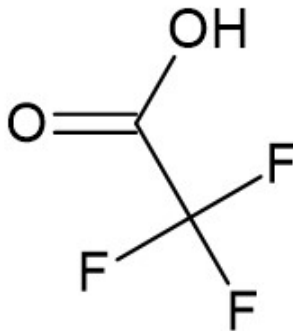




Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

Trifluoreddikesyre (TFA)

CAS nr. 76-05-1



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	560 µg/L
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	56 µg/L
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	2370 µg/L
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	237 µg/L
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{ferskvand}	Ikke udledt
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{saltvand}	Ikke udledt
Biota-kvalitetskriterium, sekundær forgiftning	BKK _{sek.forgiftn.}	Ikke udledt
Biota-kvalitetskriterium, human konsum	HKK	Ikke udledt

18. januar 2024

Indholdsfortegnelse

FORORD	3
ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS	4
1 INDLEDNING	8
2 FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	9
3 SKÆBNE I MILJØET	10
3.1 NEDBRYDELIGHED	10
3.2 ADSORPTION OG MOBILITET	10
3.3 BIOAKKUMULERING	11
3.4 FOREKOMST I MILJØET	12
4 TOKSICITETSDATA	14
4.1 TOKSICITET OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	14
4.2 TOKSICITET OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	15
4.3 TOKSICITET OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	15
4.4 TOKSICITET OVER FOR MENNESKER	16
5 ANDRE EFFEKTER	18
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	19
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	19
6.1.1 <i>Ferskvand</i>	19
6.1.2 <i>Saltvand</i>	19
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	20
6.2.1 <i>Ferskvand</i>	20
6.2.2 <i>Saltvand</i>	20
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	20
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA, SEKUNDÆR FORGIFTNING (BKK _{SEK.FORGIFTN.})	20
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	22
6.6 VANDKVALITETSKRITERIUM BASERET PÅ BKK _{SEK.FORGIFTNIN.} OG HKK	22
7 KONKLUSION	24
8 REFERENCER	25

Bilag A: Test data for trifluoreddikesyre

Bilag B: EpiSuite beregninger

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 human 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 december 2021, der er dog sket en efterfølgende opdatering af søgningen i september 2022 samt marts-juni 2023.

English Summary and conclusions

Trifluoroacetic acid (TFA) is primarily used by professional users in formulated products or repackaging in industry and/or in connection with production.

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).

AA-EQS for water

Chronic data have been found for eight freshwater species: (*Anabaena flos-aquae*, *Chlorella vulgaris*, *Myriophyllum sibiricum*, *Raphidocelis subcapitata* (*Pseudokirchneriella subcapitata*), *Daphnia magna*, *Gobiocypris rarus*, *Lemna gibba*, *Brachionus calyciflorus*), which represent 5 taxonomic groups: algae, invertebrates, fish, aquatic plants and rotifers. The study with the freshwater crustacean *Daphnia magna* states an effect concentration ≥ 25 mg/L, which is used as supplementary data, just as the long-term study with the fish *Gobiocypris rarus* is stated as $\text{NOEC} \geq 3.8$ mg/L.

Chronic toxicity data have been found for three saltwater algae: *Phaeodactylum tricornerutum*, *Dunaliella tertiolecta* and *Skeletonema costatum*. The most valid and lowest demonstrated chronic toxicity is for the alga *Raphidocelis subcapitata* (*Pseudokirchneriella subcapitata*), where a chronic toxicity of $E_rC_{10} = 5.59$ mg/L was derived. The observed chronic NOEC of 1 mg/L for the rotifer *Brachionus calyciflorus* was not used, as the test was only carried out at one concentration level (limit test).

The dataset is listed in appendix A.

According to the TGD (EU 2018) for datasets of limited data, the deterministic approach using application factors, AF, shall be used for the derivation of EQS. Therefore, this approach is followed for derivation of the EQS for TFA.

Data from long-term tests show the highest toxicity to the green algae *Raphidocelis subcapitata* (*Pseudokirchneriella subcapitata*) with the lowest EC_{10} value of 5.59 mg TFA/L. The water quality criterion is derived for both freshwater and saltwater organisms on the basis of this value.

According to the TGD (EU 2018), an AF of 10 shall be applied to the lowest EC_{10} or NOEC -value, when data are available for long-term tests at three different trophic levels and data include testing on the most sensitive organism:

$$\text{AA-EQS}_{\text{freshwater}} = 5.59 \text{ mg/L} / 10 = 0.56 \text{ mg/L} = 560 \text{ }\mu\text{g/L}$$

When data are available for long-term tests at three different trophic levels for freshwater and saltwater organisms including testing on the most sensitive organism, an AF of 100 shall be applied to the lowest EC_{10} or NOEC -value:

$$\text{AA-EQS}_{\text{saltwater}} = 5.59 \text{ mg/L} / 100 = 0.056 \text{ mg/L} = 56 \text{ }\mu\text{g/L}$$

MAC-EQS for water

Acute toxicity data have been found for 11 freshwater species: (*Anabaena flos-aquae*, *Chlamydomonas reinhardtii*, *Chlorella vulgaris*, *Desmodesmus subspicatus*, *Microcystis aeruginosa*, *Myriophyllum sibiricum*, *Raphidocelis subcapitata* (*Pseudokirchneriella subcapitata*), *Daphnia magna*, *Danio rerio*, *Lemna gibba*, *Brachionus calyciflorus*), which represents 5 taxonomic groups: algae, invertebrates, fish, aquatic plants and rotifers.

In general, toxicity to aquatic organisms has not been observed in the toxicity studies carried out, i.e., that E(L)C₅₀ is generally stated as “>highest test concentration”, e.g., the study for the freshwater crustacean *Daphnia magna* showed an effect concentration of >999 mg/L and the real effect level on *Daphnia magna* has thus not been determined. However, the test with *Daphnia magna* provides the information that algae are more sensitive than invertebrates to TFA.

Acute toxicity data have also been found for three saltwater algae: *Phaeodactylum tricornutum*, *Dunaliella tertiolecta* and *Skeletonema costatum*, where no toxicity was detected. The most valid acute toxicity study where acute toxicity has been demonstrated is the study with the alga *Raphidocelis subcapitata* (*Pseudokirchneriella subcapitata*), where an acute toxicity of E_rC₅₀ = 237 mg/L was measured.

The dataset is listed in appendix A.

MAC-EQS is derived for freshwater and saltwater organisms based on the highest toxicity for algae experimentally determined with E_rC₅₀ of 237 mg/L for *Pseudokirchneriella subcapitata*. According to the TGD (EU 2018) an AF of 100 shall be applied to the lowest EC/LC₅₀-value when short-term data are available for three trophic levels:

$$\text{MAC-EQS}_{\text{freshwater}} = 237 \text{ mg/L} / 100 = 2.37 \text{ mg/L} = 2370 \text{ }\mu\text{g/L}$$

For MAC-EQS_{saltwater} an AF of 1000 shall be applied to the lowest EC/LC₅₀-value when short-term data are available for three trophic levels:

$$\text{MAC-EQS}_{\text{saltwater}} = 237 \text{ mg/L} / 1000 = 0.237 \text{ mg/L} = 237 \text{ }\mu\text{g/L}$$

QS for sediment

Based on the Log K_{ow} < 3 (0.5) for TFA, the QS for sediment shall not be derived according to the TGD (EU 2018). No test data for the toxicity to benthic organisms have found. Furthermore, the calculated K_{oc} of 6.22 L/kg and the calculated Log K_{OW} of 0.79 indicate a low potential for TFA to be bound to the sediment and as no high toxicity to sediment-living organisms nor to aquatic organisms is expected it is not considered relevant to derive a QS for sediment.

QS for secondary poisoning

No valid data of the bioaccumulation potential (BMF or BCF(BAF)) of TFA have been identified during the literature search. Contrary to many other PFAS-substances, TFA contains only one fully fluorinated carbon, so its behavior in the environment will be governed by its hydrophilic acid group. Furthermore, its environmental behavior is expected to be very similar to the trichloroacetic acid, which has a measured BCF below 10 (REACH registration data for trichloroacetic acid, Klimisch score 4). In addition, TFA is a very strong acid (pK_a ~ 0.32), so it will be fully dissociated at ambient pH.

Overall, it is assessed that the substance has a low potential for bioaccumulation. According to the TGD (EU 2018), it is relevant to derive QS for biota for a substance when Log K_{ow} ≥ 3. Calculated Log K_{ow} for TFA is 0.5 from which it is concluded that a derivation of a QS biota is not relevant.

It is, however, noted at even though TFA is not expected to bioaccumulate, it does have potential to accumulate in the environment, due to its persistent nature. Therefore, birds and mammals may be exposed to TFA continuously. A quality criteria for secondary poisoning via biota ($QS_{\text{sec. pois.}}$) has been derived with the sole purpose of comparison with the AA-EQS (i.e. not to set a $QS_{\text{sec. pois.}}$).

The lowest chronic effect concentration for mammals (rat) is a NOAEL of 8.4 mg/kg bw/day.

Following TGD method A (section 4.4.5.1. in EU 2018) the NOAEL was normalized to energy content, under consideration of the rat body weight (bw), here set to 225 g (0.225 kg), the daily energy expenditure (DEE) and diet concentration on an energy basis ($C_{\text{energy normalized}}$).

$$\text{Log DEE} = 0.8136 + 0.7149 \times \log(\text{bw [g]})$$

$$\text{Log DEE} = 0.8136 + 0.7149 \times \log(225) = 2.4952$$

$$\text{DEE} = 10^{2.4952} = 312.73 \text{ kJ/d}$$

$$C_{\text{energy normalized [mg/kJ]}} = \text{dose} \times (\text{bw/DEE})$$

$$C_{\text{energy normalized [mg/kJ]}} = 8.4 \text{ mg/kg bw/day} \times (0.225 \text{ kg} / 312.73 \text{ kJ/d}) = 0.00604 \text{ mg/kJ}$$

As TFA is not expected to biomagnify, mussels should be chosen as the critical food item, according to TGD (section 4.4.3 in EU, 2018). However, since there are no BCF- or BAF-values available for mussels, the calculations are performed for both fish and mussels.

The energy normalized effect concentration was transformed to a concentration in biota, considering the water content (74% for fish and 92% for mussels) and the energy content (21 kJ/g_{dw} for fish and 19 kJ/g_{dw} for mussels):

$$C_{\text{biota [mg/kg}_{\text{ww}}]} = C_{\text{energy normalized}} \times \text{energy content}_{\text{biota,dw}} \times (1 - \text{water content}_{\text{biota}})$$

$$C_{\text{fish [mg/kg}_{\text{ww}}]} = 0.00604 \text{ mg/kJ} \times 21,000 \text{ kJ/kg} \times (1 - 0.74) = 32.997 \text{ mg/kg}_{\text{ww}}$$

$$C_{\text{mussels [mg/kg}_{\text{ww}}]} = 0.00604 \text{ mg/kJ} \times 19,000 \text{ kJ/kg} \times (1 - 0.92) = 9.186 \text{ mg/kg}_{\text{ww}}$$

Since the effect concentration originates from a sub-chronic study, an assessment factor (AF) of 3 (table 9; EU, 2018) was used to extrapolate to chronic effects and an AF of 10 (table 10; EU, 2018) was used to extrapolate from laboratory to different protection levels:

$$QS_{\text{sec. pois., fish}} = 32.997 \text{ mg/kg} / 3 / 10 = 1.100 \text{ mg/kg}_{\text{ww}} = \mathbf{1100 \mu\text{g/kg}_{\text{ww}}}$$

$$QS_{\text{sec. pois., mussels}} = 9.186 \text{ mg/kg} / 3 / 10 = 0.306 \text{ mg/kg}_{\text{ww}} = \mathbf{306 \mu\text{g/kg}_{\text{ww}}}$$

QS for human health

According to the TGD (EU 2018), a QS for human consumption of fishery products is relevant if the substance has relevant human hazard properties and have a potential to bioaccumulate. The harmonized classification of TFA does not trigger a derivation of QS for human consumption. The self-classification with H302 would do so, if the substance was expected to bioaccumulate. But based on the lack of potential for bioaccumulation, it is normally assumed that the water quality criteria also ensure protection of biota and human consumption of aquatic organisms.

However, due to TFAs potential to accumulate in the environment, continuous human exposure is possible. Since there is also a self-classification with H302, a quality criteria for human consumption of fishery

products ($QS_{\text{human health}}$) has been derived with the sole purpose of comparison with the AA-EQS (i.e. not to set a $QS_{\text{human health}}$).

The calculation of $QS_{\text{human health}}$ is based on the threshold value for human health (DNEL = 0.042 mg/kg/day), the 95th percentile for daily consumption of fish (0.00163 kg/kg/day) and an allocation factor of 20%:

$$QS_{\text{human health}} = (0.2 \times \text{DNEL}) / 0.0163 = (0.2 \cdot 0.042 \text{ mg/kg/day}) / 0.00163 = 5.153 \text{ mg/kg}_{\text{ww}} = \mathbf{5153 \mu\text{g/kg}_{\text{ww}}}$$

QS_{water} based on $QS_{\text{sec. pois.}}$ and $QS_{\text{human health}}$

The QS' derived for biota were converted to water concentrations ($QS_{\text{sec. pois., water}}$ and $QS_{\text{human health, water}}$) to see if the AA-EQS' of 560 $\mu\text{g/L}$ for freshwater and 56 $\mu\text{g/L}$ for saltwater would protect biota.

When converting $QS_{\text{sec. pois.}}$ to water concentrations, BCF for the critical food item is used. However, no experimentally derived BCF or BAF values are available for TFA. Instead, QSAR was used in accordance with the TGD. The calculated BAF for fish of 1.2 L/kg_{ww} and the calculated BCF for fish of 3.16 L/kg_{ww} were normalized to a lipid content of 5%, resulting in a BAF of 0.56 L/kg_{ww} and a BCF of 1.48 L/kg_{ww}. No BAF or BCF values for mussels were available, so the normalized BCF for fish was used in all calculations.

$$QS_{\text{sec. pois., water (fish)}} = 1100 \mu\text{g/kg}_{\text{ww}} / 1.48 \text{ L/kg} = 743 \mu\text{g/L}$$

$$QS_{\text{sec. pois., water (mussels)}} = 306 \mu\text{g/kg}_{\text{ww}} / 1.48 \text{ L/kg} = 207 \mu\text{g/L}$$

$$QS_{\text{human health, water}} = 5153 \mu\text{g/kg fish product}_{\text{ww}} / 1.48 \text{ L/kg} = 3490 \mu\text{g/L}$$

It must be stressed that the calculations are very uncertain, since the BCF (and BAF) values are based on QSAR. But the available data indicate that the AA-EQS' (560 $\mu\text{g/L}$ for freshwater and 56 $\mu\text{g/L}$ for saltwater) does protect predators from secondary poisoning via fish as well as human consumption of fishery products. $QS_{\text{sec. pois., water (mussels)}}$ however indicates that the AA-EQS' for freshwater might not protect predators from secondary poisoning via mussels, but the calculations are based on BCF for fish, so it is not possible to draw any conclusion.

The following EQS' have been derived for TFA:

$$\text{AA-EQS}_{\text{freshwater}} = 560 \mu\text{g/L}$$

$$\text{AA-EQS}_{\text{saltwater}} = 56 \mu\text{g/L}$$

$$\text{MAC-EQS}_{\text{freshwater}} = 2370 \mu\text{g/L}$$

$$\text{MAC-EQS}_{\text{saltwater}} = 237 \mu\text{g/L}$$

$$QS_{\text{sediment, freshwater}} = \text{Not derived}$$

$$QS_{\text{sediment, saltwater}} = \text{Not derived}$$

$$QS_{\text{sec. pois.}} = \text{Not derived}$$

$$QS_{\text{human health}} = \text{Not derived}$$

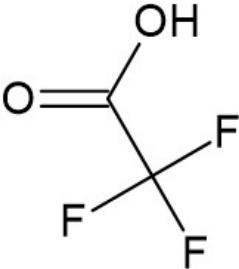
1 Indledning

Nærværende datablad vedrører trifluoreddikesyre (TFA) med CAS nr. 76-05-1. Identiteten af TFA fremgår af Tabel 1.1.

Ifølge REACH registreringen af TFA fremstilles/importeres stoffet i en tonnage på 100 til 1000 tons per år i EU. Den primære anvendelse af TFA oplyses i REACH registreringen til at være for professionelle brugere i formulerede produkter eller ompakning i industrien eller/og i forbindelse med produktion (ECHA, 2022).

Stoffet har flere harmoniserede CLH-klassificeringer, hvoraf én vedrører vandmiljøet (Tabel 1.1); Aquatic Chronic 3 (H412). Ingen selvklassificeringer, foruden H412, har relevans for vandmiljøet. Dog kan selvklassificeringen med H302 have betydning i forbindelse med udledning af et kvalitetskriterie for human konsum af fiskeriprodukter.

Tabel 1.1. Identitet af trifluoreddikesyre (TFA)

IUPAC navn	2,2,2-trifluoracetat
Strukturformel	
CAS nr.	76-05-1
EINECS nr.	200-929-3
Kemisk formel	$C_2HF_3O_2$
SMILES	<chem>O=C(O)C(F)(F)F</chem>
Harmoniseret klassificering	Skin Corr. 1A, H314 (forårsager svære ætsninger af huden og øjenskader) Acute Tox. 4, H332 (farlig ved indånding) Aquatic Chronic 3, H412 (skadelig for vandlevende organismer, med langvarige virkninger)
Selvklassificering	Eye Dam. 1, H318 (forårsager alvorlig øjenskade) Met. Corr. 1, H290 (kan ætse metaller) Acute Tox. 4, H302 (farlig ved indtagelse) Skin Corr. 1A, H314 (forårsager svære ætsninger af huden og øjenskader) Acute Tox. 4, H332 (farlig ved indånding) Aquatic Chronic 3, H412 (skadelig for vandlevende organismer, med langvarige virkninger)

2 Fysisk-kemiske egenskaber

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

Tabel 2.1. Fysisk-kemiske egenskaber for trifluoreddikesyre

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	114,02	EPI Suite 2021 (se bilag B)
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	-15,3 $^{\circ}\text{C}^1$	ECHA, 2022
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	72,2 $^{\circ}\text{C}^1$	ECHA, 2022
Damptryk, P_v (hPa)	124 ²	ECHA, 2022
Henry's konstant, H ($\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)	0,009 ³	ECHA, 2022
Vandopløselighed, S_w ($\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	1520 ²	ECHA, 2022
Dissociationskonstant, pK_a	0,43 ²	ECHA, 2022
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	0,79 ⁴	ECHA, 2022
	0,5	EPI Suite 2021 (se bilag B)
Sediment/vand fordelingskoefficient, normaliseret til organisk karbon, K_{oc} ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)	6,22 ⁵	ECHA, 2022
	3,231 ⁶	EPI Suite 2021 (se bilag B)

¹ ved 1013,25 hPa

² ved 20°C

³ ved 25°C

⁴ estimeret ved 25°C, gennemsnit af 10 estimerede værdier (0,21-1,78), værdi i overensstemmelse med estimeret værdi fra EPI Suite (0,5). Ved miljørelevante pH-værdier vil TFA være på ioniseret form og forventes derfor her at være endnu mindre lipofilt. Dette understøttes af en eksperimentelt udledt $\log K_{ow}$ på -4,1 (der blev set bort fra studiet eftersom TFA var dissocieret under forsøgsbetingelserne, ECHA, 2022) samt værdier estimeret med SPARC-modellen (-0,58 ved pH 5,5 og derover, ECHA, 2022).

⁵ K_{oc} estimeret ved beregning for organiske syrer: $\log K_{oc} = 0,6 \cdot \log K_{ow} + 0,32$. Med $\log K_{ow} = 0,79$ giver dette $\log K_{oc} = 0,794$ (svarende til $K_{oc} = 6,223$).

⁶ K_{oc} estimeret ud fra $\log K_{ow}$ (0,5) med KOCWIN i EPI Suite. Programmet advarer om, at K_{oc} kan variere betydeligt med pH.

TFA falder ind under OECDs definition af PFAS (per- og polyfluoroalkylstoffer), som (med få nævnte undtagelser) omfatter ethvert kemisk stof med mindst én perfluoreret methylgruppe (-CF₃) eller en polyfluoreret methylengruppe (-CF₂-) (OECD, 2021). TFA tilhører gruppen af perfluoroalkyl karboxylsyrer (PFCA, C_(n-1)F_(2n-1)COOH), nærmere præciseret gruppen af kortkædede PFCA (n ≤ 7) (OECD, 2022).

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

Der er ikke observeret nedbrydelighed af TFA i test.

TFA's evne til at undergå fotolyse, hydrolyse og biologisk nedbrydning er vurderet i REACH registreringsdossieret for TFA (ECHA, 2022).

Den mulige reductive og oxidative nedbrydning af TFA blev undersøgt ved fotokatalytiske forsøg. TFA viste sig at være ikke-reaktivt under stort set alle forhold, og det kan ud fra disse forsøg antages at direkte og indirekte fotolyse ikke forventes at være en vigtig omdannelsesproces for TFA i vand og luft (ECHA, 2022).

Der findes ingen standardtest til at undersøge nedbrydningen af TFA ved reaktion med vand. Dog forventes TFA's hydrolysepotentiale at være lavt baseret på stoffets kemiske struktur med ekstremt stabile karbon-fluor-bindinger samt den observerede stabilitet af TFA under standard bionedbrydning- og økotoxikologiske tests. Derudover bekræftes denne antagelse af indledende resultater af ikke-standard tests (ECHA, 2022).

I REACH registreringsdossieret er der foretaget et read-across studie til natriumtrifluoreddikesyre, da der ikke er tilgængelige eksperimentelle data for biologisk nedbrydelighed af TFA (ECHA (2022) for CAS nr. 76-05-1).

Der er ikke observeret nogen biologisk nedbrydelighed, hverken i closed-bottle-test for let bionedbrydelighed efter OECD 301D eller i en modificeret Semi-Continuous Activated Sludge (SCAS) test på potentiel bionedbrydelighed efter OECD 302A. Natriumtrifluoreddikesyre er således karakteriseret som ikke biologisk nedbrydeligt.

Resultaterne er i overensstemmelse med data opnået i et ikke GLP-studie, som blev udført med ¹⁴C-TFA for at kontrollere aerobe bakteriestammers evne til at nedbryde TFA. I studiet blev det vist, at ingen af de ni bakteriestammer er i stand til at metabolisere TFA (ECHA, 2022).

Den biologiske nedbrydning af TFA er ligeledes undersøgt i forbindelse med registreringen af pesticidaktivstofferne flufenacet (CAS: 142459-58-3) og flurtamon (CAS: 96525-23-4), som begge danner TFA ved nedbrydning. I både genregistreringsrapporten for flufenacet (flufenacet dRAR, 2017) og i EFSA's konklusion på flurtamon (EFSA, 2017) angives laboratorietests, som viser, at TFA stort set ikke nedbrydes i jord.

Det kan konkluderes at TFA er meget modstandsdygtigt overfor abiotisk og biotisk nedbrydning, og sammen med stoffets ekstreme kemiske stabilitet antyder disse resultater en meget lang levetid for TFA i miljøet (ECHA, 2022).

3.2 Adsorption og mobilitet

TFA er en stærk syre med en pKa på 0,3. Ved de miljørelevante pH-værdier (5-9), vil stoffet derfor primært være på den ioniserede form som trifluoroacetat (>99%).

En eksperimentielt baseret Henry's Lov's konstant på 0,009 Pa m³/mol ved 25 °C og 1013,25 hPa (se Tabel 2.1) viser, at TFA har en ringe tendens til at fordampe fra vandfasen. Da stoffet tillige har en lav estimeret log K_{ow} og K_{OC}, forventes stoffet primært at fordele sig til vandfaserne i de forskellige miljørum (jord, sediment, vandsøjle).

I REACH registreringsdossieret er TFAs adsorption til jord vurderet. En adsorptions-screeningtest udført i overensstemmelse med OECD-vejledning 106 viste at TFA-anionen adsorberes i ringe grad til jord (ECHA, 2022). Derudover viste et ikke-standard studie K_d-værdier for TFA på 0,19-20 l/kg med øget adsorptionen ved lavere pH-værdier og mindsket adsorption ved øgede koncentrationer af konkurrerende anioner. TFA kunne kategoriseres som mobilt i størstedelen af de undersøgte jorder.

Derudover blev TFA i et feltstudie tilført til oplandsskov og vådområde (Likens et al., 1997). Resultaterne viste, at mere end 70% af det tilførte TFA blev eksporteret fra oplandsskoven via drænvand, mens resten blev tilbageholdt i organisk overfladejord (10-20%) og vegetation (5-20%). I modsætning hertil blev mindre end 5% af det tilførte TFA transporteret ud af vådområdet via drænvand. Her blev en betydelig andel tilbageholdt i jord (20-60%) og vegetation (20-50%) (Likens et al., 1997).

I genregistreringsrapporten for flufenacet (flufenacet dRAR, 2017) og i EFSA's konklusion på flurtamon (EFSA, 2017) blev der i laboratorietests stort set ikke målt adsorption af TFA i jord. Dette understøttes af et column leaching-studie i jord, som heller ikke viste nævneværdig adsorption af TFA.

Samlet set vurderes det, at TFA primært vil forekomme i vandfasen og at stoffet kun meget langsomt – om overhovedet - vil kunne nedbrydes biologisk. Det kan ligeledes nævnes, at TFA sandsynligvis opfylder kriterierne for klassificering som et meget persistent og meget mobilt (vPvM) stof.

3.3 Bioakkumulering

Der er ikke identificeret eksperimentelle data for bioakkumulering af TFA.

TFAs affinitet for organiske stoffer er lav (log K_{ow} = 0,79), og stoffet anses ikke for at være bioakkumulerbart. Danish (Q)SAR Database (2021) angiver en BCF-værdi på 3,2 baseret på log K_{ow} på 0,5 (estimeret i EPI Suite).

En BMF > 1 eller BCF ≥ 100 anvendes som indikator for om et stof har et bioakkumuleringspotentiale (TGD, 2018). Disse kriterier er især relevante for hydrofobe stoffer, som akkumuleres i fedtvæv. Log K_{ow} anvendes ligeledes som indikation for bioakkumuleringspotentiale, da værdien er et estimat for neutrale organiske stoffers fordeling mellem vand og fedtvæv i organismer. Dog er det ikke helt så ligetil at anvende log K_{ow} for overfladeaktive og ioniserende organiske stoffer (Ankley et al., 2021). Når det kommer til organiske ioner, er oktanol ikke nødvendigvis en egnet repræsentant for biologiske matricer, eftersom organiske ioner kan have en relativt høj affinitet til membranlipider, selvom de ikke udviser nævneværdig affinitet for fedtvæv, og eftersom anioner ofte har højere affinitet til proteiner end deres neutrale modstykker (Escher et al., 2020).

Ligeledes er det generelt kompliceret at estimere det forventede bioakkumuleringspotentiale af PFAS, eftersom disse ofte har forskellige egenskaber (oleofobicitet, hydrofobicitet og hydrofilicitet) forskellige steder på molekylet. Dog indeholder TFA i modsætning til de fleste PFAS kun ét fuldt fluoreret kulstof, hvorfor dets adfærd i miljøet vil være mere styret af dets hydrofile syregruppe. Desuden forventes stoffets miljøadfærd at være meget lig trichloreddikesyre, som har en målt BCF under 10 (REACH registreringsdata for trichloreddikesyre). Derudover er TFA en meget stærk syre (pK_a ~ 0,3), så den vil være fuldstændig dissociert ved omgivende pH'er. Stoffet forventes derfor til at have et lavt potentiale for bioakkumulering.

Eftersom TFA strukturelt ligner acetat, er det muligt at organismer kan anvende TFA til syntese af biomolekyler. Standley og Bott (1998) undersøgte vandlevende organismers evne til at inkorporere TFA, og resultaterne viste, at visse vandlevende organismer, fra flere forskellige trofiske niveauer, inkorporerede radiomærket stof i biomolekyler, når de blev eksponeret til ^{14}C -mærket TFA. Inkorporeringen af ^{14}C var generelt meget lav, men indikerede at optag af TFA kan ske gennem omdannelse til biomolekyler som fedt, protein og cellevægsmateriale.

TFA kan derudover optages af planter og derigennem finde vej ind i fødekæden. Et studie af hvedes optag af perfluoroalkylsyrer (Zhang et al., 2019) indikerede, at TFA hovedsagligt optages af rødderne ved aktive transportprocesser, og at anionkanaler også indgår i processen. Eksponeringen forløb over 80 timer, og hvedeplanternes optag af TFA fortsatte over hele perioden uden at vise tegn på at nå et steady-state. Ved slutningen af eksponeringen var TFA-koncentrationen også relativt høj i rødderne i forhold til skuddene, hvilket sandsynligvis skyldtes den korte eksponeringstid (Zhang et al., 2019). Koncentrationen i rødderne nåede 175 mg/kg, hvilket svarede til en rodkoncentrationsfaktor (koncentration i rødder i fht. koncentration i næringsopløsning) på ca. 1620 (aflæst fra graf), mens koncentrationen i skuddene nåede 116 mg/kg svarende til en skudkoncentrationsfaktor (koncentration i skud i fht. koncentration i næringsopløsning) på ca. 1075 (aflæst fra graf).

I REACH registreringsdossieret (ECHA, 2022) er det angivet, at TFA kan akkumuleres i fyrretræer, tomatplanter (op til en koncentration på 10-20 $\mu\text{mol/g}$ vådvægt), hvede (BCF = 43) og solsikke (BCF = 5-20). Ligeledes viste studiet af Likens et al. (1997), som er nævnt ovenfor, at TFA tilført eksperimentelt til oplandsskov og vådområde blev optaget af og tilbageholdt i vegetation. Den højeste koncentration af TFA i vegetation ($79,80 \pm 15,8 \mu\text{g/g}$) blev målt i vådområdet i bladene på en sribet løn, som havde fået tilført 500 mg/m^2 TFA til jorden direkte under træet. BCF-værdier blev beregnet for sukkerløn (*Acer saccharum*, vådområde, BCF = 8), sribet løn (*Acer pensylvanicum*, vådområde, BCF = 32) og amerikansk bøg (*Fagus grandifolia*, oplandsskov, BCF = 10) (Likens et al., 1997).

En undersøgelse af TFA-koncentrationer i plantebaserede fødevarer fra 55 forskellige lande (heraf 15 EU-medlemslande) viste hyppige fund af TFA i bl.a. grøntsager, korn og bælgfrugter (EURL-SRM, 2017). Derudover viste et studie af Scheurer og Nödler (2021), at TFA let ekstraheres fra malt ved brygning af øl og også ekstraheres ved brygning af te, samt at TFA findes hyppigt i disse produkter. I 104 øl-prøver fra 23 lande blev TFA målt i koncentrationer op til 51 $\mu\text{g/l}$ (median 6,1 $\mu\text{g/l}$), og TFA blev også fundet i te med en median koncentration på 2,4 $\mu\text{g/l}$ (Scheurer og Nödler, 2021).

Selvom TFAs bioakkumuleringspotentiale forventes at være lavt, er der i et studie af Duan et al. (2020) fundet relativt høje niveauer af TFA i humant serum. Studiet undersøgte indholdet af 21 forskellige PFAS i serumprøver fra 252 deltagere fra Tianjin i Kina. De fundne koncentrationer af TFA i humant serum (median 8,46 ng/ml) antyder en udbredt eksponering for TFA. Selvom TFA er meget vandopløseligt, sås der en signifikant positiv korrelation mellem TFA-koncentration og alder (deltageralder fra 19 til 87 år) (Duan et al., 2020). Mulige mekanismer for bioakkumulering af TFA i mennesker er endnu ikke undersøgt, men selvom TFA ikke er bioakkumulerende i traditionel forstand, tyder de høje niveauer i mennesker på relativt høj grad af eksponering.

3.4 Forekomst i miljøet

TFA kan betragtes som et derivat af eddikesyre og anvendes bl.a. som en stærk ikke-oxiderende syre, laboratoriereagens, opløsningsmiddel, katalysator og i organisk syntese, da det er velegnet til at opløse protein, når det blandes med flydende SO_2 (PubChem 2021).

Stoffer, som udledes til miljøet og derefter nedbrydes til TFA, lader til at have stor betydning for forekomsten af TFA i miljøet. TFA kan i princippet dannes ud fra alle kemiske stoffer med en C-CF₃-gruppe, og der kendes på nuværende tidspunkt næsten 2000 potentielle udgangsstoffer (UBA, 2021).

Videnskabelige undersøgelser fra Tyskland, Kina og USA peger på, at TFA kan dannes som et nedbrydningsprodukt fra fluorerede kølemidler (f.eks. HFC gasser), der anvendes i klimaanlæg, køleanlæg og varmepumper (EFCTS 2021). Disse stoffer kan nedbrydes til TFA i atmosfæren og derefter via regnvandet blive fordelt til overfladevand og jord, hvorfra det kan sive ned til grundvandet. Dette understøttes af, at TFA er fundet i regnvand. Det kan også nævnes, at fordampede hydrofluorolefiner (HFO) nedbrydes i atmosfæren ved fotokemiske reaktioner til TFA.

Mulige udgangsstoffer for TFA omfatter desuden plantebeskyttelsesmidler, biocider og lægemidler (UBA, 2021). I jord, vand og sediment kan visse kemiske stoffer nedbrydes til TFA via biologiske processer, fotolyse eller hydrolyse (UBA, 2021; Scheurer et al., 2017).

Et review-studie fra 2016 (Solomon et al., 2016) konkluderede, at TFA i overfladevand sandsynligvis stammer fra menneskeskabte kilder, men at en stor andel af de TFA-salte, der findes i havet, er fra naturlig oprindelse. Et nyere studie (Joudan et al., 2021) sætter dog spørgsmålstegn ved dette. Joudan et al. (2021) kritiserer de anvendte metoder og påpeger desuden at fund af TFA i dybhavet ikke i sig selv retfærdiggør antagelsen om en naturlig kilde til TFA, samt at den menneskeskabte andel af TFA ikke kan estimeres ud fra en massebalance-tilgang, eftersom kilderne til TFA har så bredt et spektrum og endnu ikke kendes til bunds.

Det kommenteres ligeledes i REACH-registreringsdossieret, at TFA er tilstede i det globale miljø i en størrelsesorden, som overstiger, hvad der kan forklares med de industrielle processer og kemikalier, der indtil videre tages i betragtning, og overstiger også, hvad der kan forventes som følge af produktion af HFC. Dette antyder, at der er ukendte kilder til TFA. Dog er det uvist om disse kilder er menneskeskabte eller om naturlige geologiske eller biogene processer også er involveret (ECHA, 2022).

I Europa er TFA målt i prøver af regnvand (<0,2-850 ng/l), overfladevand (<0,2-280 ng/l), tågekondensat (2154 ng/l), drikkevand (<0,2-450 ng/l) og luft (<3,3-3230 ng/l). Havvand har vist sig at indeholde koncentrationer fra 0,5 ng/l til 250 ng/l (ECHA, 2022).

I Danmark er der i grundvandsovervågningen fundet TFA i prøver fordelt over hele landet (Miljøstyrelsen, 2021). I 2020 blev TFA i forbindelse med en screening fundet i 88,7% af de analyserede indtag (219 ud af 247 indtag). En analyse af TFA-koncentrationerne viser, at der findes højere koncentrationer i yngre grundvand, hvilket understøtter antagelsen om, at TFA stammer fra diffus atmosfærisk deposition. Dog ligger koncentrationerne i en del indtag med yngre grundvand noget over de niveauer, som er målt i regnvand, hvilket indikerer, at der også findes mere lokale kilder til TFA (GEUS, 2023).

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 sedimentlevende 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's Guidance Document no. 27: Technical Guidance Document (TGD) for Deriving Environmental Quality Standards (EU 2018).

4.1 Toksicitet over for vandlevende organismer

De fundne effektkoncentrationer over for vandlevende organismer er sammenstillet i bilag A.

Der er fundet valide akutte toksicitetsdata for 11 ferskvandslevende arter: *Anabaena flos-aquae*, *Chlamydomonas reinhardtii*, *Chlorella vulgaris*, *Desmodesmus subspicatus*, *Microcystis aeruginosa*, *Myriophyllum sibiricum*, *Raphidocelis subcapitata* (*Pseudokirchneriella subcapitata*), *Daphnia magna*, *Danio rerio*, *Lemna gibba*, *Brachionus calyciflorus*, som repræsenterer 5 taksonomiske grupper: alger, krebsdyr, fisk, vandplanter og hjuldyr.

Når der ses bort fra algestudier med effekt på biomasse, er der generelt ikke observeret en toksicitet over for vandlevende organismer i de udførte toksicitetsstudier, dvs. at E(L)C₅₀ generelt er angivet som >højeste testkoncentration. Studiet for ferskvandskrebsdyret *Daphnia magna* angiver f.eks. en effektkoncentration på >999 mg/L og det reelle effektniveau på *Daphnia magna* er således ikke fastlagt. Testen med *Daphnia magna* giver dog den information, at alger er mere følsomme end krebsdyr over for TFA. Der er påvist akut toksicitet over for hjuldyret *Brachionus calyciflorus*, men studiet er ikke gennemført efter en guideline, hvorfor dette studie betragtes alene som et supplerende studie.

Der er videre fundet akut toksicitetsdata for tre saltvandslevende alger: *Phaeodactylum tricornerutum*, *Dunaliella tertiolecta* og *Skeletonema costatum*, hvor der ikke blev påvist en toksicitet.

Videre, er der udført en række teststudier med forskellige alger, hvoraf de fleste studier er udført som limit test. Det vurderes, at det mest valide akutte toksicitetsstudie, hvor der er påvist en akut toksicitet, er studiet med algen *Raphidocelis subcapitata* (*Pseudokirchneriella subcapitata*), hvor der blev målt en akut toksicitet på E_rC₅₀ = 237 mg/L.

Der er videre fundet kroniske data for otte ferskvandslevende arter: *Anabaena flos-aquae*, *Chlorella vulgaris*, *Myriophyllum sibiricum*, *Raphidocelis subcapitata* (*Pseudokirchneriella subcapitata*), *Daphnia magna*, *Gobiocypris rarus*, *Lemna gibba*, *Brachionus calyciflorus*, som repræsenterer 5 taksonomiske grupper: alger, krebsdyr, fisk, vandplanter og hjuldyr.

Studiet for ferskvandskrebsdyret *Daphnia magna* anfører en effektkoncentration ≥ 25 mg/L, som anvendes som supplerende data, ligesom langtidsstudiet med fisken *Gobiocypris rarus* er angivet som NOEC $\geq 3,8$ mg/L. Det skal nævnes, at der videre er angivet en kronisk NOEC på 1 mg/L for hjuldyret *Brachionus calyciflorus*, men da der kun er udført test ved den ene koncentration, vurderes det ikke relevant at anvende til bestemmelse af vandkvalitetskriteriet.

Der er fundet kronisk toksicitetsdata for tre saltvandslevende alger: *Phaeodactylum tricorutum*, *Dunaliella tertiolecta* og *Skeletonema costatum*. Den laveste påviste kroniske toksicitet er for algen *Raphidocelis subcapitata* (*Pseudokirchneriella subcapitata*), hvor der blev målt en kronisk toksicitet på $E_rC_{10} = 5,59$ mg/L.

Af datasættet fremgår det, at alger har vist sig at være den mest følsomme art over for TFA i ferskvand. Da der ikke er fundet toksicitetsdata for saltvandslevende krebsdyr og fisk, kan det ikke afgøres, om alger er de mest følsomme over for TFA i saltvand.

4.2 Toksicitet over for sedimentlevende organismer

Der er ikke fundet toksicitetsdata over for sedimentlevende organismer.

4.3 Toksicitet over for pattedyr og fugle

I REACH registreringsdossieret (ECHA, 2022) er der rapporteret et sub-kronisk studie og et reproduktionsstudie, begge med rotter. Resultaterne af studierne fremgår af Tabel 4.1. Toksicitetsstudier for fugle er ikke identificeret.

Tabel 4.1. Toksicitet over for pattedyr (ECHA, 2022)

Specie	Form	Varighed	Effekter	Endpoint	Bemærkning	Reference
Rotte	NaTFA	90 d	Klinisk biokemi, hæmatologi, organvægt og organ/kropsvægt-forhold	NOAEL: 8,4 mg/kg lgv/dag (hanner) ^a	Sub-kronisk, OECD Guideline 408, GLP, oral administration	Unavngivet, 2007
Rotte	NaTFA	F0-generation: 10 uger F1-generation: fra afvænning til en alder på ca. 13-14 uger.	Levedygtighed, kropsvægt, fødeindtag, klinisk patologi, østrocyclus, sperm-parametre, fertilitetsdata, drægtighedsperiode, fødselsobservation, vurdering af kuld og udvikling, klinisk patologi, thyroideahormon, milt-lymfocytter, obduktion, organvægt og histopatologi.	NOAEL: 202,9 mg/kg lgv/dag ^b	OECD Guideline 443, GLP, oral administration	Unavngivet, 2022

^a Baseret på de observerede effekter (øget levervægt, histopatologiske ændringer af leveren, samt ændringer i hæmatologiske parametre, klinisk biokemi og urinanalyse) blev NOAEL sat til 160 ppm for både hanner og hunner, hvilket svarer til ca. 10 mg NaTFA/kg lgv/dag eller 8,4 mg TFA/kg lgv/dag for hanner og 12 mg NaTFA/kg lgv/dag eller 10,1 mgTFA /kg lgv/dag for hunner.

^b Baseret på de tilgængelige resultater blev NOAEL sat til 3000 ppm (svarende til ca. 242-265 mg NaTFA/kg lgv/dag eller 202,9-222,2 mg TFA/kg lgv/dag) for både reproduktion/ungeludvikling og for generel systemisk toksicitet. Der sås behandlingsrelaterede effekter på kropsvægtsstigning, hæmatologiske parametre, klinisk biokemi (basisk fosfatase-aktivitet, plasmaglukoseniveau, niveau af ikke-esterificerede fedtsyrer, triglycerid, bilirubin, T4-hormon), histopatologi (kirteludvidelse i den fundiske del af maven) samt levervægt. Men eftersom der ikke sås nogen effekt på f.eks. levedygtighed, fødeoptag og reproduktion, og eftersom der ikke blev observeret relaterede effekter som leverpatologi, ændret nyrevægt eller urinsammensætning, eller ændringer i kønsorganer, ansås disse effekter ikke at være betydelige i dette studie.

En sammenlignelig 90-dages NOAEL for oral toksicitet på 10 mg/kg lgv/dag (for hanrotter) angives for TFA i draft RAR for hhv. flufenacet (2017) og fluazinam (2019) samt EFSA (2014) og opdateret peer review for flurtamon (EFSA, 2017). Disse kilder angiver desuden NOAEL for udviklingstoksicitet på 75-150 mg/kg lgv/dag for moderdyr og 150 mg/kg lgv/dag for fostre (rotter).

4.4 Toksicitet over for mennesker

Gennem vurdering af pesticidaktivstofferne fluazinam (draft RAR, 2019), flufenacet (draft RAR, 2017), flurtamon (EFSA, 2017) og saflufenacil (EFSA, 2014) er der foreslået et acceptabelt dagligt indtag (ADI) på 0,05 mg/kg lgv/dag for TFA som nedbrydningsprodukt. Denne baseres på NOAEL på 10 mg/kg lgv/dag fra det subkroniske studie (se afsnit 4.3) og en ekstra usikkerhedsfaktor (UF) på 2 for ekstrapolering til kronisk eksponering (der anvendes således en samlet faktor på 200).

I registreringsdossieret for TFA (ECHA, 2022) anvendes NOAEL 8,4 mg/kg lgv/dag (se tabel 4.1) til udledning af DNEL. Der anvendes her ligeledes en samlet UF på 200, der tager højde for forskelle mellem

individer, forskelle mellem arter og ekstrapolering fra subkronisk til kronisk eksponering. Der udledes således en DNEL på 0,042 mg/kg lgv/dag.

Der er i Danmark fastsat et kvalitetskrav for drikkevand på 9 µg/l for TFA (jf. Drikkevandsbekendtgørelsen, 2023).

Bil et al. (2021) har udledt relative potensfaktorer (RPF, relateret til indeksstoffet PFOA)¹ for en række PFAS baseret på stigning i relativ levervægt. I forlængelse heraf har RIVM (2023) udledt en tilsvarende RPF for TFA med henblik på udledning af et kvalitetskriterie for drikkevand. Effekten af TFA på levervægt forekommer ved højere doser end mange andre PFAS, men de sammenlignelige effekter og de parallelle dosis-responskurver for TFA og de andre undersøgte PFAS indikerer, at deres kombinerede effekt kan estimeres ved dosis-addition. RPF for TFA angives til 0,002 (90% konfidensinterval: 0,0017-0,0031) sammenlignet med indeksstoffet PFOA (RIVM, 2023). RIVM noterer dog, at eftersom der ikke er tilgængelige immunotoksikologiske undersøgelser for TFA, kan immunotoksicitet ved lav eksponering ikke udelukkes på nuværende tidspunkt.

¹ Relative potensfaktorer (RPF) er den toksikologiske potens af en gruppe stoffer relateret til den toksikologiske potens af et indeksstof. En lavere potens sammenlignet med indeksstoffet svarer til en RPF < 1, mens en større potens svarer til RPF > 1. RPF anvendes til at vurdere risikoen forbundet med en blanding af stoffer, hvor kvantiteten af de individuelle stoffer omregnes til indeksstof-ækvivalenter ved multiplikation med det enkelte stofs RPF. RPF-metoden kan anvendes, når en gruppe af stoffer resulterer i samme toksikologiske effekt og når effekten kun adskiller sig i potens (dosis-responskurver er parallelle og har samme form) (Bil et al., 2021).

5 Andre effekter

Det er vurderet, at TFA ikke har 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)

6.1.1 Ferskvand

Datasættet for ferskvand består af eksperimentelle data fra langtidsstudier. Der er fundet kroniske data for alger, krebsdyr, fisk, vandplanter, hjuldyr. Alger er vurderet til at være den mest følsomme organisme over for TFA.

Da der kun er fundet kroniske data på 5 forskellige arter, er der ikke tilstrækkelige data og taksonomiske grupper nok repræsenteret til at anvende SSD (Species Sensitivity Distribution) metoden. Metoden kræver jævnfør TGD (EU 2018) minimum 10 forskellige arter fordelt på minimum 8 taksonomiske grupper. Derfor anvendes den deterministiske metode med anvendelse af usikkerhedsfaktorer til udledning af vandkvalitetskriterier for TFA.

Data fra langtidsstest viser den højeste giftighed over for grønalger med den laveste EC₁₀-værdi på 5,59 mg TFA/L for *Pseudokirchneriella subcapitata*. Vandkvalitetskriteriet for ferskvandsorganismer udledes på baggrund af denne værdi.

Jævnfør TGD (EU 2018) kan der anvendes en usikkerhedsfaktor (UF) på 10 på den laveste EC₁₀- eller NOEC-værdi, hvis der er data tilgængeligt for langtidsstest på tre forskellige trofiske niveauer.

Herved beregnes VKK for ferskvand:

$$\text{VKK}_{\text{ferskvand}} = 5,59 \text{ mg/L} / 10 = 0,56 \text{ mg/L} = 560 \text{ } \mu\text{g/L}$$

6.1.2 Saltvand

Der er kun fundet testdata for saltvandslevende alger, hvor der ikke blev påvist en toksicitet. Derfor udledes vandkvalitetskriteriet for saltvandsorganismer på baggrund af giftigheden af TFA over for ferskvandsalger, som er bestemt med en EC₁₀ på 5,59 mg TFA/L.

For udledning af vandkvalitetskriteriet for saltvand, kan der jævnfør TGD (EU 2018) anvendes en UF på 100 på den laveste EC₁₀- eller NOEC-værdi, hvis der er data tilgængeligt for langtidsstest med ferskvands- og saltvandsorganismer på tre forskellige trofiske niveauer og data.

Herved beregnes VKK for saltvand:

$$\text{VKK}_{\text{saltvand}} = 5,59 \text{ mg/L} / 100 = 0,056 \text{ mg/L} = 56,0 \text{ } \mu\text{g/L}$$

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

6.2.1 Ferskvand

Der er akutte data for både alger, vandplanter, krebsdyr, hjuldyr og fisk, hvor alger er fundet til at være klart den mest følsomme organisme. For akut giftighed for ferskvandsorganismer er den mest valide og højeste giftighed fundet for alger med en EC₅₀ på 237 mg/L. Korttidsvandkvalitetskriterier for ferskvandsorganismer udledes på baggrund af denne værdi.

Jævnfør TGD (EU 2018) skal der anvendes en UF på 100 på den laveste EC/LC₅₀-værdi ved data tilgængeligt for korttidstest på de tre trofiske niveauer fisk, krebsdyr og alger. Der er mulighed for at ændre denne til 10, hvis standardafvigelsen mellem log₁₀ af data for de forskellige trofiske niveau er mindre end 0,5. Da dette ikke er tilfældet for data på TFA, benyttes en UF på 100. Herved beregnes KVKK for ferskvand:

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 237 \text{ mg/L} / 100 = 2,37 \text{ mg/L} = 2370 \text{ } \mu\text{g/L}$$

6.2.2 Saltvand

Der er ikke fundet testdata for saltvandsorganismer. Derfor udledes vandkvalitetskriteriet for saltvand på baggrund af akut giftighed bestemt for ferskvandsalger på EC₅₀ på 237 mg/L.

Jævnfør TGD (EU 2018) anvendes der en UF på 1000 på den laveste EC/LC₅₀-værdi ved data tilgængeligt for korttidstest på de tre trofiske niveauer fisk, krebsdyr og alger, hvorved KVKK for saltvand beregnes:

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 237 \text{ mg/L} / 1000 = 0,237 \text{ mg/L} = 237 \text{ } \mu\text{g/L}$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Ifølge TGD (2018) er det relevant at udlede et sedimentkvalitetskriterium (SKK), hvis et stof forventes at akkumulere i sediment, dvs. $\log K_{OC} \geq 3$, $\log K_{OW} \geq 3$ eller akkumuleringsdata fra monitoring, eller hvis stoffet udviser høj grad af toksicitet overfor vandlevende eller sedimentlevende organismer.

TFA's beregnede K_{OC} er på 6,22 l/kg, og den beregnede $\log K_{OW}$ er på 0,79, hvorfor TFA har et lavt potentiale for at blive bundet til sedimentet.

Videre er der ikke mistanke om høj toksicitet over for sedimentlevende organismer, hvorfor det ikke vurderes relevant at beregne et SKK. En høj toksicitet overfor vandlevende organismer er også en trigger for udledning af et sedimentkriterie, men da TFA kun har en harmoniseret klassificering med Aquatic Chronic 3, er det samlet set vurderet ikke at være relevant at udlede et kriterie for sediment.

6.4 Kvalitetskriterium for biota, sekundær forgiftning (BKK_{sek.forgiftn.})

Ifølge TGD (2018) er det relevant at udlede et biotakvalitetskriterium for sekundær forgiftning gennem fødekæden (BKK_{sek.forgiftn.}), hvis et stof forventes at bioakkumulere, dvs. $BMF > 1$, $BCF \geq 100$, $\log K_{OW} \geq 3$ eller andre indikationer på bioakkumulering (f.eks. målt i biota), eller hvis stoffet udviser høj grad af toksicitet overfor pattedyr eller fugle.

Der foreligger ikke valide værdier for TFAs bioakkumuleringspotentiale (BMF, BCF eller BAF). I modsætning til mange andre PFAS-stoffer, indeholder TFA kun ét fuldt fluoreret kulstof, så dets adfærd i miljøet vil være mere styret af dets hydrofile syregruppe. Desuden forventes dets miljøadfærd at være meget sammenlignelig med miljøadfærd for trichloreddikesyre, som har en målt BCF under 10 (REACH registreringsdata for trichloreddikesyre). Videre er TFA en stærk syre ($pK_a \sim 0,3$), så den vil være fuldstændig dissocieret ved omgivelsernes pH. Der er beregnet en $\log K_{ow}$ på 0,5 for TFA, hvilket er under triggerværdien på 3. En estimeret BCF er hertil angivet til 3,2. TFA vurderes derfor at have et lavt potentiale for bioakkumulering.

Eftersom TFA ikke forventes at bioakkumulere, vil det normalt antages at vandkvalitetskriterierne også sikrer beskyttelse af pattedyr og fugle ved sekundær forgiftning gennem fødekæden, og det vil derfor ikke anses for relevant at udlede et biotakvilitetskriterium. Dog har TFA grundet dets ringe nedbrydelighed potentiale til akkumulering i miljøet, hvorved pattedyr og fugle kan udsættes for kontinuerlig eksponering. Derfor udregnes et kriterie for sekundær forgiftning (BKK), som i nuværende datablad alene anvendes til sammenligning med de udledte vandkvalitetskriterier (jf. afsnit 6.1)

Som angivet i afsnit 4.3, er den laveste kroniske effektkoncentration for pattedyr (rotte) en NOAEL på 8,4 mg/kg lgv/dag. Effektkoncentrationen energinormaliseres ved brug af metode A, da effektkoncentrationen på 8,4 mg/kg lgv/dag er angivet i daglig dosis (EU, 2018, s. 85). Først beregnes det daglige energibehov (DEE) ved følgende formel:

$$\text{Log DEE} = 0,8136 + 0,7149 \cdot \log(\text{lgv [g]})$$

Vægten for rotten er angivet til 225-259 g ved forsøgets begyndelse (ECHA, 2022), og en vægt på 225 g anvendes derfor konservativt i beregningerne.

$$\begin{aligned} \text{Log DEE} &= 0,8136 + 0,7149 \cdot \log(225) = 2,4952 \\ \text{DEE} &= 10^{2,4952} = 312,73 \text{ kJ/d} \end{aligned}$$

Det daglige energibehov anvendes til at energinormalisere effektkoncentrationen, hvor følgende formel anvendes (med angivelse af legemsvægt i kilogram):

$$\begin{aligned} K_{\text{energinormaliseret}} [\text{mg/kJ}] &= \text{dosis} \cdot (\text{lgv}/\text{DEE}) \\ K_{\text{energinormaliseret}} [\text{mg/kJ}] &= 8,4 \text{ mg/kg lgv/d} \cdot (0,225 \text{ kg} / 312,73 \text{ kJ/d}) = 0,00604 \text{ mg/kJ} \end{aligned}$$

Eftersom TFA ikke forventes at biomagnificere, bør musling vælges som det kritiske fødeemne jf. TGD (EU, 2018, s. 82). Dog er der ingen BCF- eller BAF-værdier tilgængeligt for musling, hvorfor beregningerne foretages for både fisk og musling.

Den energinormaliserede effektkoncentration omregnes til en koncentration i det kritiske fødeemne, hvor der tages højde for vandindholdet (92% for musling, 74% for fisk) og energiindholdet (19.000 kJ/kg_{iv} for musling, 21.000 kJ/kg_{iv} for fisk). Følgende formel anvendes til beregningen:

$$K_{\text{fødeemne}} [\text{mg/kg}_{\text{vv}}] = K_{\text{energinormaliseret}} \cdot \text{energiindhold}_{\text{fødeemne, tv}} \cdot (1 - \text{vandindhold}_{\text{fødeemne}})$$

$$\begin{aligned} K_{\text{fisk}} [\text{mg/kg}_{\text{vv}}] &= 0,00604 \text{ mg/kJ} \cdot 21.000 \text{ kJ/kg} \cdot (1 - 0,74) = 32,997 \text{ mg/kg}_{\text{vv}} \\ K_{\text{musling}} [\text{mg/kg}_{\text{vv}}] &= 0,00604 \text{ mg/kJ} \cdot 19.000 \text{ kJ/kg} \cdot (1 - 0,92) = 9,186 \text{ mg/kg}_{\text{vv}} \end{aligned}$$

Effektkoncentration stammer fra et studie med en varighed på 90 dage, hvorfor studiet betragtes som værende subkronisk, og der anvendes en ekstrapoleringsfaktor på 3 jf. EU-vejledningens tabel 9 (EU, 2018, s. 88). Der anvendes endvidere en usikkerhedsfaktor på 10 (tabel 10) til at ekstrapolere fra laboratorieforsøg til miljøet (EU, 2018, s. 89):

$$\text{BKK}_{\text{fisk,vv}} = 32,997 \text{ mg/kg} / 3 / 10 = 1,100 \text{ mg/kg} = 1100 \text{ } \mu\text{g/kg}_{\text{vv}}$$

$$\text{BKK}_{\text{musling,vv}} = 9,186 \text{ mg/kg} / 3 / 10 = 0,306 \text{ mg/kg} = 306 \text{ } \mu\text{g/kg}_{\text{vv}}$$

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Et kvalitetskriterie for human konsum af fiskeriprodukter er i følge TGD (EU 2018) relevant at udlede, hvis stoffet har relevante humanfareegenskaber (nærmere specificeret i TGD afsnit 2.4.3.2 (EU 2018)). 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.

Den harmoniserede klassificering af TFA udløser ikke, at der skal udledes et HKK. Selvklassificeringen med H302 ville udløse udledningen af et HKK, hvis stoffet samtidig havde potentiale til bioakkumulering. Men eftersom TFA ikke forventes at bioakkumulere, vil det normalt antages at vandkvalitetskriterierne også sikrer beskyttelse af mennesker ved konsum af vandlevende organismer, og det vil derfor ikke anses for relevant at udlede et kriterium for konsum af fiskeriprodukter.

Dog har TFA grundet dets ringe nedbrydelighed potentiale til akkumulering i miljøet, hvorved mennesker kan udsættes for kontinuerlig eksponering. Da der samtidig er en selvklassificering med H302, udregnes der derfor et kriterie for human konsum af fiskeriprodukter (HKK), som i nuværende datablad alene anvendes til sammenligning med de udledte vandkvalitetskriterier (jf. afsnit 6.1).

Beregningen af HKK baseres på grænseværdien for human sundhed (DNEL = 0,042 mg/kg lgv/dag), 95% fraktilen for dagligt indtag af fisk (0,00163 kg/kg lgv/dag) og en allokeringfaktor på 20%:

$$\text{HKK} = (0,2 \cdot 0,042 \text{ mg/kg lgv/dag}) / 0,00163 = 5,153 \text{ mg/kg føde} = 5153 \text{ } \mu\text{g/kg føde}$$

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

Jævnfør TGD (EU, 2018) skal der laves en tilbageregning fra biotakvalitetskriterierne ($\text{BKK}_{\text{sek.forgiftn.}}$ og HKK) til en vandkoncentration, for at se om vandkvalitetskriteriet fastsat for direkte effekter også beskytter mod sekundær forgiftning gennem fødekæden samt sundhedseffekter i mennesker ved indtag af fiskeriprodukter.

Tilbageregningen baseres på viden om bioakkumulering for at transformere koncentrationen i biota til en koncentration i vandfasen.

Ifølge TGD er det muligt at anvende QSAR, hvis der ikke forefindes pålidelige eksperimentelle data på bioakkumulering. Programmet BCFBAF, som er en del af EPISuite, beregner en BAF-værdi for det højeste trofiske niveau for fisk med et fedtindhold på 10,7%. Efter normalisering til et fedtindhold på 5%, kan en sådan værdi bruges ved tilbageregning til vandkoncentration.

For TFA beregner BCFBAF en BAF-værdi på 1,2 l/kg_{vv}, som normaliseres til et fedtindhold på 5%:

$$\text{BAF}_{\text{lipid}} = \text{BAF}_{\text{vv } 10,7\%} / 0,107 = 1,2 \text{ l/kg} / 0,107 = 11,21 \text{ l/kg}$$

$$\text{BAF}_{\text{vv } 5\%} = \text{BAF}_{\text{lipid}} \cdot 0,05 = 11,21 \text{ l/kg} \cdot 0,05 = 0,56 \text{ l/kg}$$

Derudover beregner BCFBAF en BCF-værdi på 3,16 l/kg_{vv}, som ligeledes normaliseres til et fedtindhold på 5%:

$$\text{BCF}_{\text{lipid}} = \text{BCF}_{\text{vv } 10,7\%} / 0,107 = 3,16 \text{ l/kg} / 0,107 = 29,53 \text{ l/kg}$$
$$\text{BCF}_{\text{vv } 5\%} = \text{BCF}_{\text{lipid}} \cdot 0,05 = 29,53 \text{ l/kg} \cdot 0,05 = 1,48 \text{ l/kg}$$

Der er ikke BCF eller BAF tilgængeligt for musling, hvorfor BAF og BCF for fisk anvendes ved alle tilbageberegningerne.

Baseret på BAF:

$$\text{BKK}_{\text{vand (fisk)}} = 1100 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt} / 0,56 \text{ l/kg} = 1964 \text{ } \mu\text{g/l}$$
$$\text{BKK}_{\text{vand (musling)}} = 306 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt} / 0,56 \text{ l/kg} = 547 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{HKK}_{\text{vand}} = 5153 \text{ } \mu\text{g/kg føde} / 0,56 = 9190 \text{ } \mu\text{g/l}$$

Baseret på BCF:

$$\text{BKK}_{\text{vand (fisk)}} = 1100 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt} / 1,48 \text{ l/kg} = 743 \text{ } \mu\text{g/l}$$
$$\text{BKK}_{\text{vand (musling)}} = 306 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt} / 1,48 \text{ l/kg} = 207 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{HKK}_{\text{vand}} = 5153 \text{ } \mu\text{g/kg føde} / 1,48 = 3490 \text{ } \mu\text{g/l}$$

Det bør understreges, at beregningerne er behæftet med usikkerhed, da BAF og BCF er baseret på QSAR. Men med de data, der er tilgængelige, indikerer den beregnede HKK_{vand} samt BKK_{vand} (baseret på koncentrationen i fisk), at vandkriteriet for ferskvand ($560 \text{ } \mu\text{g/L}$) beskytter mod sundhedseffekter i mennesker ved indtag af fiskeriprodukter, samt mod sekundær forgiftning af fugle og pattedyr ved indtag af fisk. BKK_{vand} baseret på koncentrationen i musling indikerer at vandkriteriet i ferskvand muligvis ikke beskytter mod sekundær forgiftning af fugle og pattedyr ved indtag af musling. Dog har der ikke været værdier for BCF eller BAF i musling tilgængeligt ved beregningerne, hvorfor BAF for fisk er anvendt. Der er derfor stor usikkerhed omkring værdierne.

7 Konklusion

På baggrund af de indsamlede data udledes følgende kvalitetskriterier:

Vandkvalitetskriterium $VKK_{\text{ferskvand}} = 560 \mu\text{g/L}$

Vandkvalitetskriterium $VKK_{\text{saltvand}} = 56 \mu\text{g/L}$

Korttidsvandkvalitetskriterium $KVKK_{\text{ferskvand}} = 2370 \mu\text{g/L}$

Korttidsvandkvalitetskriterium $KVKK_{\text{saltvand}} = 237 \mu\text{g/L}$

Sedimentkvalitetskriterium $SKK_{\text{ferskvand}} = \text{ikke udledt}$

Sedimentkvalitetskriterium $SKK_{\text{saltvand}} = \text{ikke udledt}$

Kvalitetskriterium for biota, $BKK = \text{ikke udledt}$

Kvalitetskriterium for human konsum, $HKK = \text{ikke udledt}$

8 Referencer

Ankley, G.T., Cureton, P., Hoke, R.A., Houde, M., Kumar, A., Kurias, J., Lanno, R., McCarthy, C., Newsted, J., Salice, C.J., Sample, B.E., Sepúlveda, M.S., Steevens, J. & Valsecchi, S. (2020): Assessing the ecological risks of per- and polyfluoroalkyl substances: Current state-of-the science and a proposed path forward. *Environmental Toxicology and Chemistry*, vol. 40 (3), 564-605.

Barthel, Y. (2008): Evaluation de l'écotoxicité d'une substance reference: "acide trifluoroacétique". IPL santé, report no. RPRK08YBA17 rev. 1. Beskrevet i ECHA, 2022.

Berends, A.G. (1993): Ukendt titel. Beskrevet i ECHA, 2022.

Berends, A.G. et al. (1995): Ukendt titel. Beskrevet i ECHA, 2022.

Berends, A.G. (1996): Ukendt titel. Beskrevet i ECHA 2022.

Berends, A.G. (1995) og Groeneveld, A.H.C (1996): Ukendt titel. Beskrevet i ECHA, 2022.

Bil, W., Zeilmaker, M., Fragki, S., Lijzen, J., Verbruggen, E. & Bokkers, B. (2021): Risk assessment of per- and polyfluoroalkyl substance mixtures: A relative potency factor approach. *Environmental Toxicology and Chemistry*, vol. 40 (3), 859-870.

Chabot, L. (2017): Alga, growth inhibition test. Effect of the trifluoroacetic acid on the growth of the unicellular alga *Pseudokirchneriella subcapitata*, according to OECD guideline 201. INERIS, study no. 17-005-167094. Beskrevet i ECHA, 2022.

Danish (Q)SAR Database (2021), November 2021.

<http://qsar.food.dtu.dk>

Dasgupta, S., Reddam, A., Liu, Z., Liu, J. & Volz, D.C. (2020): High-content screening in zebrafish identifies perfluorooctanesulfonamide as a potent developmental toxicant. *Environmental Pollution* 256 (2020) 113550.

Drikkevandsbekendtgørelsen (2023): Bekendtgørelse om vandkvalitet og tilsyn med vandforsyningsanlæg. BEK nr. 504 af 14/05/2023.

Duan, Y., Sun, H., Yao, Y., Meng, Y. & Li, Y. (2020): Distribution of novel and legacy per-/polyfluoroalkyl substances in serum and its associations with two glyceamic biomarkers among Chinese adult men and women with normal blood glucose levels. *Environment International* 134 (2020) 105295.

ECHA (2022). Registreringsdossier for trifluoroeddikesyre CAS 76-05-1. Factsheet sidst opdateret november 2022. Data hentet december 2021 samt marts-juni 2023.

[Registration Dossier - ECHA \(europa.eu\)](https://echa.europa.eu)

EFCTS (2021): TFA as an atmospheric breakdown product.

<https://www.fluorocarbons.org/environment/environmental-impact/tfa-as-an-atmospheric-breakdown-product/>

EFSA (2014): Setting of MRLs for saflufenacil and dietary risk assessment for its metabolite TFA. EFSA Journal 2014; 12(2): 3585.

EFSA (2017): Updated peer review of the pesticide risk assessment of the active substance flurtamone. EFSA Journal 2017; 15(8): 4976.

EPI Suite (2021), December 2021. EPI-Suite calculation (EPIWEB version 4.1 US-EPA).

Escher, B.I., Abagyan, R., Embry, M., Klüver, N., Redman, A.D., Zarfl, C. & Parkerton, T.F. (2020): Recommendations for improving methods and models for aquatic hazard assessment of ionizable organic chemicals. Environmental Toxicology and Chemistry, vol. 39 (2), 269-286.

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>

EURL-SRM (2017): Residue findings report. Residues of DFA and TFA in samples of plant origin. EU Reference Laboratories for Residues of Pesticides, Single Residue Methods, version 1.

Fluazinam draft RAR (2019): Draft Renewal Assessment Report prepared according to Regulation (EC) No. 1107/2009.

Flufencaet dRAR (2017): Draft Renewal Assessment Report prepared according to the Commission Regulation (EU) no. 1107/2009. Rapporteur member state: Poland. Co-rapporteur member state: France.

GEUS (2023): Grundvandsovervågning. Status og udvikling 1989-2021. De Nationale Geologiske Undersøgelser for Danmark og Grønland, Klima, Energi- og Forsyningsministeriet.

Groeneveld, A.H.C., de Kok, H.A.M. & van den Berg, G. (1992): The toxicity of sodium trifluoroacetate to the alga *Selenastrum capricornutum*. SOLVAY DUPHAR B.V. Environmental Research Department, report no. 56635/52/9. Beskrevet i ECHA, 2022.

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

Joudan, S., De Silva, A.O. & Young, C.J. (2021): Insufficient evidence for the existence of natural trifluoroacetic acid. Environmental Science Processes & Impacts, 2021, 23, 1641.

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.

Likens, G.E., Tartowski, S.L., Berger, T.W., Richey, D.G., Driscoll, C.T., Frank, H.G. & Klein, A. (1997): Transport and fate of trifluoroacetate in upland forest and wetland ecosystems. Proceedings of the National Academy of Sciences USA, vol. 94, 4499-4503.

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

Miljøstyrelsen (2021). Notits på internettet: ”Nyt stof fundet i grundvandet”.

[Nyt stof fundet i grundvandet \(mst.dk\)](#)

OECD (2021): Reconciling terminology of the universe of per- and polyfluoroalkyl substances: Recommendations and practical guidance. Series on risk management, no. 61.

OECD (2022): Fact cards of major groups of per- and polyfluoroalkyl substances (PFASs). Series on risk management, no. 68.

PubChem (2021): Online database on chemical substances.

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

RIVM (2023): RIVM-VSP Advies 14434A02 – Drinkwaterrichtwaarde voor trifluorazijnzuur. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Version 2, 2023.

Scheurer, M. & Nödler, K. (2021): Ultrashort-chain perfluoroalkyl substance trifluoroacetate (TFA) in beer and tea – An unintended aqueous extraction. Food Chemistry 351, 129304.

Scheurer, M., Nödler, K., Freeling, F., Janda, J., Happel, O., Riegel, M., Müller, U., Storck, F.R., Fleig, M., Lange, F.T., Brunsch, A. & Brauch, H.J. (2017): Small, mobile, persistent: Trifluoroacetate in the water cycle – Overlooked sources, pathways, and consequences for drinking water supply. Water Research 126 (2017), 460-471.

Smyth, D.V. et al. (1994): Ukendt titel. Beskrevet i ECHA, 2022.

Solomon, K.R., Velders, G.J.M., Wilson, S.R., Madronich, S., Longstreth, J., Aucamp, P.J. & Bornman, J.F. (2016): Sources, fates, toxicity, and risks of trifluoroacetic acid and its salts: Relevance to substances regulated under the Montreal and Kyoto Protocols. Journal of Toxicology and Environmental Health, Part B 2016, vol. 19 (7), 289-304.

Standley, L.J. & Bott, T.L. (1998): Trifluoroacetate, an atmospheric breakdown product of hydrofluorocarbon refrigerants: Biomolekular fate in aquatic organisms. Environmental Science & Technology, 1998, vol. 32, 469-475.

Thiebaud, H. (1996): Toxicity of sodium trifluoroacetate to the alga *Raphidocelis subcapitata*. ELF ATOCHEM, report no. 96/SAE6/1398/HT. Beskrevet i ECHA, 2022.

UBA (2021): Reducing the input of chemicals into waters: trifluoroacetate (TFA) as a persistent and mobile substance with many sources. Sources, input pathways, environmental contamination of TFA and regulatory approaches. Umweltbundesamt (German Environment Agency). Background, November 2021.

Ulhaq, M., Carlsson, G., Örn, S. & Norrgren, L. (2013). Comparison of developmental toxicity of seven perfluoroalkyl acids to zebrafish embryos. Environmental Toxicology and Pharmacology. 36. 423-426. 10.1016/j.etap.2013.05.004.

Unavngivet (1992a): Ukendt titel (short-term toxicity to aquatic invertebrates). Beskrevet i ECHA, 2022.

Unavngivet (1992b): Ukendt titel (short-term toxicity to fish). Beskrevet i ECHA, 2022.

- Unavngivet (1993): Ukendt titel (toxicity to aquatic plants other than algae). Beskrevet i ECHA, 2022.
- Unavngivet (1996): Ukendt titel (Toxicity to aquatic algae and cyanobacteria). Beskrevet i ECHA 2022
- Unavngivet (1997): Ukendt titel (Toxicity to aquatic algae and cyanobacteria). Beskrevet i ECHA 2022
- Unavngivet (2007): Ukendt titel (sub-chronic toxicity: oral). Beskrevet i ECHA, 2022.
- Unavngivet (2010): Ukendt titel (long-term toxicity to aquatic invertebrates). Beskrevet i ECHA, 2022.
- Unavngivet (2019): Ukendt titel (fish early-life stage toxicity). Beskrevet i ECHA, 2022.
- Unavngivet (2022): Ukendt titel (extended one-generation reproductive toxicity). Beskrevet i ECHA, 2022.
- UNEP (United Nations Environment Programme) (2016): Sources, Fates, Toxicity, And Risks of Trifluoroacetic Acid and Its Salts: Relevance to Substances Regulated Under The Montreal And Kyoto Protocols. A report prepared by the UNEP Environmental Effects Assessment Panel and published in the Journal of Toxicology and Environmental Health B, 2016: DOI11 February, 2016. Report Number 2016-01.
- Wang, Y., Junfeng, N., Lilan, Z. & Jianghong, S. (2014): Toxicity assessment of perfluorinated carboxylic acids (PFCAs) towards the rotifer *Brachionus calyciflorus*. Science of the Total Environment 491–492 (2014) 266–270.
- Zhang, L., Sun, H., Wang, Q., Chen, H., Yao, Y., Zhao, Z. & Alder, A.C. (2019): Uptake mechanisms of perfluoroalkyl acids with different carbon chain lengths (C2-C8) by wheat (*Triticum aestivum* L.). Science of the Total Environment 654, 19-27.

Bilag A

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

Ferskvandsorganismer

Akut toksicitet

	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi (mg TFA/L)	Reference	Bemærkninger	Troværdighed (1-4)
Alger								
<i>Raphidocelis subcapitata</i> *	TFA	Nominelt	72 timer	EC ₅₀ , vækst	237	Chabot, 2017, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 201	2
<i>Raphidocelis subcapitata</i> *	TFA	Nominelt	72 timer	EC ₅₀ , biomasse	1,2	Unavngivet, 1997, beskrevet i ECHA 2022	OECD Guideline 201. Opfylder ikke alle fire validitetskriterier i OECD TG 201. Testen er derfor mindre pålidelig	3
<i>Raphidocelis subcapitata</i> *	TFA	Nominelt	72 timer	EC ₅₀ , vækst	6,4	Thiebaud, 1996, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 201	3
<i>Raphidocelis subcapitata</i> *	TFA	Nominelt	72 timer	EC ₅₀ , vækst EC ₅₀ , biomasse	133 4	Groeneveld et al., 1992, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 201	3
<i>Raphidocelis subcapitata</i> *	TFA	Nominelt	72 timer	EC ₅₀ , vækst EC ₅₀ , biomasse	145 24,7	Barthel, 2008, beskrevet i ECHA, 2022	ISO 8692; ikke GLP; inoculum ikke kendt, 5 replikater i kontrollen (6 foreskrives i OECD 301). Anvendes ikke til afledning af VKK, da der er en mindre afvigelse i forhold til OECD 301.	2-3
<i>Chlorella vulgaris</i>	NaTFA	Nominelt	72 timer	EC ₅₀ , vækst EC ₅₀ , biomasse	>999 >999	Berends, 1993, beskrevet i ECHA, 2022	OECD 201, limit test	2

<i>Desmodesmus subspicatus</i>	NaTFA	Målt	72 timer	EC ₅₀ , vækst EC ₅₀ , biomasse	>99,9 >99,9	Berends et al., 1995, beskrevet i ECHA, 2022	OECD 201-undersøgelse med GLP-overholdelse. Kun 4 koncentrationer i stedet for 5 og 2 anvendte replikater ved hver testkoncentration i stedet for 3. Koncentrationerne blev ikke målt	2
<i>Chlamydomonas reinhardtii</i>	NaTFA	Nominelt	72 timer	EC ₅₀ , vækst EC ₅₀ , biomasse	>99,9 >99,9	Berends, 1995 og Groeneveld, 1996, beskrevet i ECHA, 2022	OECD 201, ingen afvigelser. Limit test.	2
<i>Microcystis aeruginosa</i>	NaTFA	Nominelt	144 timer	EC ₅₀ , vækst	>97	Berends, 1995 og Groeneveld, 1996, beskrevet i ECHA, 2022	OECD 201, limit test	2
<i>Navicula pelliculosa</i>	NaTFA	Nominelt	96 timer	EC ₅₀ , vækst EC ₅₀ , biomasse	1997 999	Smyth et al., 1994, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 201, GLP. Valideringskriteriet omkring CV% (Coefficient of Variation) overskred 35%	3
<i>Anabaena flos-aquae</i>	NaTFA	Nominel	120 timer	EC ₅₀ , vækst EC ₅₀ , biomasse	>1997 1997	Smyth et al., 1994, beskrevet i ECHA, 2022	OECD 201	2
Hjuldyr								
<i>Brachionus calyciflorus</i>	TFA		24 timer	LC ₅₀	70	Wang Yujuan <i>et al.</i> , 2014	Studiet er velbeskrevet men er ikke udført efter standard guidance. Da troværdigheden ligger op ad en score på 4, anvendes studiet ikke som udslagsgivende.	2 (4)
Krebsdyr								

<i>Daphnia magna</i>	NaTFA	Nominelt	48 timer	EC ₅₀ , mobilitet	>999	Unavngivet, 1992a, beskrevet i ECHA 2022	OECD Guideline 202	1
Fisk								
Zebrafisk (<i>Danio rerio</i>)	NaTFA	Nominelt	96 timer	LC ₅₀	>999	Unavngivet, 1992b, beskrevet i ECHA 2022	OECD Guideline 203	1
Zebrafisk (<i>Danio rerio</i>), befrugtede æg i mindst 4-celle stadium	TFA	Nominelt	144 timer	LC ₅₀	> 3000	Ulhaq Mazhar <i>et al.</i> 2013		2-3
Zebrafisk (<i>Danio rerio</i>), befrugtede æg i mindst 4-celle stadium	TFA	Nominelt	144 timer	EC ₅₀ , sub-lethale effekter	700	Ulhaq Mazhar <i>et al.</i> 2013	Effekter: ødemer, misdannelser, ikke ud-klækkede æg, reduceret pigmentering, manglende cirkulation	2-3
Zebrafisk (<i>Danio rerio</i>), embryo	TFA	Nominelt	Ekspone- ring 0,75 til 24 timer efter klækning	EC ₅₀ , mortality, udvikling	700	Dasgupta <i>et al.</i> 2020		2-3
Planter								
<i>Lemna gibba</i>	NaTFA	Nominelt	168 timer	EC ₅₀ , frond number	>915	Unavngivet, 1993, beskrevet i ECHA, 2022	ASTM (1991) E1415-91 Standard guide for conducting static toxicity tests with <i>Lemna gibba</i> G3.	1
<i>Lemna gibba</i>		Nominelt	168 timer	EC ₅₀ , biomasse	999			
<i>Lemna gibba</i>	NaTFA	Nominelt	7 dage	EC ₅₀ , våd biomasse	618** (518)	Hanson & Solomon, 2004	Flere endpoints målt. Vækst målt som våd biomasse er mest følsom. Test ikke udført i henhold til, men sammenlignelig med standard guideline. Ikke GLP.	2

<i>Myriophyllum sibiricum</i>	NaTFA	Nominelt	14 dage	EC ₅₀ , rodvækst	340,7* (285,7)	Hanson & Solomon, 2004	Flere endpoints målt. Vækst målt som rodlængde er mest følsom, meget sammenlignelig værdi med våd biomasse. Test ikke udført i henhold til, men sammenlignelig med standard guideline. Ikke GLP.	2
<i>Myriophyllum spicatum</i>	NaTFA	Nominelt	14 dage	EC ₅₀ , rodvækst	222** (186,1)	Hanson & Solomon, 2004	Flere endpoints målt. Vækst målt som rodlængde er mest følsom. Test ikke udført i henhold til, men sammenlignelig med standard guideline. Ikke GLP. Da troværdigheden ligger op ad en score på 4, anvendes studiet ikke som udslagsgivende.	2 (4)

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

** Værdi angivet for NaTFA, omregnet til TFA (angivet i parentes) ved formlen: $\text{Konc. TFA} = \text{Konc. NaTFA} \times \text{molvægt TFA} (114,02) / \text{molvægt NaTFA} (135,989)$.

Ferskvandsorganismer

Kronisk toksicitet

	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi (mg TFA/L)	Reference	Bemærkninger	Troværdighed (1-4)
Alger								
<i>Raphidocelis subcapitata</i> *	TFA	Nominelt	72 timer	EC ₁₀ , vækst	5,59	Chabot, 2017, beskrevet i ECHA 2022	OECD 201	1
<i>Raphidocelis subcapitata</i> *	TFA	Nominelt	72 timer	EC ₁₀ , vækst	1	Thiebaud, 1996, beskrevet i ECHA 2022	OECD 201	3
<i>Raphidocelis subcapitata</i> *	TFA	Nominelt	72 timer	EC ₁₀ , biomasse	0,12	Unavngivet, 1996, beskrevet i ECHA 2022	OECD 201	3
<i>Raphidocelis subcapitata</i> *	NaTFA	Nominelt	72 timer	EC ₁₀ , vækst	15,4	Barthel, 2008, beskrevet i ECHA 2022	ISO 8692; ikke GLP; inoculum ikke kendt, 5 replikater i kontrollen (6 foreskrives i OECD 301)	4
				EC ₁₀ , biomasse	9,5			
<i>Microcystis aeruginosa</i>	NaTFA	Nominelt	144 timer	NOEC, vækst	97	Berends, 1995 og Groenenveld, 1996, beskrevet i ECHA, 2022	OECD 201, limit test	2
<i>Chlorella vulgaris</i>	NaTFA	Nominelt	72 timer	NOEC, vækst	1200	Berends, 1993, beskrevet i ECHA, 2022	OECD 201, limit test	2
				NOEC, biomasse	999			
<i>Navicula pelliculosa</i>	NaTFA	as	96 timer	NOEC, vækst	499	Smyth et al., 1994, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 201, GLP. Valideringskriteriet omkring CV% (Coefficient of Variance) overskred 35%	3
		as		NOEC, biomasse	499			
<i>Anabaena flos-aquae</i>	NaTFA	Nominel	120 timer	NOEC, vækst	499	Smyth et al., 1994, beskrevet i ECHA, 2022	OECD 201	2
Krebsdyr								

<i>Daphnia magna</i>	NaTFA	Nom.	21 dage	NOEC, reproduktion	≥25	Unavngivet, 2010, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 211, GLP Ingen effekter observeret ved de 5 testkoncentrationer	1
Fisk								
<i>Gobiocypris rarus</i>	NaTFA	as	35 dage	NOEC, llæknings succes, dødelighed (succes efter klækning), antal sunde fisk, længden af den overlevende fisk, tørvægten af den overlevende fisk	≥3,8	Unavngivet, 2019, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 210, GLP	1
Hjuldyr								
<i>Brachionus calyciflorus</i>	NaTFA		72 timer	NOEC, vækst	1	Wang Yujuan et al. 2014	Testen er alene udført ved denne ene koncentration (limit test). Derudover ligger troværdigheden op ad en score på 4. Derfor anvendes studiet ikke som udslagsgivende.	2 (4)
Planter								
<i>Lemna gibba</i>	NaTFA	Nominelt	168 timer	NOEC, frond number NOEC, biomasse	250 250	Unavngivet, 1993, beskrevet i ECHA, 2022	ASTM (1991) E1415-91 Standard guide for conducting static toxicity tests with Lemna gibba G3.	4
<i>Lemna gibba</i>	NaTFA	Nominelt	7 dage	EC ₁₀ , bladbiomasse NOEC, bladbiomasse	11,2** (9,4) 30** (25)	Hanson & Solomon, 2004	Flere endpionts målt. Vækst målt som biomasse af blade (fonds) er betydelig mest følsom. Test ikke udført i henhold til men	2

							sammenlignelig med standard guideline. Ikke GLP	
<i>Myriophyllum sibiricum</i>	NaTFA	Nominelt	14 dage	EC ₁₀ , vækst NOEC, vækst	32** (27) 100** (84)	Hanson & Solomon, 2004	Flere endpionts målt. Vækst målt som tør- og våd biomasse, samt plante længde er mest følsomme. Test ikke udført i henhold til men sammenlignelig med standard guideline. Ikke GLP	2
<i>Myriophyllum spicatum</i>	NaTFA	Nominelt	14 dage	EC ₁₀ , rodvækst NOEC, vækst	38** (32) 30** (25)	Hanson & Solomon, 2004	Flere endpionts målt. Vækst målt som rodlængde er mest følsom. Test ikke udført i henhold til men sammenlignelig med standard guideline. Ikke GLP	2

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

** Værdi angivet for NaTFA, omregnet til TFA (angivet i parentes) ved formlen: $\text{Konc. TFA} = \text{Konc. NaTFA} \times \text{molvægt TFA (114,02)} / \text{molvægt NaTFA (135,989)}$.

Saltvandsorganismer
Akut toksicitet

	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi (mg TFA/L)	Reference	Bemærkninger	Troværdighed (1-4)
Alger								
<i>Phaeodactylum tricornutum</i>	NaTFA	Nominelt	72 timer	EC ₅₀ , vækst	>97	Berends, 1996, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 201. OECD Guideline 201. Der blev ikke analyseret, da tidligere data har vist, at stoffet er stabilt	1
<i>Skeletonema costatum</i>	NaTFA	Nominelt, as	96 timer	EC ₅₀ , vækst og biomasse	>1997	Smyth et al., 1994, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 201	2
<i>Dunaliella tertiolecta</i>	NaTFA		72 timer	EC ₅₀ , vækst	>103	Berends, 1996, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 201, Limit test	2
				EC ₅₀ , biomasse	>103			

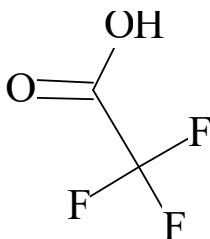
Saltvandsorganismer
Kronisk toksicitet

	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi (mg TFA/L)	Reference	Bemærkninger	Troværdighed (1-4)
Alger								
<i>Phaeodactylum tricornutum</i>	NaTFA	Nominelt	72 timer	NOE _r C, vækst	≥97	Berends, 1996, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 201. Der blev ikke analyseret, da tidligere data har vist, at stoffet er stabilt	1
<i>Skeletonema costatum</i>	NaTFA	Nominelt, as	96 timer	NOEC, vækst og biomasse	≥1997	Smyth et al., 1994, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 201	2
<i>Dunaliella tertiolecta</i>	NaTFA		72 timer	NOEC, vækst	<103	Berends, 1996, beskrevet i ECHA, 2022	OECD Guideline 201, Limit test	2

Bilag B

EpiSuite-beregninger

EPI Suite Results For CAS 76-05-1



SMILES : O=C(O)C(F)(F)F
CHEM : Acetic acid, trifluoro-
MOL FOR: C2 H1 F3 O2
MOL WT : 114.02

----- 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) = 0.50

Boiling Pt, Melting Pt, Vapor Pressure Estimations (MPBPVP v1.43):
Boiling Pt (deg C): 105.72 (Adapted Stein & Brown method)
Melting Pt (deg C): -24.00 (Mean or Weighted MP)
VP(mm Hg,25 deg C): 116 (Mean VP of Antoine & Grain methods)
VP (Pa, 25 deg C) : 1.55E+004 (Mean VP of Antoine & Grain methods)
MP (exp database): -15.2 deg C
BP (exp database): 73 deg C
VP (exp database): 1.10E+02 mm Hg (1.47E+004 Pa) at 25 deg C

Water Solubility Estimate from Log Kow (WSKOW v1.42):
Water Solubility at 25 deg C (mg/L): 9.745e+004
log Kow used: 0.50 (estimated)
no-melting pt equation used
Water Sol (Exper. database match) = 1e+006 mg/L (20 deg C)
Exper. Ref: RIDDICK,JA ET AL. (1986)

Water Sol Estimate from Fragments:
Wat Sol (v1.01 est) = 91486 mg/L

ECOSAR Class Program (ECOSAR v1.11):

Class(es) found:

Neutral Organics-acid

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

Bond Method : 4.31E-006 atm-m3/mole (4.37E-001 Pa-m3/mole)

Group Method: Incomplete

Exper Database: 1.11E-07 atm-m3/mole (1.12E-002 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: 1.786E-004 atm-m3/mole (1.810E+001 Pa-m3/mole)

VP: 116 mm Hg (source: MPBPVP)

WS: 9.75E+004 mg/L (source: WSKOWWIN)

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

Log Kow used: 0.50 (KowWin est)

Log Kaw used: -5.343 (exp database)

Log Koa (KOAWIN v1.10 estimate): 5.843

Log Koa (experimental database): None

Probability of Rapid Biodegradation (BIOWIN v4.10):

Biowin1 (Linear Model) : 0.2455

Biowin2 (Non-Linear Model) : 0.0257

Expert Survey Biodegradation Results:

Biowin3 (Ultimate Survey Model): 2.7988 (weeks)

Biowin4 (Primary Survey Model) : 3.7944 (days)

MITI Biodegradation Probability:

Biowin5 (MITI Linear Model) : 0.6062

Biowin6 (MITI Non-Linear Model): 0.0000

Anaerobic Biodegradation Probability:

Biowin7 (Anaerobic Linear Model): 1.0229

Ready Biodegradability Prediction: YES

Hydrocarbon Biodegradation (BioHCwin v1.01):

Structure incompatible with current estimation method!

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

Vapor pressure (liquid/subcooled): 1.47E+004 Pa (110 mm Hg)

Log Koa (Koawin est): 5.843

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

Mackay model : 2.05E-010

Octanol/air (Koa) model: 1.71E-007

Fraction sorbed to airborne particulates (phi):

Junge-Pankow model : 7.39E-009

Mackay model : 1.64E-008

Octanol/air (Koa) model: 1.37E-005

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):

1.19E-008 (Junge-Pankow, Mackay avg)

1.37E-005 (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 : 2.706 L/kg (Kow method)
Log Koc: 0.432 (Kow method)

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) = -0.6553 days (HL = 0.2212 days)
Log BCF Arnot-Gobas method (upper trophic) = 0.078 (BCF = 1.198)
Log BAF Arnot-Gobas method (upper trophic) = 0.078 (BAF = 1.198)
log Kow used: 0.50 (estimated)

Volatilization from Water:

Henry LC: 1.11E-007 atm-m³/mole (Henry experimental database)
Half-Life from Model River: 5633 hours (234.7 days)
Half-Life from Model Lake : 6.154E+004 hours (2564 days)

Removal In Wastewater Treatment:

Total removal: 1.87 percent
Total biodegradation: 0.09 percent
Total sludge adsorption: 1.77 percent
Total to Air: 0.01 percent
(using 10000 hr Bio P,A,S)

Level III Fugacity Model:

Mass Amount (percent)	Half-Life (hr)	Emissions (kg/hr)	
Air	1.99	2.14e+003	1000
Water	37	360	1000
Soil	61	720	1000
Sediment	0.0727	3.24e+003	0

Persistence Time: 534 hr

....

