	EC ₅₀	8370	Ingen kontrol af pH, men der er tjekket for pH effekt	Bringmann & Kühn 1982	3
	TCA	Nej	24 timer	EC ₅₀	110	Ingen kontrol af pH, men der er tjekket for pH effekt	Bringmann & Kühn 1982	3
<i>Daphnia magna</i>	Na-TCA	Nej	24 timer	EC ₅₀	>10 000 (> 8 811) ¹	Ingen kontrol af pH	Bringmann & Kühn 1977b	3
<i>Daphnia magna</i>	TCA	Nej	48 timer	EC ₅₀	354	Yngre end 24 timer	Melo <i>et al.</i> 2019	2
<i>Daphnia magna</i>	Ikke angivet	Nej	48 timer	EC ₅₀	2000	Yngre end 24 timer	Dennis <i>et al.</i> 1979	3
<i>Daphnia magna</i>	TCA	Ikke angivet	24 timer	EC ₅₀	164	Yngre end 24 timer	Janssen <i>et al.</i> 1993	3

<i>Daphnia magna</i>	TCA	Ikke angivet	48 timer	EC ₅₀	146	Yngre end 24 timer	Janssen <i>et al.</i> , 1993	3
<i>Daphnia magna</i>	TCA	Ikke angivet	1 time	EC ₅₀	137	Enzymatisk hæmning Yngre end 24 timer	Janssen <i>et al.</i> 1993	3
<i>Streptocephalus proboscideus</i>	TCA	Ikke angivet	24 timer	LC ₅₀	1,5	Instar II-III nauplii	Centeno <i>et al.</i> 1993 refereret i Centeno <i>et al.</i> 1995	3
<i>Thamnocephalus platyurus</i>	TCA	Nej	24 timer	LC ₅₀	16,9	Instar II-III nauplii	Centeno <i>et al.</i> 1995	3
Copepoda <i>Nitocra spinipes</i>	TCA	Ikke angivet	96 timer	IC ₅₀	4800	10°C, test i brakvand (7 ‰); test med voksne, 0,6-0,8 mm	Linden <i>et al.</i> 1979	2
Amphibia Tudse (<i>Xenopus laevis</i>)	TCA	Nej	96 timer	EC ₅₀ LOEC LC ₅₀	1740 5000 4430	Embryo	Fort <i>et al.</i> 1993	2
Insekter Guldsmede nymfer: <i>Somatochlora cingulata</i> , <i>Aeschna Umbrosa</i> , <i>Aeschna sp.</i> , <i>Basiaeschna sp.</i>	Neutraliseret	Ikke angivet	-	Signifikant subletal effekt	0,01 0,1	Iltforbrug/ammonium udskillelse Iltforbrug	OECD 2001	4
Gulfebermyg (<i>Aedes aegypti</i>)	Ikke angivet	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	5500	Larve	Knapek & Lakota 1974	4

Fisk Løje (<i>Alburnus alburnus</i>)	TCA	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	9300	10°C, test i brakvand (7 ‰); test med yngel, 8 cm	Linden <i>et al.</i> 1979	2
Karpe, Rimte (<i>Leuciscus idus</i>)	Ikke angivet	Ikke angivet	48 timer	LC ₅₀	>10 000		Juhnke & Luedemann 1978	4
Karpe, Karusse (<i>Carassius sp.</i>)	Ikke angivet	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	3420	Yngel	Knapek & Lakota 1974	4
Karpe (<i>Cyprinus carpio</i>)	Ikke angivet	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	2500	Yngel ca. 3 cm	Knapek & Lakota 1974	4
Karpe, Suder (<i>Tinca tinca</i>)	Ikke angivet	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	3420	Yngel ca. 3 cm	Knapek & Lakota 1974	4
Guppy (<i>Poecilia reticulata</i>)	Neutraliseret	Ikke angivet	48 timer	LC ₅₀	9160	Yngel 28-40 mm	Jirasek <i>et al.</i> 1980 refereret i Lewis <i>et al.</i> 2004	4
Japansk risfisk (<i>Oryzias latipes</i>)	Neutraliseret	Ikke angivet	48 timer	LC ₅₀	277	Test medium ikke neutraliseret	OECD 2001	4
Fathead minnow (<i>Pimephales promelas</i>)	Neutraliseret	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	2000	Yngre end 1 år	Dennis <i>et al.</i> 1979	3
Kongelaks (<i>Oncorhynchus tshawytscha</i>)	Neutraliseret	Ikke angivet	48 timer	LC ₅₀	10	Test betingelser ikke angivet	OECD 2001	4
Laks (Salmonidae)	Ikke angivet	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	1050	Yngel ca. 3 cm	Knapek & Lakota 1974	4
Zebrafisk (<i>Danio rerio</i>)	TCA	Nej	72 timer	LC ₅₀ EC ₅₀	>6 990 >6 990	Embryo 4 timer	Teixidó <i>et al.</i> 2015	2

Blågælllet solaborre (<i>Lepomis macrochirus</i>)	Ikke angivet	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	1,5 3,8 4,5 4,8	Yngel 5 cm Yngel 5 cm Yngel 5 cm Yngel 10 cm	Office of Pesticide Programs 2000 refereret i Lewis <i>et al.</i> 2004	4
Røddøjet solaborre (<i>Lepomis microlophus</i>)	Ikke angivet	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	5,4	10 cm	Office of Pesticide Programs 2000 refereret i Lewis <i>et al.</i> 2004	4
Plettet dværgmalle (<i>Ictalurus punctatus</i>)	Na-TCA (90%)	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	>2000 (>1586)	Yngel 5-8 cm	Clemens & Sneed 1959	4
Emerald shiner (<i>Notropis atherinodides</i>)	Ikke angivet	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	4	Yngel 0,5 cm	Office of Pesticide Programs 2000 refereret i Lewis <i>et al.</i> 2004	4
Stormundet ørredaborre (<i>Micropterus salmoides</i>)	Ikke angivet	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	2,7 4,8	10 cm 10 cm	Office of Pesticide Programs 2000 refereret i Lewis <i>et al.</i> 2004	4
Regnbueørred (<i>Oncorhynchus mykiss</i>)	Ikke angivet	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀	3,53	61 g	Office of Pesticide Programs 2000 refereret i	4

Makrofytter <i>Lemna gibba</i>	Na-TCA	Nominelt	7 dage	EC ₅₀ (vækst)	864,3 ¹ (761,5)	Flere endpoints målt. Vækst målt som antal blade (fronds) er mest følsom. Test ikke udført i henhold til, men sammenlignelig med standard guideline.	Lewis <i>et al.</i> 2004 Hanson & Solomon 2004	2
<i>Myriophyllum spicatum</i>	Na-TCA	Nominelt	14 dage	EC ₅₀ (våd biomasse)	49,8 ¹ (43,9)	Flere endpoints målt. Vækst målt som våd biomasse er mest følsom. Test ikke udført i henhold til, men sammenlignelig med standard guideline.	Hanson & Solomon 2004	2
<i>Myriophyllum sibiricum</i>	Na-TCA	Nominelt	14 dage	EC ₅₀ (våd biomasse)	49,5 ¹ (43,6)	Flere endpoints målt. Vækst målt som våd biomasse er mest følsom. Test ikke udført i henhold til, men sammenlignelig med standard guideline.	Hanson & Solomon 2004	2

¹ Værdi angivet for Na-TCA, omregnet til TCA (angivet i parentes) ved formlen: $\text{Konc. TCA} = \text{Konc. Na-TCA} \times \text{molvægt TCA (163)} / \text{molvægt Na-TCA (185)}$

² Tidligere kendt som *Pseudokirchneriella subcapitata* og *Selenastrum capricornutum*

Ferskvandsorganismer
Kronisk toksicitet

	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Bemærkning	Reference	Troværdighed (1-4)
Alger								
Grønalger								
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	Na-TCA	Ikke angivet	7 dage	TT (vækst)	200 ¹ (176)	TT: Toxicity threshold	OECD 2001	4
<i>Ankistrodesmus minutissimus</i>	Na-TCA	Ikke angivet	14 dage	EC ₅₀	98 ¹ (86)		OECD 2001	4
<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	Na-TCA	Ikke angivet	14 dage	EC ₅₀	0,3 ¹ (0,26) 0,01 ¹		Bednarz 1981	3
<i>Chlorella mucosa</i>	Na-TCA	Ikke angivet	14 dage	NOEC EC ₅₀	(0,0088) 0,46 ¹ (0,41)		Bednarz 1981	3
<i>Chlorella vulgaris</i>	Na-TCA (41,5%) formulering	Nej	96 timer	NOEC (vækst)	100 ¹ (88,1)	3-4 dage, logaritmisk vækstfase. 100 mg Na-TCA/L er højeste testkoncentration.	Garten, 1990	4
Chlorococcum sp.	Na-TCA	Ikke angivet	14 dage	EC ₅₀	1,2 ¹ (1,06)		OECD 2001	4
<i>Dictosphaerium pulchellum</i>	Na-TCA	Ikke angivet	14 dage	EC ₅₀	7 ¹ (6,2)		OECD 2001	4
<i>Raphidocelis subcapitata</i> ²	TCA	Ja	72 timer	NOEC (vækst) NOEC (biomasse)	3,0 3,0		Roberts <i>et al.</i> 2010	2
<i>Raphidocelis subcapitata</i> ²	Na-TCA (41,5%) formulering	Nej	96 timer	LOEC (vækst) NOEC (vækst)	10 ¹ (8,8) 1 ¹ (0,88)	3-4 dage, logaritmisk vækstfase	Garten, 1990	4
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	TCA	Ja	72 timer	NOEC (vækst) NOEC (biomasse)	3,0 3,0		Roberts <i>et al.</i> 2010	2

<i>Scenedesmus acutus</i>	Na-TCA	Ikke angivet	14 dage	EC ₅₀ (vækst)	8,8 ¹ (7,8)		OECD 2001	4
Cyanobakterier <i>Anabaena variabilis</i>	Na-TCA	Ikke angivet	14 dage	LC ₅₀ (vækst)	8 ¹ (7)		Bednarz, 1981	3
Krebsdyr <i>Daphnia magna</i>	TCA	Ja	21 dage	<u>Overlevelse:</u> NOEC LOEC Kronisk værdi ³	285,0 493,0 374,8	Ingen pH justering i test- LC ₅₀ ved samme test blev bestemt til 249,5 mg/L betydende af NOEC svare til >50% effekt.	Fisher <i>et al.</i> 2014	3
				<u>Reproduktion:</u> NOEC LOEC Kronisk værdi ³	285,0 493,0 374,8			
Fisk <i>Cyprinus carpio</i>	Na-TCA	Ikke angivet	63 dage	LOEC	7 ¹ (6,2)	Vægttab, muskulær atropi, hyalin degeneration, celle nekrose i gæller	OECD 2001	4
Makrofytter <i>Lemna gibba</i>	Na-TCA	Nominelt	7 dage	EC ₁₀ (vækst) NOEC (vækst)	53,9 ¹ (47,5) 30 ¹ (26)	Flere endpoints målt. Vækst målt som våd biomasse og antal blade (fronds) er mest følsomme. Test ikke udført i henhold til, men	Hanson & Solomon 2004	2

<i>Myriophyllum spicatum</i>	Na-TCA	Nominelt	14 dage	EC ₁₀ (våd biomasse) NOEC (våd biomasse)	5,6 ¹ (4,9) 10 ¹ (8,8)	sammenlignelig med standard guideline. Flere endpoints målt. Vækst målt som antal noder er mest følsom. Test ikke udført i henhold til, men sammenlignelig med standard guideline.	Hanson & Solomon 2004	2
<i>Myriophyllum sibiricum</i>	Na-TCA	Nominelt	14 dage	EC ₁₀ (våd biomasse) NOEC (våd biomasse)	4,0 ¹ (3,5) 3 ¹ (2,6)	Flere endpoints målt. Vækst målt som våd biomasse er mest følsom. Test ikke udført i henhold til, men sammenlignelig med standard guideline.	Hanson & Solomon 2004	2

¹ Værdi angivet for Na-TCA, omregnet til TCA (angivet i parentes) ved formlen: $\text{Konc. TCA} = \text{Konc. Na-TCA} \times \text{molvægt TCA (163)} / \text{molvægt Na-TCA (185)}$

² Tidligere kendt som *Pseudokirchneriella subcapitata* og *Selenastrum capricornutum*

³ Geometrisk gennemsnit af NOEC og LOEC

Saltvandsorganismer

Akut toksicitet

	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Bemærkning	Reference	Troværdighed (1-4)
Alger <i>Isochrysis galbana</i>	TCA	Ja	72 timer	EC ₅₀ (vækst)	331,6	25°C, testmedie justeret til salinitet på 20 ‰, ingen pH justering i test	Fisher <i>et al.</i> 2014	2

Saltvandsorganismer

Kronisk toksicitet

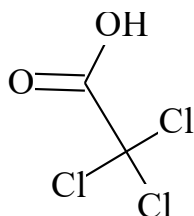
	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Bemærkning	Reference	Troværdighed (1-4)
Alger <i>Isochrysis galbana</i>	TCA	Ja	96 timer	<u>Vækst:</u> EC ₁₀ NOEC LOEC Kronisk værdi ¹	38,5 78,5 140,2 104,9	25°C, testmedie justeret til salinitet på 20 ‰, ingen pH justering i test	Fisher <i>et al.</i> 2014	2
Fisk Sheephead minnow (<i>Cyprinodon variegatus</i>)	TCA	Ja	32 dage	<u>Embryo udklækket og overlevet:</u> NOEC LOEC Kronisk værdi ¹	235,0 293,0 262,4	25°C, test i saltvand (20 ‰); brakvandsorganisme, ingen pH justering i test	Fisher <i>et al.</i> 2014	2(4) ²
Sheephead minnow (<i>Cyprinodon variegatus</i>)	TCA	Ja	32 dage	<u>Vækst af larve:</u> NOEC LOEC Kronisk værdi ¹ <u>Vækst af embryo:</u> NOEC LOEC Kronisk værdi ¹	235,0 293,0 262,4 235,0 293,0 262,4	25°C, test i saltvand (20 ‰); brakvandsorganisme, ingen pH justering i test	Fisher <i>et al.</i> 2014	2(4) ²

¹ Geometrisk gennemsnit af NOEC og LOEC

² Der blev kun observeret en effekt ved højeste testkoncentration. Dertil faldt pH drastisk med stigende testkoncentration, hvortil de skønnes at effekten kan skyldes pH-ændringen. Værdierne anses derfor som worst case.

Bilag B

EPI Suite Results For CAS 76-03-9



SMILES : O=C(O)C(Cl)(Cl)Cl
CHEM : Acetic acid, trichloro-
MOL FOR: C2 H1 CL3 O2
MOL WT : 163.39

----- EPI SUMMARY (v4.11) -----

Physical Property Inputs:
Log Kow (octanol-water): -----
Boiling Point (deg C) : -----
Melting Point (deg C) : -----
Vapor Pressure (mm Hg) : -----
Water Solubility (mg/L): -----
Henry LC (atm-m³/mole) : -----

Log Octanol-Water Partition Coef (SRC):
Log Kow (KOWWIN v1.68 estimate) = 1.44
Log Kow (Exper. database match) = 1.33
Exper. Ref: HANSCH,C ET AL. (1995)

Boiling Pt, Melting Pt, Vapor Pressure Estimations (MPBPVP v1.43):
Boiling Pt (deg C): 203.15 (Adapted Stein & Brown method)
Melting Pt (deg C): 26.70 (Mean or Weighted MP)
VP(mm Hg,25 deg C): 0.196 (Modified Grain method)
VP (Pa, 25 deg C) : 26.1 (Modified Grain method)
MP (exp database): 57.5 deg C
BP (exp database): 196.5 deg C
VP (exp database): 6.00E-02 mm Hg (8.00E+000 Pa) at 25 deg C
Subcooled liquid VP: 0.126 mm Hg (25 deg C, exp database VP)
: 16.8 Pa (25 deg C, exp database VP)

Water Solubility Estimate from Log Kow (WSKOW v1.42):
Water Solubility at 25 deg C (mg/L): 1.199e+004
log Kow used: 1.33 (expkow database)
no-melting pt equation used
Water Sol (Exper. database match) = 5.46e+004 mg/L (25 deg C)
Exper. Ref: YALKOWSKY,SH & HE,Y (2003)

Water Sol Estimate from Fragments:
Wat Sol (v1.01 est) = 53701 mg/L

ECOSAR Class Program (ECOSAR v1.11):

Class(es) found:

Halo Acids -acid

Henrys Law Constant (25 deg C) [HENRYWIN v3.20]:

Bond Method : 2.39E-008 atm-m3/mole (2.43E-003 Pa-m3/mole)

Group Method: Incomplete

Exper Database: 1.35E-08 atm-m3/mole (1.37E-003 Pa-m3/mole)

For Henry LC Comparison Purposes:

User-Entered Henry LC: not entered

Henrys LC [via VP/WSol estimate using User-Entered or Estimated values]:

HLC: 3.514E-006 atm-m3/mole (3.561E-001 Pa-m3/mole)

VP: 0.196 mm Hg (source: MPBPVP)

WS: 1.2E+004 mg/L (source: WSKOWWIN)

Log Octanol-Air Partition Coefficient (25 deg C) [KOAWIN v1.10]:

Log Kow used: 1.33 (exp database)

Log Kaw used: -6.258 (exp database)

Log Koa (KOAWIN v1.10 estimate): 7.588

Log Koa (experimental database): None

Probability of Rapid Biodegradation (BIOWIN v4.10):

Biowin1 (Linear Model) : 0.2244

Biowin2 (Non-Linear Model) : 0.0026

Expert Survey Biodegradation Results:

Biowin3 (Ultimate Survey Model): 2.4710 (weeks-months)

Biowin4 (Primary Survey Model) : 3.5423 (days-weeks)

MITI Biodegradation Probability:

Biowin5 (MITI Linear Model) : 0.4781

Biowin6 (MITI Non-Linear Model): 0.0708

Anaerobic Biodegradation Probability:

Biowin7 (Anaerobic Linear Model): 0.6447

Ready Biodegradability Prediction: NO

Hydrocarbon Biodegradation (BioHCwin v1.01):

Structure incompatible with current estimation method!

Sorption to aerosols (25 Dec C) [AEROWIN v1.00]:

Vapor pressure (liquid/subcooled): 16.8 Pa (0.126 mm Hg)

Log Koa (Koawin est) : 7.588

Kp (particle/gas partition coef. (m3/ug)):

Mackay model : 1.79E-007

Octanol/air (Koa) model: 9.51E-006

Fraction sorbed to airborne particulates (phi):

Junge-Pankow model : 6.45E-006

Mackay model : 1.43E-005

Octanol/air (Koa) model: 0.00076

Atmospheric Oxidation (25 deg C) [AopWin v1.92]:

Hydroxyl Radicals Reaction:

OVERALL OH Rate Constant = 0.5200 E-12 cm3/molecule-sec

Half-Life = 20.569 Days (12-hr day; 1.5E6 OH/cm3)

Ozone Reaction:

No Ozone Reaction Estimation

Fraction sorbed to airborne particulates (phi):

1.04E-005 (Junge-Pankow, Mackay avg)

0.00076 (Koa method)

Note: the sorbed fraction may be resistant to atmospheric oxidation

Soil Adsorption Coefficient (KOCWIN v2.00):

Koc : 3.231 L/kg (MCI method)
Log Koc: 0.509 (MCI method)
Koc : 7.787 L/kg (Kow method)
Log Koc: 0.891 (Kow method)
Experimental Log Koc: 0.3 (database)

Aqueous Base/Acid-Catalyzed Hydrolysis (25 deg C) [HYDROWIN v2.00]:

Rate constants can NOT be estimated for this structure!

Bioaccumulation Estimates (BCFBAF v3.01):

Log BCF from regression-based method = 0.500 (BCF = 3.162 L/kg wet-wt)
Log Biotransformation Half-life (HL) = -0.3831 days (HL = 0.4139 days)
Log BCF Arnot-Gobas method (upper trophic) = 0.481 (BCF = 3.024)
Log BAF Arnot-Gobas method (upper trophic) = 0.481 (BAF = 3.024)
log Kow used: 1.33 (expkow database)

Volatilization from Water:

Henry LC: 1.35E-008 atm-m³/mole (Henry experimental database)
Half-Life from Model River: 5.544E+004 hours (2310 days)
Half-Life from Model Lake : 6.049E+005 hours (2.52E+004 days)

Removal In Wastewater Treatment:

Total removal: 1.93 percent
Total biodegradation: 0.09 percent
Total sludge adsorption: 1.84 percent
Total to Air: 0.00 percent
(using 10000 hr Bio P,A,S)

Level III Fugacity Model:

	Mass Amount (percent)	Half-Life (hr)	Emissions (kg/hr)
Air	0.176	494	1000
Water	42	900	1000
Soil	57.7	1.8e+003	1000
Sediment	0.087	8.1e+003	0

Persistence Time: 1.01e+003 hr

....