

Rapport d'évaluation préalable pour le Défi
Diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 3,3,5-
triméthylcyclohexylidène

Numéro de registre du Chemical Abstracts Service :
6731-36-8

Environnement Canada
Santé Canada

Juillet 2008

Synopsis

Conformément à l'article 74 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement* (1999) [LCPE (1999)], les ministres de l'Environnement et de la Santé ont effectué une évaluation préalable du diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 3,3,5-triméthylcyclohexylidène (DBTMC), dont le numéro de registre du Chemical Abstracts Service (CAS) est 6731-36-8. Une priorité élevée a été donnée à l'évaluation préalable de cette substance inscrite au Défi lancé par les ministres, car elle répondait aux critères environnementaux de la catégorisation (persistance, potentiel de bioaccumulation et toxicité intrinsèque pour les organismes autres que les êtres humains) et l'on croit qu'elle est commercialisée au Canada.

L'évaluation des risques que présente la substance DBTMC pour la santé humaine n'a pas été jugée hautement prioritaire à la lumière des résultats fournis par des outils simples de détermination du risque d'exposition et du risque pour la santé mis au point par Santé Canada aux fins de la catégorisation des substances figurant sur la Liste intérieure des substances (c.-à-d. qu'elle ne répondait pas aux critères pour être considérée comme présentant le plus fort risque d'exposition ou le risque d'exposition intermédiaire et qu'elle n'a pas été classée comme cancérogène, mutagène ou toxique pour le développement ou la reproduction par un autre organisme national ou international de réglementation). Pour ces raisons, la présente évaluation est axée sur l'information pertinente pour l'évaluation des risques pour l'environnement.

Le DBTMC est une substance organique utilisée au Canada et dans d'autres pays pour le traitement des polymères ainsi que pour le durcissement des résines de polyester. Il n'est pas produit naturellement dans l'environnement. Le DBTMC n'a pas été fabriqué au Canada en 2006, mais entre 10 000 et 100 000 kg y ont été importés au cours de la même période.

Selon certaines hypothèses et les modes d'utilisation signalés, la plus grande partie de la substance est transformée pendant l'étape du traitement. Une petite proportion (0,04 p.100) pourrait être rejetée dans l'eau. Cette substance n'est pas soluble dans l'eau et tend à se déplacer vers les particules car elle est hydrophobe. Pour ces raisons, presque tout le DBTMC devrait se retrouver dans les sédiments et ne devrait pas être présent en quantités appréciables dans d'autres milieux.

Le DBTMC ne devrait pas remplir le critère de la persistance énoncé dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*, mais il devrait avoir un potentiel d'accumulation dans les organismes.

Les concentrations environnementales estimées sont de quelques ordres de grandeur plus faibles que les concentrations estimées sans effet pour les organismes aquatiques, ce qui indique une faible probabilité de risque dans le milieu aquatique.

Cette substance s'inscrira dans la mise à jour de l'inventaire de la Liste intérieure des substances, qui débutera en 2009. De plus, des activités de recherche et de surveillance viendront, le cas échéant, appuyer la vérification des hypothèses formulées au cours de l'évaluation préalable.

Compte tenu des renseignements disponibles, le DBTMC ne remplit aucun des critères de l'article 64 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement* (1999).

Introduction

La *Loi canadienne sur la protection de l'environnement* (1999) [LCPE (1999)] (Canada, 1999) impose aux ministres de l'Environnement et de la Santé de faire une évaluation préalable des substances qui répondent aux critères de la catégorisation énoncés dans la Loi, afin de déterminer si ces substances présentent ou sont susceptibles de présenter un risque pour l'environnement ou la santé humaine. À partir des résultats de l'évaluation préalable, les ministres peuvent proposer de ne rien faire à l'égard de la substance, de l'inscrire sur la Liste des substances d'intérêt prioritaire en vue d'une évaluation plus détaillée ou de recommander son inscription sur la Liste des substances toxiques de l'annexe 1 de la Loi et, s'il y a lieu, la quasi-élimination de ses rejets dans l'environnement.

En se fondant sur l'information obtenue dans le cadre de la catégorisation, les ministres ont jugé qu'une attention hautement prioritaire devait être accordée à un certain nombre de substances, à savoir :

- celles qui répondent à tous les critères de la catégorisation relatifs à l'environnement [persistance (P), potentiel de bioaccumulation (B) et toxicité intrinsèque (Ti) pour les organismes aquatiques] et que l'on croit être commercialisées au Canada;
- celles qui répondent aux critères de la catégorisation pour le plus fort risque d'exposition (PFRE) ou qui présentent un risque d'exposition intermédiaire (REI) et qui ont été jugées particulièrement dangereuses pour la santé humaine à la lumière de leur classification par d'autres organismes nationaux ou internationaux en ce qui a trait à la cancérogénicité, à la génotoxicité ou à la toxicité pour le développement ou la reproduction.

Le 9 décembre 2006, les ministres ont publié un avis d'intention dans la Partie I de la *Gazette du Canada* (Canada, 2006), dans lequel ils mettent au défi l'industrie et les autres intervenants intéressés de fournir, selon un calendrier déterminé, des renseignements particuliers sur les substances qui pourraient servir à étayer l'évaluation des risques. Ces renseignements pourraient aussi servir à élaborer et à évaluer comparativement les meilleures pratiques de gestion des risques et de gérance des produits pour ces substances jugées hautement prioritaires.

Le DBTMC est une substance dont l'évaluation des risques pour l'environnement a été jugée hautement prioritaire puisqu'elle est persistante, bioaccumulable et intrinsèquement毒ique pour les organismes aquatiques et que l'on croit être commercialisée au Canada. Le volet du Défi portant sur cette substance a été lancé le 3 février 2007 au moyen d'un avis paru dans la *Gazette du Canada* (Canada, 2007a). Le profil de cette substance a été publié en même temps. Ce profil présentait l'information technique, obtenue avant décembre 2005, sur laquelle a reposé la catégorisation de cette substance. En réponse au Défi, on a reçu des documents présentant des renseignements.

Même si l'évaluation des risques pour l'environnement du DBTMC est jugée hautement prioritaire, cette substance ne répond pas aux critères de PFRE ou de REI et de grave danger au plan de la santé humaine lorsqu'on examine les classements attribués par d'autres organismes nationaux ou internationaux concernant sa cancérogénicité, sa génotoxicité ou sa toxicité pour le développement ou la reproduction. Par conséquent, la présente évaluation est axée principalement sur les renseignements relatifs à l'évaluation des risques pour l'environnement.

Les évaluations préalables réalisées dans le cadre de la LCPE (1999) mettent l'accent sur les renseignements jugés essentiels pour déterminer si une substance est toxique selon les critères de l'article 64 de la Loi :

- « 64. [...] est toxique toute substance qui pénètre ou peut pénétrer dans l'environnement en une quantité ou concentration ou dans des conditions de nature à :
- a) avoir, immédiatement ou à long terme, un effet nocif sur l'environnement ou sur la diversité biologique;
 - b) mettre en danger l'environnement essentiel pour la vie;
 - c) constituer un danger au Canada pour la vie ou la santé humaine. »

Les évaluations préalables mettent en lumière les renseignements scientifiques et présentent les conclusions que l'on peut dégager en incorporant la méthode du poids de la preuve et la prudence.

Cette évaluation préalable inclue l'examen des renseignements sur les propriétés chimiques, les dangers, les utilisations et l'exposition, à l'inclusion des renseignements additionnels fournis dans le cadre du Défi. Des données pertinentes à l'évaluation préalable de cette substance ont été relevées dans des publications originales, des rapports de synthèse et d'évaluation, des rapports de recherche de parties intéressées et d'autres documents accessibles lors de recherches menées dernièrement, jusqu'en mai 2008. Les études importantes ont fait l'objet d'évaluations critiques. Les études clés ont fait l'objet d'évaluation critique ; les résultats de la modélisation ont pu être utilisés dans la formulation de conclusions. L'information disponible et pertinente présentée dans des évaluations des dangers faites par d'autres instances a également été utilisée. La présente évaluation préalable n'est pas le résultat d'un examen exhaustif ou critique de toutes les données disponibles, mais il fait plutôt état des études et des éléments de preuve les plus importants pour appuyer la conclusion.

La présente évaluation préalable a été effectuée par le personnel des Programme des substances existantes de Santé Canada et d'Environnement Canada et elle intègre des résultats provenant d'autres programmes appliqués par ces ministères. De plus, une version provisoire de la présente évaluation préalable a fait l'objet d'une consultation publique de 60 jours. Les considérations et les renseignements importants à la base du présent rapport sont présentés ci-après.

Identité de la substance

Aux fins du présent document, la substance est appelée DBTMC. Cet acronyme est tiré de l'un des noms anglais de la substance, le 1,1-di-*tert*-butylperoxy-3,3,5-trimethylcyclohexane.

Tableau 1. Identité de la substance

Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS)	6731-36-8
Nom dans la Liste intérieure des substances (LIS)	Diperoxyde de di- <i>tert</i> -butyle et de 3,3,5-triméthylcyclohexylidène
Noms dans les inventaires	Peroxide, 1,1'-(3,3,5-trimethylcyclohexylidene)bis[2-(1,1-dimethylethyl)] (TSCA) Di- <i>tert</i> -butyl 3,3,5-trimethylcyclohexylidene diperoxide (EINECS)
Autres noms	1,1-Bis(tert-butylperoxy)-3,5,5-trimethylcyclohexane; 1,1-Di(<i>t</i> -butylperoxy)-3,3,5-trimethylcyclohexane; 3,3,5-Trimethyl-1,1-bis(tert-butylperoxy)cyclohexane; Interrox TMCH 401C, Link-Cup TMCH, Luperco 231G, 231G40, 231XL, 231XLP; Luperox 231, 231-50, 231XL; Lupersol 230XL, 231, L 231; Perhexa 3M, 3M40, Sanperox CY 1.1; Trigonox 29, 29-40B-PD, 29/40, 29/40MB, 29A, 29B50, 29B75, 29B90, 29C75, Tx 29, 29B50, Varox 231XL
Groupe chimique	Produits chimiques organiques définis
Sous-groupe chimique	Diperoxcétals
Formule chimique	C ₁₇ H ₃₄ O ₄
Structure chimique	
SMILES	O(OC(C)(C)C)C(OOC(C)(C)C)(CC(CC1(C)C)C)C1
Masse moléculaire	302,46 g/mole

Source : National Chemical Inventories (NCI), 2007; EINECS (Inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes); TSCA (inventaire des substances chimiques visées par la *Toxic Substances Control Act*).

Propriétés physiques et chimiques

Le tableau 2 présente les propriétés physiques et chimiques (valeurs expérimentales et modélisées) du DBTMC qui se rapportent à son devenir dans l'environnement.

Tableau 2. Propriétés physiques et chimiques du DBTMC

Propriété	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
Point de fusion (°C)	expérimental	- 20 90 (temp. de décomposition)		Acros Organics MSDS, 2004; Morioka et Yamada, 1993
	modélisé	86,3		MPBPWIN, 2000
Point d'ébullition (°C)	modélisé	306,87 312,2		MPBPWIN, 2000; ACD, 2007
Pression de vapeur (Pa)	modélisé	0,09 0,13	25	MPBPWIN, 2000; ACD, 2007
Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mole)	modélisé	152,7 (0,001 507 atm·m ³ /mole)	25	HENRYWIN, 2000
Log K_{oe} (coefficent de partage octanol/eau) [sans dimension]	modélisé	7,56 6,92	25 25	KOWWIN, 2000; ACD, 2007
Log K_{co} (coefficent de partage carbone organique/eau) [L/kg]	modélisé	5,53 5,14	25	PCKOCWIN, 2000; ACD, 2007
Solubilité dans l'eau (mg/L)	modélisé	0,004 118 0,082	25 25	WSKOWWIN, 2000; ACD, 2007

La majorité des propriétés physiques et chimiques présentées dans le tableau ci-dessus ont été obtenues à l'aide de modèles de relations quantitatives structure-activité (RQSA), pour lesquels on a noté des incertitudes. Par exemple, il se peut que le domaine

d'application d'un modèle ne correspond pas exactement à la structure d'une substance chimique donnée, ce qui réduit la fiabilité des prévisions.

Fabrication et importation

Aucun initiateur de type peroxyde organique n'était fabriqué au Canada en 2000. Les peroxycétals figuraient dans la catégorie des peroxydes organiques qui avaient été les moins utilisés dans les procédés de fabrication de résines de polymères au Canada. Près de 100 000 kg de ces substances ont été utilisées à cette fin en l'an 2000 (ChemInfo Services Inc., 2002).

Une enquête réalisée à la suite d'un avis donné en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999) a montré que le DBTMC n'avait pas été fabriqué au Canada en 2006 en une quantité correspondant au seuil de déclaration de 100 kg. Huit entreprises, assujetties au seuil de déclaration de 100 kg, ont déclaré avoir importé cette substance au Canada. La quantité totale importée par ces huit entreprises se situait entre 10 000 et 100 000 kg et une entreprise a déclaré en avoir importé une quantité inférieure à 100 kg (Environnement Canada, 2007a).

La quantité de DBTMC importée au Canada dans des articles finis, par exemple sous forme de résidus dans des polymères, est inconnue.

Dans d'autres pays, la quantité de DBTMC utilisée et déclarée à l'Environmental Protection Agency des États-Unis conformément à la US Inventory Update Rule se situait entre 4,5 et 225 tonnes par an de 1990 à 1998; ces valeurs passent de 225 à 455 tonnes en 2002 (US EPA, 2002). Le DBTMC est une substance chimique produite en faible quantité par l'Union européenne (UE), ce qui indique que sa production au sein de l'UE devrait être de l'ordre de dix tonnes par an. La base de données des pays scandinaves pour les substances présentes dans des préparations indique que cette substance a été utilisée en Suède, en Norvège et au Danemark entre 1999 et 2004 (base de données SPIN, 2000). Au Japon, 108 tonnes de DBTMC ont été fabriquées ou importées en 2004. Une enquête réalisée en 2001 par le ministère de l'Économie, du Commerce et de l'Industrie du Japon montre que de 100 à 1 000 tonnes de cette substance ont été fabriquées ou importées (site Web NITE).

Utilisations

En réponse à l'avis émis conformément à l'article 71 de la LCPE pour l'année civile 2006, on a reçu des renseignements sur les utilisations du DBTMC au Canada, notamment comme additif de polymérisation, agent réticulant, catalyseur, accélérateur, initiateur, activateur, adhésif, liant, matériau d'étanchéité et bouche- pores.

La documentation publiée indique que le DBTMC est utilisé comme initiateur de la polymérisation des monomères ainsi que pour le durcissement des résines de polyester insaturées et la réticulation des polymères. Il peut servir d'initiateur de la polymérisation des plastiques et être utilisé pour le traitement du caoutchouc dans la fabrication des joints d'étanchéité pour les fenêtres et les automobiles, des boyaux et des semelles de chaussures. On peut également l'utiliser comme durcisseur de certaines résines dans des applications comme la fabrication de coques de bateaux, de piscines et de pièces de carrosserie (Arkema, 2006). Ces utilisations font appel au bris des liaisons peroxyde afin d'obtenir des radicaux réactifs qui amorcent la polymérisation.

Rejets dans l'environnement

Le DBTMC n'est pas produit naturellement dans l'environnement.

Outil de débit massique

À l'aide d'un outil de débit massique, on a estimé les rejets possibles de cette substance dans l'environnement à diverses étapes de son cycle de vie. Les données empiriques sur les rejets de substances particulières dans l'environnement sont plutôt rares. On estime donc, pour chaque type d'utilisation d'une substance, la proportion et le volume des rejets dans les divers milieux naturels ainsi que la proportion de la substance qui est transformée chimiquement ou éliminée sous forme de déchets. Les hypothèses et les paramètres utilisés pour réaliser ces estimations sont fondés sur des renseignements obtenus de diverses sources dont les réponses à des enquêtes réglementaires, les données de Statistique Canada, les sites Web des fabricants et les bases de données techniques. On compte, parmi les plus pertinents, les facteurs d'émission qui sont généralement exprimés comme la fraction de la substance rejetée dans l'environnement, surtout pendant sa fabrication, sa transformation et son utilisation dans le cadre de procédés industriels. Ces renseignements proviennent notamment de documents sur les scénarios d'émission qui sont souvent élaborés sous les auspices de l'Organisation de coopération et de développement économiques (OCDE) et des hypothèses par défaut utilisées par les divers organismes internationaux de réglementation des substances chimiques. Il est à noter que le degré d'incertitude concernant la masse d'une substance et la quantité rejetée dans l'environnement augmente généralement aux étapes plus avancées du cycle de vie. À l'exception des cas où l'on dispose de renseignements détaillés sur le taux ou le potentiel de rejet d'une substance à partir de sites d'enfouissement ou d'incinérateurs, l'outil de débit massique ne tient pas compte de façon quantitative des rejets dans l'environnement résultant de l'élimination.

Tableau 3. Rejets et pertes estimés de DBTMC dans les milieux naturels, et répartition entre les modes de gestion des déchets, y compris la transformation, d'après l'outil de débit massique¹

Devenir	Proportion de la masse (%)	Principale étape du cycle de vie
Rejets dans les milieux récepteurs :		
Sol	0,0	
Air	0,0	vulcanisation du caoutchouc
Égout ²	0,04	transport et manutention
Transformation chimique	99,58	
Transfert vers les sites d'élimination des déchets (p. ex., site d'enfouissement, incinération)	0,37	gestion des déchets

¹ Dans le cas du DBTMC, les données provenant des scénarios d'émission de l'OCDE (OCDE, 2004; Brooke et Crookes, 2007) ont été utilisées pour estimer les rejets dans l'environnement et la répartition de la substance résumés dans ce tableau. Les valeurs des rejets dans les milieux naturels ne tiennent pas compte des mesures qui peuvent atténuer les rejets à certains endroits (p. ex., une élimination partielle par les stations d'épuration des eaux usées). Les hypothèses utilisées pour produire ces estimations sont résumées dans un document d'Environnement Canada (2007b).

² C.-à-d. les eaux usées avant tout traitement.

L'application de l'outil montre que la substance est pratiquement toute perdue par transformation (99,6 p. 100 environ) pendant le traitement dans les installations de fabrication des polymères, où les liaisons peroxyde de la substance sont brisées pour obtenir des radicaux réactifs qui amorcent la polymérisation. Environ 0,4 p. 100 de la substance peut se retrouver dans des sites d'élimination des déchets à la suite des activités de manutention et de nettoyage et du rejet de produits non conformes. Une petite partie des déchets solides est incinérée, ce qui devrait donner lieu à la transformation de la substance. On estime, en se fondant surtout sur les scénarios d'émission de l'OCDE pour le traitement et les utilisations connexes de cette substance, que 0,04 p. 100 du DBTMC pourrait être rejeté dans les égouts.

Selon ces informations, la plus grande partie du DBTMC rejeté dans l'environnement se fait dans les égouts au cours de son transport et de sa manutention.

Devenir dans l'environnement

Selon ses propriétés physiques et chimiques (tableau 2) et les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (tableau 4), le DBTMC devrait demeurer en grande partie dans les sédiments, le sol et l'air et, dans une moindre mesure, dans l'eau, en fonction du milieu de rejet.

Tableau 4. Résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (EPIWIN, 2004)

Rejet de la substance dans :	Fraction de la substance répartie dans chaque milieu (%)			
	Air	Eau	Sol	Sédiments
- l'air (100 %)	37	0,6	13	49
- l'eau (100 %)	0,003	1,3	0,001	98,7
- le sol (100 %)	6×10^{-5}	0,002	99,8	0,2

Selon les résultats de l'outil de débit massique présentés au tableau 3, le plus important rejet direct de DBTMC dans l'environnement s'effectue dans les égouts pendant l'étape du traitement de sorte que le scénario de rejet de 100 p. 100 dans l'eau apparaît comme le plus pertinent au Canada. On prévoit, sur la base de son log K_{oe} très élevé de 7 environ (tableau 2) et des résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III, que la fraction du DBTMC rejetée dans l'eau s'adsorbera fortement sur les matières en suspension et les sédiments.

Persistance et potentiel de bioaccumulation

Persistance

Comme on l'a indiqué ci-dessus, le seul rejet direct de DBTMC dans l'environnement pourrait être celui des égouts qui se déversent dans les eaux de surface (tableau 3). Selon l'analyse du devenir présentée dans le tableau 4, une fois dans l'eau, cette substance se répartit presque totalement dans les sédiments (99 %) et, dans une mesure beaucoup moindre, dans l'eau (1 %). Selon cette même analyse, le DBTMC ne devrait pas passer dans l'air ou dans le sol s'il est rejeté dans l'eau. Pour cette raison, on ne doit évaluer le potentiel de persistance du DBTMC que pour le milieu aquatique.

Alors que les peroxydes sont habituellement jugés réactifs à cause de leur lien peroxyde, on note des différences de réactivité entre les différentes catégories d'organoperoxydes, et même entre les différentes substances d'une même catégorie.

Les peroxycétales, comme le DBTMC, sont assez stables à leur température d'entreposage recommandée de moins de 38 °C, avec une demi-vie d'au moins un an (ATOFINA, 2001). Toutefois, les conditions d'entreposage ne correspondent pas à celles des voies de transformation qui peuvent exister dans le milieu naturel, comme l'hydrolyse, la photolyse et la biodégradation.

Pour ce qui est de l'hydrolyse, le DMBP ne comporte pas de groupes fonctionnels qui devraient réagir avec l'eau. En ce qui concerne la photolyse, on ne dispose pas de données sur le spectre d'absorption du DMBP ou d'un composé analogue. Il existe des données expérimentales disponibles pour évaluer la biodégradation du DBTMC et d'autres peroxydes organiques. En somme, ces données suggèrent que le DBTMC ne serait pas persistant dans l'eau.

Premièrement, dans un essai en flacon fermé de biodégradabilité rapide (Directive 301 D de l'OCDE) mené avec le DBTMC, une biodégradation ultime de 2% et de 37% est survenue aux jours 28 et 112 respectivement (Soumission d'étude, 2006a). Dans cet essai, les liens peroxydes ont pu être initialement brisés pour former des produits comme du butanol tertiaire et du 3,3,5-trimethylcyclohexanone, suivi par une biodégradation de ces produits de dégradation. Des données provenant de la base de données NITE (2002) pour le DBTMC indiquent une biodégradation de 12% et 8% après 28 jours dans le cadre d'un essai de biodégradabilité rapide (Directive 301 C de l'OCDE). Ces résultats ont été mesurés par analyse de chromatographie gazeuse et par spectrométrie ultraviolette-visible, respectivement.

On a trouvé des études sur la biodégradation d'autres peroxydes organiques. Même si une valeur plus faible est attribuée à ces données, elles sont utilisées comme sources de données pour évaluer le potentiel de persistance du DBTMC. Premièrement, dans un essai en flacon fermé (Directive 301 D de l'OCDE), le peroxyde de dialkyle Peroxyde de bis(a,a-dimethylbenzyle) (No CAS 80-43-3) a présenté une biodégradation de 18% et de 60% au jour 28 et 57, respectivement (OPPSD, 2008). Pour le peroxyde (2,5-diméthyl-2,5-di-(*tert*-butylperoxy)-hexane (n° CAS 78-63-7), un autre peroxyde de dialkyle, il était presque complètement dégradé après 8 semaines lors d'un test de boues activées semi-instantanées (OPPSD, 2008). Dans le cadre d'un essai de biodégradation rapide (Directive 301 C de l'OCDE), on n'a observé que 4 % de biodégradation après 28 jours (NITE, 2002).

Dans une évaluation des risques de l'hydroperoxyde de *tert*-butyle (n° CAS 75-91-2), le Bureau des substances chimiques des Pays-Bas a déclaré que cette substance n'était pas dégradée de façon appréciable selon des essais de dégradation abiotique, pour lesquels on a obtenu des demi-vies de dégradation principale comprises entre 170 et 6 900 jours au cours d'essais de 10 jours dans de l'eau ultrapure, et entre 36 et 45 jours au cours d'essais de 10 jours avec de la boue stérilisée (Bureau des substances chimiques, 2004). Cette substance ne se biodégradait pas rapidement selon l'essai de Sturm modifié et selon l'essai en vase clos, qui mesurent la dégradation finale. Toutefois, cette substance était biodégradée au cours d'essais d'une heure dans la boue activée, avec des demi-vies de dégradation principale de 18 à 24 minutes (Bureau des substances chimiques, 2004). Ces résultats indiquent que cet hydroperoxyde n'est pas hydrolysé et qu'il présente une forte tendance à se sorber aux matières organiques. Ils montrent aussi que ce peroxyde subit une dégradation principale en quelques minutes. Toutefois, il résiste à la dégradation ultime. Il faut noter que le lien peroxyde des hydroperoxydes est à l'extrémité de la molécule, où il est plus exposé aux attaques que celui des diperoxycétals, qui est plus près du centre de la molécule.

D'autres types d'études étaient disponibles pour évaluer la biodégradation, qui semblent indiquer que le DMBP n'est pas persistant. D'abord, selon une étude du métabolisme *in vitro* portant sur la fraction enzymatique S9 du foie de la truite (OPPSD 2008), le DBTMC était rapidement métabolisé en conditions d'incubation et se dégradait rapidement chez des témoins dont la fraction S9 avait été dénaturée. Deux études identiques menées avec d'autres peroxydes organiques (CAS No 1068-27-5; diperoxyde

de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-tétraméthylbut-2-yne-1,4-ylène et CAS No. 78-63-7; diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-tétraméthyltétraméthylène) ont aussi trouvé que ces substances étaient dégradées rapidement (OPPSD, 2008). Plus précisément, la demi-vie déclarée pour le contrôle d'une des études était de 1,89 heure. Les résultats des études de métabolisme indiquent que le DBTMC, ainsi que d'autres peroxydes organiques, peuvent subir une dégradation biotique et abiotique très rapide dans l'environnement et pour cette raison, il ne peuvent être considérées comme des substances persistantes.

Deuxièmement, au cours de deux essais de toxicité en laboratoire menés avec un peroxyde de dialkyle (CAS No 1068-27-5), la concentration mesurée de cette substance dans l'eau a chuté de 3,76 à moins de 0,081 mg/L après 72 h, et de 5,31 à 0,375 mg/L après 48 h (Soumission d'étude 2006b et 2006c). Compte tenu de la dégradation du cette substance dans l'une des études de métabolisme mentionnée ci-dessus, cette disparition peut être due à la dégradation de cette substance.

Bien que des données expérimentales sur la dégradation du DBTMC et des substances analogues soient disponibles, on présente aussi les résultats d'études RQSA effectuées à l'aide de modèles de dégradation. La modélisation indique que le DBTMC semble être persistant dans l'eau et dans les sédiments. Toutefois, les valeurs modélisées sont jugées moins fiables, car les ensembles d'apprentissage des modèles utilisés ne comportaient pas de substances chimiques ayant une structure semblable à celle du DBTMC. En effet, ces modèles fondés sur des fragments ne tiennent pas compte du lien peroxyde, qui peut être réactif avec certaines substances. Étant donné que des données expérimentales sont disponibles et que les valeurs modélisées sont moins fiables, on n'attribue que peu d'importance à ces dernières dans l'évaluation de la persistance environnementale du DBTMC.

Le potentiel de persistance du DBTMC dans les sédiments est plus préoccupant, étant donné que, rejetée dans l'eau de surface, cette substance devrait se répartir principalement dans ce milieu environnemental (tableau 4). Selon les données présentées à Environnement Canada, la réactivité des peroxydes organiques en présence de métaux comme le fer et le manganèse devrait empêcher leur accumulation dans les sols et les sédiments (selon une déclaration dans le cadre du Défi, 2008), car ces métaux sont abondants dans ces matrices.

On a présenté les différents éléments de preuve ci-dessus pour évaluer la persistance du DBTMC en cas de rejet dans un milieu aquatique. En se fondant sur ces éléments de preuve, on a conclu que le DBTMC ne satisfait pas aux critères de persistance ni dans l'eau (demi-vie supérieure ou égale à 182 jours), ni dans les sédiments (demi-vie supérieure ou égale à 365 jours), conformément au *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Bioaccumulation

Les valeurs expérimentales du facteur de bioconcentration (FBC) chez le poisson (tableau 5a) varient de 3 500 à 13 200 L/kg (NITE, 2002; voir annexe), ce qui indique que le DBTMC peut faire l'objet d'une bioconcentration dans l'environnement. Au cours de cette étude, des poissons ont été exposés pendant huit semaines en conditions d'écoulement continu. Des prélèvements et des analyses de l'eau étaient effectués deux fois par semaine tandis que les prélèvements et les analyses des poissons étaient réalisés toutes les deux semaines. Les poissons n'étaient pas nourris les jours où ils faisaient l'objet de prélèvements. Les renseignements tirés de la base de données NITE et présentés par l'industrie (OPPSD, 2008) indiquent des FBC en huit semaines se situant entre 4 960 et 6 510. Ces valeurs peuvent être considérées comme des FBC à l'équilibre. L'OPPSD (2008) a signalé la possibilité d'une erreur dans le calcul des FBC de cette étude. Il semble que les valeurs indiquées aient été corrigées en fonction de l'efficacité de la récupération de la méthode d'analyse, mais cette façon de faire pourrait ne pas tenir compte de la dégradation du DBTMC. L'OPPSD (2008) a procédé à une étude de cette récupération en utilisant des échantillons enrichis d'homogénats de poisson et a constaté que le peroxyde organique était rapidement dégradé et qu'il ne pouvait donc être récupéré. En l'absence de renseignements détaillés sur l'efficacité de la récupération effectuée pour l'étude des données de la NITE, il est impossible de déterminer si les FBC obtenus sont exacts ou s'ils sont surestimés par le fait qu'on n'a pas tenu compte de la dégradation au moment du calcul du facteur de correction (OPPSD, 2008). Le retrait du facteur de correction donne une gamme de FBC à l'équilibre variant entre 3 750 et 4 922 (OPPSD, 2008). La méthode d'Arnot *et al.* (2008) permet cependant de tenir compte de l'incertitude des données sur le FBC au moment du calcul du potentiel de métabolisation.

Tableau 5a. Valeurs empiriques de la bioaccumulation

Organisme d'essai	Concentration utilisée (mg/L)	Paramètre	Valeur en masse humide (L/kg)	Référence
<i>Cyprinus carpio</i> (carpe commune)	0,2	FBC	3 500 – 9 860	base de données NITE, 2002
<i>Cyprinus carpio</i> (carpe commune)	0,02	FBC	4 960 – 13 200	base de données NITE, 2002

Les valeurs à l'équilibre du FBC de la base de données NITE ont été utilisées pour obtenir une constante du taux métabolique *in vivo* (k_M) par la méthode d'Arnot *et al.* (2008). Selon cette méthode, la valeur de k_M est donnée par l'équation :

$$k_M = (k_1\phi/FBC) - (k_2 + k_E + k_G) \quad (1)$$

où :

k_M = constante du taux métabolique (1/jour)

k_1 = constante du taux d'absorption (Arnot et Gobas, 2003)

ϕ = fraction de la substance chimique libre dissoute dans l'eau (Arnot et Gobas, 2003)

FBC = facteur de bioconcentration fondé sur les données empiriques existantes

k_2 = constante du taux d'élimination (Arnot et Gobas, 2003)

k_E = constante du taux d'évacuation fécale (Arnot et Gobas, 2003)

k_G = constante du taux de croissance (Arnot et Gobas, 2003)

La valeur non corrigée du FBC n'a pas été utilisée (tel que proposé par l'OPPSD), car l'application de cette méthode *in vivo* aurait donné lieu à un double comptage du potentiel de métabolisme du DBTMC. La moyenne géométrique des FBC signalés après huit semaines (à l'équilibre), de 5 880, a donc été utilisée pour les calculs ci-dessus.

La méthode d'Arnot *et al.* (2008) permet d'estimer des facteurs de confiance (FC) pour la k_M et ainsi tenir compte de l'erreur liée aux données obtenues *in vivo* (c.-à-d. la variabilité des mesures, l'incertitude de l'estimation des paramètres et l'erreur du modèle ainsi que l'incertitude de la valeur estimée du $\log K_{oe}$). Un FC de $\pm 13,3$ a été calculé pour les données disponibles sur le FBC.

Étant donné que le potentiel de métabolisme peut être lié à la masse corporelle et à la température (p. ex., Hu et Layton, 2001; Nichols *et al.*, 2006), la k_M a été normalisée à 15 °C et ensuite corrigée en fonction de la masse corporelle des poissons du niveau trophique intermédiaire du modèle d'Arnot-Gobas (0,184 g). Le poisson de niveau trophique intermédiaire a été utilisé pour représenter l'entrant général du modèle, tel que proposé par le concepteur du modèle (Arnot, comm. pers.), car il est le plus représentatif de la masse et de la taille des poissons consommés par des oiseaux ou des animaux terrestres piscivores. Une fourchette de k_M de 0,0002 à 0,04 a été obtenue après qu'on ait procédé à la normalisation.

Une étude *in vitro* du métabolisme portant sur la fraction enzymatique S9 a été citée par l'OPPSD (2008). Les constantes du taux métabolique pour le poisson entier, $k_{mét}$, de cette étude ont été obtenues par l'OPPSD qui a appliqué les méthodes d'extrapolation de Cowan-Ellsberry *et al.* (2008). La $k_{mét}$ S9 pour l'écoulement artériel et portal (la plus réaliste) signalée est de 0,22 (tableau 4; OPPSD, 2008). Au contraire de la méthode d'Arnot *et al.* (2008), les estimations des $k_{mét}$ à partir d'essais *in vitro* ne prévoient pas de facteur de confiance. Cowan-Ellsberry *et al.* (2008) ont proposé que l'acceptation des méthodes *in vitro* soit conforme à la connaissance des incertitudes de ces méthodes et à la réalisation d'essais portant sur des substances d'autres types afin d'évaluer les diverses hypothèses utilisées. Han *et al.* (2007) ont aussi mentionné que l'incertitude liée aux paramètres de modélisation de la méthode fondée sur les hépatocytes devrait être connue. Vu l'impossibilité d'estimer directement des limites pour les données obtenues *in vitro*, une erreur d'un ordre de grandeur (FC = ± 10) pour la variabilité et l'incertitude liées aux paramètres servant à déterminer les $k_{mét}$ a été choisie pour hypothèse. Les valeurs de la fraction S9 et de la $k_{mét}$ ont aussi été normalisées en fonction de la masse du poisson du

niveau trophique intermédiaire du modèle d'Arnot et Gobas. La valeur normalisée de la $k_{mét}$ ainsi obtenue se situait entre 0,14 et 1,44.

Les constantes du taux métabolique déterminées *in vivo* et *in vitro* ont été utilisées pour corriger les valeurs prévues du FBC et du FBA à partir de la valeur par défaut du métabolisme nul du modèle d'Arnot et Gobas. Les résultats obtenus et d'autres estimations fondées sur des RQSA sont présentés dans le tableau 5b.

Tableau 5b. FBA et FBC du DBTMC prévus par le modèle cinétique d'Arnot et Gobas (v1.11)

k_M (1/jour)	$k_{mét}$ avec S9 (1/jour)	Log K_{oe} utilisé	FBC d'Arnot et Gobas	FBA d'Arnot et Gobas*	Demi-vie (jours)
2,16E-04 (FC -13,3) (2,5%)		7,6	21 093	5 862 361	3 209
2,87E-03 (médiane)		7,6	5 760	2 049 444	242
0,04 (FC +13,3) (97,5%)		7,6	506	49 370	17
	1,44E-02 (FC -10)	7,6	1 357	276 963	48
	1,44E-01	7,6	143	4 499	5
	1,44E+00 (FC +10)	7,6	15	61	0,5

* L'utilisation de la moyenne géométrique de 4 445 du FBC, fondée sur les données sur le FBC non corrigées de la base de données NITE pour le calcul de la k_M , ne modifie pas le résultat des valeurs modélisées du FBA. Toutes les valeurs du FBA corrigées pour la k_M *in vivo* sont supérieures à 5 000.

La comparaison des constantes des taux métaboliques indique un écart d'un ou deux ordres de grandeur environ entre les valeurs médianes des k_M et des $k_{mét}$ aux extrémités des gammes. Les FBC se situaient entre 15 et 21 093 et leur moyenne était de 4 812 environ, cela indépendamment de la méthode de correction du métabolisme utilisée. Quant aux FBA, ils variaient entre 61 et 5 862 361 et leur moyenne était de 1 373 400, ici aussi sans égard à la méthode de correction. Les demi-vies variaient de moins de un jour à plusieurs années. La moyenne géométrique du FBC à l'équilibre signalée dans la base de données NITE est de 5 880, ce qui concorde très bien avec le FBC corrigé de 5 760 (facteur = 1,02) et correspond à une constante de taux métabolique de 0,003 environ. Le degré de confiance le plus élevé est celui du FBA prévu à partir de cette correction du taux métabolique. Le FBA correspondant au FBC corrigé de 5 760 pour le métabolisme est de 2 049 444. Le FBC de 143, corrigé par la $k_{mét}$ S9 (sans FC), est de 41 fois environ inférieur à la moyenne géométrique de la base de données NITE, de 5 880, et de 31 fois

inférieur environ à la moyenne géométrique des FBC non corrigés de l'OPPSD, qui est de 4 445.

Tableau 5c. Données modélisées supplémentaires sur la bioaccumulation

Organisme d'essai	Paramètre	Valeur en masse humide (L/kg)	Référence
Poisson	FBC	106 000	ACD, 2007
Poisson	FBC	25 119	OASIS Forecast, 2005
Poisson	FBC	10 965	BCFWIN, 2000

Les valeurs modélisées du tableau 5c sont jugées moins fiables, car les modèles utilisés ne tiennent pas compte du métabolisme et leurs ensembles de données d'apprentissage ne comportent pas de substance de structure chimique semblable.

Selon le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000), le FBA est le paramètre privilégié pour l'évaluation du potentiel de bioaccumulation d'une substance. Cela s'explique par le fait que le FBC ne tient pas correctement compte du potentiel de bioaccumulation lié à l'alimentation, qui constitue la principale voie pour les substances dont le $\log K_{oe}$ est supérieur à 4,0 environ (Arnot et Gobas, 2003). Comme on ne disposait pas de données empiriques sur le FBA pour le DBTMC, sa valeur a été modélisée. Il a été jugé que la modélisation cinétique du bilan massique constituait la méthode de prévision la plus fiable pour la détermination du potentiel de bioaccumulation du DBTMC, car elle permet d'apporter une correction pour le métabolisme et que le $\log K_{oe}$ du DBTMC se situe dans le domaine du modèle.

Les valeurs du FBC et du FBA corrigées pour le métabolisme se situent entre 15 et 21 093 et entre 61 et 2 049 444, respectivement, selon le taux métabolique. Environnement Canada a analysé ces valeurs et déterminé que le taux métabolique le plus fiable était celui pour lequel le FBC estimé et corrigé pour le métabolisme correspondait le mieux au FBC empirique. L'application de ce taux métabolique au FBA estimé donne un FBA de 2 049 444. Par conséquent, si l'on se fonde sur les valeurs empiriques et celles obtenues par modélisation cinétique corrigées pour le métabolisme, et si l'on prend en considération les résultats des essais *in vivo* et *in vitro* sur le potentiel métabolique, le DBTMC satisfait au critère de la bioaccumulation ($FBA \geq 5000$) énoncé dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Potentiel d'effets écologiques nocifs

Une évaluation quantitative fondée sur l'exposition et les effets écologiques a été réalisée pour cette substance dans le cadre de l'évaluation par le poids de la preuve de son potentiel d'effets nocifs.

Une concentration environnementale estimée (CEE) a tout d'abord été déterminée par analyse des voies d'exposition. Une concentration estimée sans effet (CESE) a été obtenue en divisant une valeur critique de toxicité (VCT), choisie à partir des données disponibles sur la toxicité, par un facteur d'évaluation.

Évaluation de l'exposition environnementale

Aucune donnée empirique n'a été relevée sur les concentrations de DBTMC dans l'environnement. Il a été estimé qu'une proportion de 0,04 p. 100 de la quantité utilisée dans une installation de fabrication de polymères pouvait être rejetée dans les effluents liquides. On a donc calculé une CEE prudente à l'aide de l'équation suivante (Environnement Canada, 2007c) :

$$\text{CEE} = \frac{I \times L \times (1-R) \times 1\,000}{D \times (F + S) \times 86\,400}$$

où :

- CEE = concentration environnementale estimée (mg/L)
- I = masse maximale importée (ou fabriquée) dans un complexe industriel relié à un point de rejet (12 400 kg/an; OPPSD, 2008)
- L = pertes dues au traitement (0,0004)
- R = taux d'élimination de la station d'épuration des eaux usées (0,92) fondé sur les résultats du modèle Simple Treat 3.0
- 1 000 = conversion des unités (kg/m³ en mg/L)
- D = jours de rejet de la substance du site (250 jours/an; OPPSD, 2008)
- F = débit du cours d'eau récepteur (0,65 m³/s), valeur par défaut (Environnement Canada, 2007c)
- S = débit des effluents de la station d'épuration des eaux usées (0,04 m³/s), valeur par défaut (Environnement Canada, 2007c)
- 86 400 = conversion des unités (jours en secondes)

Selon cette équation, la CEE dans les eaux réceptrices est de 0,00003 mg/L.

Évaluation des effets écologiques

Des données expérimentales sur la toxicité aiguë du DBTMC sont présentées dans le tableau 6. Une étude réalisée par MITI a indiqué une CL₅₀ en 48 heures chez le poisson *Oryzias latipes* supérieure à 500 mg/L. Cependant, puisque cette valeur est supérieure de plusieurs ordres de grandeur à la solubilité dans l'eau estimée pour le DBTMC (< 1 mg/L; Tableau 2), la validité de ces résultats est questionnée (Soumission d'étude, 2008; voir annexe).

Dans une autre étude soumise à Environnement Canada, une CE₅₀ en 48 heures de 0,13 mg/L a été mesurée chez *Daphnia magna*, en se fondant sur la valeur nominale du test (Soumission d'étude, 2006d; voir annexe). Dans ce test, un co-solvant avait été ajouté pour accroître la solubilité de la substance. Le co-solvant a fait l'objet d'une vérification et ne s'est pas avéré毒ique.

Tableau 6. Données empiriques sur la toxicité aquatique

Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
<i>Oryzias latipes</i> (poisson médaka)	tox. aiguë	CL ₅₀	> 500	Soumission d'étude, 2008
<i>Daphnia magna</i> (daphnie)	tox. aiguë	CE ₅₀	0,13	Soumission d'étude, 2006d

CL₅₀ – Concentration létale pour 50 % de la population d'essai.

CE₅₀ – Concentration ayant un effet sur 50 % de la population d'essai.

Une gamme de prévisions de la toxicité en milieu aquatique (0,006 à 0,440 mg/L) ont aussi été obtenue à l'aide de divers modèles RQSA. Toutefois, les valeurs modélisées sont jugées peu fiables, car les ensembles d'apprentissage des modèles utilisés ne comportaient pas de substances chimiques ayant une structure semblable à celle du DBTMC.

Afin de faciliter la caractérisation du risque écologique du DBTMC, une concentration estimée sans effet (CESE) a été dérivée. À cette fin, on a d'abord sélectionné une valeur critique de toxicité (VCT) de 0,13 mg/L, en se fondant sur le test mené avec *D. magna*. Cette VCT a ensuite été divisée par un facteur d'évaluation de 100 pour tenir compte de la variabilité interspécifique et intraspécifique de la sensibilité, pour estimer une concentration sans effet à long terme à partir d'une CL₅₀ à court terme, et pour tenir compte de l'incertitude découlant de l'extrapolation au terrain de résultats obtenus en laboratoire. Il est à noter que la bioaccumulation peut faire en sorte que les niveaux de la toxicité chronique de cette substance soient passablement inférieurs à ceux de la toxicité aiguë. Une CESE de 0,0013 mg/L a été obtenue.

Caractérisation du risque écologique

La démarche adoptée pour la présente évaluation écologique préalable consistait à examiner divers éléments d'information pertinents et à formuler des conclusions fondées sur la méthode du poids de la preuve et le principe de prudence, comme l'exige l'article 76.1 de la LCPE (1999). On a accordé une attention particulière à l'analyse du quotient de risque, à la persistance, à la bioaccumulation, à la toxicité, aux sources et au devenir dans l'environnement.

On a utilisé un outil fondé sur le débit massique pour estimer les rejets possibles du DBTMC dans l'environnement à diverses étapes de son cycle de vie. Les résultats indiquent que les pertes de DBTMC surviennent principalement au cours de sa transformation lors de son usage dans les procédés industriels. Une faible proportion devrait se retrouver dans les sites d'enfouissement des déchets, et une proportion encore plus faible (0,04 %) pourrait être rejetée dans les égouts. Selon cette analyse, le DBTMC pourrait être rejeté dans l'environnement par les effluents des stations d'épuration des eaux d'égout. Une fois rejeté dans les écosystèmes aquatiques, le DBTMC se répartit surtout dans les sédiments, alors qu'une plus faible proportion demeure dans la colonne d'eau. En se fondant sur des éléments probants obtenus au cours d'études expérimentales disponibles pour le DBTMC, et pour d'autres peroxydes organiques, on a déterminé que le DBTMC n'est pas persistant dans l'eau et dans les sédiments. Toutefois, sur la base des facteurs de bioaccumulation estimés (FBA), on a déterminé que le DBTMC était bioaccumulable. Toutefois, parce qu'il ne devrait pas persister dans l'eau, le DBTMC ne devrait pas se bioaccumuler de façon importante dans les organismes s'il est rejeté dans les écosystèmes aquatiques. De plus, la faible solubilité dans l'eau du DBTMC devrait mitiger en partie son potentiel de danger pour les organismes aquatiques.

Pour le milieu aquatique du Canada, on a effectué une analyse du quotient de risque (CEE/CESE) prenant en compte des expositions estimées prudentes avec des concentrations prudentes pour des effets toxiques nocifs possibles. Une CEE estimée de 0,00003 mg/L, et on a calculé une CESE de 0,0013 mg/L (voir ci-dessus). Ces deux valeurs donnent un quotient de risque (CEE/CESE) de 0,00003/0,0013, soit 0,02. Cette valeur indique que les organismes pélagiques ne devraient pas courir de risques si du DBTMC est rejeté dans les écosystèmes aquatiques.

Si le DBTMC est rejeté dans un plan d'eau, il va se répartir dans les sédiments où les organismes benthiques y sont exposés. Étant donné l'absence de données de surveillance environnementale ou de données sur la toxicité spécifiques à ces organismes, la méthode du partage à l'équilibre pourrait être utilisée pour calculer une CEE et une CESE à partir des valeurs présentées plus haut pour le milieu aquatique. Le quotient de risque (CEE/CESE) pour le milieu des sédiments serait donc le même que pour le milieu aquatique, à savoir 0,02. Cette valeur indique aussi que les organismes benthiques ne devraient vraisemblablement pas courir de risques si du DMBP est rejeté dans les écosystèmes aquatiques.

Incertitudes de l'évaluation du risque écologique

Il demeure des incertitudes quant à la persistance du DBTMC dans l'air, l'eau, le sol et les sédiments dans les conditions naturelles. Alors que des études sur le métabolisme et certains tests de biodégradation menés avec le DBTMC ainsi qu'avec d'autres types d'organoperoxydes suggèrent que ces substances peuvent disparaître rapidement lors de tests de laboratoire, des données spécifiques au DBTMC seraient nécessaires afin de dériver une demi-vie réelle.

Il existe une certaine incertitude au sujet du potentiel de bioconcentration du DBTMC, car on ne disposait que d'une étude sur la bioconcentration et les renseignements de la base de données NITE étaient peu détaillés. L'estimation du métabolisme du DBTMC chez les poissons est aussi incertaine, comme le montre la gamme des valeurs des k_M et $k_{mét}$. Les limites d'incertitude ont cependant été utilisées pour déterminer le taux métabolique le plus fiable à appliquer à la correction du FBA prévu devant servir à formuler une conclusion sur le potentiel de bioaccumulation.

Conclusion

À la lumière des renseignements présentés dans cette évaluation préalable, il est conclu que le DBTMC ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité ou concentration ou dans des conditions de nature à avoir, immédiatement ou à long terme, un effet nocif sur l'environnement ou sur la diversité biologique ou à mettre en danger l'environnement essentiel pour la vie. Il est aussi conclu que le DBTMC répond au critère de la bioaccumulation mais non à celui de la persistance qui sont énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Il est donc conclu que le DBTMC ne satisfait pas à la définition de substance toxique énoncée à l'alinéa 64a) de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement* (1999).

Références

[ACD] Advanced Chemistry Development. 2007. Valeurs calculées à l'aide du logiciel Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) V9.04 for Solaris© 1994-2007, présenté dans la base de données SciFinder. Consulté le 25 juillet 2007.

Acros Organics N.V. Material Safety Data Sheet. 1,1-Di-(tert-butylperoxy)-3,3,5-trimethylcyclohexane, 75% solution in aromatic free mineral spirit. 10/5/2004.
<http://msdsonline.com>

[AIES] Artificial Intelligence Expert System. 2003-2005. v 1.25. Ottawa (ON) : Environnement Canada. Modèle élaboré par Stefan Niculescu. Disponible à : Environnement Canada, Division des substances existantes, Division des substances nouvelles, Ottawa, K1A 0H3.

Arkema. Products in Everyday Life. Consulté le 14 décembre 2006.
http://www.terrainsdentente.arkemagroup.com/telechargement/Arkema_products_va_fin al.pdf

Arnot, J.A. et Gobas, F.A.P.C. 2003. A Generic QSAR for Assessing the Bioaccumulation Potential of Organic Chemicals in Aquatic Food Webs. *QSAR Comb. Sci.* 22(3): 337-345.

Arnot, J.A., D. Mackay et M. Bonnell. 2008. Estimating metabolic biotransformation rates in fish from laboratory data. *Environ. Toxicol. Chem.* 27(2): 341–351.

ATOFINA. 2001. Organic Peroxides. Product Bulletin. Peroxyketals. ATOFINA Chemicals, Inc., Philadelphie, PA. 7 pages.

[BCFWIN] BioConcentration Factor Program for Windows [Modèle d'estimation]. 2000. Version 2.15. Washington (DC): US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY): Syracuse Research Corporation.
www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Brooke, D. N. et Crookes, M. J. 2007. Emission scenario document on transport and storage of chemicals [Internet]. Bristol (Royaume-Uni): Environment Agency. Product code:SCHO0407BMLK-E-P [cité le 26 février 2008]. <http://publications.environment-agency.gov.uk/pdf/SCHO0407BMLK-e-e.pdf>

Bureau des substances chimiques. 2004. Risk Assessment. Tertiary Butyl Hydroperoxide (TBHP). *Final draft of 9 April 2004*. R319_0404_env. Bureau des substances chimiques. Bilthoven, Pays-Bas. 70 pages.

Canada. 1999. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*, L.C., 1999, chap. 33. partie #, art. #. *Gazette du Canada* (Partie III), vol. 22, n° 3.
<http://canadagazette.gc.ca/partIII/1999/g3-02203.pdf>

Canada. 2000. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999): Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*, P.C. 2000-348, 23 mars 2000, DORS/2000-107, *Gazette du Canada*, Partie II, vol. 134, n° 7, p. 607-612.
<http://canadagazette.gc.ca/partII/2000/20000329/pdf/g2-13407.pdf>

Canada, Ministère de l'Environnement et Ministère de la Santé. 2006. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis d'intention d'élaborer et de mettre en œuvre des mesures d'évaluation et de gestion des risques que certaines substances présentent pour la santé des Canadiens et leur environnement. Gazette du Canada*. Partie I, vol. 140, no 49, p. 4109 à 4117.
<http://canadagazette.gc.ca/partI/2006/20061209/pdf/g1-14049.pdf>

Canada, Ministère de l'Environnement et Ministère de la Santé. 2007. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) Avis de première divulgation d'information technique concernant les substances identifiées dans le Défi*. *Gazette du Canada*, Partie I, vol. 141, n° 5, p. 162-165. <http://canadagazette.gc.ca/partI/2007/20070203/pdf/g1-14105.pdf>

ChemInfo Services Inc. 2002. Use of Initiators in the Canadian Polymer Resin Manufacturing and Polymer Resin Processing Sectors. mars 2002. Ébauche de rapport. Toronto: Cheminfo Services Inc. 62 p. Présenté à Environnement Canada, Bureau national de la prévention de la pollution. Disponible sur demande.

Cowan-Ellsberry, C.E., S.D. Dyer, S. Erhardt, M.J. Bernhard, A.L. Roe, M.E. Dowty et A.V. Weisbrod. 2008. Approach for extrapolating in vitro metabolism data to refine bioconcentration factor estimates. *Chemosphere* 70:1804-1817.

Déclaration dans le cadre du Défi. 2008. Communication confidentielle pour le DMBP, n° CAS 1068-27-5, présentée à la Division des substances existantes d'Environnement Canada dans le cadre de l'initiative du Plan de gestion des produits chimiques du Défi. Reçu le 2 août 2007.

[ECOSAR] Ecological Structural Activity Relationships [modèle d'estimation]. 2004. Version 0.99h. Washington (DC): US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY): Syracuse Research Corporation. www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Environnement Canada. 2007a. Données sur les substances du premier lot recueillies conformément à l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* et à l'Avis concernant certaines substances identifiées dans le Défi, publié le 9 décembre 2006 dans l'Avis d'intention d'élaborer et de mettre en œuvre des mesures d'évaluation et de gestion des risques que certaines substances présentent pour la santé

des Canadiens et leur environnement. Données préparées par Environnement Canada, Programme des substances existantes, Ottawa K1A 0H3.

Environnement Canada. 2007b. Assumptions, limitations and uncertainties of the Mass Flow Tool for (3,3,5-trimethylcyclohexylidene)bis[(1,1-dimethylethyl)peroxide] (DBTMC), Chemical Abstracts Service Registry Number 6731-36-8. Division des substances existantes, Environnement Canada, Gatineau (Qc). Ébauche de document interne, Gatineau (Québec), Environnement Canada, Division des substances existantes.

Environnement Canada. 2007c. Guidance for Conducting Ecological Assessments under CEPA 1999. Science Resource Technical Series. Technical Guidance Module. The Industrial Generic Exposure Tool – Aquatic (IGETA). Document de travail, Gatineau (Québec), Environnement Canada, Division des substances existantes.

[EPIWIN] Estimation Programs Interface for Microsoft Windows [Modèle d'estimation]. 2004. Version 3.12. Washington (DC): US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY): Syracuse Research Corporation. www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Han, X., D.L. Nabb, R.T. Mingoia et C.-H. Yang. 2007. Determination of xenobiotic intrinsic clearance in freshly isolated hepatocytes from rainbow trout (*Oncorhynchus mykiss*) and rat and its application in bioaccumulation assessment. *Environ. Sci. Technol.* 41: 3269 -3276.

[HENRYWIN] Henry's Law Constant Program for Microsoft Windows [Modèle d'estimation]. 2000. Version 3.10. Washington (DC): US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY): Syracuse Research Corporation. www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Hu T.-M. et W.L. Layton. 2001. Allometric scaling of xenobiotic clearance: uncertainty versus universality. *AAPS PharmSci.* 3(4) Article 29. <http://www.pharmsci.org/>

[KOWWIN] Octanol-Water Partition Coefficient Program for Microsoft Windows [Modèle d'estimation]. 2000. Version 1.67. Washington (DC): US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY): Syracuse Research Corporation. www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Morioka, I. et K. Yamada. 1993. Manufacture of high-molecular-weight styrene polymers. *Jpn. Kokai Tokkyo Koho*, 5 pages. CODEN : JKXXAF JP 05178914 A 19930720 Heisei. Brevet rédigé en japonais. Application : JP 91-345988 19911227. Priorité : CAN 120:271468 AN 1994:271468. Cité dans SciFinder, 2007.

[MPBPWIN] Melting Point Boiling Point Program for Microsoft Windows [Modèle d'estimation]. 2000. Version 1.41. Washington (DC): US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY): Syracuse Research Corporation. www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[NCI] National Chemical Inventories database. 2007. American Chemical Society, Chemical Abstracts Service. Consulté en avril 2007.

Nichols J.W., P.N. Fitzsimmons et L.P. Burkhard. 2007. In vitro – in vivo extrapolation of quantitative hepatic biotransformation data for fish. II. Modeled effects on chemical bioaccumulation. Environ. Toxicol. Chem. 26: 1304-1319.

[NITE] National Institute of Technology and Evaluation, Japon [base de données]. 2002. Biodegradation and Bioconcentration of the Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law.

http://www.safe.nite.go.jp/data/hazkizon/pk_e_kizon_data_result.home_data (Consulté le 30 octobre 2006).

[OASIS Forecast] Optimized Approach based on Structural Indices Set [modèle d'estimation]. 2005. Version 1.20. Bourgas, Bulgarie: Laboratory of Mathematical Chemistry. <http://oasis-lmc.org/?section=software>

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2004. Emission Scenario Document on Plastics Additives [Internet]. Paris, France. Direction de l'environnement de l'OCDE, Division Environnement, Santé et Sécurité. <http://oecd.org/ehs/>

[OPPSD] Organic Peroxide Producers Safety Division, The Society of the Plastics Industry. 2008. Submittal for the Environment Canada Industry Challenge Program: Comments on the Draft Screening Assessments for the Three Organic Peroxides CAS Numbers 78-63-7, 1068-27-5, and 6731-36-8 to the Executive Director, Division des substances existantes, Environnement Canada. 18 mars 2008. 49 pages.

[PCKOCWIN] Organic Carbon Partition Coefficient Program for Windows [Modèle d'estimation]. 2000. Version 1.66. Washington (DC): US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY): Syracuse Research Corporation. [Cité le (date, année)]. www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[SPIN] Substances in Preparations in Nordic Countries [base de données sur Internet]. 2006. Copenhague, Danemark. Conseil des ministres des pays nordiques. [Cité en mars 2006]. <http://195.215.251.229/Dotnetnuke/Home/tabid/58/Default.aspx>

Soumission d'étude. 2006a. Étude confidentielle inédite présentée à Environnement Canada, Division des substances existantes, dans le cadre du Défi du Plan de gestion des produits chimiques. Sommaire de rigueur d'étude, numéro 11142Soumission004. Disponible sur demande.

Soumission d'étude. 2006b. Étude confidentielle inédite présentée à Environnement Canada, Division des substances existantes, dans le cadre du Défi du Plan de gestion des produits chimiques. Sommaire de rigueur d'étude, numéro 11142Soumission001. Disponible sur demande.

Soumission d'étude. 2006c. Étude confidentielle inédite présentée à Environnement Canada, Division des substances existantes, dans le cadre du Défi du Plan de gestion des produits chimiques. Sommaire de rigueur d'étude, numéro 11142Soumission002. Disponible sur demande.

Soumission d'étude. 2006d. Étude confidentielle inédite présentée à Environnement Canada, Division des substances existantes, dans le cadre du Défi du Plan de gestion des produits chimiques. Sommaire de rigueur d'étude, numéro 11142Soumission003. Voir annexe.

Soumission d'étude. 2008. Étude confidentielle inédite présentée à Environnement Canada, Division des substances existantes, dans le cadre du Défi du Plan de gestion des produits chimiques. Sommaire de rigueur d'étude, numéro 22875Soumission001. Voir annexe.

[U.S. EPA] United States Environmental Protection Agency. 2002. Toxic Substances Control Act-Inventory Update Rule (TSCA-IUR). Information sur les volumes produits. Données inédites pour 1986, 1990, 1994, 1998, 2002. Disponible sur demande

[WSKOWWIN] Water Solubility for Organic Compounds Program for Microsoft Windows [Modèle d'estimation]. 2000. Version 1.41 Washington (DC): US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY): Syracuse Research Corporation. www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Annexe – Sommaire de rigueur d'étude

N°	Point	Pondération	Oui/non	Précisions
1	Référence : [NITE] National Institute of Technology and Evaluation, Japon [Base de données]. 2002. Biodegradation and Bioconcentration of the Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law. Accès : http://www.safe.nite.go.jp/data/hazkizon/pk_e_kizon_data_result.home_data (ouvert le 30 Octobre 2006)			
2	Identité de la substance: n° CAS	s.o.		6731-36-8
3	Identité de la substance: Nom(s) chimique(s)	s.o.		Diperoxyde de di- <i>tert</i> -butyle et de 3,3,5-triméthylcyclohexylidène
4	Composition chimique de la substance	2.		
5	Pureté chimique	1	O	97,8
6	Indication de la persistance/stabilité de la substance en milieu aquatique?	1	O	
7	Si le matériel test est radiomarqué, est-ce que la (les) position(s) précise(s) de(s) l'atome(s) marqué(s) ainsi que le pourcentage de radioactivité associé avec les impuretés ont été rapportés.	2		
Méthode				
8	Références	1	O	
9	Méthode normalisée (OCDE, UE, nationale ou autre)?	3	O	Méthode Japonaise
10	Justification de la méthode ou du protocole non normalisé utilisé, le cas échéant	2		
11	BPL (bonnes pratiques de laboratoire)	3		
Organisme d'essai				
12	Identité de l'organisme: nom	s.o.	-	<i>Carp, Cyprinus carpio</i>

13	Indication du nom latin ou des deux noms (latin et commun)?	1	O	
14	Âge ou stade biologique de l'organisme d'essai	1	N	
15	Longueur et/ou poids	1	O	
16	Sexe	1	N	
17	Nombre d'organismes par répétition	1	O	19
18	Charge en organismes	1	O	5 g/L
19	Type de nourriture et périodes d'alimentation au cours de la période d'acclimatation	1	O	
Conception et conditions des essais				
20	Type d'expérience (en laboratoire ou sur le terrain)	s.o.		Laboratoire
21	Voies d'exposition (nourriture, eau, les deux)	s.o.		Eau
22	Durée d'exposition	s.o.		8 semaines
23	Nombre de répétitions (y compris les témoins)	1	O	16
24	Concentrations	1	O	0,2 and 0,02 mg/L
25	Type/composition de la nourriture et périodes d'alimentation durant les essais.	1	O	
26	Si le ratio de FBC/FBA a été utilisé comme dérivé de la concentration du produit chimique dans l'organisme et dans l'eau, est-ce que la durée de l'expérimentation était égale ou plus longue que le temps requis pour que la concentration du produit chimique atteigne un état stable?	3	O	Rapport des concentrations
27	Si le ratio FBC/FBA a été utilisé comme dérivé de la concentration du produit chimique dans l'organisme et dans l'eau, est-ce que les concentrations mesurées dans	3	O	

	l'organisme et dans l'eau étaient mentionnées?			
28	Les concentrations dans les eaux d'essais ont-elles été mesurées périodiquement?	1	O	
29	Les conditions du milieu d'exposition pertinentes pour la substance sont-elles indiquées? (ex. : pour la toxicité des métaux - pH, COD/COT, dureté de l'eau, température)	3	O	
30	Photopériode et intensité de l'éclairage	1	N	
31	Préparation de solutions mères et de solutions d'essai	1	O	
32	Intervalles des contrôles analytiques	1	O	
33	Méthodes statistiques utilisées	1	N	
34	Un agent émulsionnant ou stabilisant a-t-il été employé, si la substance était peu soluble ou instable?	s.o.	N	
Renseignements d'intérêt pour la qualité des données				
35	L'organisme d'essai convient-il à l'environnement canadien?	3	O	
36	Les conditions d'essai (pH, température, OD, etc.) sont-elles typiques pour l'organisme d'essai?	1	O	
37	Le type et la conception du système (statique, semi-statique, dynamique; ouvert ou fermé; etc.) correspondent-ils aux propriétés de la substance et à la nature ou aux habitudes de l'organisme?	2	O	
38	Le pH de l'eau d'essai était-il dans la plage des valeurs typiques de l'environnement canadien (6 à 9)?	1	O	
39	La température de l'eau d'essai était-elle dans la plage des valeurs typiques de l'environnement canadien (5 à 27 °C)?	1	O	
40	Est-ce que le contenu en lipides (ou FBA/FBC normalisé par rapport aux lipides) a été rapporté?	2	O	

41	Est-ce que les concentrations mesurées d'un produit chimique dans les eaux d'essai étaient plus basse que la solubilité du produit?	3	O	
42	Si une substance radiomarquée a été utilisée, est ce que le FBC a été déterminé en se basant sur le composé d'origine? (i.e., pas sur les résidus radiomarqués)	3		
Résultats				
43	Les paramètres déterminés (FBA. FBC) et leur valeurs.	S.O.	S.O.	FBCs = 3500 – 13200 L/Kg
44	FBA ou FBC déterminés comme : 1) le rapport de la concentration en produit chimique présent dans l'organisme et dans l'eau, ou 2) le rapport entre les constantes d'incorporation de produit chimique et du taux d'élimination.	S.O.	S.O.	Rapport des concentrations
45	Soit FBA/FBC a été dérivé d'un 1) échantillon de tissu ou de 2) l'organisme entier?	S.O.	S.O.	Organisme entier
46	Soit le FBA/FBC 1) moyen ou 2) maximal a été utilisé?	S.O.	S.O.	Les valeurs pour 2, 4, 6 et 8 semaines on été rapportées
47	Note Globale: ... %	90,7		
48	Code de fiabilité d'EC:	1		
49	Catégorie de fiabilité (élévé, moyenne, basse):	Haute confiance		
50	Commentaires :			

N°	Point	Pondération	Oui/non	Précisions
1	Référence: Soumission d'étude. 2008. Étude confidentielle inédite présentée à Environnement Canada, Division des substances existantes, dans le cadre du Défi du Plan de gestion des produits chimiques. Sommaire de rigueur d'étude, numéro 22875Soumission001. Voir annexe.			
2	Identité de la substance : n° CAS	s.o.		6731-36-8
3	Identité de la substance: Nom(s) chimique(s)	s.o.		Diperoxyde de di- <i>tert</i> -butyle et de 3,3,5-triméthylcyclohexylidène
4	Composition chimique de la substance	2		
5	Pureté chimique	1	O	97,80%
6	Indication de la persistance/stabilité de la substance en milieu aquatique?	1	O	
Méthode				
7	Références	1	O	
8	Méthode normalisée (OCDE, UE, nationale ou autre)?	3	O	Méthode Japonaise pour les nouvelles substances
9	Justification de la méthode ou du protocole non normalisé utilisé, le cas échéant	2		
10	BPL (bonnes pratiques de laboratoire)	3		
Organisme d'essai				
11	Identité de l'organisme: nom	s.o.		<i>Himedaka, Oryzias latipes</i>
12	Indication du nom latin ou des deux noms (latin et commun)?	1	O	
13	Âge ou stade biologique de l'organisme d'essai	1		
14	Longueur et/ou poids	1	O	
15	Sexe	1	N	

16	Nombre d'organismes par répétition	1	O	10
17	Charge en organismes	1	O	0,75 g/L
18	Type de nourriture et périodes d'alimentation au cours de la période d'accimatation	1	N	
Conception et conditions des essais				
19	Type d'essai (aiguë ou chronique)	s.o.		Aiguë
20	Type d'expérience (en laboratoire ou sur le terrain)	s.o.		Laboratoire
21	Voies d'exposition (nourriture, eau, les deux)	s.o.		Eau
22	Durée d'exposition	s.o.		48 heures
23	Témoins négatifs ou positifs (préciser)	1	N	
24	Nombre de répétitions (y compris les témoins)	1	N	
25	Des concentrations nominales sont-elles indiquées?	1	N	
26	Des concentrations mesurées sont-elles indiquées?	3	N	
27	Type de nourriture et périodes d'alimentation durant les essais à long terme	1	N	
28	Les concentrations ont-elles été mesurées périodiquement (spécialement dans les essais de toxicité chronique)?	1	N	
29	Les conditions du milieu d'exposition pertinentes pour la substance sont-elles indiquées? (ex. : pour la toxicité des métaux - pH, COD/COT, dureté de l'eau, température)	3	O	
30	Photopériode et intensité de l'éclairage	1	N	
31	Préparation de solutions mères et de solutions d'essai	1	O	
32	Un agent émulsionnant ou stabilisant a-t-il été employé, si la substance était peu soluble ou instable?	1	O	Huile de castor hydrogénée
33	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, sa concentration est-elle indiquée?	1	O	
34	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, des données sont-elles fournies sur son écotoxicité?	1	N	
35	Intervalles des contrôles analytiques	1	N	
36	Méthodes statistiques utilisées	1	N	
Renseignements d'intérêt pour la qualité des données				

37	Le paramètre déterminé est-il directement attribuable à la toxicité de la substance, non à l'état de santé des organismes (p. ex. lorsque la mortalité des témoins est > 10 %) ou à des facteurs physiques (p. ex. effet d'ombrage)?	s.o.	O	
38	L'organisme d'essai convient-il à l'environnement canadien?	3	O	
39	Les conditions d'essai (pH, température, OD, etc.) sont-elles typiques pour l'organisme d'essai?	1	O	
40	Le type et la conception du système (statique, semi-statique, dynamique; ouvert ou fermé; etc.) correspondent-ils aux propriétés de la substance et à la nature ou aux habitudes de l'organisme?	2	O	
41	Le pH de l'eau d'essai était-il dans la plage des valeurs typiques de l'environnement canadien (6 à 9)?	1	O	
42	La température de l'eau d'essai était-elle dans la plage des valeurs typiques de l'environnement canadien (5 à 27 °C)?	1	O	
43	La valeur de la toxicité était-elle inférieure à celle de la solubilité de la substance dans l'eau?	3	N	
Résultats				
44	Valeurs de la toxicité (indiquer paramètres et valeurs)	s.o.	s.o.	48-h LC50=>500 mg/L
45	Autres paramètres indiqués - ex. : FBC/FBA, CMEO/CSEO (préciser)?	s.o.	N	
46	Autres effets nocifs indiqués (cancérogénicité, mutagénicité, etc.)?	s.o.	N	
47	Note globale : ... %	58.5		
48	Code de fiabilité d'EC :	3		
49	Catégorie de fiabilité (élevée, satisfaisante, faible) :	Basse confiance		
50	Commentaires			