

Évaluation préalable pour le Défi concernant le

10,12-Dioxo-19-isocyanato-11-(6-isocyanatohexyl)-2,9,11, 13-tétraazonadécanethioate de S-[3-(triméthoxysilyl) propyle]

**Numéro de registre du Chemical Abstracts Service
85702-90-5**

**Environnement Canada
Santé Canada**

Janvier 2011

Sommaire

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 mené une évaluation préalable du 10,12-dioxo-19-isocyanato-11-(6-isocyanatohexyl)-2,9,11,13-tétraazanonadécane-thioate de S-[3-(triméthoxysilyl) propyle] ester, dont le numéro de registre du Chemical Abstracts Service (numéro de CAS)* est 85702-90-5; dans la présente évaluation, cette substance sera identifiée comme étant le TIDTE. On a accordé une priorité élevée à l'évaluation préalable du TIDTE et on l'a inclus dans l'initiative du Défi en vertu du Plan de gestion des substances chimiques parce qu'on a trouvé qu'il répond aux critères de catégorisation écologiques de persistance, de potentiel de bioaccumulation et de toxicité intrinsèque pour les organismes non humains et qu'il semble être commercialisé au Canada.

Le TIDTE n'a pas été considéré comme étant hautement prioritaire au titre de l'évaluation des risques potentiels pour la santé humaine à la suite de l'utilisation des outils simples de détermination de l'exposition et du danger, qui ont été élaborés pour la catégorisation des substances de la Liste intérieure des substances.

Le TIDTE est une substance organique qui n'est pas naturellement produite dans l'environnement; elle ne serait pas non plus fabriquée au Canada. En 2005 et en 2006, une quantité de 100 à 1 000 kg de cette substance a été importée au pays dans des produits.

D'après l'utilisation rapportée du TIDTE comme composant d'adhésifs et de produits d'étanchéité marins, on estime que cette substance se réticule en polymères dans les formulations. Ainsi, on considère que l'essentiel du TIDTE (99 %) subit une transformation chimique dans la matrice du produit formulé, ce qui empêche son rejet dans l'environnement. On présume que des résidus d'adhésifs et de produits d'étanchéité contenus dans les contenants sont également éliminés dans les lieux d'enfouissement.

Il est peu probable que les rejets de TIDTE dans l'environnement se produise autrement qu'en de très faibles quantités.. Si une quantité quelconque de la substance est rejetée dans l'environnement, on prévoit qu'elle sera rapidement hydrolysée dans l'eau (en formant des amines, du silanol et du méthanol), ainsi qu'en présence de l'humidité contenue dans les autres milieux naturels. Ainsi, bien que l'on s'attende à ce que la dégradation ultime (le barème utilisé lors de la catégorisation) soit très lente (p.ex. le silanol issu de l'hydrolyse se dégrade très lentement dans l'environnement), le TIDTE subit une dégradation primaire rapide..

De nouvelles prévisions modélisées de bioaccumulation qui considèrent le potentiel de transformation métabolique montrent que ni le TIDTE, ni les produits de son hydrolyse ne sont bioaccumulables dans les organismes aquatiques. Par conséquent, on conclut que

* Le numéro d'enregistrement du Chemical Abstracts Service (CAS) est la propriété de l'American Chemical Society. Toute utilisation ou redistribution est interdite sans l'autorisation écrite préalable de l'American Chemical Society, sauf en réponse à des besoins législatifs et aux fins des rapports destinés au gouvernement en vertu d'une loi ou d'une politique administrative.

la substance ne répond pas aux critères de persistance ou de bioaccumulation énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* de la *Loi Canadienne sur la Protection de l'environnement (1999)*.

De plus, d'après la modélisation des données sur la toxicité, ni le TIDTE ni les produits de son hydrolyse ne sont susceptibles de présenter un danger significatif pour les organismes aquatiques. Compte tenu de ceci et à la lumière de la faible probabilité de rejets au compartiment environnemental, on conclut que le TIDTE ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité ou concentration ou dans des conditions qui ont ou pourraient avoir, immédiatement ou à long terme, un effet nocif sur l'environnement ou sur la diversité biologique, ou qui constituent ou pourraient constituer un danger pour l'environnement essentiel pour la vie.

L'exposition potentielle de la population générale au TIDTE présent dans les milieux naturels devrait être négligeable. L'exposition de la population générale au TIDTE dans des produits de consommation devrait être très faible.

Aucune donnée empirique relative aux effets sur la santé n'a été relevée pour le TIDTE ou ses analogues. Du fait de la faible solubilité et de la nature très réactive du TIDTE, des prévisions des relations quantitatives structure-activité (RQSA), ainsi que de la classification de la Commission européenne, le principal risque posé par le TIDTE est la sensibilisation de la peau et des voies respiratoires. Toutefois, puisque l'exposition de la population générale au TIDTE devrait être très faible ou négligeable, le risque pour la santé humaine est considéré comme faible. Par conséquent, on conclut que le TIDTE ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité ou concentration ou dans des conditions qui constituent ou pourraient constituer un danger au Canada pour la vie ou la santé humaines.

D'après les renseignements disponibles, il est donc conclu que le TIDTE ne répond à aucun des critères énoncés dans l'article 64 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*.

On envisagera d'inclure cette substance dans l'initiative de mise à jour de la Liste intérieure des substances. De plus, des activités de recherche et de surveillance viendront appuyer, le cas échéant, la vérification des hypothèses utilisées au cours de l'évaluation préalable.

Introduction

La *Loi canadienne sur la protection de l'environnement* (1999) [LCPE (1999)] (Canada, 1999) exige que les ministres de l'Environnement et de la Santé procèdent à une évaluation préalable des substances qui répondent aux critères de la catégorisation énoncés dans la *Loi* afin de déterminer si elles présentent ou sont susceptibles de présenter un risque pour l'environnement ou la santé humaine.

Selon 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 environnementaux de la catégorisation, notamment la persistance (P), le potentiel de bioaccumulation (B) et la toxicité intrinsèque pour les organismes aquatiques (Ti), 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, compte tenu des classifications établies par d'autres organismes nationaux ou internationaux concernant leur cancérogénicité, leur génotoxicité ou leur toxicité pour le développement ou la reproduction.

Le 9 décembre 2006, les ministres ont donc publié un avis d'intention dans la Partie I de la *Gazette du Canada* (Canada, 2006) dans lequel ils priaient l'industrie et les autres intervenants de fournir, selon un calendrier déterminé, des renseignements précis qui pourraient servir à étayer l'évaluation des risques, ainsi qu'à élaborer et à évaluer les meilleures pratiques de gestion des risques et de bonne gestion des produits pour ces substances jugées hautement prioritaires.

On a décidé d'accorder une attention hautement prioritaire à l'évaluation des risques pour l'environnement du 10,12-Dioxo-19-isocyanato-11-(6-isocyanatohexyl)-2,9,11, 13-tétraazanonadécanethioate de S-[3-(triméthoxysilyl) propyle] (TIDTE), car cette substance a été jugée persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques dans la catégorisation de la Liste intérieure des substances, et il semble qu'elle est commercialisée au Canada. Le volet du Défi portant sur cette substance a été publié dans la *Gazette du Canada* le 20 juin 2009 (Canada, 2009). En même temps a été publié le profil de cette substance, qui présentait l'information technique (obtenue avant décembre 2005) sur laquelle a reposé sa catégorisation. Des renseignements relatifs aux utilisations de la substance ont été communiqués en réponse au Défi (Environnement Canada, 2010a).

Même si l'évaluation des risques que présente le TIDTE pour l'environnement est jugée hautement prioritaire, cette substance ne répond pas aux critères de la catégorisation pour le PFRE ou le REI, ni aux critères définissant un grave risque pour la santé humaine, compte tenu du classement attribué par d'autres organismes nationaux ou internationaux quant à sa cancérogénicité, à sa génotoxicité ou à sa toxicité sur le plan du développement ou de la reproduction.

Les évaluations préalables effectuées aux termes de la LCPE (1999) mettent l'accent sur les renseignements jugés essentiels pour déterminer si une substance répond aux critères de l'article 64 de la *Loi*. Elles visent à examiner des renseignements scientifiques et à tirer des conclusions fondées sur la méthode du poids de la preuve et le principe de prudence.²

La présente évaluation préalable finale prend en considération les renseignements sur les propriétés chimiques, les dangers, les utilisations de la substance en question et l'exposition à celle-ci, y compris l'information supplémentaire fournie dans le cadre du Défi. Les données qui ont trait à l'évaluation préalable de cette substance proviennent de documents originaux, de rapports de synthèse et d'évaluation, de rapports de recherche réalisés par des intervenants et de recherches documentaires menées récemment, soit jusqu'en février 2010, pour les sections qui portent sur les aspects écologiques et sur les incidences d'une exposition pour la santé humaine. Les études les plus importantes ont fait l'objet d'une évaluation critique, et certains résultats de modélisation ont servi à formuler des conclusions. L'évaluation préalable finale ne constitue pas un examen exhaustif ou critique de toutes les données disponibles. Il s'agit plutôt d'un sommaire des renseignements essentiels qui appuient la conclusion proposée.

Lorsqu'ils étaient disponibles et pertinents, les renseignements contenus dans les évaluations des dangers effectués par d'autres instances ont été utilisés. L'évaluation préalable finale ne constitue pas un examen exhaustif ou critique de toutes les données disponibles. Il s'agit plutôt d'un sommaire des renseignements essentiels qui appuient la conclusion proposée.

La présente évaluation préalable finale a été préparée par le personnel du Programme des substances existantes de Santé Canada et d'Environnement Canada, et elle intègre les résultats d'autres programmes exécutés par ces ministères. La section écologique de

² La détermination de la conformité à l'un ou plusieurs des critères énoncés à l'article 64 est basée sur une évaluation des risques potentiels pour l'environnement ou la santé humaine associés aux expositions dans l'environnement en général. Pour les humains, cela comprend, sans toutefois s'y limiter, les expositions par l'air ambiant et intérieur, l'eau potable, les produits alimentaires et l'utilisation de produits de consommation. Une conclusion établie en vertu de la LCPE (1999) portant sur les substances 1 à 12 énumérées dans le Plan de gestion des produits chimiques (PGPC) n'est pas pertinente à une évaluation, qu'elle n'empêche pas non plus, par rapport aux critères de risque définis dans le Règlement sur les produits contrôlés, qui fait partie d'un cadre réglementaire pour le Système d'information sur les matières dangereuses au travail (SIMDUT) pour les produits destinés à être utilisés au travail. De la même manière, la conclusion qui s'inspire des critères contenus dans l'article 64 de la LCPE (1999) n'empêche pas les mesures prises en vertu d'autres autres de la LCPE ou d'autres lois.

l'évaluation a fait l'objet d'une étude consignée par des pairs ou d'une consultation de ces derniers. Par ailleurs, une ébauche de cette évaluation a fait l'objet d'une période de commentaires du public de 60 jours. Bien que les commentaires externes formulés durant la consultation aient été pris en considération, Santé Canada et Environnement Canada assument la responsabilité du contenu final et des résultats de l'évaluation préalable. Les méthodes utilisées dans les évaluations préalables du Défi ont été examinées par un Groupe consultatif du Défi indépendant.

Les principales données et considérations sur lesquelles repose la présente évaluation finale sont résumées ci-après.

Identité de la substance

Aux fins du présent document, la substance dont il est question ici est appelée TIDTE, sigle provenant du nom utilisé dans la Liste intérieure des substances (LIS).

Tableau 1. Identité de la substance – TIDTE

Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS)	85702-90-5
Nom dans la LIS	10,12-Dioxo-19-isocyanato-11-(6-isocyanatohexyl)-2,9,11, 13-tétraazonadécanéthioate de S-[3-(triméthoxysilyl) propyle]
Noms relevés dans les National Chemical Inventories (NCI)¹	<i>2,9,11,13-Tetraazonadecanethioic acid, 19-isocyanato-11-(6-isocyanatohexyl)-10,12-dioxo-, S-[3-(trimethoxysilyl)propyl] ester</i> (TSCA, LIS, PICCS, ASIA-PAC, NZIoC) <i>Mélange de S-(3-trimethoxysilyl)propyl 19-isocyanato-11-(6-isocyanatohexyl)-10,12-dioxo-2,9,11,13-tetraazonadecanethioate et de S-(3-(trimethoxysilyl)propyl 17-isocyanato-9-(isocyanatohexyl-aminocarbonyl)-10-oxo-2,9,11-triazaheptadecanethioate</i> (REACH)
Autres noms	Sans objet
Groupe chimique (groupe de la LIS)	Produits chimiques organiques définis
Principale classe chimique ou utilisation	Isocyanate d'alkyle-silanes
Principale sous-classe chimique	Isocyanates, thiocarbamates, biuret, méthoxysilanes, amines aliphatiques, amines secondaires, amines tertiaires
Formule chimique	C ₂₉ H ₅₄ N ₆ O ₈ SSi
Structure chimique	
SMILES²	O=C(N(C(=O)NCCCCCN(C(=O)SCCC[Si](OC)(OC)OC)CCC CCCN=C(=O))NCCCCCN=C=O
Masse moléculaire	674,93 g/mol

¹ National Chemical Inventories (NCI), 2009 : ASIA-PAC (listes des substances de l'Asie-Pacifique); NZIoC (inventaire des substances chimiques de la Nouvelle-Zélande); PICCS (inventaire des produits et substances chimiques des Philippines); REACH (enregistrement, évaluation et autorisation des substances chimiques de l'Union européenne); et TSCA (inventaire des substances chimiques visées par la *Toxic Substances Control Act* des États-Unis).

² Simplified Molecular Input Line Entry System.

Propriétés physiques et chimiques

On dispose d'aucune donnée expérimentale sur les propriétés physiques et chimiques du TIDTE (voir le tableau 2). Les analogues structuraux du TIDTE ont été établis à l'aide des sites Web de SciFinder et de ChemID. Cependant, aucune donnée empirique sur les propriétés physiques et chimiques n'a été relevée pour ces analogues.

Des modèles basés sur les relations quantitatives structure-activité (RQSA) ont été utilisés pour estimer les principales propriétés physiques et chimiques du TIDTE. Les résultats sont présentés dans le tableau 2 ci-dessous. Ces modèles (excepté WSKOWWIN, 2008) sont principalement fondés sur des méthodes d'addition de fragments, c'est-à-dire qu'ils s'appuient sur la structure d'un produit chimique donné.

Tableau 2. Estimation des propriétés physiques et chimiques du TIDTE

Propriété	Valeur ¹	Température (°C)	Référence
Point de fusion (°C)	349,84		MPBPWIN, 2008
Point d'ébullition (°C)	861,44		MPBPWIN, 2008
Densité (kg/m ³)	Non disponible		
Pression de vapeur (Pa)	1,73 × 10 ⁻¹⁹ (1,3 × 10 ⁻²¹ mm Hg)	25	EPIWIN, 2008
Constante de la loi de Henry (Pa·m ³ /mol)	1,16 × 10 ⁻¹⁶ (1,14 × 10 ⁻²¹ atm·m ³ /mol)	25	HENRYWIN, 2008
Log K _{oe} (coefficient de partage octanol-eau) [sans dimension]	6,62		KOWWIN, 2008
Log K _{co} (coefficient de partage carbone organique-eau) (sans dimension)	4,40		KOCWIN, 2008
Log K _{oa} (coefficient de partage octanol-air) [sans dimension]	25,95		KOAWIN, 2008
Solubilité dans l'eau (mg/L)	1,14 × 10 ⁻⁴	25	WSKOWWIN, 2008
pK _a (constante de dissociation) [sans dimension]	13,23		ACD/pK _a DB, 2008
Diamètre maximal (nm) ²	1,74 à 3,43		CPOP, 2008

¹ Les valeurs entre parenthèses représentent les valeurs originales estimées par les modèles.

² Les valeurs représentent l'étendue des diamètres moléculaires maximums (D_{max}) estimés par les modèles CPOP.

Selon les modèles, la substance aurait une très faible pression de vapeur (1,73 × 10⁻¹⁹ Pa), une très faible constante de la loi d'Henry (1,16 × 10⁻¹⁶ Pa m³/mol), un log K_{oe} élevé (6,62), une faible solubilité dans l'eau (1,14 × 10⁻⁴ mg/L) et une taille moléculaire importante (diamètre transversal maximum de 1,74 à 3,43 nm).

Sources

Rien n'indique que le TIDTE est produit naturellement dans l'environnement.

La quantité fabriquée, importée ou commercialisée au Canada au cours de l'année civile 1986 et déclarée dans la LIS se situe entre 1 000 et 10 000 kg.

Des enquêtes menées en 2005 et 2006 par le truchement d'avis publiés dans la *Gazette du Canada* conformément à l'article 71 de la LCPE (1999) ont permis de recueillir des renseignements (Canada, 2006). Ces avis visaient à recueillir des données sur la fabrication et l'importation de TIDTE au Canada. Dans l'avis de 2006, on demandait également de fournir des données sur la quantité utilisée de cette substance.

Au Canada, aucune activité de fabrication du TIDTE n'a été déclarée en 2005 et 2006. Toutefois, du TIDTE a été importé en une quantité de 100 à 1 000 kg par moins de quatre entreprises au cours de chacune de ces années en tant que composant de produits commerciaux et de consommation prêts à l'emploi. Quatre entreprises ont manifesté un intérêt pour la substance par l'entremise du formulaire de déclaration des parties intéressées dans le cadre de l'enquête menée en vertu de l'article 71 pour l'année 2006.

Ailleurs, une quantité de TIDTE fabriqué ou traité située entre 4 500 et 225 000 kg a été déclarée en 1990, 1994 et 1998 dans le cadre de l'inventaire des substances chimiques réalisé en vertu de la *Toxic Substance Control Act* (TSCA) des États-Unis (USEPA, 1986-2002). Aucune déclaration relative au TIDTE n'a été effectuée en 2002.

Utilisations

Les codes d'utilisation suivants de la LIS ont été indiqués pour le TIDTE durant la période d'inscription (1984 à 1986) : Composant de formulation; Production d'adhésifs et de matériaux d'étanchéité.

Des renseignements relatifs aux utilisations pour les années civiles 2005 et 2006 ont été recueillis en réponse aux avis publiés en application de l'article 71 de la LCPE (1999) (Canada, 2006, 2009).

Le TIDTE est utilisé comme composant d'adhésifs et de produits d'étanchéité marins utilisés principalement pour des objets en plastique ou en métal situés au-dessus ou en dessous de la ligne de flottaison. Cependant, aucune information ne permet de déterminer la quantité pour chaque type d'utilisation. Ces produits sont conçus pour adhérer à la surface sur laquelle ils sont appliqués de façon stable.

Le TIDTE n'est pas un ingrédient utilisé dans des produits cosmétiques au Canada (SDC, 2010) et ne figure pas sur la Liste critique des ingrédients dont l'utilisation est restreinte ou interdite dans les cosmétiques (Santé Canada, 2009). Le TIDTE n'est pas actuellement présent au Canada en tant que produit de formulation pour des pesticides, puisqu'il n'est

pas inscrit à la liste des produits de formulation de l'Agence de réglementation de la lutte antiparasitaire (Santé Canada, 2007; courriel de l'Agence de réglementation de la lutte antiparasitaire de Santé Canada adressé au Bureau de l'évaluation des risques pour les substances existantes de Santé Canada en mars 2010, source non citée). Il n'est pas répertorié comme additif alimentaire au titre 16 du *Règlement sur les aliments et drogues* (Canada, 1978). Il n'est pas utilisé dans les emballages alimentaires ni comme additif indirect (courriel de la Direction des aliments de Santé Canada adressé au Bureau de gestion du risque de Santé Canada en janvier 2010; source non citée). De plus, le TIDTE n'est inscrit ni dans la base de données sur les produits pharmaceutiques, ni dans la base de données sur les ingrédients non médicinaux de la Direction des produits thérapeutiques, ni dans la base de données sur les ingrédients des produits de santé naturels (BDIPSN), ni dans la base de données sur les produits de santé naturels homologués (BDPSNH) en tant qu'ingrédient médicinal ou non médicinal dans les produits pharmaceutiques finaux, les produits de santé naturels ou les médicaments vétérinaires (courriels de la Direction des produits thérapeutiques, de la Direction des produits de santé naturels et de la Direction des médicaments vétérinaires de Santé Canada adressés au Bureau de gestion du risque de Santé Canada de novembre 2009 à janvier 2010, source non citée).

Aucune autre utilisation du TIDTE n'a été répertoriée.

Rejets dans l'environnement

En général, les rejets d'une substance dans l'environnement peuvent découler de différentes pertes pendant sa fabrication, son utilisation industrielle ou commerciale ainsi que son utilisation par les consommateurs. Les pertes sont regroupées en sept catégories : (1) déversements dans les eaux usées, (2) émissions atmosphériques, (3) pertes dans le sol, (4) transformation chimique, (5) élimination dans les sites d'enfouissement, (6) élimination par recyclage et (7) élimination par incinération. Elles sont estimées à partir des données provenant des enquêtes réglementaires et des industries, ainsi que celles publiées par différents organismes.

Afin d'aider à estimer ces pertes, une feuille de calcul (outil de débit massique) a été utilisée pour regrouper toutes les données et hypothèses requises (Environnement Canada, 2010b). À moins de disposer de données précises sur le taux ou le potentiel de rejet de cette substance provenant des sites d'enfouissement et des incinérateurs, l'outil de débit massique ne permet pas de quantifier les rejets dans l'environnement à partir des sites d'élimination des déchets.

Selon l'information requise dans le cadre de l'enquête menée en vertu de l'article 71 et les codes d'utilisation de la LIS, le TIDTE est un composant d'adhésifs et de produits d'étanchéité prêts à l'emploi. On estime que la majeure partie de cette substance se réticule en polymères dans les formulations et se fixe à la matrice durcie du produit d'étanchéité, lequel est par la suite fixé sur une surface. Dans cette forme, une perte

relativement minime a lieu en raison de l'élimination des matériaux traités dans les sites d'enfouissement.

Un rejet dans l'eau peut avoir lieu en raison d'une séparation mécanique du produit d'étanchéité des objets traités. Cependant, le rejet direct de molécules de TIDTE libres (c.-à-d. TIDTE résiduel et inaltéré) à partir de la matrice du produit d'étanchéité devrait être très limité. Le rejet de TIDTE dans l'environnement pour d'autres raisons est moins probable.

Dans le cas des adhésifs et des produits d'étanchéité, dans lesquels le TIDTE n'a pas encore réagi, un rejet peut être causé par l'élimination des contenants commerciaux avec des résidus dans les sites d'enfouissement. Toutefois, la quantité rejetée de façon devrait être minime. Les émissions atmosphériques, les pertes dans le sol et l'élimination par recyclage sont considérées comme improbables.

Les pertes estimées pour le TIDTE au cours de son cycle de vie sont présentées au tableau 3 (Environnement Canada, 2010b). En général, la majeure partie du TIDTE (99 %) devrait subir une transformation chimique en réagissant avec d'autres composants du produit dans lequel il se trouve. La partie rejetée dans l'environnement (eau de surface) sans avoir subi de transformation est estimée de façon prudente à 1 %.

Tableau 3. Estimation des pertes de TIDTE pendant son cycle de vie

Type de perte	Proportion (%)	Étapes pertinentes du cycle de vie
Eau	1	Utilisation commerciale et par les consommateurs
Émissions atmosphériques	0	--
Sol	0	--
Transformation chimique	99	Utilisation commerciale et par les consommateurs
Sites d'enfouissement	< 1 %	Utilisation commerciale et par les consommateurs
Recyclage	0	--
Incinération	0	--

Devenir dans l'environnement

Tel qu'il est décrit plus en détail dans la section Persistance dans l'environnement, le TIDTE n'est pas stable dans l'air (photo-oxydation en phase gazeuse) ou l'eau (l'hydrolyse devrait se produire rapidement, en quelques heures, avec les produits principaux étant un silanol, du méthanol et des amines). D'après ses propriétés physiques et chimiques seulement – en particulier la faible hydrosolubilité et les valeurs élevées de K_{oe} et K_{co} (tableau 2) – le TIDTE lui-même devrait demeurer principalement dans le sol ou les sédiments, toutefois, les résultats de la modélisation de la fugacité indiquent le contraire. Le modèle de fugacité de niveau III a été utilisé pour prévoir le devenir du TIDTE dans l'environnement, à l'aide des demi-vies ($t_{1/2}$) dans les milieux naturels comme $t_{1/2 \text{ air}} = 4 \text{ h}$, $t_{1/2 \text{ eau}} = 24 \text{ h}$, $t_{1/2 \text{ sol}} = 2 \text{ 160 h}$ (équivalent à 90 jours), et $t_{1/2 \text{ sédiments}} = 24 \text{ h}$. Ces résultats (voir le tableau 4 ci-dessous) représentent la répartition de la substance dans un environnement d'évaluation hypothétique découlant d'une répartition intermédiaire, et la perte tant par les processus de transport d'advection (à l'extérieur du milieu modélisé) que de dégradation ou de transformation. Les valeurs de répartition présentées dans le tableau 4 représentent les effets nets de ces processus dans des conditions de rejets continus lorsqu'un « état stable » hors de l'équilibre est atteint.

Tableau 4. Résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (EQC, 2003)

Substance rejetée dans :	Pourcentage de la substance répartie dans chaque milieu			
	Air	Eau	Sol	Sédiments
l'air (100 %)	1,2	0,1	98,7	0,01
l'eau (100 %)	< 0,01	89,5	< 0,01	10,5
le sol (100 %)	< 0,01	< 0,01	100	< 0,01

Dans le cas peu probable où la substance serait rejetée dans l'air, on estime qu'une très petite quantité de la substance devrait y demeurer. D'après les valeurs modélisées négligeables de la pression de vapeur ($1,73 \times 10^{-19} \text{ Pa}$) et de la constante de la loi de Henry ($1,16 \times 10^{-16} \text{ Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$), le TIDTE est considéré comme non volatil. Par conséquent, si ce dernier n'était rejeté que dans l'air, la grande majorité de la quantité rejetée (~99 %) aurait tendance à se retrouver dans le sol et une fraction très faible se retrouverait dans d'autres milieux (voir le tableau 4 ci-dessus).

Si le TIDTE est rejeté dans l'eau (scénario le plus probable), son hydrolyse rapide devrait jouer un rôle très important dans la séparation dans les milieux naturels. Même si la substance est caractérisée par une valeur élevée du $\log K_{co}$ estimée de 4,4, l'équilibre entre l'eau et les sédiments dépend principalement de la dégradation rapide du TIDTE dans le milieu aquatique, et la majorité de la substance devrait finir par demeurer dans l'eau. La volatilisation à partir de la surface de l'eau devrait être un processus peu important de son devenir d'après la constante estimée de la loi de Henry. Par conséquent, si l'eau était le milieu récepteur, le TIDTE devrait surtout demeurer dans l'eau (~90 %) et se répartir dans une certaine mesure (~10 %) dans les sédiments (voir le tableau 4 ci-dessus).

Dans le cas peu probable où le TIDTE était rejeté dans le sol, son adsorption sur place devrait être élevée (la substance devrait être immobile d'après la valeur estimée du $\log K_{co}$). La volatilisation à partir des surfaces de sol humides devrait être négligeable d'après la constante très faible de la loi de Henry (estimée à $1,16 \times 10^{-16}$ Pa m³/mol) et son $\log K_{oa}$ élevé (estimé à 25,95). En raison de sa pression de vapeur, la substance ne se volatiliserait pas à partir des surfaces de sol sèches. Par conséquent, si le TIDTE était rejeté dans le sol, il y demeurerait en totalité. Ces prévisions sont illustrées par les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (voir le tableau 4 ci-dessus).

Persistance et potentiel de bioaccumulation

Persistance dans l'environnement

Aucune donnée expérimentale sur la dégradation du TIDTE (soit la substance seule, soit dans les adhésifs et les produits d'étanchéité) n'a été trouvée.

Bien que le rejet de molécules libres de TIDTE (c.-à-d., qui ne font pas partie d'une préparation) dans l'environnement soit peu probable, le potentiel de dégradation d'une telle molécule a été prise en compte dans la présente évaluation. Des modèles RQSA ont été utilisés pour évaluer la dégradation puisque aucune donnée empirique n'existait. Étant donné l'utilisation du TIDTE au Canada, l'importance écologique du milieu aquatique et le fait que la plupart des modèles disponibles s'appliquent à l'eau, l'évaluation a surtout porté sur la persistance dans l'eau. Le tableau 5 résume les résultats pour la dégradation du TIDTE.

Tableau 5. Prévisions modélisées pour la dégradation du TIDTE

Processus du devenir	Modèle et base du modèle	Résultat et prévision du modèle	Demi-vie extrapolée (jours)
Air			
Oxydation atmosphérique	AOPWIN, 2008 ¹	$t_{1/2} = 0,17$ jour	< 2
Réaction avec l'ozone	AOPWIN, 2008 ¹	s. o. ²	s. o.
Eau			
Hydrolyse	HYDROWIN, 2008 ¹	~ 1 jour (pH 4 à 9)	< 182
Biodégradation primaire			
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2008 ¹ Sous-modèle 4 : enquête d'expert (résultats qualitatifs)	3,07 ³ « se biodégrade relativement rapidement »	< 182
Biodégradation ultime			
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2008 ¹ Sous-modèle 3 : enquête d'expert (résultats qualitatifs)	1,66 ³ « se biodégrade très lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2008 ¹ Sous-modèle 5 : Probabilité linéaire MITI	-0,30 ⁴ « se biodégrade très lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2008 ¹ Sous-modèle 6 : Probabilité non linéaire MITI	0,00 ⁴ « se biodégrade très lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	TOPKAT, 2004 Probabilité	0,00 « se biodégrade très lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	CATABOL c2000-2008 % DBO (demande biologique en oxygène)	23,4 ⁵ « se biodégrade lentement »	> 182

¹ Un des onze programmes distincts faisant partie des programmes d'estimation de la suite EPI (EPI Suite, 2008).

² Le modèle ne donne pas d'estimation pour ce type de structure.

³ Le résultat s'exprime par une valeur numérique de 0 à 5.

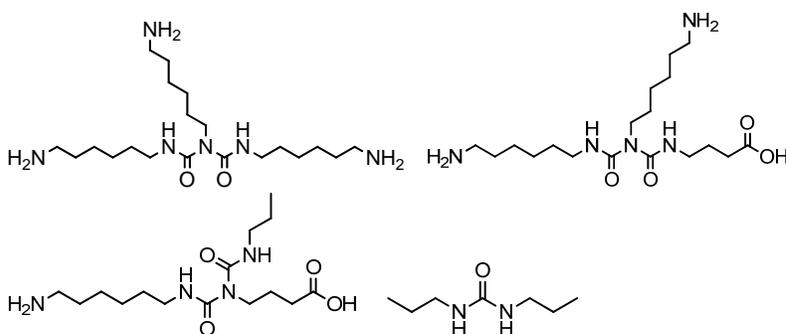
⁴ Le résultat s'exprime par un taux de probabilité.

⁵ Le résultat se situe plus près du seuil de 20 % (« se biodégrade lentement ») que du seuil de 40 % (« peut se biodégrader rapidement »); par conséquent, la demi-vie extrapolée devrait se situer à >182 jours.

Dans l'air, la demi-vie prévue par oxydation atmosphérique de seulement 0,17 jour (voir le tableau 5) démontre que le TIDTE est susceptible de s'oxyder rapidement. Cette substance ne devrait pas réagir avec d'autres espèces photo-oxydantes dans l'atmosphère, notamment l'O₃, et elle ne devrait pas se dégrader par photolyse directe. Des réactions

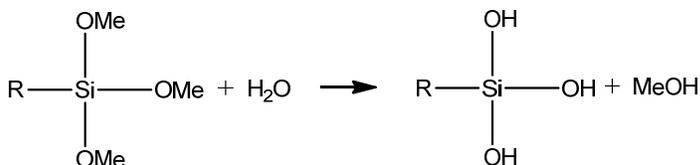
avec des radicaux hydroxyles devraient donc constituer le plus important processus régissant son devenir dans une atmosphère sèche. Sa demi-vie de 0,17 jour, résultant des réactions avec ces radicaux, permet d'affirmer que le TIDTE n'est pas persistant dans l'air selon le critère énoncé dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (une substance avec une demi-vie dans l'air supérieure ou égale à deux jours est considérée comme persistante) (Canada, 2000).

Selon les prévisions des modèles, le potentiel de biodégradation primaire du TIDTE est relativement rapide, ce qui concorde avec le potentiel d'hydrolyse de la substance dans le milieu aquatique. En effet, le TIDTE est un composé chimiquement actif qui comporte des groupements fonctionnels (isocyanate et alcoxysilane). Comme l'ensemble des isocyanates, cette substance peut s'hydrolyser rapidement avec l'eau pour produire des alkylamines. La modélisation (CATABOL c2004-2008) semble indiquer que les amines suivantes peuvent se produire pendant le processus d'hydrolyse du TIDTE :



Le taux d'hydrolyse des isocyanates augmente et la demi-vie de l'hydrolyse, par conséquent, diminue en présence de substituants qui captent des électrons : 9 minutes (25 °C) pour l'isocyanate de méthyle et 55 secondes (solution de dioxane et d'eau) pour l'isocyanate de phényle (HSDB, 2007).

L'alcoxysilane du TIDTE peut aussi s'hydrolyser rapidement. L'hydrolyse de l'alcoxysilane est catalysée tant par les acides que les bases (Osterholtz et Pohl, 1992; Mill et Tse, 1989). Cependant, les taux d'hydrolyse les plus faibles ont lieu lorsque le pH se situe près de 7. Les demi-vies par hydrolyse relevées pour différents alcoxysilanes varient de 0,04 à 504 minutes pour des pH de 5 à 9 (Mill et Tse, 1989). L'hydrolyse du méthoxysilane du TIDTE devrait produire du méthanol et un silanol (voir l'illustration ci-dessous).



En raison de l'hydrolyse rapide, la demi-vie estimée du TIDTE est inférieure à 1 jour, ce qui est beaucoup moins que le critère (une substance avec demi-vie dans l'eau supérieure ou égale à 182 jours est considérée comme persistante, comme il est décrit dans le

Règlement sur la persistance et la bioaccumulation) (Canada, 2000). Ainsi, le TIDTE est considéré comme non persistant dans l'eau.

Étant donné que le TIDTE devrait aussi subir une hydrolyse rapide dans d'autres milieux environnementaux comprenant de l'eau, les sédiments et les sols, les demi-vies de cette substance dans ces deux milieux devraient aussi être courtes (c'est-à-dire beaucoup moins que 365 et 182 jours, respectivement). Par conséquent, le TIDTE ne devrait pas être persistant dans les sédiments ni dans le sol.

Les résultats de tous les modèles de biodégradation ultime (voir le tableau 5) montrent qu'une longue demi-vie est requise pour terminer la minéralisation du TIDTE. Ces prévisions tiennent compte seulement de l'hydrolyse du TIDTE comme une étape intermédiaire en vue de terminer la minéralisation. Même si la dégradation ultime était la mesure de persistance utilisée pour la catégorisation, la présente évaluation prend en compte des propriétés (y compris le potentiel de toxicité) des produits d'hydrolyse du TIDTE. Pour ces raisons, les prévisions de la biodégradation ultime n'ont pas été utilisées pour déterminer la persistance du TIDTE dans l'environnement.

Par conséquent, compte tenu des éléments ci-dessus, le TIDTE ne répond pas aux critères de persistance dans l'air, l'eau, le sol ou les sédiments, qui sont énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Potentiel de bioaccumulation

Étant donné que le TIDTE est une substance qui est hydrolysable rapidement, son potentiel de bioaccumulation et celui de ses principaux produits d'hydrolyse ont été considérés dans la présente évaluation. Les raisons expliquant les prévisions du potentiel de bioaccumulation du composé d'origine (compte tenu de son hydrolyse rapide) étaient les expositions dans des situations de rejet constant (p. ex. rejet constant du TIDTE dans l'eau là où le composé d'origine peut être présent en petites quantités).

Puisque aucune donnée expérimentale sur les facteurs de bioaccumulation (FBA) ou de bioconcentration (FBC) pour le TIDTE n'est disponible, une méthode prédictive a été appliquée au moyen des modèles de FBA et de FBC disponibles, comme l'indique le tableau 6 ci-dessous. Selon le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000), une substance est bioaccumulable si ses facteurs de bioaccumulation et de bioconcentration sont supérieurs à 5 000. Toutefois, le calcul des facteurs de bioaccumulation est la mesure préconisée pour évaluer le potentiel de bioaccumulation des substances. En effet, le facteur de bioconcentration ne prend pas en compte de manière adéquate le potentiel de bioaccumulation des substances par l'alimentation, lequel est un facteur majeur pour les substances dont le $\log K_{oe}$ est supérieur à $\sim 4,0$ (Arnot et Gobas, 2003). La modélisation cinétique du bilan massique devrait constituer la méthode de prévision la plus fiable pour déterminer le potentiel de bioaccumulation, car elle permet une correction de la transformation métabolique dans la mesure où le $\log K_{oe}$ de la substance se trouve dans le domaine du $\log K_{oe}$ du modèle.

Des estimations du FBC et du FBA, corrigées en fonction d'une biotransformation potentielle, ont été produites à l'aide de modèle BCFBAF (EPI Suite, 2008). Des constantes du taux métabolique ont été obtenues à l'aide de relations quantitatives structure-activité décrites ci-après dans la méthode d'Arnot *et al.* (2008a, b et 2009). Étant donné qu'une relation peut être établie entre le potentiel métabolique, et le poids corporel et la température (Hu et Layton, 2001, et Nichols *et al.*, 2006), le modèle BCFBAFWIN normalise davantage la constante k_M pour un poisson de 10 g à 15 °C en fonction du poids corporel de poissons de niveau trophique intermédiaire (184 g) dans le modèle Arnot-Gobas (Arnot *et al.*, 2008b).

Des estimations des facteurs de bioconcentration et de bioaccumulation, corrigées en fonction d'une biotransformation potentielle (BCFBAF, 2008), ainsi que les estimations des facteurs de bioconcentration tirées du modèle CPOP (2008) varient entre 8 et 10 L/kg (voir le tableau 6), ce qui laisse croire à un faible potentiel de bioaccumulation.

Tableau 6. Données modélisées sur la bioaccumulation du TIDTE

Organisme d'essai	Paramètre	Valeur (poids humide en L/kg)	Référence
Poisson	FBA (niveau trophique intermédiaire)	9,5	BCFBAF, 2008
Poisson	FBC (niveau trophique intermédiaire)	10,1	BCFBAF, 2008
Poisson	FBC	7,7	CPOP, 2008

Un autre élément de preuve de faible bioaccumulation du TIDTE est la taille moléculaire élevée de cette substance. En effet, d'après de récentes études liées aux données sur le FBC chez les poissons et aux paramètres de la taille moléculaire (Dimitrov *et al.*, 2002, 2005), la probabilité qu'une molécule traverse des membranes cellulaires à la suite d'une diffusion passive diminue de façon importante lorsque le diamètre transversal maximal (D_{max}) augmente. La probabilité qu'une diffusion passive se produise diminue de façon notable lorsque le diamètre maximal est supérieur à environ 1,5 nm et diminue de façon encore plus significative dans le cas des molécules ayant un diamètre maximal supérieur à 1,7 nm. Sakuratani *et al.* (2008) ont également étudié l'effet du diamètre transversal sur la diffusion passive à l'aide d'un ensemble d'essais sur le FBC comptant environ 1 200 substances chimiques nouvelles et existantes. Ils ont observé que les substances dont le potentiel de bioconcentration n'était pas très élevé ($FBC < 5000$) avaient souvent un D_{max} supérieur à 2,0 nm ainsi qu'un diamètre effectif (D_{eff}) supérieur à 1,1 nm.

Cependant, comme l'ont évoqué Arnot *et al.* (2010), il existe des incertitudes quant aux seuils proposés par Dimitrov *et al.* (2002, 2005) et Sakuratani *et al.* (2008), étant donné que les études sur le FBC utilisées pour calculer ces seuils n'ont pas fait l'objet d'évaluations critiques. Comme le soulignent Arnot *et al.* (2010), la taille moléculaire a un effet sur la solubilité et la capacité de diffusion dans l'eau et dans les phases organiques (membranes), et les plus grosses molécules peuvent avoir un taux d'absorption plus lent. Toutefois, ces mêmes contraintes liées aux facteurs cinétiques

s'appliquent aux voies de diffusion de l'élimination chimique (c.-à-d., absorption lente = élimination lente). Un potentiel de bioaccumulation important peut donc s'appliquer aux substances qui sont soumises à un processus d'absorption lent, si elles sont biotransformées lentement ou diluées ou éliminées lentement par d'autres processus. Par conséquent, lorsqu'on évalue le potentiel de bioaccumulation, les données sur la taille moléculaire doivent être utilisées avec discernement et de pair avec des éléments de preuve pertinents dans le cadre d'une méthode du poids de la preuve.

Le diamètre moléculaire maximal du TIDTE varie de 1,74 à 3,43 nm (CPOP, 2008), ce qui indiquerait une possibilité de réduction significative de l'absorption à partir de l'eau et de la biodisponibilité *in vivo* pour cette substance.

Puisque le TIDTE s'hydrolyse très rapidement dans l'eau (demi-vie beaucoup plus courte que 182 jours), le potentiel de bioaccumulation des produits de l'hydrolyse (silanol et amines) a également été pris en compte dans la présente évaluation. Selon les résultats du modèle tirés de l'Estimation Programs Interface Suite for Microsoft Windows (EPI Suite, 2008), le silanol devrait avoir une valeur du log K_{oc} d'environ 1,5 (KOWWIN, 2008), et on estime que les valeurs des facteurs de bioconcentration et de bioaccumulation sont très faibles (environ 2 L/kg pour le poisson de niveau trophique intermédiaire) (BCFBAF, 2008). En ce qui concerne les amines (les structures sont présentées dans la section Persistance dans l'environnement), les valeurs du log K_{oc} varient entre 1,3 et 2,7, et on estime que les valeurs de bioconcentration et de bioaccumulation pour le poisson de niveau trophique intermédiaire sont inférieures à 5 L/kg (BCFBAF, 2008).

Par conséquent, les preuves disponibles indiquent que le TIDTE devrait présenter un faible potentiel de bioaccumulation en raison de ses propriétés physiques et chimiques (c.-à-d. grand diamètre moléculaire maximal et faible hydrosolubilité) et de ses taux élevés de biotransformation et d'hydrolyse. Il est conclu que ni le TIDTE ni ses produits d'hydrolyse ne répondent aux critères de bioaccumulation (FBC ou FBA $\geq 5\ 000$) du *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Potentiel d'effets nocifs sur l'environnement

Évaluation des effets écologiques

A – Dans le milieu aquatique

Étant donné que le TIDTE est une substance qui est hydrolysable rapidement, ses priorités écotoxicologiques et celles de ses principaux produits d'hydrolyse ont été considérées dans la présente évaluation. Les raisons expliquant les prévisions des valeurs d'écotoxicité du composé d'origine (compte tenu de son hydrolyse rapide) étaient les expositions dans des situations de rejet constant (p. ex. rejet constant du TIDTE dans l'eau là où le composé d'origine peut être présent en petites quantités).

Il n'existe pas de données écotoxicologiques expérimentales du TIDTE en tant que tel. Par conséquent, des modèles RQSA ont été utilisés pour prévoir sa toxicité pour les organismes aquatiques. En raison de l'hydrolyse rapide du TIDTE avec du méthoxysilane produisant un silanol et du méthanol, et de l'isocyanate produisant des amines, les produits en découlant ont également été pris en considération. Les résultats du modèle RQSA pour le TIDTE sont résumés dans le tableau 7 ci-dessous.

Tableau 7. Données modélisées sur la toxicité pour les organismes aquatiques du TIDTE

Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
Poisson	Toxicité aiguë (96 heures)	CL ₅₀ ¹	0,064*	ECOSAR, 2009
<i>Daphnia magna</i>	Toxicité aiguë (48 heures)	CL ₅₀	0,064*	
Algues vertes	Toxicité aiguë (96 heures)	CE ₅₀ ²	0,185*	
Poisson	Toxicité chronique	Vtc ³	0,005*	
<i>Daphnia magna</i>	Toxicité chronique	Vtc	0,013*	
Algues vertes	Toxicité chronique	Vtc	0,155*	
<i>Daphnia magna</i>	Toxicité aiguë (48 heures)	CE ₅₀	0,154*	CPOP, 2008
<i>Daphnia magna</i>	Toxicité aiguë (48 heures)	CL ₅₀	0,135*	
<i>Pimephales promelas</i>	Toxicité aiguë	CL ₅₀	0,299*	

¹CL₅₀ – Concentration d'une substance qu'on estime létale pour 50 % des organismes d'essai.

²CE₅₀ – Concentration d'une substance qu'on estime susceptible de causer un effet chez 50 % des organismes d'essai.

³Vtc – Valeur de toxicité chronique.

* La concentration d'exposition est au moins dix fois supérieure à l'hydrosolubilité estimée.

Il est à noter que même si la toxicité pour les organismes aquatiques prévue du TIDTE en lui-même est relativement élevée, les valeurs estimées pour les toxicités aiguë et chronique (entre 0,005 et 0,3 mg/L) sont de beaucoup supérieures à l'hydrosolubilité prévue de cette substance ($1,14 \times 10^{-4}$ mg/L). Par conséquent, même lorsque les organismes aquatiques sont exposés à des solutions saturées du TIDTE, des effets nocifs sont peu probables.

La toxicité aiguë du silanol (l'un des produits d'hydrolyse du TIDTE) devrait être beaucoup plus faible : les valeurs de référence modélisées CL₅₀ et CE₅₀ varient de 235 à 1 250 mg/L (ECOSAR, 2009), ce qui se situe au-delà de la valeur d'hydrosolubilité modélisée du silanol d'environ 12 mg/L). Les valeurs de toxicité chronique de référence situées entre 57 et 120 mg/L (ECOSAR, 2009) laissent entendre aussi que la toxicité du silanol pour les organismes aquatiques est faible.

Étant donné que le méthanol est produit durant l'hydrolyse du méthoxysilane, sa toxicité a également été prise en compte dans la présente évaluation. Les CE_{50} et CL_{50} rapportées du méthanol pour les espèces aquatiques sont dans la plupart des cas supérieures à 1 000 mg/L (HSDB, 2006); on considère donc que la toxicité de cette substance est faible.

Les valeurs modélisées de toxicité aiguë (ECOSAR, 2009) d'autres produits d'hydrolyse, les amines (les structures sont présentées dans la section Persistance dans l'environnement), étaient tirées de plusieurs mg/L à des centaines de mg/L, ce qui indique que l'écotoxicité de ces substances est de modérée à faible.

Par conséquent, étant donné que l'hydrosolubilité du TIDTE est bien inférieure aux valeurs d'écotoxicité prévues, et que l'écotoxicité des produits d'hydrolyse du TIDTE est faible, on peut conclure que ni le TIDTE ni ses produits d'hydrolyse ne possèdent un potentiel élevé de nuire aux organismes aquatiques.

B – Dans d'autres milieux naturels

On n'a trouvé aucune étude concernant les effets de cette substance dans le sol ou les sédiments.

Évaluation de l'exposition de l'environnement

Aucune donnée relative aux concentrations de cette substance dans les différents milieux naturels au Canada n'a été répertoriée; par conséquent, le potentiel d'exposition dans l'environnement a été fondé sur les quantités utilisées, le profil d'utilisation, les caractéristiques des adhésifs et produits d'étanchéité marins, le comportement du TIDTE dans l'environnement, ainsi que ses principaux produits d'hydrolyse.

A – Rejets industriels

D'après les renseignements obtenus en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999), le TIDTE n'est pas fabriqué au Canada. Cette substance est importée en tant que composant d'adhésifs et de produits d'étanchéité. On estime donc que les rejets industriels sont négligeables.

B – Rejets commerciaux et par les consommateurs

Tel qu'il a été mentionné dans les sections précédentes de la présente évaluation, dans les préparations d'adhésifs et de produits d'étanchéité, presque tout le TIDTE est intégré aux polymères uréthanes. La majorité de cette substance devrait subir des transformations chimiques dans la matrice du produit formulé. Par conséquent, on peut présumer qu'un

rejet direct de molécules libres de TIDTE (résiduel et inaltéré) à partir de la matrice du produit d'étanchéité résistant aux intempéries et aux eaux salées serait négligeable.

On présume que des résidus d'adhésifs et de produits d'étanchéité contenus dans les contenants sont éliminés dans les lieux d'enfouissement. Toutefois, étant donné que les rejets de ces sites devraient être très limités, les risques associés aux rejets des lieux d'enfouissement ne sont pas considérés dans la présente évaluation préalable.

Le rejet de TIDTE dans d'autres milieux naturels, soit l'air ou le sol, est très peu probable. Par conséquent, l'exposition de la faune à cette substance devrait être négligeable.

Caractérisation des risques pour l'environnement

La démarche utilisée dans le cadre de cette évaluation écologique préalable visait à examiner les divers renseignements pertinents afin de tirer des conclusions fondées sur la méthode du poids de la preuve et le principe de prudence, conformément aux dispositions de la LCPE (1999). Les éléments de preuve pris en compte comprennent des renseignements sur la persistance, la bioaccumulation, la toxicité intrinsèque, les sources et le devenir de la substance en elle-même, de ses produits d'hydrolyse, et le TIDTE résiduel présent dans le produit formulé.

Le TIDTE est importé au Canada dans les produits prêts à l'emploi. Tel qu'il a été mentionné dans les sections précédentes de la présente évaluation, en raison des fins pour lesquelles il est utilisé ainsi que de ses propriétés physiques et chimiques, il ne devrait pas être rejeté dans l'air ou dans le sol au Canada.

Il est possible, en théorie, que cette substance soit rejetée dans l'eau, mais ces rejets devraient être très faibles puisqu'il est peu probable qu'elle s'échappe de la matrice des produits formulés et pendant l'application du produit. De plus, ces rejets devraient être diffusés (dispersés sur de grandes étendues), et la toxicité pour les organismes aquatiques de la substance elle-même et ses produits d'hydrolyse n'est pas considérée comme étant élevée.

Au Canada, la quantité de TIDTE sur le marché est très faible (entre 100 et 1 000 kg/année). La quantité maximale importée de TIDTE (1 000 kg) peut être utilisée de façon prudente pour la caractérisation des risques écologiques de cette substance. D'après les pertes estimées de TIDTE au cours de son cycle de vie (voir le tableau 3) et les transformations chimiques dans les matrices de produits, on présume de façon prudente que 1 % de la substance, c.-à-d. seulement un maximum de 10 kg/année, est rejetée dans l'ensemble de l'environnement canadien. Toutefois, le volume actuel importé de TIDTE est inférieur à 1 000 kg/année, et la production transformée chimiquement est probablement supérieure à 99 % et, par conséquent, le rejet annuel actuel de TIDTE inaltéré et résiduel est probablement beaucoup moins que 10 kg/année.

Comme le TIDTE a une utilisation dispersée, et que la quantité relâchée est probablement inférieure à 10 kg/année dans tout le pays, on s'attend à ce que les concentrations environnementales estimées (CEE) soient extrêmement faibles.

Enfin, il convient également de mentionner que même si le TIDTE est une substance qui est hydrolysable facilement avec une très courte demi-vie dans l'eau, les concentrations environnementales estimées de ses produits d'hydrolyse dans l'eau devraient aussi être extrêmement faibles (d'autant plus que le taux de rejet très bas est inférieur à 10 kg/année).

Si l'on tient compte de l'ensemble de ces considérations, on conclut que le risque écologique global du TIDTE est considéré comme très faible.

Incertitudes dans l'évaluation des risques pour l'environnement

Les principales incertitudes liées à l'évaluation du TIDTE sont liées au manque de données expérimentales sur les propriétés physiques et chimiques, la persistance, la bioaccumulation et la toxicité intrinsèque. Des modèles RQSA ont été utilisés pour estimer les principales propriétés physiques et chimiques du TIDTE, notamment la solubilité dans l'eau, le log K_{oe} et la pression de vapeur). Les valeurs modélisées pour ces paramètres ont également été utilisées pour prévoir le devenir de cette substance dans l'environnement et évaluer son potentiel de persistance et de bioaccumulation, sa toxicité ainsi que son risque pour l'environnement. Toutefois, puisque les groupements fonctionnels du TIDTE sont inclus dans les ensembles d'étalonnage des modèles RQSA, les données modélisées sont jugées suffisamment fiables pour justifier leur utilisation dans la présente évaluation.

Les concentrations prévues, associées à la toxicité intrinsèque pour les organismes aquatiques, constituent une source additionnelle d'incertitude, dans le sens où elles dépassent la solubilité prévue du produit chimique dans l'eau. Malgré ce fait, les données dont on dispose indiquent que le TIDTE n'est pas très dangereux pour les organismes aquatiques.

Par ailleurs, l'information sur le profil d'utilisation régionale des adhésifs et des produits d'étanchéité marins contenant du TIDTE est limitée, et aucune donnée ne porte sur la quantité de ces produits appliquée au-dessus ou en dessous de la ligne de flottaison. En outre, peu d'information concerne l'élimination des contenants de ces produits. Toutefois, compte tenu de la petite quantité de la substance commercialisée au Canada, ces limites ne devraient pas avoir une influence importante sur la conclusion générale de l'évaluation.

Potentiel d'effets nocifs sur la santé humaine

Évaluation de l'exposition

Milieu naturel

Aucune donnée empirique sur les concentrations de TIDTE dans les milieux naturels au Canada n'a été relevée. Il ne devrait pas se retrouver dans les aliments ou les boissons au Canada. Les concentrations environnementales ont été estimées à l'aide des pourcentages des pertes prévus par l'outil de débit massique (voir le tableau 3) (Environnement Canada, 2010b). Ces pourcentages ont été appliqués à la quantité totale de TIDTE commercialisée au Canada en 2006. Selon une estimation prudente, cette quantité pourrait atteindre jusqu'à 1 000 kg (Environnement Canada, 2010a). La quantité des pertes est estimée à 10 kg par année dans l'eau de surface.

Les pertes estimées ont été utilisées dans ChemCAN, un modèle d'exposition environnementale propre au Canada, afin d'estimer les concentrations dans différents milieux naturels (ChemCAN, 2003). Ce modèle diffère des modèles aux sources ponctuelles utilisés dans la section de l'évaluation écologique du document, qui fournissent des estimations de l'exposition à proximité des points de rejets, dans le sens où il s'agit d'un modèle régional de fugacité de niveau III en champ lointain qui est utilisé pour estimer les concentrations moyennes dans différents milieux, dans le but d'informer les estimations relatives à l'exposition humaine. Les concentrations environnementales estimées sont présentées à l'annexe 2 et ont été utilisées afin d'obtenir des estimations de l'absorption. On a obtenu des valeurs prudentes de la limite supérieure d'absorption quotidienne du TIDTE pour la population au Canada sur la base des concentrations environnementales estimées, qui ont donné une exposition négligeable de l'ordre de nanogrammes (10^{-9} g par kilogramme de poids corporel [kg p.c.] par jour).

Produits commerciaux et de consommation

Au Canada, le TIDTE est présent dans un adhésif marin à une concentration de 1 à 2 % en poids. Les fiches signalétiques (FS) pour ce produit énumèrent les effets potentiels sur la santé incluant la sensibilisation aussi bien que les mesures de premiers soins relatives (3M Canada Company, 2006). Cet adhésif marin est un substrat de polyuréthane qui durcit en présence d'humidité en moins de 24 heures après son application afin de former un produit d'étanchéité au-dessus ou en dessous de la ligne de flottaison des bateaux (3M Marine, 2006). Ce substrat peut être appliqué sur une variété de joints et d'interfaces, notamment des hublots, des petits accastillages, des moulures et des joints de coffre (3M Marine, 2006). La procédure d'application comprend le chargement de l'adhésif dans un pistolet à calfeutrer, la coupe du bout de l'applicateur pour obtenir un boudin de la taille désirée et l'application de l'adhésif à l'endroit voulu.

En raison de l'exposition découlant de l'utilisation des produits de consommation et due à la très faible pression de vapeur du TIDTE, l'exposition par inhalation au TIDTE qui se volatilise à partir de ce produit de consommation devrait être négligeable. En revanche, étant donné que le log K_{oe} de TIDTE est élevé, il existe un potentiel d'exposition dermique au contact du produit. Par exemple, durant la procédure d'application, certaines personnes peuvent utiliser leurs doigts pour rendre le substrat plus lisse. À l'aide des hypothèses par défaut de la version 4.1 du modèle ConsExpo pour un produit de scellement, on a estimé que l'exposition liée à l'application du produit sur un bateau était faible, soit 2,06 µg/kg p.c. par événement (annexe 3).

Évaluation des effets sur la santé

Le TIDTE est composé d'isocyanate d'alkyle-silanes. Aucune donnée empirique relative aux effets sur la santé n'a été relevée pour le TIDTE. Les analogues structuraux du TIDTE ont été établis à l'aide des sites Web de SciFinder et de ChemID. Cependant, aucune donnée empirique sur la toxicité n'a été relevée pour ces analogues.

Selon la Commission européenne, le TIDTE est une substance R42 et R43 (peut entraîner une sensibilisation par inhalation et par contact avec la peau) [BESC, 1991]. Bien que le fondement de cette classification n'est pas connu (aucun compte rendu sommaire de la Commission européenne sur le TIDTE n'a été trouvé), elle repose vraisemblablement sur le groupement fonctionnel isocyanate du TIDTE, l'isocyanate étant un agent sensibilisateur cutané et respiratoire (CDC, 2005).

Aucune donnée expérimentale sur les propriétés physiques et chimiques du TIDTE n'a été trouvée. Selon plusieurs modèles, la solubilité du TIDTE pour une vaste gamme de pH est faible (tableau 8). De plus, le modèle WSKOWWIN (2008) prévoit une hydrosolubilité de $1,14 \times 10^{-4}$ mg/L à 25 °C pour le TIDTE.

Tableau 8. Estimation de la solubilité du TIDTE à différents pH

pH	Modèle ADME Boxes	Modèle ACD (Advanced Chemistry Development)
	Valeur	Valeur (25 °C)
1,7 (estomac)	$1,11 \times 10^{-4}$ mg/L	0,11 mg/L
4,6 (duodénum)	$1,11 \times 10^{-4}$ mg/L	0,11 mg/L
6,5 (jéjunum et iléon)	$1,11 \times 10^{-4}$ mg/L	0,11 mg/L
7,4 (sang)	$1,11 \times 10^{-4}$ mg/L	0,11 mg/L
8,0 (côlon)	$1,11 \times 10^{-4}$ mg/L	0,11 mg/L

Bien que les différentes valeurs relatives à l'hydrosolubilité aient été prédites par les deux modèles, la faible solubilité estimée dans son ensemble du TIDTE était faible quel que soit le pH des liquides biologiques (c.-à-d. moins de 0,5 mg/L). Le TIDTE est un composé chimiquement actif qui comporte des groupements fonctionnels (isocyanate et

alcooxysilane) pouvant réagir en présence d'eau ou d'humidité et être rapidement hydrolysés. Le principal produit d'hydrolyse primaire du TIDTE (figure 1) est plus soluble que ce dernier. Sa solubilité modélisée étant de 11,81 mg/L à 25 °C (WSKOWWIN, 2008).

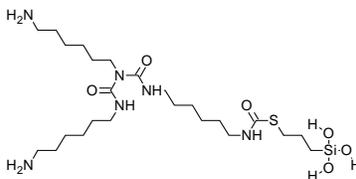


Figure 1. Structure du produit d'hydrolyse primaire du TIDTE

La toxicité prévue selon les modèles de relations quantitatives structure-activité (RQSA) pour le TIDTE et son produit d'hydrolyse primaire est résumée à l'annexe 4. Selon le modèle DEREK, il est plausible que le TIDTE soit mutagène (d'après les groupements fonctionnels isocyanate ou isothiocyanate et thiocarbamate), qu'il cause des dommages chromosomiques (d'après les groupements fonctionnels isocyanate ou isothiocyanate), qu'il soit hépatotoxique (d'après le composé organosilicié), qu'il cause une irritation de la peau, des yeux et des voies respiratoires (d'après le groupement fonctionnel isocyanate) et qu'il soit un agent sensibilisateur cutané et respiratoire (d'après le groupement fonctionnel isocyanate) [DEREK, 2009]. De plus, une activité mutagène positive chez les drosophiles (*Drosophila*) a été prévue par le modèle Leadscope (Leadscope Model Applier, 2010), et une activité mutagène (d'après le groupement fonctionnel thiocarbamate) et une hépatotoxicité (d'après le composé organosilicié) sont plausibles pour le produit d'hydrolyse primaire du TIDTE selon le modèle DEREK. Les autres modèles de relations quantitatives structure-activité (RQSA) n'ont pu prévoir la toxicité du TIDTE ou de son produit d'hydrolyse primaire étant donné que ces composés ne font pas partie de leur base de données (version 6.2 de TOPKAT [TOPKAT, 2004]) ou que la structure de ces derniers contient de la silicone, qui n'est pas reconnu correctement par l'un des modèles utilisés (version 2.1 de CASETOX [CASETOX, 2009]).

Du fait de la faible solubilité, de la nature très réactive du TIDTE et des prévisions des modèles RQSA, les effets potentiels de cette substance sur la santé devraient être une irritation ou une sensibilisation de la peau et des muqueuses, causées par son groupement fonctionnel isocyanate. Les produits hydrolysés deviennent légèrement solubles, mais moins réactifs que le composé d'origine. Ces composés peuvent être davantage hydrolysés ou métabolisés si le produit d'hydrolyse primaire est soumis à des conditions qui favorisent les processus physiologiques. De plus, des liaisons transversales peuvent se former entre les groupements silanols dans les composés hydrolysés, ce qui génère des polymères de siloxane, dont la biodisponibilité est également considérée comme faible. Même si un modèle RQSA, DEREK, a détecté une structure mutagène en raison de la présence de thiocarbamate dans le produit d'hydrolyse du TIDTE, aucune information liée au métabolisme ne permet de déterminer l'importance relative du TIDTE et de son produit d'hydrolyse en ce qui concerne la mutagénicité.

Le méthanol est également un produit de l'hydrolyse primaire du TIDTE.

Le niveau de confiance accordé à l'évaluation des effets sur la santé est considéré comme faible, car aucun effet empirique ni aucune donnée sur les propriétés physiques et chimiques n'ont été relevés à ce sujet. L'information disponible sur ce composé permet uniquement de prévoir de façon qualitative son potentiel de génotoxicité et son potentiel d'irritation ou de sensibilisation de la peau, des yeux et des voies respiratoires.

Caractérisation du risque pour la santé humaine

Du fait de la faible solubilité, de la nature très réactive du TIDTE et des prévisions des modèles de relations quantitatives structure-activité (RQSA), les principaux effets sur la santé associés au TIDTE devraient être une irritation ou une sensibilisation de la peau, des yeux et des voies respiratoires. La Commission européenne a également classé le TIDTE comme un agent sensibilisateur potentiel pour la peau et les voies respiratoires (BESC, 1991).

Les produits qui découlent de l'hydrolyse du TIDTE peuvent devenir plus solubles et moins réactifs que le TIDTE, et peuvent davantage être hydrolysés ou métabolisés, ou encore former des polymères par l'établissement de liaisons transversales. Cependant, aucune donnée sur le métabolisme n'était disponible pour déterminer l'importance relative du TIDTE et de ses produits d'hydrolyse primaire en présence de conditions physiologiques. Un modèle RQSA a détecté un faible potentiel de mutagénicité en raison de la présence de thiocarbamate dans le produit d'hydrolyse primaire du TIDTE, mais la pertinence de ce résultat en fonction de l'exposition humaine est incertaine.

L'estimation de l'exposition au TIDTE à partir des milieux naturels est de l'ordre de grandeur des nanogrammes (10^{-9} g) par kg p.c. (kilogramme de poids corporel) par jour. L'exposition de la population générale au TIDTE à partir des produits de consommation, notamment les adhésifs marins, devrait être faible en raison l'utilisation peu fréquente et spécialisée de ces produits. Par conséquent, l'exposition de la population générale au Canada devrait être faible à négligeable, et le risque pour la santé humaine est considéré comme faible.

L'utilisation par les consommateurs de produits contenant du TIDTE est considérée comme faible. Pour les produits classés sous le Règlement sur les produits contrôlés, établi en vertu de la *Loi sur les produits dangereux*, les effets potentiels sur la santé, incluant la sensibilisation, seraient définis sur la fiche signalétique.

Incertitudes de l'évaluation des risques pour la santé humaine

L'incertitude liée à la caractérisation de l'exposition est élevée vu l'absence de données empiriques. Néanmoins, le niveau de confiance est élevé quant au fait que l'exposition au TIDTE à partir de sources environnementales est négligeable. Aucune donnée n'a été relevée dans la documentation concernant les concentrations de cette substance dans les milieux naturels. Toutefois, comme on connaît les quantités commercialisées pour l'année

civile 2006, on les a combinées à des pourcentages de perte estimés à l'aide de l'outil de débit massique afin de modéliser les concentrations dans l'environnement. Comme la valeur maximale des quantités commercialisées a été utilisée dans la modélisation, les résultats modélisés devraient représenter des estimations prudentes de l'exposition environnementale. La confiance à l'égard des estimations relatives à l'exposition des produits de consommation est modérée. Le manque de données expérimentales sur les propriétés physiques et chimiques requises pour les prévisions de l'exposition à l'aide de la version 4.1 du modèle ConsExpo réduit le niveau de confiance dans l'estimation de l'exposition.

Le niveau de confiance accordé à la détermination des effets critiques sur la santé est faible en raison de l'absence de données expérimentales relatives aux effets sur la santé. Bien que la caractérisation du risque repose sur le composé d'origine et sur les produits issus de son hydrolyse, l'exposition relative à ces substances et leur présence chez les mammifères sont inconnues.

Conclusion

D'après les renseignements disponibles, on peut conclure que le TIDTE ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité, à une concentration ou dans des conditions qui ont ou peuvent avoir un effet nuisible immédiat ou à long terme sur l'environnement ou sur sa diversité biologique, ou qui constituent ou peuvent constituer un danger pour l'environnement essentiel pour la vie. De plus, le TIDTE ne répond pas aux critères de persistance et de bioaccumulation énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

À la lumière des renseignements disponibles, il est conclu que le TIDTE ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité, à des concentrations ou dans des conditions qui constituent ou peuvent constituer un risque pour la vie ou la santé humaine au Canada.

Il est donc conclu que le TIDTE ne satisfait à aucun des critères énoncés à l'article 64 de la LCPE (1999).

On envisagera d'inclure cette substance dans l'initiative de mise à jour de la Liste intérieure des substances. De plus, s'il y a lieu, des activités de recherche et de surveillance viendront, le cas échéant, appuyer la vérification des hypothèses formulées au cours de l'évaluation préalable.

Références

3M Canada Company. 2006. Fiche signalétique : 3M™ Marine Adhesive Sealant Fast Cure 5200 – White; PN 06520, 05220. London (Ont.) : 3M Canada Company. [date d'émission : le 13 mars 2006]. Accès : <http://www.compositescanada.com/pictures/brochure/629.pdf?tt=1262186318>

3M Marine. 2006. Fiche signalétique : 3M™ Marine Adhesive/Sealant Fast Cure 5200. Saint Paul (MN) : 3M Marine. [date d'émission : le 4 janvier 2006]. Accès : <http://multimedia.3m.com/mws/mediawebserver?66666UuZjcFSLXTtlx&EoXM6EVuQEcuZgVs6EVs6E666666--> [consultée le 1^{er} février 2010]

ACD/pKaDB [module de prévision]. 2008. Version 11. Toronto (Ont.) : Advanced Chemistry Development. Accès : http://www.acdlabs.com/products/phys_chem_lab/pka/ [consulté en mars 2010]

ADME Boxes [module de prévision]. Pharma Algorithms. Droits d'auteur en vigueur de 2001 à 2008. Access (ADME ToxWEB) : <http://www.pharma-algorithms.com/webboxes/>

[AOPWIN] Atmospheric Oxidation Program for Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 1.92a. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

Arnot, J.A., Arnot, M., Mackay, D., Couillard, Y., MacDonald, D., Bonnell, M., Doyle, P. 2010. Molecular size cut-off criteria for screening bioaccumulation potential: Fact or fiction? *Integrated Environmental Assessment and Management* 6(2):210-224.

Arnot, J.A., Meylan, W., Tunkel, J., Howard, P.H., Mackay, D., Bonnell, M., Boethling, R.S. 2009. A quantitative structure-activity relationship for predicting metabolic biotransformation rates for organic chemicals in fish. *Environ. Toxicol. Chem.* 28(6):1168-1177.

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

Arnot, J.A., Mackay, D., Parkerton, T.F., Bonnell, M. 2008b. A database of fish biotransformation rates for organic chemicals. *Environ. Toxicol. Chem.* 27(11):2263-2270.

Arnot, J.A., 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.

[BCFBAF] BioConcentration Factor Program for Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 3.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

[BESC] Bureau européen des substances chimiques. 1991. Directive 91/326/CEE de la Commission du 5 mars 1991 portant modification pour la 30^e fois, en vue de l'adaptation au progrès technique de la Directive du conseil 67/548/CEE concernant le rapprochement des dispositions législatives, réglementaires et administratives relativement à la classification, à l'étiquetage et à l'emballage des substances dangereuses [traduction]. Directive 91/326/CEE (ATP13).

[BIOWIN] Biodegradation Probability Program for Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 4.10. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

Boethling, R.S., Howard, P.H., Beauman, J.A., Larosche, M.E. 1995. Factors for intermedia extrapolations in biodegradability assessment. *Chemosphere* 30(4):741-752.

Canada. 1978. Règlement sur les aliments et drogues. C.R.C., c. 870. Accès : <http://laws.justice.gc.ca/fr/C.R.C.-ch.870/index.html>

Canada. 1999. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*. L.C. 1999, c. 33, *Gazette du Canada*. Partie III. vol. 22, n° 3. Accès : <http://www.gazette.gc.ca/archives/p3/1999/g3-02203.pdf>

Canada. 2000. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*, C.P. 2000-348, 23 mars 2000, DORS/2000-107, *Gazette du Canada*. Partie II, vol. 134, n° 7, p. 607-612. Accès : <http://gazette.gc.ca/archives/p2/2000/2000-03-29/pdf/g2-13407.pdf>

Canada. Ministère de l'Environnement, 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*, *Canada Gazette*. Partie I, vol. 140, n° 49, p. 4109-4117. Accès : <http://www.gazette.gc.ca/archives/p1/2006/2006-12-09/pdf/g1-14049.pdf>

Canada. Ministère de l'Environnement, ministère de la Santé. 2009. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis de dixième divulgation d'information technique concernant les substances identifiées dans le Défi*, *Gazette du Canada*. Partie I, vol. 143, n° 25, p. 1796-1812. Accès : <http://gazette.gc.ca/rp-pr/p1/2009/2009-06-20/pdf/g1-14325.pdf>

CASETOX [module de prévision]. 2009. Version 2.1. Beachwood (OH) : MultiCASE. Accès : <http://www.multicase.com/products/prod03.htm> [consulté le 16 décembre 2009] [réserve de consultation]

[CATABOL] Probabilistic assessment of biodegradability and metabolic pathways [modèle informatique]. c2004-2008. Version 5.10.2. Bourgas (Bulgarie) : Bourgas Prof. Assen Zlatarov University, Laboratory of Mathematical Chemistry. Accès :

[CDC] Centres for Disease Control and Prevention (É.-U.) 2005. NIOSH health hazard evaluation report. HETA #2004-0349-2970. Kewaunee (WI) : Kewaunee Fabrications, LLC. Cincinnati (OH) : CDC, National Institute for Occupational Safety and Health Publications Office. Accès : <http://www.cdc.gov/niosh/hhe/reports> [consulté le 9 avril 2010]

ChemCAN [Level III fugacity model of 24 regions of Canada]. 2003. Version 6.00. Peterborough (Ont.) : Trent University, Canadian Centre for Environmental Modelling and Chemistry. Accès : <http://www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel/models/CC600.html> [consulté le 15 février 2010]

[CPOP] Modèle canadien de POP. 2008. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques; Bourgas (Bulgarie) : Bourgas Prof. Assen Zlatarov University, Laboratory of Mathematical Chemistry. [Modèle basé sur celui de Mekenyan *et al.*, 2005]. Disponible auprès de la Division des évaluations écologiques d'Environnement Canada.

[DEREK] Deductive Estimation of Risk from Existing Knowledge [module de prévision]. 2009. Version 12.0. Leeds (R.-U.) : Lhasa Limited. Accès : <https://www.lhasalimited.org/derek/> [réserve de consultation]

[DERMWIN] Dermal Permeability Coefficient Program [modèle d'évaluation]. 2000. Version 1.43a. Washington (DC) : USEPA. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm> [consulté le 2 février 2010]

Dimitrov, S., Dimitrova, N., Walker, J., Veith, G., Mekenyan, O. 2002. Predicting bioconcentration potential of highly hydrophobic chemicals. Effect of molecular size. *Pure Appl. Chem.* 74(10):1823-1830.

Dimitrov, S., Dimitrova, N., Parkerton, T., Comber, M., Bonnell, M., Mekenyan, O. 2005. Base-line model for identifying the bioaccumulation potential of chemicals. *SAR QSAR Environ. Res.* 16(6):531-554.

[ECOSAR] Ecological Structural Activity Relationships Class Program for Windows [en ligne]. 2009. Version 1.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

Environnement Canada. 2010a. Données sur les substances du lot 10 recueillies en vertu de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*. Données recueillies par Environnement Canada, Division de la mobilisation et de l'élaboration des programmes.

Environnement Canada. 2010b. Assumptions, limitations and uncertainties of the Mass Flow Tool for TIDTE, CAS RN 85702-90-5. Document provisoire interne. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

[EPISuite] Estimation Programs Interface Suite for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 4.0. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm>

[EQC] Equilibrium Criterion Model. 2003. Version 2.02. Peterborough (Ont.) : Trent University, Canadian Environmental Modelling Centre. Accès : <http://www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel/models/EQC2.html>

[HENRYWIN] Henry's Law Constant Program for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 3.20. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[HSDB] Hazardous Substances Data Bank [base de données sur Internet]. 2006. Methanol. US National Library of Medicine. Accès : <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB> [consulté en février 2010]

[HSDB] Hazardous Substances Data Bank [base de données sur Internet]. 2007. Hydrolysis of isocyanates. US National Library of Medicine [tiré de EPISuite 2008]. Accès : <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB> [consulté en février 2010]

Hu, T.M., Layton, W.L. 2001. Allometric scaling of xenobiotic clearance: uncertainty versus universality [en ligne]. *AAPS PharmSci.* Octobre 2010. Vol. 3(4):Article 29. Accès : <http://www.aapsj.org/view.asp?art=ps030429>.

[HYDROWIN] Hydrolysis Rates Program for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 2.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Industrie Canada. 2008. Bateaux de plaisance. Accès : <http://www.ic.gc.ca/eic/site/rb-bp.nsf/fra/accueil> [mis à jour le 5 novembre 2008, consulté le 12 octobre 2010]

[KOAWIN] Octanol Air Partition Coefficient Program for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 1.10. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[KOCWIN] The Soil Adsorption Coefficient Program [modèle d'évaluation]. 2008. Version 2.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[KOWWIN] Octanol-Water Partition Coefficient Program for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 1.67. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Mekenyan, G., Dimitrov, S.D., Pavlov, T.S., Veith, G.D. 2005. POPs: A QSAR system for creating PBT profiles of chemicals and their metabolites. *SAR QSAR Environ. Res.* 16(1-2):103-133.

Mill, T., Tse, D. 1989. Environmental fate and exposure studies: Development of a SAR for hydrolysis of alkoxysilanes. SRI International, Draft Summary Report: Task 243, EPA Contract No. 68-02-4254. Menlo Park (CA) : SRI International.

[MPBPWIN] Melting Point Boiling Point Program for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 1.43. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[NCI] National Chemical Inventories [base de données sur CD-ROM]. 2007. Issue 1. Columbus (OH) : American Chemical Society. Accès : <http://www.cas.org/products/cd/nci/index.html> [consultée le 11 décembre 2007]

Nichols, J.W., Fitzsimmons, P.N., Burkhard, L.P. 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.

Osterholtz, F.D., Pohl, E.R. 1992. Kinetics of the hydrolysis and condensation of organofunctional alkoxysilanes: A review. *J. Adhes. Sci. Technol.* 6:127-49.

[RIVM] Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. 2007. Do-it-yourself products fact sheet: To assess the risks for the consumer [en ligne]. Bilthoven (NL) : RIVM (Institut national néerlandais de la santé publique et de l'environnement). RIVM Report 320104007/2007. Accès : <http://www.rivm.nl/bibliotheek/rapporten/320104007.pdf> [consulté le 2 février 2010]

Sakuratani, Y., Noguchi, Y., Kobayashi, K., Yamada, J., Nishihara, T. 2008. Molecular size as a limiting characteristic for bioconcentration in fish. *J. Environ. Biol.* 29(1):89-92.

Santé Canada. 1998. Exposure factors for assessing total daily intake of priority substances by the general population of Canada. Rapport inédit. Ottawa (Ont.) : Santé Canada, Direction de l'hygiène du milieu.

Santé Canada. 2007. Note réglementaire REG 2007-04 de l'Agence de réglementation de la lutte antiparasitaire (ARLA) : liste des produits de formulation de l'ARLA [en ligne]. Ottawa (Ont) : Santé Canada, ARLA. Accès : http://www.hc-sc.gc.ca/cps-spc/pubs/pest/_decisions/reg2007-04/index-fra.php [consultée le 11 mars 2010]

Santé Canada. 2009. Liste critique des ingrédients dont l'utilisation est restreinte ou interdite dans les cosmétiques – septembre 2009 [en ligne]. Ottawa (Ont.) : Santé Canada, Sécurité des produits de consommation. Accès : http://www.hc-sc.gc.ca/cps-spc/person/cosmet/info-ind-prof/_hot-list-critique/hotlist-liste-fra.php [consultée le 1^{er} mars 2010]

[SDC] Système de déclaration des cosmétiques [base de données exclusive]. 2010. Disponible auprès de Santé Canada, Division des cosmétiques.

[TOPKAT] Toxicity Prediction by Komputer Assisted Technology [en ligne]. 2004. Version 6.2. San Diego (CA) : Accelrys Software Inc. Accès : <http://www.accelrys.com/products/topkat/index.html>

[USEPA] United States Environmental Protection Agency. 1986-2002. Toxic Substances Control Act: Inventory update reporting (TSCA-IUR). Non-confidential production volume information for 1986, 1990, 1994, 1998 and 2002 reporting cycles [CD-ROM]. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency.

[WSKOWWIN] Water Solubility for Organic Compounds Program for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 1.41. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Annexe 1 : Persistance, bioaccumulation, toxicité (PBT) Tableau sommaire des intrants des modèles

Peu de données expérimentales existent en ce qui concerne les propriétés physiques et chimiques du TIDTE. Les données estimées à l'aide du modèle Estimation Programs Interface Suite for Microsoft Windows (EPI Suite) pour les principaux paramètres ont été utilisées pour d'autres modélisations.

Le code suivant du Simplified Molecular Input Line Entry System (SMILES) a été utilisé pour le TIDTE dans les modèles :

```
O=C(N(C(=O)NCCCCCNC(=O)SCCCSi)(OC)(OC)OC)CCCCCN=C(=O))NCCCCCN=C=O
```

Puisque le TIDTE s'hydrolyse rapidement dans l'eau, y compris dans les autres milieux naturels en présence d'humidité, le produit issu de son hydrolyse primaire a été inclus dans la présente évaluation. Le code suivant du SMILES a été utilisé pour ce dernier dans les modèles :

```
O=C(N(C(=O)NCCCCCNC(=O)SCCC[Si](O)(O)O)CCCCCN)NCCCCCN
```

	Devenir physique et chimique	Devenir	Profil de PBT	Écotoxicité
Paramètres d'entrée des modèles	Suite EPIWIN (tous les modèles, notamment OAPWIN, KOWWIN, KOCWIN, BCFBAF, BIOWIN et ECOSAR)	EQC (produit chimique de type I)	Modèle canadien de POP (y compris CATABOL)	TOPKAT
Code SMILES pour le TIDTE	x	x	x	x
Code SMILES pour le produit d'hydrolyse	x			x
Masse moléculaire (g/mol)		674,93		
Point de fusion (°C)		349,84		
Température (°C)		25		
Pression de vapeur (Pa)		1×10^{-11}		
Log K_{oe} (coefficient de partage octanol-eau) (sans dimension)		6,62		
Solubilité dans l'eau (mg/L)		$1,14 \times 10^{-4}$		
Demi-vie dans l'air¹ (jours)		0,17		

	Devenir physique et chimique	Devenir	Profil de PBT	Écotoxicité
Demi-vie dans l'eau (jours)		1		
Demi-vie dans les sédiments² (jours)		45		
Demi-vie dans le sol³ (jours)		1		

¹ Estimée par AOPWIN, 2008.

² Estimée d'après le taux de biodégradation primaire (sous-modèle BIOWIN 3, 2008).

³ Taux d'hydrolyse estimé comme étant le même que dans l'eau.

Annexe 2 : Estimation des concentrations du TIDTE dans les milieux naturels à l'aide du modèle ChemCAN, version 6.00 (ChemCAN, 2003)¹

Milieu ²	Concentration estimée
Air ambiant ³	0,319 ng/m ³
Eau de surface ⁴	0,0213 ng/L
Sol ⁴	2,93 x 10 ⁻³ ng/g de solides
Sédiments ⁴	7,89 x 10 ⁻⁴ ng/g de solides

¹Les concentrations ont été estimées pour la région du sud de l'Ontario.

²Les concentrations du débit entrant par défaut, soit 2 ng/m³ dans l'air et 3 ng/L dans l'eau ont été précisées par ChemCAN.

³La demi-vie de dégradation dans l'air a été estimée à 0,17 jour (AOPWIN, 2008).

⁴La demi-vie de dégradation hydrolytique dans l'air a été estimée à 1 jour (HYDROWIN, 2008). Étant donné que le TIDTE devrait aussi s'hydrolyser dans les sédiments et le sol, une demi-vie d'une journée a également été utilisée pour estimer le taux de dégradation dans les sédiments et le sol.

Annexe 3 : Estimation de l'exposition cutanée liée à l'application de produits de scellement sur les bateaux

Hypothèses	Calculs	Exposition estimée
<p>K_p (coefficient de perméabilité) : 0,0073 cm/h (DERMWIN, 2000)</p> <p>S (surface du bout des doigts) : 2 cm² (RIVM, 2007)</p> <p>FM (fraction massique maximale du TIDTE) : 0,02 (3M Canada Company, 2006)</p> <p>ρ (densité du substrat) : 1 g/cm³ (RIVM, 2007)</p> <p>DE (durée de l'exposition) : 0,5 h (RIVM, 2007)</p> <p>C_f (facteur de conversion) : 1 × 10⁶ µg/1 g</p> <p>PC (poids du corps d'un adulte) : 70,9 kg p.c. (Santé Canada, 1998)</p>	<p>Absorption cutanée :</p> $= (K_p)(S)(DE)(FM)(\rho)(C_f) / (PC)$ <p>=</p> $(0,0073 \text{ cm/h})(2 \text{ cm}^2)(0,5 \text{ h})(0,02)(1 \text{ g/cm}^3)(1 \times 10^6 \text{ µg/1 g}) / (70,9 \text{ kg p.c.})$ <p>= 2,06 µg/kg p.c. par événement</p>	<p>Dose cutanée aiguë :</p> <p>2,06 µg/kg p.c. par événement</p>

Annexe 4 : Résumé des résultats des modèles R(Q)SA relatifs à la toxicité du TIDTE

PRÉVISIONS DES MODÈLES R(Q)SA SUR LA CANCÉROGÉNICITÉ DU TIDTE ET DE SON PRODUIT D'HYDROLYSE PRIMAIRE

Modèle/Espèces	Souris		Rat		Rat	Souris	Rongeur	Mammifères
	Mâle	Femelle	Mâle	Femelle				
Model Applier	HD	HD	HD	HD	HD	HD	HD	-
Multicase Casetox	S. O.	S. O.	S. O.	S. O.	S. O.	S. O.	S. O.	-
TOPKAT	HD	HD	HD	HD	-	-	-	-
DEREK	-	-	-	-	-	-	-	AR

HD – hors domaine (le modèle indique qu'un produit chimique donné est hors de son domaine d'applicabilité)

S. O. – Sans objet

« - » – aucun modèle disponible dans la suite RQSA

AR – aucun résultat

PRÉVISIONS DES MODÈLES R(Q)SA SUR LA GÉNOTOXICITÉ DU TIDTE

Modèle/paramètres	aberrations chromosomiques	aberrations chromosomiques – autres rongeurs	aberrations chromosomiques – rats	test du micronoyau sur des souris	test du micronoyau sur des rongeurs	drosophiles	translocations héritables des drosophiles	essai d'expression d'allèles récessifs létaux liés au sexe sur des drosophiles	mutation des mammifères	mutation létale dominante des mammifères	synthèse de l'ADN non programmée (UDS)	synthèse de l'ADN non programmée avec des lymphocytes humains	synthèse de l'ADN non programmée avec des hépatocytes de rats	mutation du lymphome chez des souris	S. cerevisiae	levure	hgprt	E. coli	E. coli W	Microbes/bactéries	salmonella
MA	HD	HD	H D	HD	N	P	H D	P	H D	HD	HD	HD	HD	HD	N	N	HD	HD	HD	HD	HD
CT	S. O.	-	-	S. O.	-	S. O.	-	-	-	-	S. O.	-	-	S. O.	-	-	-	-	-	-	S. O.
TK	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	HD
DEREK	P	P	P	-	-	-	-	-	A R	-	-	-	-	-	-	-	-	P	P	P	P

MA – Model applier

CT – Multicase Casetox

TK – Topkat

HD – hors domaine (le modèle indique qu'un produit chimique donné est hors de son domaine d'applicabilité)

S. O. – Sans objet

« - » – aucun modèle disponible dans la suite RQSA

AR – aucun résultat

P – Positif

PRÉVISIONS DES MODÈLES R(Q)SA SUR LA GÉNOTOXICITÉ DU PRODUIT D'HYDROLYSE PRIMAIRE DU TIDTE

Modèle/paramètres	aberrations chromosomiques	aberrations chromosomiques – autres rongeurs	aberrations chromosomiques – rats	test du micronoyau sur des souris	test du micronoyau sur des rongeurs	drosophiles	translocations héritables des drosophiles	essai d'expression trans gènes récessifs létaux liés au sexe sur <i>Drosophila</i>	mutation des mammifères	mutation létale dominante des mammifères	synthèse de l'ADN non programmée (UDS)	synthèse de l'ADN non programmée avec des anticorps anti-ADN	synthèse de l'ADN non programmée avec des anticorps anti-ADN	mutation du lymphome chez des souris	S. cerevisiae	levure	hgprt	E. coli	E. coli W	Microbes/bactéries	salmonella
CT	S. O.	-	-	S. O.	-	S. O.	-	-	-	-	S. O.	-	-	S. O.	-	-	-	-	-	-	S. O.
TK	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	HD
DEREK	AR	AR	AR	-	-	-	-	-	AR	-	-	-	-	-	-	-	-	P	P	P	P

CT – Multicase Casetox

TK – Topkat

S. O. – Sans objet

HD – hors domaine (le modèle indique qu'un produit chimique donné est hors de son domaine d'applicabilité)

« - » – aucun modèle disponible dans la suite RQSA

AR – aucun résultat

P – Positif

PRÉVISIONS DES MODÈLES R(Q)SA SUR LA TOXICITÉ DU TIDTE POUR LE DÉVELOPPEMENT

Model Applier

Paramètre/espèces	Souris	Lapin	Rat	Rongeur
Retard	HD	HD	HD	HD
Diminution du poids	HD	HD	HD	HD
Mort du fœtus	HD	HD	HD	HD
Perte après l'implantation	HD	HD	HD	HD
Perte avant l'implantation	HD	HD	HD	HD
Structure	HD	HD	HD	HD
Viscères	HD	-	HD	HD

HD – hors domaine (le modèle indique qu'un produit chimique donné est hors de son domaine d'applicabilité)

« - » – aucun modèle disponible dans la suite RQSA

Multicase Casetox

Paramètre/espèces	Hamster	Mammifères	Divers
Tératogénicité	-	S. O.	S. O.
Développement	S. O.	-	-

« - » – aucun modèle disponible dans la suite RQSA

S. O. – Sans objet

PRÉVISIONS DES MODÈLES R(Q)SA SUR LA TOXICITÉ DU TIDTE POUR LA REPRODUCTION

Model Applier

Modèle/paramètre	Femelle			Mâle		
	Souris	Rat	Rongeur	Souris	Rat	Rongeur
Reproduction	HD	HD	HD	HD	HD	HD
Sperme	-	-	-	HD	HD	HD

HD – hors domaine (le modèle indique qu'un produit chimique donné est hors de son domaine d'applicabilité)

« - » – aucun modèle disponible dans la suite RQSA

Reproduction – Toxicité pour la reproduction

Multicase Casetox

Souris	Rat	Lapin	Homme
S. O.	S. O.	S. O.	S. O.

S. O. – Sans objet

PRÉVISIONS DES MODÈLES R(Q)SA SUR LA SENSIBILISATION POUR LE TIDTE

Modèle/paramètres	SVR – chien	SVR – cobaye	SVR – hamster	SVR – humain	SVR – mammifère	SVR – singe	SVR – souris	SVR – primate	SVR – lapin	SVR – rat	SVR – rongeur	SP – chien	SP – cobaye	SP – hamster	SP – humain	SP – mammifère	SP – singe	SP – souris	SP – primate	SP – lapin	SP – rat	SP – rongeur	
DEREK	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P

P – Positif

PRÉVISIONS DES MODÈLES R(Q)SA SUR LA SENSIBILISATION POUR LE PRODUIT D'HYDROLYSE PRIMAIRE DU TIDTE

Modèle/paramètres	SVR – chien	SVR – cobaye	SVR – hamster	SVR – humain	SVR – mammifère	SVR – singe	SVR – souris	SVR – primate	SVR – lapin	SVR – rat	SVR – rongeur	SP – chien	SP – cobaye	SP – hamster	SP – humain	SP – mammifère	SP – singe	SP – souris	SP – primate	SP – lapin	SP – rat	SP – rongeur
DEREK	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR	AR

AR – aucun résultat