

ACIDE CHLOROACETIQUE— n° CAS : 79-11-8

VALEUR GUIDE ENVIRONNEMENTALE

EAU DOUCE

Moyenne Annuelle dans l'eau : $VGE_{\text{EAU-DOUCE}} = 0.6 \mu\text{g/L}$

fondée sur la protection des organismes de la colonne d'eau

Concentration Maximale Acceptable dans l'eau: $MAC_{\text{EAU-DOUCE}} = 2.5 \mu\text{g/L}$

EAU MARINE

Moyenne Annuelle dans l'eau : $VGE_{\text{EAU-MARINE}} = 0.06 \mu\text{g/L}$

fondée sur la protection des organismes de la colonne d'eau

Concentration Maximale Acceptable dans l'eau: $MAC_{\text{EAU-MARINE}} = 0.25 \mu\text{g/L}$

VALEURS GUIDES POUR LE SEDIMENT

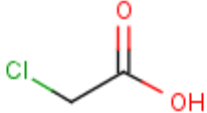
Avec un Koc de 4 L/kg et un log Kow < 0.2, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée par le guide européen (E.C., 2011).

ACIDE CHLOROACETIQUE– n° CAS : 79-11-8

L'acide chloroacétique est principalement utilisé comme intermédiaire dans la synthèse d'autres composés comme les plastiques, les esters, amines, ou acide thioglycol.

L'acide chloroacétique est aussi utilisé en faible quantité (<10 tonnes/an) comme substance active entrant dans la composition de certains herbicides.

IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE

Substance chimique	Acide Chloroacétique
Autres dénominations/synonymes	Acide α -Chloroacétique Chloressigsauer Acide Chloroéthanoïque MCA Chlorethansauere MkhUK Monochloressigsauere Acide Monochloroethanoïque MCAA
Numéro CAS	79-11-8
Formule moléculaire	C ₂ H ₃ ClO ₂
Code SMILES	C(CCl)(O)=O
Structure moléculaire	

EVALUATIONS EXISTANTES ET INFORMATIONS REGLEMENTAIRES

Evaluations existantes	E.C. (2005). "European Union Risk Assessment Report. Acide Chloroacétique.
Phrases de risque et classification	Annexe I Directive 67/548/CEE (C.E., 1967) T; R23/24/25 C; R34 N; R50 Annexe VI Règlement (CE) No 1272/2008 (C.E., 2008) Acute Tox. 3 H301 Skin Corr. 1B H314 Aquatic Acute 1 H400
Effets endocriniens	L'acide chloroacétique n'est pas cité dans la stratégie communautaire concernant les perturbateurs endocriniens (E.C., 2004) et dans le rapport d'étude de la DG ENV sur la mise à jour de la liste prioritaire des perturbateurs endocriniens à faible tonnage (Petersen <i>et al.</i> , 2007).
Critères PBT / POP	La substance ne remplit pas les critères PBT/vPvB ¹ (C.E., 2006) ou POP ² (PNUE, 2001).
Normes de qualité existantes	<u>Allemagne</u> : Norme de qualité pour les eaux prélevées destinées à la consommation = 10 µg/L (ETOX, 2007) ³
Mesure de restriction	-
Substance(s) associée(s)	-

Cette substance a fait l'objet d'une évaluation des risques européenne (E.C., 2005) dans le cadre du Règlement (CE) n° 1488/94 sur les substances existantes. Les données issues de ce rapport ont été soumises à un examen collectif par les états membres de l'Union européenne et n'ont donc pas fait l'objet d'une validation supplémentaire.

¹ Les PBT sont des substances persistantes, bioaccumulables et toxiques et les vPvB sont des substances très persistantes et très bioaccumulables. Les critères utilisés pour la classification des PBT sont ceux fixés par l'Annexe XIII du règlement n° 1907/2006 (REACH).

² Les Polluants Organiques Persistants (POP) sont des substances persistantes (aux dégradations biotiques et abiotiques), fortement bioaccumulables, et qui peuvent être transportées sur de longues distances et être retrouvée de façon ubiquitaire dans l'environnement. Les critères utilisés pour la classification POP sont ceux fixés par l'Annexe 5 de la Convention de Stockholm placée sous l'égide du PNUE (Programme des Nations Unies pour l'Environnement).

³ Les données issues de cette source (<http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>) ne sont données qu'à titre indicatif ; elles n'ont donc pas fait l'objet d'une validation par l'INERIS.

PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES

	Valeurs	Source
Poids moléculaire [g/mol]	94.5	E.C, 2005
Hydrosolubilité [mg/L]	4210 à 20°C	
Pression de vapeur [Pa]	<100 à 20°C 8.7 à 25°C 1100 à 80°C	
Constante de Henry [Pa.m ³ /mol]	1.9.10 ⁻⁴ à 20°C	
Log du coefficient de partage Octanol-eau (log Kow)	< 0.2	
Coefficient de partage carbone organique-eau (Koc) [L/kg]	4 (QSAR)	
Constante de dissociation (pKa)	2.85 à 25°C	

COMPORTEMENT DANS L'ENVIRONNEMENT**PERSISTANCE**

		Source
Hydrolyse	L'acide chloroacétique peut subir une dégradation très lente par hydrolyse. Après 30 jours, seul 0.01% de l'acide chloroacétique présent dans le milieu est dégradé par hydrolyse.	E.C, 2005
Photolyse	Un temps de demi-vie de 58 jours a été estimé à l'aide d'un modèle QSAR.	
Biodégradabilité	D'après les études réalisées, l'acide chloroacétique peut être considéré comme facilement biodégradable.	

DISTRIBUTION DANS L'ENVIRONNEMENT

		Source
Adsorption	La valeur de Koc, obtenue à partir de QSAR (4 L/kg), permet de conclure que l'acide chloroacétique n'a pas tendance à s'adsorber sur les sédiments, les sols ou les particules en suspension.	E.C, 2005
Volatilisation	D'après la constante de Henry ($1.9.10^{-4}$ Pa.m ³ /mol), l'acide chloroacétique, en solution aqueuse, n'a pas tendance à se volatiliser.	
Bioaccumulation	La faible valeur disponible (BCF calculé à 3,162, selon BCFBAF v3.01, US-EPA, 2010) de l'acide chloroacétique indique que cette substance n'est pas bioaccumulable. Un BCF de 3,162 est utilisé dans la détermination des normes de qualité. En l'absence de valeur mesurée, le document guide technique européen pour la dérivation des NQE recommande l'utilisation des valeurs par défaut suivantes pour ce qui est de la prise en compte de la biomagnification : $BMF_1 = BMF_2 = 1$.	E.C., 2011

ECOTOXICITE ET TOXICITE

ORGANISMES AQUATIQUES

Dans les tableaux ci-dessous, sont reportés pour chaque taxon, uniquement les résultats des tests d'écotoxicité montrant la plus forte sensibilité à la substance. Toutes les données présentées ont fait l'objet d'un examen collectif européen, elles n'ont donc pas fait l'objet de validation supplémentaire.

Ces résultats d'écotoxicité sont principalement exprimés sous forme de NOEC (*No Observed Effect Concentration*), concentration sans effet observé, d'EC₁₀ concentration produisant 10% d'effets et équivalente à la NOEC, ou de EC₅₀, concentration produisant 50% d'effets. Les NOEC sont principalement rattachées à des tests chroniques, qui mesurent l'apparition d'effets sub-létaux à long terme, alors que les EC₅₀ sont plutôt utilisées pour caractériser les effets à court terme.

ECOTOXICITE

ECOTOXICITE AQUATIQUE AIGUË

Organisme		Espèce	Critère d'effet	Valeur [mg/L]	Validité	Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	EC ₅₀ (72 h)	0.025	Valide	BUA, 1993 cité dans E.C., 2005
	Milieu marin	Pas d'information disponible.				
Invertébrés	Eau douce	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ (48 h)	77	Valide	BUA, 1993 cité dans E.C., 2005
	Milieu marin	Pas d'information disponible.				
	Sédiment	Pas d'information disponible.				
Poissons	Eau douce	<i>Leuciscus idus melanotus</i>	LC ₅₀ (96 h), statique	>100	Valide	BUA, 1993 cité dans E.C., 2005
	Milieu marin	Pas d'information disponible.				

ECOTOXICITE AQUATIQUE CHRONIQUE

Organisme		Espèce	Critère d'effet	Valeur [mg/L]	Validité	Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	NOEC (72 h)	0.0058	Valide	BUA, 1993 cité dans E.C., 2005
	Milieu marin	Pas d'information disponible.				
Invertébrés	Eau douce	<i>Daphnia magna</i>	NOEC (21 j), reproduction	32	Valide	BUA, 1993 cité dans E.C., 2005
	Milieu marin	Pas d'information disponible.				
	Sédiment	Pas d'information disponible.				
Poissons	Eau douce	<i>Brachydanio rerio</i>	NOEC (28 j), calculé à partir de la LOEC	12.5	Valide	ECETOC, 1999 cité dans E.C., 2005
	Milieu marin	Pas d'information disponible.				

NORMES DE QUALITE POUR LA COLONNE D'EAU

Les normes de qualité pour les organismes de la colonne d'eau sont calculées conformément aux recommandations du guide technique européen pour la détermination des normes de qualité environnementale (E.C., 2011). Elles sont obtenues en divisant la plus faible valeur de NOEC ou d'EC₅₀ valide par un facteur d'extrapolation (AF, *Assessment Factor*).

La valeur de ce facteur d'extrapolation dépend du nombre et du type de tests pour lesquels des résultats valides sont disponibles. Les règles détaillées pour le choix des facteurs sont données dans le guide technique européen (E.C., 2011).

En ce qui concerne les organismes marins, selon le guide technique pour la détermination de normes de qualité environnementale (E.C., 2011), la sensibilité des espèces marines à la toxicité des substances organiques peut être considérée comme équivalente à celle des espèces dulçaquicoles, à moins qu'une différence ne soit montrée.

- **Moyenne annuelle (AA-QS_{water_eco} et AA-QS_{marine_eco}) :**

Une concentration annuelle moyenne est déterminée pour protéger les organismes de la colonne d'eau d'une possible exposition prolongée.

Pour l'acide chloroacétique on dispose de données valides pour 3 niveaux trophiques à la fois en aigu et en chronique. En aigu comme en chronique, les algues semblent être les plus sensibles. En chronique, la plus basse NOEC a été observée pour *Scenedesmus subspicatus* (NOEC à 0.0058 mg/L). Conformément au guide technique européen pour la détermination des normes de qualité environnementale (E.C., 2011), un facteur d'extrapolation de 10 est appliqué pour déterminer la AA-QS_{water_eco}. L'INERIS propose donc la valeur suivante :

$$\begin{aligned} \text{AA-QS}_{\text{water_eco}} &= 0.0058 / 10 = 0.00058 \text{ mg/L, soit} \\ \text{AA-QS}_{\text{water_eco}} &= 0.58 \text{ } \mu\text{g/L} \end{aligned}$$

En ce qui concerne les organismes marins aucune donnée n'est disponible en aigu comme en chronique. Le jeu de données disponible ne permet donc pas de mettre en évidence une différence de sensibilité entre les espèces marines et dulçaquicoles. Pour le milieu marin, le facteur d'extrapolation appliqué doit prendre en compte les incertitudes additionnelles telles que la sous-représentation des taxons clés et une diversité d'espèces plus importante. Par conséquent et conformément au guide technique européen pour la détermination des normes de qualité environnementale (E.C., 2011), un facteur d'extrapolation de 100 est appliqué pour déterminer la AA-QS_{marine_eco}. L'INERIS propose donc la valeur suivante :

$$\begin{aligned} \text{AA-QS}_{\text{marine_eco}} &= 0.0058 / 100 = 0.000058 \text{ mg/L, soit} \\ \text{AA-QS}_{\text{marine_eco}} &= 0.058 \text{ } \mu\text{g/L} \end{aligned}$$

- **Concentration Maximum Acceptable (MAC et MAC_{marine}) :**

La concentration maximale acceptable est calculée afin de protéger les organismes de la colonne d'eau de possibles effets de pics de concentrations de courtes durées (E.C., 2011).

Pour l'acide chloroacétique, on dispose de données aiguës pour trois niveaux trophiques (algues, invertébrés, poissons), la plus faible étant celle sur *Scenedesmus subspicatus*, EC₅₀ = 0.025 mg/L. Par défaut, un facteur d'extrapolation de 100 s'applique pour calculer la MAC. Cependant le document guide pour la détermination de normes de qualité environnementale (E.C., 2011) prévoit que, pour les substances pour lesquelles des données sont disponibles pour le taxon le plus sensible, ce facteur puisse être diminué. Pour l'acide chloroacétique, les algues semblent être de loin les plus sensibles, il est donc proposé d'abaisser ce facteur à 10. L'INERIS propose donc la valeur suivante :

$$\begin{aligned} \text{MAC} &= 0.025 / 10 = 0.0025 \text{ mg/L, soit} \\ \text{MAC} &= 2.5 \text{ } \mu\text{g/L} \end{aligned}$$

En ce qui concerne les organismes marins aucune donnée n'est disponible en aigu. Le jeu de données disponible ne permet donc pas de mettre en évidence une différence de sensibilité entre les

espèces marines et dulçaquicoles. Pour le milieu marin, le facteur d'extrapolation appliqué doit prendre en compte les incertitudes additionnelles telles que la sous-représentation des taxons clés et une diversité d'espèces plus importante. Par défaut, et conformément document guide pour la détermination de normes de qualité environnementale (E.C., 2011), un facteur d'extrapolation de 1000 s'applique pour calculer la MAC. Cependant ce même document prévoit aussi que, pour les substances pour lesquelles des données sont disponibles pour le taxon le plus sensible, ce facteur puisse être diminué. Pour l'acide chloroacétique, les algues semblent être de loin les plus sensibles, il est donc proposé d'abaisser ce facteur à 100. L'INERIS propose donc la valeur suivante :

$$\text{MAC}_{\text{marine}} = 0.025 / 100 = 0.00025 \text{ mg/L, soit}$$

$$\text{MAC}_{\text{marine}} = 0.25 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau douce)		
Moyenne annuelle [AA-QS_{water_eco}]	0.58	µg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC]	2.5	µg/L
Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau marine)		
Moyenne annuelle [AA-QS_{marine_eco}]	0.058	µg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC_{marine_eco}]	0.25	µg/L

VALEUR GUIDE POUR LES ORGANISMES BENTHIQUES (QS_{SED} ET QS_{SED-MARIN})

Un seuil de qualité dans le sédiment est nécessaire (i) pour protéger les espèces benthiques et (ii) protéger les autres organismes d'un risque d'empoisonnement secondaire résultant de la consommation de proies provenant du benthos. Les principaux rôles des normes de qualité pour les sédiments sont de :

1. Identifier les sites soumis à un risque de détérioration chimique (la norme sédiment est dépassée)
2. Déclencher des études pour l'évaluation qui peuvent conduire à des études plus poussées et potentiellement à des programmes de mesures
3. Identifier des tendances à long terme de la qualité environnementale (Art. 4 Directive 2000/60/CE) (C.E., 2000).

Aucune information d'écotoxicité pour les organismes benthiques n'a été trouvée dans la littérature pour les organismes aquatiques.

A défaut, une valeur guide pour le sédiment peut être calculée à partir du modèle de l'équilibre de partage.

Ce modèle suppose que :

- il existe un équilibre entre la fraction de substances adsorbées sur les particules sédimentaires et la fraction de substances dissoutes dans l'eau interstitielle du sédiment,
- la fraction de substances adsorbées sur les particules sédimentaires n'est pas biodisponible pour les organismes et que seule la fraction de substances dissoutes dans l'eau interstitielle est susceptible d'impacter les organismes,
- la sensibilité intrinsèque des organismes benthiques aux toxiques est équivalente à celle des organismes vivant dans la colonne d'eau. Ainsi, la norme de qualité pour la colonne d'eau peut être utilisée pour définir la concentration à ne pas dépasser dans l'eau interstitielle.

Une valeur guide de qualité pour le sédiment peut être alors calculée selon l'équation suivante (E.C., 2011) :

$$QS_{\text{sed wet weight}} [\mu\text{g}/\text{kg}] = \frac{K_{\text{sed-eau}}}{RHO_{\text{sed}}} * AA-QS_{\text{water_eco}} [\mu\text{g}/\text{L}] * 1000$$

Avec

RHO_{sed} : masse volumique du sédiment en $[\text{kg}_{\text{sed}}/\text{m}^3_{\text{sed}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le document guide technique européen (E.C., 2011) est utilisée : $1300 \text{ kg}/\text{m}^3$.

$K_{\text{sed-eau}}$: coefficient de partage sédiment/eau en m^3/m^3 . En l'absence d'une valeur exacte, les valeurs génériques proposées par le guide technique européen (E.C., 2011) sont utilisées. Le coefficient est alors calculé selon la formule suivante : $0.8 + 0.025 * K_{\text{oc}}$ soit $K_{\text{sed-eau}} = 0.9 \text{ m}^3/\text{m}^3$

Pour l'acide chloroacétique, on obtient :

$$QS_{\text{sed wet weight}} [\mu\text{g}/\text{kg}] = \frac{0.9}{1300} * 0.58 * 1000$$

$$QS_{\text{sed wet weight}} = 0.4 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{poids humide}}$$

La concentration correspondante en poids sec peut être estimée en tenant compte du facteur de conversion suivant :

$$\frac{RHO_{\text{sed}}}{F_{\text{solide}_{\text{sed}}} * RHO_{\text{solide}}} = \frac{1300}{500} = 2.6$$

Avec $F_{\text{solide}_{\text{sed}}}$: fraction volumique en solide dans les sédiments en $[\text{m}^3_{\text{solide}}/\text{m}^3_{\text{susp}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le document guide technique européen (E.C., 2011) est utilisée : $0.2 \text{ m}^3/\text{m}^3$.

RHO_{solide} : masse volumique de la partie sèche en $[\text{kg}_{\text{solide}}/\text{m}^3_{\text{solide}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le document guide technique européen (E.C., 2011) est utilisée : $2500 \text{ kg}/\text{m}^3$.

Pour l'acide chloroacétique, la concentration correspondante en poids sec est :

$$QS_{\text{sed dry weight}} = QS_{\text{sed wet weight}} * 2.6 = 0.4 * 2.6 = 1 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$$

Selon la même approche que pour le sédiment d'eau douce, une valeur guide de qualité pour le sédiment marin peut être calculée selon la formule suivante :

$$QS_{\text{sed-marin wet weight}} [\mu\text{g}/\text{kg}] = \frac{K_{\text{sed-eau}}}{RHO_{\text{sed}}} * AA-QS_{\text{marin_eco}} [\mu\text{g}/\text{L}] * 1000$$

Pour l'acide chloroacétique, on obtient :

$$0.9$$

$$QS_{\text{sed-marin wet weight}} [\mu\text{g}/\text{kg}] = \frac{\text{-----}}{1300} * 0.058 * 1000$$

$$QS_{\text{sed-marin wet weight}} = 0.04 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{poids humide}}$$

La concentration correspondante en poids sec est alors la suivante:

$$QS_{\text{sed-marin dry weight}} = 0.1 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$$

Le log Kow de la substance étant inférieur à 5, un facteur additionnel de 10 n'est pas jugé nécessaire.

Il faut rappeler que les incertitudes liées à l'application du modèle de l'équilibre de partage sont importantes. Les sédiments naturels peuvent avoir des propriétés très variables en termes de composition (nature et quantité de matières organiques, composition minéralogique), de granulométrie, de conditions physico-chimiques, de conditions dynamiques (taux de déposition/taux de resuspension). Par ailleurs ces propriétés peuvent évoluer dans le temps en fonction notamment des conditions météorologiques et de la morphologie de la masse d'eau. Si bien que le partage entre la fraction de substance adsorbée et la fraction de substance dissoute peut être extrêmement variable d'un sédiment à un autre et l'hypothèse d'un équilibre entre ces deux fractions ne semble pas très réaliste pour des conditions naturelles.

Par ailleurs, certains organismes benthiques peuvent ingérer les particules sédimentaires, et donc être contaminés par la fraction de substance adsorbée sur ces particules, ce qui n'est pas pris en compte par la méthode.

Proposition de valeur guide pour les organismes benthiques (eau douce)	0.4	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids humide}}$
	1	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$
Proposition de valeur guide pour les organismes benthiques (eau marine)	0.04	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids humide}}$
	0.1	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$
Conditions particulières	Avec un Koc de 4 L/kg et un log Kow <0,2, la mise en œuvre d'un seuil pour les organismes benthiques n'est pas recommandée par le document guide technique européen (E.C., 2011).	

EMPOISONNEMENT SECONDAIRE

Ce chapitre traite de la toxicité chronique induite par la substance sur les prédateurs *via* la consommation d'organismes aquatiques contaminés (appelés biote, i.e. poissons ou invertébrés vivant dans la colonne d'eau ou dans les sédiments). Il s'agit donc d'évaluer la toxicité chronique de la substance par la voie d'exposition orale uniquement.

Dans les tableaux ci-dessous, ne sont reportés pour chaque type de test que les résultats permettant d'obtenir les NOEC ou la valeur toxicologique de référence (VTR) les plus protectrices. N'ont été recherchés que des tests sur mammifères ou oiseaux exposés par voie orale (exposition par l'alimentation ou par gavage). Toutes les données présentées ont été validées.

Les résultats de toxicité sont principalement donnés sous forme de doses journalières : NOAEL (*No Observed Adverse Effect Level*), ou LOAEL (*Lowest Observed Adverse Effect Level*). NOAEL et LOAEL sont exprimées en termes de quantité de substance administrée par unité de masse corporelle de l'animal testé, et par jour.

Pour calculer la norme de qualité liée à l'empoisonnement secondaire des prédateurs, il est nécessaire de connaître la concentration de substance dans le biote n'induisant pas d'effets observés pour les prédateurs (exprimée sous forme de NOEC). Il est possible de déduire une NOEC à partir d'une NOAEL grâce à des facteurs de conversion empiriques variables selon les espèces testées. Les facteurs utilisés ici sont ceux recommandés par le guide technique européen pour la détermination de normes de qualité (E.C., 2011). Les valeurs de ces facteurs de conversion dépendent de la masse corporelle des animaux et de leur consommation journalière de nourriture. Celles-ci peuvent donc varier d'une façon importante selon le niveau d'activité et le métabolisme de l'animal, la valeur nutritive de sa nourriture, etc. En particulier elles peuvent être très différentes entre un animal élevé en laboratoire et un animal sauvage.

Afin de couvrir ces sources de variabilité, mais aussi pour tenir compte des autres sources de variabilité ou d'incertitude (variabilité inter et intra-espèces, extrapolation du court terme au long terme, etc.) des facteurs d'extrapolation sont nécessaires pour le calcul de la $QS_{\text{biota_sec\ pois}}$. Les valeurs recommandées pour ces facteurs d'extrapolation sont données dans le guide technique européen (E.C., 2011). Un facteur d'extrapolation supplémentaire ($AF_{\text{dose-réponse}}$) est utilisé dans le cas où la toxicité a été établie à partir d'une LOAEL plutôt que d'une NOAEL.

ECOTOXICITE POUR LES VERTEBRES TERRESTRES

TOXICITE ORALE POUR LES MAMMIFERES

	Type de test	NOAEL ⁽¹⁾ [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Rat Durée de l'étude : 2 ans Effets : Augmentation du poids de la rate	LOAEL = 3.5 NOAEL _{corr} ⁽²⁾ = 0.35 AF dose-réponse = 10	DeAngelo et al., 1997	20	7

⁽¹⁾ NOAEL : No Observed Adverse Effect Level

⁽²⁾ La NOAEL_{corr} correspond à la NOAEL déduite à partir de la LOAEL disponible.

TOXICITE ORALE POUR LES OISEAUX

	Type de test	NOAEL/LOAEL ⁽¹⁾ [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Pas d'information disponible.				
Toxicité pour la reproduction	Pas d'information disponible.				

⁽¹⁾ NOAEL : No Observed Adverse Effect Level; LOAEL : Low Observed Adverse Effect Level

NORME DE QUALITE EMPOISONNEMENT SECONDAIRE (QS_{BIOTA_SEC POIS})

La norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire (QS_{biota_sec pois}) est calculée conformément aux recommandations du guide technique européen (E.C., 2011). Elle est obtenue en divisant la plus faible valeur de NOEC valide par les facteurs d'extrapolation recommandés (E.C., 2011).

Pour l'acide chloroacétique, un facteur de 30 est appliqué car la durée du test retenu (NOAEL à 0,35 sur le rat, soit une NOEC de 7 mg/kg_{biota}) est deux ans. On obtient donc :

$$QS_{\text{biota_sec pois}} = 7 \text{ [mg/kg}_{\text{biota}}] / 30 = 0.233 \text{ mg/kg}_{\text{biota}} = 233.33 \text{ }\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$$

Cette valeur de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire peut être ramenée :

- à une concentration dans l'eau douce selon la formule suivante :

$$QS_{\text{water sp}} \text{ [}\mu\text{g/L]} = \frac{QS_{\text{biota_sec pois}} \text{ [}\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}]}{BCF \text{ [L/kg}_{\text{biota}}] * BMF_1}$$

- à une concentration dans l'eau marine selon la formule suivante :

$$QS_{\text{marin sp}} \text{ [}\mu\text{g/L]} = \frac{QS_{\text{biota_sec pois}} \text{ [}\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}]}{BCF \text{ [L/kg}_{\text{biota}}] * BMF_1 * BMF_2}$$

Avec :

BCF : facteur de bioconcentration,

BMF₁ : facteur de biomagnification,

BMF₂ : facteur de biomagnification additionnel pour les organismes marins.

Ce calcul tient compte du fait que la substance présente dans l'eau du milieu peut se bioaccumuler dans le biote. Il donne la concentration à ne pas dépasser dans l'eau afin de respecter la valeur de la norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire déterminée dans le biote.

La bioaccumulation tient compte à la fois du facteur de bioconcentration (BCF, ratio entre la concentration dans le biote et la concentration dans l'eau) et du facteur de biomagnification (BMF, ratio entre la concentration dans l'organisme du prédateur en bout de chaîne alimentaire, et la concentration dans l'organisme de la proie au début de la chaîne alimentaire). En l'absence de valeurs mesurées pour le BMF₁ et le BMF₂, celles-ci peuvent être estimées à partir du BCF selon le guide technique européen (E.C., 2011).

Ce calcul n'est donné qu'à titre indicatif. Il fait en effet l'hypothèse qu'un équilibre a été atteint entre l'eau et le biote, ce qui n'est pas véritablement réaliste dans les conditions du milieu naturel. Par ailleurs il repose sur un facteur de bioaccumulation qui peut varier de façon importante entre les espèces considérées.

Pour l'acide chloroacétique, un BCF de 3.162 et un BMF₁ = BMF₂ de 1 (cf. E.C., 2011) ont été retenus. On a donc :

$$QS_{\text{water sp}} = 233 \text{ [mg/kg}_{\text{biota}}] / (3.162 * 1) = 73.7 \text{ mg/L}$$

$$QS_{\text{marin sp}} = 233 \text{ [mg/kg}_{\text{biota}}] / (3.162 * 1 * 1) = 73.7 \text{ mg/L}$$

Proposition de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire des prédateurs	233	µg/kg _{biota}
valeur correspondante dans l'eau douce et marine	74	µg/L

SANTE HUMAINE

Ce chapitre traite de la toxicité chronique induite par la substance sur l'homme soit *via* la consommation d'organismes aquatiques contaminés, soit *via* l'eau de boisson.

Dans les tableaux ci-dessous, ne sont reportés pour chaque type de test que les résultats permettant d'obtenir les NOEC ou la valeur toxicologique de référence (VTR) les plus protectrices. Compte tenu du mode d'exposition envisagée, seuls les tests sur mammifères exposés par voie orale (dans l'alimentation ou par gavage) ont été recherchés.

Toutes les données présentées ont été validées.

Les résultats de toxicité sont principalement donnés sous forme de doses journalières : NOAEL (*No Observed Adverse Effect Level*), ou LOAEL (*Lowest Observed Adverse Effect Level*). NOAEL et LOAEL sont exprimées en termes de quantité de substance administrée par unité de masse corporelle de l'animal testé, et par jour.

TOXICITE

Pour l'évaluation des effets sur la santé humaine, seuls les résultats sur mammifères sont considérés comme pertinents. Contrairement à l'évaluation des effets pour les prédateurs, les effets de type cancérogène ou mutagène sont également pris en compte.

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Valeur toxicologique de référence (VTR) [µg/kg _{corporel} /j]
Toxicité sub-chronique ou chronique	Rat Durée de l'étude : 2 ans Effets : Augmentation du poids de la rate	LOAEL = 3.5 NOAEL _{corr} ⁽¹⁾ = 0.35 AF dose-réponse = 10	DeAngelo <i>et al.</i> , 1997	3.5 ⁽¹⁾ Facteur d'incertitude utilisé : 100 - AF Inter-espèce = 10 - AF Intra-espèce = 10

(1) Cette VTR a été déterminée par l'OMS (2004) (WHO, 2004).

	Classement CMR	Source
Cancérogénèse	La substance est inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008 mais ne fait pas l'objet d'un classement pour la cancérogénèse	C.E., 2008
Mutagénèse	La substance est inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008 mais ne fait pas l'objet d'un classement pour la mutagénèse.	C.E., 2008
Toxicité pour la reproduction	La substance est inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008 mais ne fait pas l'objet d'un classement pour la reproduction.	C.E., 2008

NORME DE QUALITE POUR LA SANTE HUMAINE VIA LA CONSOMMATION DES PRODUITS DE LA PECHE (QS_{BIOTA_HH})

La norme de qualité pour la santé humaine est calculée de la façon suivante (E.C., 2011) :

$$QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * VTR [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * \text{poids corporel} [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{\text{Cons. Journ. Moy.} [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} * \frac{1}{F_{\text{sécurité}}}$$

Ce calcul tient compte de :

- un facteur correctif de 10% (soit 0.1) : la VTR donnée ne tient compte en effet que d'une exposition par voie orale, et pour la consommation de produits de la pêche uniquement. Mais la contamination peut aussi se faire par la consommation d'autres sources de nourriture, par la consommation d'eau, et d'autres voies d'exposition sont possibles (inhalation ou contact cutané). Le facteur correctif de 10% (soit 0.1) permet de rendre l'objectif de qualité plus sévère d'un facteur 10 afin de tenir compte de ces autres sources de contamination possibles.
- la valeur toxicologique de référence (VTR), correspondant à une dose totale admissible par jour ; pour cette substance elle sera considérée égale à 3.5 µg/kg_{corporel}/j (cf. tableau ci-dessus),
- un poids corporel moyen de 70 kg,
- F_{sécurité} : facteur de sécurité supplémentaire pour tenir compte des potentiels effets CMR ou de perturbation endocrine de la substance. L'acide chloroacétique ne présentant aucune de ces propriétés, le facteur de sécurité est fixé à 1.
- Cons. Journ. Moy : une consommation journalière moyenne de produits de la pêche (poissons, mollusques, crustacés) égale à 115 g par jour.

Ce calcul n'est donné qu'à titre indicatif. Il peut être inadapté pour couvrir les risques pour les individus plus sensibles ou plus vulnérables (masse corporelle plus faible, forte consommation de produits de la pêche, voies d'exposition individuelles particulières). Le facteur correctif de 10% n'est donné que par défaut, car la contribution des différentes voies d'exposition varie selon les propriétés de la substance (et en particulier sa distribution entre les différents compartiments de l'environnement), ainsi que selon les populations considérées (travailleurs exposés, exposition pour les consommateurs/utilisateurs, exposition via l'environnement uniquement). L'hypothèse cependant que la consommation des produits de la pêche ne représente pas plus de 10% des apports journalier contribuant à la dose journalière tolérable apporte une certaine marge de sécurité (E.C., 2011).

Pour l'acide chloroacétique, le calcul aboutit à :

$$QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * 3.5 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel/j}}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{0.115 [\text{kg}_{\text{biota/j}}]} = 213 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$$

Comme pour l'empoisonnement secondaire, la concentration correspondante dans l'eau du milieu peut être estimée en tenant compte de la bioaccumulation de la substance :

- à une concentration dans l'eau douce selon la formule suivante :

$$QS_{\text{water_hh food}} [\mu\text{g}/\text{L}] = \frac{QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}]}{\text{BCF} [\text{L}/\text{kg}_{\text{biota}}] * \text{BMF}_1}$$

- à une concentration dans l'eau marine selon la formule suivante :

$$QS_{\text{marine_hh food}} [\mu\text{g}/\text{L}] = \frac{QS_{\text{biota_hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}]}{\text{BCF} [\text{L}/\text{kg}_{\text{biota}}] * \text{BMF}_1 * \text{BMF}_2}$$

Pour l'acide chloroacétique, on obtient donc :

$$QS_{\text{water_hh food}} = 213 / (3.162 * 1) = 67.3 \mu\text{g}/\text{L}$$

$$QS_{\text{marine_hh food}} = 213 / (3.162 * 1 * 1) = 67.3 \mu\text{g}/\text{L}$$

Proposition de norme de qualité pour la santé humaine via la consommation de produits de la pêche	213	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$
valeur correspondante dans l'eau douce et marine	67	$\mu\text{g}/\text{L}$

NORME DE QUALITE POUR LA SANTE HUMAINE VIA L'EAU DE BOISSON (QS_{DW_HH})

En principe, lorsque des normes de qualité dans l'eau de boisson existent, soit dans la Directive 98/83/CE (C.E., 1998), soit déterminées par l'OMS, elles peuvent être adoptées. Les valeurs réglementaires de la Directive 98/83/CE doivent être privilégiées par rapport aux valeurs de l'OMS qui ne sont que de simples recommandations.

Il faut signaler que ces normes réglementaires ne sont pas nécessairement établies sur la base de critères (éco)toxicologiques (par exemple les normes pour les pesticides avaient été établies par rapport à la limite de quantification analytique de l'époque pour ce type de substance, soit 0.1 $\mu\text{g}/\text{L}$).

Pour l'acide chloroacétique aucune valeur n'est mentionnée par la Directive 98/83/CE ou l'OMS.

A titre de comparaison, la valeur seuil provisoire pour l'eau de boisson est calculée de la façon suivante (E.C., 2011):

$$MPC_{\text{dw, hh}} [\mu\text{g}/\text{L}] = \frac{0.1 * \text{VTR} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel/j}}] * \text{poids corporel} [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{\text{Cons.moy.eau} [\text{L/j}]} * \frac{1}{F_{\text{sécurité}}}$$

Ce calcul tient compte de :

- la valeur toxicologique de référence (VTR), correspondant à une dose totale admissible par jour ; pour cette substance elle sera considérée égale à 3.5 µg/kg_{corporel}/j (cf. tableau ci-dessus),
- Cons.moy.eau [L/j] : une consommation d'eau moyenne de 2 L par jour,
- un poids corporel moyen de 70 kg,
- un facteur correctif de 10% (soit 0.1) afin de tenir compte de ces autres sources de contamination possibles.
- F_{sécurité} : facteur de sécurité supplémentaire pour tenir compte des potentiels effets CMR ou de perturbation endocrine de la substance. L'acide chloroacétique ne présentant aucune de ces propriétés, le facteur de sécurité est fixé à 1.

L'eau de boisson est obtenue à partir de l'eau brute du milieu après traitement pour la rendre potable. La fraction éliminée lors du traitement dépend de la technologie utilisée ainsi que des propriétés de la substance.

Ainsi, la norme de qualité correspondante dans l'eau brute se calcule de la manière suivante :

$$QS_{dw_hh} [\mu\text{g/L}] = \frac{MPC_{dw_hh} [\mu\text{g/L}]}{1 - \text{fraction éliminée}}$$

En l'absence d'information, on considèrera que la fraction éliminée est nulle et le critère pour l'eau de boisson s'appliquera alors à l'eau brute du milieu. Par ailleurs, on rappellera que ce calcul n'est donné qu'à titre indicatif et peut s'avérer inadéquat pour certaines substances et certaines populations.

Pour l'acide chloroacétique, on obtient :

$$QS_{dw_hh} = \frac{0.1 * 3.5 * 70}{2 * (1 - 0)} = 12.25 \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour l'eau destinée à la production d'eau potable	12	µg/L
--	----	------

PROPOSITION DE VALEUR GUIDE ENVIRONNEMENTALE (VGE)

La VGE est définie à partir de la valeur de la norme de qualité la plus protectrice parmi tous les compartiments étudiés.

		Valeur	Unité
OBJECTIFS DE PROTECTION INDIVIDUELS			
Organismes aquatiques (eau douce) moyenne annuelle	AA-QS_{water_eco}	0.6	µg/L
Organismes aquatiques (eau douce) Concentration Maximum Acceptable	MAC	2.5	µg/L
Organismes aquatiques (eau marine) moyenne annuelle	AA-QS_{marine_eco}	0.06	µg/L
Organismes aquatiques (eau marine) Concentration Maximum Acceptable	MAC_{marine}	0.25	µg/L
Empoisonnement secondaire des prédateurs	QS _{biota sec pois}	233	µg/kg _{biota}
valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	QS _{water_sp} QS _{marine_sp}	74	µg/L
Santé humaine via la consommation de produits de la pêche	QS _{biota hh}	213	µg/kg _{biota}
valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	QS _{water hh food} QS _{marine hh food}	67	µg/L
Santé humaine via l'eau destinée à la production d'eau potable	QS _{dw_hh}	12	µg/L

Pour l'acide chloroacétique, la norme de qualité pour la protection des organismes aquatiques est la valeur la plus faible pour l'ensemble des approches considérées.

VALEURS GUIDES POUR LE SEDIMENT

Avec un Koc de 4 L/kg et un log Kow = < 0.2, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée par le guide européen (E.C., 2011).

BIBLIOGRAPHIE

- BUA (1993). Beratergremium für umweltrelevante Altstoffe). Monochloroacetic acid, Sodium monochloroacetate, BUA report 127, S. Hirzel.
- C.E. (1967). Directive 67/548/CEE du Conseil, du 27 juin 1967, concernant le rapprochement des dispositions législatives, réglementaires et administratives relatives à la classification, l'emballage et l'étiquetage des substances dangereuses. Journal officiel n° 196 du 16/08/1967 p. 0001 - 0098.
- C.E. (1998). Directive 98/83/CE du conseil du 3 novembre 1998 relative à la qualité des eaux destinées à la consommation humaine, Journal Officiel L 330/32 du 5.12.1998: 32-54.
- C.E. (2000). Directive 2000/60/CE du Parlement Européen et du Conseil du 23 octobre 2000 établissant un cadre pour une politique communautaire dans le domaine de l'eau, JO L 327 du 22.12.2000: 1-86.
- C.E. (2006). Règlement (CE) n°1907/2006 du Parlement européen et du Conseil du 18 décembre 2006 concernant l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances (REACH), instituant une agence européenne des produits chimiques, modifiant la directive 1999/45/CE et abrogeant le règlement (CEE) n° 793/93 du Conseil et le règlement (CE) n°1488/94 de la Commission ainsi que la directive 76/769/CEE du Conseil et les directives 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE et 2000/21/CE de la Commission, JO L 396 du 30.12.2006: p. 1-849.
- C.E. (2008). Règlement (CE) no 1272/2008 du Parlement européen et du Conseil du 16 décembre 2008 relatif à la classification, à l'étiquetage et à l'emballage des substances et des mélanges, modifiant et abrogeant les directives 67/548/CEE et 1999/45/CE et modifiant le règlement (CE) no 1907/2006.
- DeAngeo, A. B., F. B. Daniel, B. M. Most et G. R. Olson (1997). "Failure of monochloroacetic acid and trichloroacetic acid administered in the drinking water to produce liver cancer in male F344/N rats." Journal of Toxicology and Environmental Health **52**(5): 425-445.
- E.C. (2004). Commission staff working document on implementation of the Community Strategy for Endocrine Disrupters - a range of substances suspected of interfering with the hormone systems of humans and wildlife (COM(1999) 706). SEC(2004) 1372., European Commission.
- E.C. (2005). "European Union Risk Assessment Report. Acide Chloroacétique. Final report." http://ecb.jrc.it/DOCUMENTS/ExistingChemicals/RISK_ASSESSMENT/REPORT/mcaareport320.pdf
- E.C. (2011). Technical Guidance For Deriving Environmental Quality Standards. Guidance Document No. 27 for the Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). Technical Report - 2011 - 055.
http://circa.europa.eu/Public/irc/env/wfd/library?l=/framework_directive/guidance_documents/tgdeqs_cis-wfd/_EN_1.0_&a=d.
- ECETOC (1999). Monochloroacetic acid (CAS no. 79-11-8) and its sodium salt (CAS no. 3926-62-3). JACC report no. 38.
- ETOX. (2007). "ETOX: Datenbank für ökotoxikologische Wirkungsdaten und Qualitätsziele." from <http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>.
- Petersen, G., D. Rasmussen, *et al.* (2007). Study on enhancing the Endocrine Disrupter priority list with a focus on low production volume chemicals, DHI: 252.
- PNUE (2001). Convention de Stockholm sur les Polluants Organiques Persistants: pp 47.
- WHO (2004). Monochloroacetic Acid in Drinking-water Background document for development of WHO Guidelines for Drinking-water Quality. World Health Organisation 2004 - WHO/SDE/WSH/03.04/85