



Government of Canada
Gouvernement du Canada

**Évaluation préalable pour le Défi concernant le
4,4'-[isopropylidènebis(4,1-phénylénoxy)]dianiline
(BAPP)**

**Numéro d'enregistrement du Chemical Abstracts
Service
13080-86-9**

**Environnement et Changement climatique Canada
Santé Canada**

octobre 2017

Canada

N° de cat. : En14-295/2017F-PDF

ISBN 978-0-660-23722-0

Le contenu de cette publication ou de ce produit peut être reproduit en tout ou en partie, et par quelque moyen que ce soit, sous réserve que la reproduction soit effectuée uniquement à des fins personnelles ou publiques mais non commerciales, sans frais ni autre permission, à moins d'avis contraire.

On demande seulement :

- de faire preuve de diligence raisonnable en assurant l'exactitude du matériel reproduit;
- d'indiquer le titre complet du matériel reproduit et l'organisation qui en est l'auteur;
- d'indiquer que la reproduction est une copie d'un document officiel publié par le gouvernement du Canada et que la reproduction n'a pas été faite en association avec le gouvernement du Canada ni avec l'appui de celui-ci.

La reproduction et la distribution à des fins commerciales est interdite, sauf avec la permission écrite de l'auteur. Pour de plus amples renseignements, veuillez communiquer avec l'informathèque d'Environnement et Changement climatique Canada au 1-800-668-6767 (au Canada seulement) ou 819-997-2800 ou par courriel à ec.enviroinfo.ec@canada.ca.

© Sa Majesté la Reine du chef du Canada, représentée par le ministre de l'Environnement et Changement climatique, 2016.

Also available in English

Sommaire

Conformément à l'article 74 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement* (1999) (LCPE), les ministres de l'Environnement et de la Santé ont effectué une évaluation préalable du 4,4'-[isopropylidènebis(4,1-phénylénoxy)]dianiline. Cette substance sera appelée BAPP dans la présente évaluation. Son numéro d'enregistrement du Chemical Abstracts Service (NE CAS¹) est 13080-86-9. Cette substance est considérée comme prioritaire aux fins de l'évaluation, car elle répond aux critères de la catégorisation énoncés au paragraphe 73(1) de la LCPE.

Le BAPP n'est pas présent de façon naturelle dans l'environnement. En 2006, 250 kg de BAPP ont été importés au Canada pour être utilisés principalement dans le domaine de l'aérospatial, comme additif dans les apprêts structuraux fixatifs par collage inhibant la corrosion. En 2010, la quantité de BAPP commercialisée au Canada était d'environ 500 kg.

Les profils d'utilisation déclarés et certaines hypothèses permettent de croire que la plus grande partie de la substance (66,5 %) est appliquée sur des pièces d'aéronef et que la substance est modifiée chimiquement après une vulcanisation ultérieure. Il est estimé que les quantités qui ne sont pas appliquées sur des pièces d'aéronef sont rejetées dans les égouts après un traitement à une installation pour déchets dangereux (4,5 %), dans l'air (1,5 %) et dans les sites d'enfouissement et d'incinération (27,5 %). Le BAPP a une solubilité faible dans l'eau et une volatilité négligeable. De plus, comme elle est hydrophobe, elle se retrouve généralement dans les particules. Pour ces raisons, cette substance pourrait se retrouver principalement dans les sédiments ou dans le sol, en fonction du milieu dans lequel elle est rejetée. Elle ne devrait pas être présente en quantité importante dans d'autres milieux. Elle ne devrait pas non plus être sujette au transport atmosphérique à grande distance.

D'après les résultats des prévisions sur les relations structure-activité, le BAPP ne devrait pas se dégrader rapidement dans l'environnement. Il est persistant dans l'eau, le sol et les sédiments. En outre, cette substance peut s'accumuler dans les organismes et présente un potentiel de bioamplification dans les chaînes trophiques. En

¹ Le numéro d'enregistrement du Chemical Abstracts Service (NE CAS) est la propriété de l'American Chemical Society. Toute utilisation ou redistribution, sauf si elle sert à répondre à des exigences réglementaires ou si elle est nécessaire à la rédaction de rapports destinés au gouvernement du Canada lorsque des renseignements ou des rapports sont exigés par la loi ou une politique administrative, est interdite sans l'autorisation écrite préalable de l'American Chemical Society.

outre, les valeurs modélisées de toxicité aiguë et chronique pour les organismes aquatiques indiquent que la substance est extrêmement dangereuse pour les organismes aquatiques. Il a également été déterminé qu'elle dispose d'un important potentiel de fixation aux récepteurs des œstrogènes.

Étant donné la faible quantité de BAPP importée au Canada, son profil d'utilisation et les pratiques de manutention et d'élimination qui sont actuellement en place, il est attendu que l'exposition écologique à cette substance au Canada découlant de l'activité commerciale est très faible. Compte tenu de tous les éléments de preuve disponibles qui ont été présentés dans cette évaluation préalable, le risque que cette substance cause un effet nocif pour les organismes et l'intégrité globale de l'environnement est faible. Il est conclu que le BAPP ne satisfait pas aux critères énoncés aux alinéas 64a) ou b) de la LCPE, car il 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 constituer un danger au Canada pour la vie ou la santé humaines.

Il n'existe que très peu de données empiriques concernant les effets du BAPP sur la santé humaine. Toutefois, les résultats des prévisions sur les relations quantitatives structure-activité indiquent que cette substance pourrait avoir des propriétés dangereuses. Il est prévu que l'exposition de l'ensemble de la population canadienne au BAPP sera négligeable par le biais de l'environnement et de la nourriture, et nulle lors de l'utilisation de produits de consommation. Puisque l'exposition de la population générale par le biais de l'environnement au Canada serait négligeable, les risques pour la santé humaine seraient faibles. Selon les renseignements présentés dans cette évaluation préalable, il est conclu que le BAPP ne répond pas aux critères énoncés à l'alinéa 6c) de la LCPE, car il ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité ou concentration ou dans des conditions de nature à constituer un danger au Canada pour la vie ou la santé humaines.

Il est conclu que le BAPP ne répond à aucun des critères énoncés à l'article 64 de la LCPE.

Table des matières

1. Introduction	1
2. Identité de la substance	4
2.1 Nom de la substance	4
3. Propriétés physiques et chimiques.....	5
4. Sources.....	8
5. Utilisations.....	8
6. Rejets dans l'environnement.....	10
7. Devenir dans l'environnement.....	12
7.1 Persistance dans l'environnement	14
7.2 Potentiel de bioaccumulation	16
8. Potentiel de causer des effets nocifs sur l'environnement	18
8.1 Évaluation des effets sur l'environnement.....	18
8.2 Caractérisation du risque pour l'environnement.....	21
8.3 Incertitudes de l'évaluation des risques pour l'environnement	21
9. Potentiel d'effets nocifs sur la santé humaine	22
9.1 Évaluation de l'exposition.....	22
9.1.1 Milieux naturels.....	22
9.1.2 Produits de consommation	22
9.2 Évaluation des effets sur la santé	22
9.3 Caractérisation du risque pour la santé humaine	24
9.4 Incertitudes de l'évaluation des risques pour la santé humaine	24
10. Conclusion.....	25
Références	26
Annexes	35

Liste des tableaux

Tableau 2-1. Identité de la substance- BAPP.....	4
Tableau 3-1. Propriétés physiques et chimiques de la forme neutre du BAPP	6
Tableau 6-1. Pertes estimées du BAPP pendant son cycle de vie.....	11
Tableau 7-1. Résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (EQC, 2003) (pourcentage de la substance répartie dans chaque milieu)	13
Tableau 7-2. Données modélisées sur la dégradation du BAPP.....	14
Tableau 7-3. Données modélisées sur la bioaccumulation du BAPP.....	16
Tableau 8-1. Données modélisées sur la toxicité pour les organismes aquatiques	18
Tableau A-1. Tableau sommaire des intrants des modèles PBT - modèles physico- chimiques	35
Tableau A-2. Tableau sommaire des intrants des modèles PBT – modélisation du devenir.....	35
Tableau A-3. Tableau sommaire des intrants pour les modèles PBT – profil et écotoxicité.....	37
Tableau D-1. Prévisions du modèle RQSA sur la cancérogénicité	41
Tableau D-2. Prévisions du modèle RQSA sur la génotoxicité	41

1. Introduction

La *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* (LCPE) (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.

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 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 qui ont été 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, 2006a) dans lequel ils priaient l'industrie et les autres parties intéressées 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.

Il a été déterminé que l'évaluation de cette substance, le 4,4'-[isopropylidènebis(4,1-phénylénoxy)]dianiline, était prioritaire, car elle répond aux critères de catégorisation énoncés au paragraphe 73(1) de la LCPE (ECCC, SC [modifiée en 2007]). Le volet du Défi portant sur cette substance a été publié dans la *Gazette du Canada* le 26 décembre 2009 (Canada, 2009a et 2009b). 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 sur les utilisations de la substance et l'exposition à cette dernière ont été reçus en réponse au Défi.

Les évaluations préalables mettent l'accent sur les renseignements jugés essentiels pour déterminer si une substance répond aux critères énoncés à l'article 64 de la LCPE. Les évaluations préalables visent à examiner les 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 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 pertinentes pour l'évaluation préalable de cette substance sont tirées de publications originales, de rapports de synthèse et d'évaluation et de rapports de recherche de parties intéressées et d'autres documents consultés au cours de recherches documentaires menées jusqu'en octobre 2010 (pour les parties de l'évaluation préalable portant sur l'environnement et la santé). En février 2017, une recherche documentaire rapide n'a pas permis de trouver d'autres renseignements significatifs qui auraient pu influencer sur l'issue de cette évaluation. Les études les plus importantes ont fait l'objet d'une évaluation critique et les résultats de la modélisation ont également servi à formuler des conclusions.

Lorsqu'ils étaient disponibles et pertinents, les renseignements présentés dans les évaluations des dangers provenant d'autres instances ont également été pris en compte.

La présente évaluation préalable a été préparée par le personnel du Programme des substances existantes de Santé Canada et d'Environnement et Changement climatique Canada et elle intègre les résultats d'autres programmes exécutés par ces ministères. La section de la présente évaluation qui porte sur les effets dans l'environnement a fait l'objet d'une étude consignée par des pairs ou d'une consultation de ces derniers. Les

² La détermination de la conformité à l'un ou plusieurs des critères énoncés à l'article 64 de la LCPE 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 inclut notamment les expositions par l'air ambiant et intérieur, l'eau potable, les produits alimentaires et des produits de consommation. Une conclusion établie en vertu de la LCPE n'est pas pertinente à une évaluation, qu'elle n'empêche pas non plus, par rapport aux critères de risque définis du Système d'information sur les matières dangereuses au travail (SIMDUT) qui sont précisés dans le *Règlement sur les produits contrôlés*, qui font partie du cadre réglementaire pour le SIMDUT concernant les produits destinés à être utilisés au travail. De la même manière, la conclusion qui repose sur les critères énoncés à l'article 64 de la LCPE (1999) n'empêche pas la prise de mesures en vertu d'autres articles de la LCPE ou d'autres lois.

méthodes utilisées dans les évaluations préalables du Défi ont été examinées par un Groupe consultatif du Défi indépendant. De plus, l'ébauche de l'évaluation préalable a fait l'objet d'une période de consultation publique. Aucun commentaire de l'extérieur n'a été reçu dans le cadre de l'ébauche de l'évaluation préalable. Le contenu final et les résultats de l'évaluation préalable demeurent la responsabilité de Santé Canada et d'Environnement et Changement climatique Canada.

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

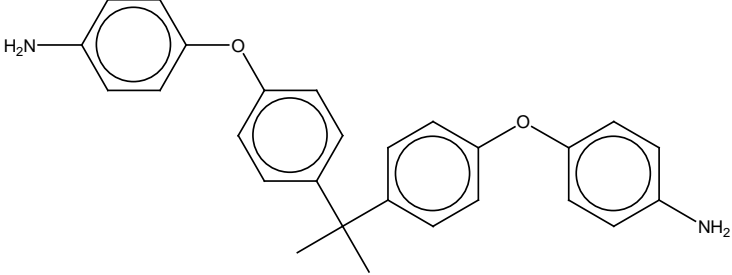
2. Identité de la substance

2.1 Nom de la substance

Aux fins du présent document, la substance est appelée BAPP, un nom commun utilisé dans la documentation scientifique.

Tableau 2-1. Identité de la substance - BAPP

Numéro d'enregistrement du Chemical Abstracts Service (NE CAS)	13080-86-9
Nom dans la LIS^a	4,4'-[Isopropylidènebis(4,1-phénylénoxy)]dianiline
Noms relevés dans les National Chemical Inventories (NCI)^b	<p><i>Benzenamine, 4,4'-[(1-méthylethylidène)bis(4,1-phenyleneoxy)]bis-</i> (TSCA, ASIA-PAC, NZIoC)</p> <p><i>4,4'-[Isopropylidènebis(4,1-phenyleneoxy)]dianiline</i> (REACH, EINECS)</p> <p><i>4,4'-[Isopropylidènebis(4,1-phenyleneoxy)]bis[aniline]</i> (ENCS)</p>
Autres noms	<p><i>2,2'-Bis[4-(4-aminophénoxy)phényl]propane</i></p> <p><i>2,2-Bis[4-(4-aminophénoxy)phényl]propane</i></p> <p><i>2,2-Bis[p-(4-aminophénoxy)phényl]propane</i></p> <p><i>4,4'-[1-Méthyléthylidène)bis(1,4-phénylène)dioxy]dianiline</i></p> <p><i>4,4'-[Isopropylidènebis(1,4-phénylène)dioxy]dianiline</i></p> <p><i>Aniline, 4,4'-[isopropylidènebis(p-phénylèneoxy)]di-</i></p> <p><i>BAPP</i></p> <p><i>Bisphénol A bis(4-aminophényl)éther</i></p> <p><i>Bis[4-(4-aminophénoxy)phényl]diméthyl méthane</i></p> <p><i>Cheminox CLP 5250</i></p> <p><i>CLP 5250</i></p> <p><i>4,4'-[Isopropylidènebis(4,1-phénylénoxy)]dianiline</i></p>

	<i>4,4'-[Propane-2,2-diylbis(4,1-phénylèneoxy)]bisaniiline</i>
Groupe chimique (groupe de la LIS)	Produits chimiques organiques définis
Principale classe chimique ou utilisation	Composés organiques carbopolycycliques à faible poids moléculaire
Principale sous-classe chimique	Bisphénol A, benzénamines, phénylèneoxy
Formule chimique	C ₂₇ H ₂₆ N ₂ O ₂
Structure chimique	
SMILES^c	<chem>O(c(ccc(c1)C(c(ccc(Oc(ccc(N)c2)c2)c3)c3)(C)C)c1)c(ccc(N)c4)c4</chem>
Masse moléculaire	410,52 g/mol

^a Liste intérieure des substances (LIS).

^b National Chemical Inventories (NCI). 2010 : ASIA-PAC (listes des substances de l'Asie-Pacifique); EINECS (inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes); ENCS (inventaire des substances chimiques existantes et nouvelles du Japon); NZIoC (inventaire des substances chimiques de la Nouvelle-Zélande) et TSCA (inventaire des substances chimiques visées par la *Toxic Substances Control Act*).

^c SMILES = Simplified Molecular Input Line Entry System.

3. Propriétés physiques et chimiques

Le tableau 3-1 présente les propriétés physiques et chimiques (données expérimentales et modélisées) du BAPP qui ont une incidence sur le devenir de cette substance dans l'environnement.

Des modèles fondés sur les relations quantitatives structure-activité (RQSA) ont été utilisés pour générer des données pour certaines propriétés physiques et chimiques du BAPP. L'annexe A présente un tableau sommaire des intrants des modèles. 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. Comme la plupart de ces modèles n'acceptent que la forme neutre d'un produit chimique comme données d'entrée (forme SMILES), les valeurs modélisées indiquées au tableau 3-1 portent sur la forme neutre du BAPP. Étant donné sa valeur de pK_a (voir le tableau 3-1), le BAPP devrait exister essentiellement sous forme neutre aux pH caractéristiques de l'environnement (entre 6 et 9).

Comme il existe peu de données empiriques sur le BAPP, une démarche fondée sur des analogues a été utilisée pour trouver des données expérimentales d'analogues chimiques appropriés qui pourraient servir à la modélisation et fournir des éléments de preuve à l'appui de la présente évaluation. Un analogue est un produit chimique dont la

structure est semblable à celle de la substance évaluée; il devrait donc avoir des propriétés physiques et chimiques, un comportement dans l'environnement et une toxicité similaire. La valeur modélisée de $\log K_{oe}$ du BAPP, qui est présentée au tableau 3-1, a été calculée par l'option d'ajustement de la valeur expérimentale du modèle KOWWIN. Cette démarche consiste à estimer la valeur de $\log K_{oe}$ du produit chimique recherché (en l'occurrence le BAPP), en comparant sa structure à celle d'un analogue chimique approprié dont la valeur empirique de $\log K_{oe}$ est connue - dans le cas présent, le bisphénol A (BPA). Un ajustement quantitatif de la valeur empirique de $\log K_{oe}$ de l'analogue est ensuite fait en fonction de l'influence des différences structurales entre les deux composés chimiques sur la valeur de $\log K_{oe}$. Le BAPP et le bisphénol A sont considérés comme des analogues appropriés, car tous deux contiennent un groupement fonctionnel bisphénol. Il convient toutefois de préciser que le BPA est considéré comme un analogue adéquat pour déterminer la valeur du $\log K_{oe}$ du BAPP, mais non pour en caractériser les risques pour l'environnement ou la santé humaine, car les deux substances n'ont pas des effets toxicologiques similaires.

Tableau 3-1. Propriétés physiques et chimiques de la forme neutre du BAPP

Propriété	Type	Valeur ^a	Température (°C)	Référence
État physique	s. o.	Poudre blanche	s.o.	Sigma-Aldrich, 2010
Point de fusion (°C) (forme neutre)	Expérimental	127 à 130	-	Sigma-Aldrich, 2010
Point de fusion (°C) (forme neutre)	Modélisé	246	-	MPBPWIN, 2008
Point d'ébullition (°C) (forme neutre)	Modélisé	571	-	MPBPWIN, 2008
Masse volumique (kg/m ³)	Expérimental	s.o.	-	
Pression de vapeur (Pa) (forme neutre)	Modélisé	2,18 x 10 ⁻¹⁰ (1,64 x 10 ⁻¹² mm Hg)	25	MPBPWIN, 2008

Propriété	Type	Valeur ^a	Température (°C)	Référence
Constante de la loi de Henry (Pa·m ³ /mol) (forme neutre)	Modélisé	5,12 x 10 ⁻⁹ (5,05 x 10 ⁻¹⁴ atm·m ³ /mol)	-	HENRYWIN, 2008
Log K _{oe} (coefficient de partage octanol-eau) (sans dimension) (forme neutre)	Modélisé	6,6 ^{b*}	-	KOWWIN, 2008
Log K _{co} (coefficient de partage carbone organique-eau) (sans dimension) (forme neutre)	Modélisé	4,6 ^c	-	KOCWIN, 2008
Solubilité dans l'eau (mg/L) (forme neutre)	Modélisé	6,6 x 10 ^{-3c}	25	WSKOWWIN, 2008
Solubilité dans l'eau (mg/L) (forme neutre)	Modélisé	2,2 x 10 ⁻³	25	WATERNT, 2008
pK _a (constante de dissociation acide) (sans dimension)	Modélisé	pK _a 1 = 5,16 pK _a 2 = 4,54	-	ACD/pKaDB, 2005
Diamètre maximum (nm)	Modélisé	1,4–2,2 (moyenne : 1,8)	-	CPOP, 2008

Abréviations : s.o., sans objet; K_{co}, coefficient de partage carbone organique-eau; K_{oe}, coefficient de partage octanol-eau. « - », aucune donnée.

^a Les valeurs entre parenthèses représentent les valeurs originales déclarées par les auteurs ou estimées à l'aide de modèles.

^b Cette valeur a été modélisée à l'aide de la méthode d'ajustement de la valeur expérimentale du modèle KOWWIN (2008) : la valeur de log K_{oe} de la substance a été estimée à partir de la valeur expérimentale de log K_{oe} (3,32) de l'analogue bisphénol A (n° CAS 80-05-7) (Howard, 1989; Hansch *et al.*, 1995).

^c Ce résultat a été obtenu à partir d'une valeur de log K_{oe} de 6,6.

*Valeur choisie pour la modélisation.

4. Sources

Le BAPP est une substance qui ne se trouve pas naturellement dans l'environnement.

Des données ont été recueillies dans le cadre d'enquêtes menées auprès de l'industrie pour les années 2005 et 2006, aux termes d'avis publiés dans la *Gazette du Canada* en application de l'article 71 de la LCPE (1999) (Canada, 2006c et 2009b). Comme le précisait ces avis, les enquêtes visaient à recueillir des données sur les quantités des substances fabriquées et importées au Canada. L'avis publié pour l'année 2006 demandait également la présentation de données sur les quantités de BAPP utilisées.

Aucune quantité de BAPP, fabriquée au Canada en des quantités supérieures au seuil de déclaration (100 kg/an), n'a été signalée pour l'année civile 2006. Une entreprise a déclaré avoir importé 250 kg de BAPP en 2006, cette substance étant présente dans un apprêt adhésif structurel de qualité industrielle, en une concentration variant de 3 à 6 % (Environnement Canada, 2010a). Des données plus récentes indiquent que la quantité de BAPP utilisée dans le commerce au Canada a augmenté, comme cela est indiqué par une quantité d'utilisation de 500 kg par la même entreprise en 2010 (communication personnelle en 2011 d'un « utilisateur industriel » à Environnement Canada; source non citée).

Durant les années civiles 1984 à 1986, moins de quatre déclarants avaient déclaré des quantités fabriquées, importées ou commercialisées au Canada totalisant de 5 000 à 25 000 kg.

Aux États-Unis, le BAPP figure dans l'inventaire de la *Toxic Substances Control Act* (TSCA). Le volume de la production globale à l'échelle nationale y est inférieur à 500 000 lb (~230 000 kg) (US EPA, 2006).

5. Utilisations

Des données sur les utilisations du BAPP durant l'année civile 2006 ont été recueillies en réponse à l'avis publié en application de l'article 71 de la LCPE (Canada, 2009b). En 2006, une entreprise a déclaré avoir utilisé le BAPP comme additif dans un apprêt adhésif structurel pour des pièces d'aéronef (Environnement Canada, 2010a). Le BAPP est un additif qui entre dans la composition d'une peinture anticorrosion combinée à une colle époxyde, qui est utilisée dans l'industrie aéronautique (Cytec, 2001; Environnement Canada, 2010a). Après son application, la couche d'apprêt est séchée pendant une heure à 120 °C afin d'obtenir une surface résistante aux égratignures qui pourra résister à plus de 20 essayages avec un chiffon imprégné de méthyléthylcétone (résistance à la méthyléthylcétone) (Cytec, 2001). On présume que la presque totalité

du BAPP qui se retrouve sur les pièces d'aéronef subit une transformation chimique après le séchage.

Durant les années civiles 1984 à 1986, le code d'utilisation de la Liste intérieure des substances « intermédiaire chimique - inorganique, organométallique » a été attribué au BAPP.

Un examen des données scientifiques et techniques disponibles indique que le BAPP a été utilisé comme intermédiaire organique dans la synthèse chimique de nouveaux matériaux de type polyester, le BAPP agissant d'agent de solidification (Suzhou Yinsheng Chemical Co. Ltd., 2003). Le BAPP est également utilisé en faibles concentrations (< 6 %) comme réactif dans la fabrication de polyimides aromatiques, de polyamides ou de résines de benzoxazine (Chuang *et al.*, 2001; Ghosh et Mittal, 1996; Kong *et al.*, 2006; Lin *et al.*, 2008). Ces résines thermodurcissables sont des polymères qui présentent une grande stabilité thermo-oxydative, ainsi que de remarquables propriétés mécaniques et électriques (Gosh et Mittal, 1996; Lin *et al.*, 2008). Le BAPP confère une plus grande souplesse à la résine et en améliore la solubilité dans les solvants organiques ainsi que la maniabilité durant le moulage (Seika Group, 2010). Des polyimides thermoplastiques contenant du BAPP sont largement utilisés dans l'industrie de l'électronique en raison de leurs excellentes propriétés filmogènes et de leur résistance aux solvants d'usage courant (Chuang *et al.*, 2001).

Le BAPP est également employé comme colorant et pigment organiques intermédiaires (Xia et Miley, 2002) et comme réactif dans les recherches sur les polymères haute performance (TCI America, 2010). Cette substance n'est pas utilisée comme colorant ou pigment intermédiaire dans l'industrie canadienne du textile, mais les données actuelles sont insuffisantes pour déterminer si elle est présente dans des produits importés (communication personnelle de la Division des produits d'Environnement et Changement climatique Canada au Bureau d'évaluation des risques des substances existantes de Santé Canada, 2010; source non citée).

Le BAPP n'est pas un ingrédient utilisé dans des produits cosmétiques au Canada (SDC, 2010) et il ne figure pas non plus sur la Liste critique des ingrédients dont l'utilisation est restreinte ou interdite dans les cosmétiques au Canada, une liste administrative établie par Santé Canada (Santé Canada, 2010). À l'heure actuelle, le BAPP n'est pas homologué au Canada comme produit de formulation des produits antiparasitaires (ARLA, 2007) ni ne figure dans les listes des additifs alimentaires autorisés comme additif alimentaire autorisé par la *Loi sur les aliments et drogues* (Canada, 1978) et les autorisations de mise en marché connexes (Santé Canada, 2013). Le BAPP n'est pas utilisé dans les emballages alimentaires ni comme additif indirect (communication personnelle de la Direction des aliments au Bureau de gestion du risque de Santé Canada, 2010; source non citée).

Enfin, le BAPP n'est pas inscrit dans la Base de données sur les produits pharmaceutiques (BDPP), la base de données interne des ingrédients non médicinaux de la Direction des produits thérapeutiques, la Base de données sur les ingrédients des

produits de santé naturels (BDIPSN) ou la Base de données des produits de santé naturels homologués (BDPSNH), à titre d'ingrédient médicinal ou non médicinal présent dans les produits pharmaceutiques, les produits de santé naturels ou les médicaments vétérinaires finis (BDPP, 2010; BDIPSN, 2010; BDPSNH, 2010; communication personnelle de la Direction des produits thérapeutiques, de la Direction des produits de santé naturels et de la Direction des médicaments vétérinaires de Santé Canada au Bureau de gestion du risque de Santé Canada, 2010, source non citée).

6. Rejets dans l'environnement

Une technique a été conçue par Environnement et Changement climatique Canada pour estimer les rejets d'une substance dans l'environnement à différentes étapes de son cycle de vie, dont son devenir comme constituant d'un produit fini ou d'un article (Environnement Canada, 2008). Cette méthode, appelée le débit massique, consiste en une analyse du cycle de vie et en un tableur (outil de débit massique) qui intègrent les données sur la fabrication, l'importation et l'utilisation disponibles pour la substance. En commençant par une masse définie de la substance, on évalue chaque étape du cycle de vie jusqu'à ce que toute la masse ait été prise en compte. Les facteurs pertinents sont étudiés, les incertitudes sont reconnues et des hypothèses peuvent être émises pendant chaque étape, selon les renseignements disponibles. Les pertes estimées représentent le bilan massique exhaustif de la substance au cours de son cycle de vie et elles comprennent les rejets dans les eaux usées et d'autres milieux récepteurs (sol, air), la transformation chimique, le transfert vers les activités de recyclage et le transfert vers les sites d'élimination des déchets (sites d'enfouissement, incinération). Toutefois, 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, la méthode ne permet pas de quantifier les rejets dans l'environnement à partir de ces sources.

En général, les rejets d'une substance dans l'environnement peuvent découler de différentes pertes de la substance pendant sa fabrication, son utilisation industrielle ainsi que son utilisation commerciale et par les consommateurs. Ces pertes peuvent être regroupées en sept types : (1) rejets dans les eaux usées; (2) émissions atmosphériques; (3) émissions dans les terres; (4) transformation chimique; (5) élimination sur les sites d'enfouissement; (6) élimination par incinération et (7) élimination par recyclage (le recyclage est jugé comme une perte et n'est pas pris davantage en considération). Elles sont estimées à partir de données issues d'enquêtes réglementaires et des industries, ainsi qu'en fonction des données publiées par divers organismes. Dans ce cas, les rejets dans les eaux usées désignent les rejets envoyés

vers un système de traitement des eaux usées³ après avoir subi un traitement primaire et un traitement secondaire à une installation spécialisée dans le traitement des déchets dangereux. Les pertes par transformation chimique se rapportent aux modifications de l'identité d'une substance qui peuvent avoir lieu au cours des étapes de fabrication, d'utilisation industrielle et d'utilisation commerciale ou par les consommateurs, mais elles excluent celles qui ont lieu pendant les opérations de gestion des déchets telles que l'incinération et le traitement des eaux usées. Les émissions dans les terres incluent le transfert accidentel ou les rejets dans le sol ou les surfaces pavées ou non pavées pendant l'utilisation de la substance et sa durée de vie utile (p. ex. durant l'utilisation de machinerie agricole ou d'automobiles). Elle n'inclut toutefois pas les autres transferts vers l'utilisation de la substance et sa durée de vie utile (p. ex. application au sol des biosolides et dépôts atmosphériques).

Le tableau 6-1 présente les pertes estimées de BAPP durant son cycle de vie (d'après des hypothèses prudentes) (Environnement Canada, 2010b). Étant donné que le BAPP n'est pas fabriqué au Canada au-delà des seuils de déclaration, les pertes estimées sont fondées sur l'application industrielle du BAP déclarée par l'entreprise ayant importé cette substance en 2006.

Tableau 6-1. Pertes estimées du BAPP pendant son cycle de vie

Type de perte	Proportion (%)	Étapes pertinentes du cycle de vie
Eaux usées	4,5	Utilisation à des fins industrielles
Émissions atmosphériques	1,5	Utilisation à des fins industrielles
Sol	0	-
Transformation chimique	66,5	Utilisation à des fins industrielles
Site d'enfouissement	9,4	Utilisation à des fins industrielles
Incinération	18,1	Utilisation à des fins industrielles
Recyclage	0	-

« - » : sans objet ou valeur non calculée

³ Dans la présente évaluation, le terme « système de traitement des eaux usées » désigne un système qui collecte les eaux d'égout d'origine résidentielle, commerciale ou institutionnelle et, éventuellement, les eaux industrielles (après leur rejet dans les égouts), habituellement en vue de leur traitement et de leur rejet possible dans l'environnement. Sauf indication contraire, cette expression ne permet pas de distinguer les types de propriétaires et d'exploitants (municipal, provincial, fédéral, autochtone, privé ou partenariat). Les systèmes situés dans des centres industriels et précisément conçus pour traiter les effluents industriels seront identifiés par les termes « systèmes locaux de traitement des eaux usées » et « systèmes industriels de traitement des eaux usées ».

Les rejets de BAPP sont estimés à 1,5 % dans l'air, à 4,5 % dans les eaux usées et à 27,5 % dans les sites d'enfouissement et d'incinération durant son utilisation à des fins industrielles.

Après l'expédition de l'apprêt adhésif à une installation industrielle, l'apprêt contenant du BAPP est vaporisé sur des pièces d'aéronef dans une cabine de pistelage à aspiration par le sol. Pendant la vaporisation, les gouttelettes de perte de peinture sont retirées de l'air à l'aide d'un système de filtres secs. Les filtres sont éliminés dans un site d'enfouissement après leur utilisation. L'apprêt contenant du BAPP n'est pas capté par le système de filtration et il s'écoule sur le sol qui est nettoyé à l'aide d'un appareil à nettoyer les planchers. L'effluent liquide est ensuite recueilli dans un réservoir pour les eaux usées où la fraction solide (boue) se déposera au fond du réservoir. Les eaux usées et la boue sont généralement acheminées à une installation spécialisée dans le traitement des déchets dangereux. Une fois le traitement terminé, les eaux usées sont acheminées par les égouts à une installation régionale de traitement des eaux usées. La boue est quant à elle acheminée à une installation spécialisée pour incinération.

Les estimations sont fondées sur les hypothèses suivantes pour une utilisation industrielle : perte de 3 % de résidus des conteneurs d'expédition; perte de 2 % durant le nettoyage de l'équipement de traitement; efficacité de pulvérisation de 70 %; efficacité des filtres à air sec de 75 % et taux d'élimination de 79,6 % par le traitement secondaire des eaux usées modélisé à l'aide de ASTreat (2006). On estime que la majeure partie du BAPP appliqué sur les pièces d'aéronef (66,5 %) subit une transformation chimique après le séchage des revêtements appliqués. Parmi la fraction soumise à un processus de gestion des déchets (27,5 %), la majeure partie sera perdue par incinération (66 %) et une proportion moindre le sera pendant l'enfouissement (34 %).

Les pertes estimées précédemment indiquent que le BAPP pourrait être rejeté dans l'environnement, mais étant donné les profils d'utilisation actuels, les quantités de rejet estimées seraient faibles.

7. Devenir dans l'environnement

D'après les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (tableau 7-1) réalisée à l'aide des propriétés physiques et chimiques du BAPP (tableau 3-1), cette substance devrait demeurer principalement dans le sol ou les sédiments, selon le milieu dans lequel elle est rejetée (voir le tableau sommaire des intrants des modèles à l'annexe A).

Tableau 7-1. Résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (EQC, 2003) (pourcentage de la substance répartie dans chaque milieu)

Substance rejetée dans :	Air	Eau	Sol	Sédiments
air (100 %)	0,4	0,4	82,4	16,8
eau (100 %)	0	2,3	0	97,7
sol (100 %)	0	0	99,9	0,1

Ces résultats représentent la répartition de la substance dans un environnement d'évaluation hypothétique découlant d'une répartition entre différents milieux et des pertes par les processus de transport d'advection (hors de la région modélisée) et de dégradation ou de transformation. Les valeurs de répartition présentées au tableau 7-1 représentent les effets nets de ces processus dans des conditions de rejets continus lorsqu'un « état stationnaire » hors de l'équilibre est atteint.

Dans l'eau, le BAPP devrait être fortement adsorbé aux particules en suspension et aux sédiments, étant donné la valeur élevée de $\log K_{co}$ ($\sim 4,6$). La volatilisation à la surface de l'eau ne devrait pas être un processus de devenir important, si l'on se fie à la valeur de la constante de la loi de Henry de cette substance ($5,12 \times 10^{-16} \text{ Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$). Par conséquent, si l'eau est le milieu récepteur, peu de BAPP restera dans l'eau et la majeure partie ($\sim 97,7 \%$) devrait se retrouver dans les sédiments (voir le tableau 7-1).

Dans l'air, une faible quantité de BAPP devrait demeurer dans ce milieu (voir le tableau 7-1). Avec la valeur modélisée négligeable de sa pression de vapeur ($2,18 \times 10^{-10} \text{ Pa}$) et la valeur modélisée de sa constante de la loi de Henry ($5,12 \times 10^{-9} \text{ Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$), le BAPP n'est pas volatil. Par conséquent, s'il est rejeté uniquement dans l'air, le BAPP aura tendance à se déposer sur le sol ($\sim 82,4 \%$) et, dans une moindre mesure, dans les sédiments ($16,8 \%$) (voir le tableau 7-1).

Étant donné sa valeur estimée de $\log K_{co}$, le BAPP devrait être immobile dans le sol s'il y est rejeté. La volatilisation à partir de la surface de sols humides et secs semble être un processus peu important dans le devenir de cette substance, en raison de sa faible pression de vapeur. Les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III laissent également croire que le BAPP se répartira dans le sol (voir le tableau 7-1).

La constante de dissociation acide (pK_a) relativement élevée (5,2) pour le groupe fonctionnel acide indique que la moitié du produit chimique sera dissociée à un pH de 5,2. Dans les plans d'eau dont le pH se situe dans la plage des valeurs caractéristiques de l'environnement (entre 6 et 9), la quasi-totalité du BAPP sera non dissociée, ce qui signifie que le biote sera exposé au BAPP sous sa forme neutre. La proportion relativement faible de la substance chimique dissociée indique également que le comportement de répartition prévu à partir des valeurs de $\log K_{oe}$ et de $\log K_{co}$ est adéquat.

En conclusion, bien que l'on puisse s'attendre à ce qu'il y ait rejet de BAPP dans le milieu aquatique et l'air, les résultats de la modélisation de la fugacité montrent que le

BAPP rejeté dans l'air finira par être déposé au sol s'il n'est pas oxydé, alors que le BAPP dans l'eau finira dans les sédiments.

7.1 Persistance dans l'environnement

Aucune donnée expérimentale sur la dégradation du BAPP n'a été trouvée pour quelque milieu. Étant donné l'importance écologique du milieu aquatique, le fait que le BAPP devrait être rejeté dans les eaux usées, la persistance dans l'eau a surtout été examinée à l'aide de modèles prévisionnels RQSA sur la biodégradation. Le BAPP ne contient pas de groupements fonctionnels pouvant subir une hydrolyse. Le tableau 7-2 résume les résultats des modèles RQSA disponibles sur la dégradation dans divers milieux naturels (voir le tableau sommaire des intrants des modèles à l'annexe A).

Tableau 7-2. Données modélisées sur la dégradation du BAPP

Processus du devenir	Type	Modèle et base du modèle	Résultat et prévision du modèle	Demi-vie extrapolée (jours)
Oxydation atmosphérique	Abiotique	AOPWIN, 2008 ^a	$t_{1/2} \sim 0,053$ jour	< 2
Réaction à l'ozone	Abiotique	AOPWIN, 2008 ^a	s.o. ^b a	-
Hydrolyse	Abiotique	HYDROWIN, 2008 ^a	s.o. ^b a	-
Biodégradation (aérobie)	Primaire	BIOWIN, 2008 ^a Sous-modèle 4 : enquête d'expert (résultats qualitatifs)	3,04 ^c « peut se biodégrader rapidement »	≤ 182
Biodégradation (aérobie)	Ultime	BIOWIN, 2008 ^a Sous-modèle 3 : enquête d'expert (résultats qualitatifs)	1,69 ^c « se biodégrade lentement »	≥ 182
Biodégradation (aérobie)	Ultime	BIOWIN, 2008 ^a Sous-modèle 5 : Probabilité linéaire MITI	-0,23 ^d « se biodégrade très lentement »	≥ 182
Biodégradation (aérobie)	Ultime	BIOWIN, 2008 ^a Sous-modèle 6 : Probabilité non linéaire MITI	0,0 ^d « se biodégrade très lentement »	≥ 182
Biodégradation (aérobie)	Ultime	TOPKAT, 2004 Probabilité	0,02 ^d « se biodégrade très lentement »	≥ 182
Biodégradation (aérobie)	Ultime	CATABOL, 2004-2008 : % DBO (demande biologique en oxygène)	% BOD =5,1 « se biodégrade très lentement »	≥ 182

^a EPI Suite (2008).

^b Le modèle ne précise pas d'estimation pour ce type de structure.

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

^d Le résultat s'exprime par un taux de probabilité.

Comme tous les fragments moléculaires du BAPP sont inclus dans l'« ensemble d'apprentissage » du modèle TOPKAT, les résultats obtenus par ce modèle sont considérés comme fiables, même s'ils se situent en dehors de l'intervalle de prévision optimal. Il convient de noter que 6,45 % des fragments moléculaires du BAPP ne sont pas inclus dans le modèle CATABOL.

Dans l'air, la valeur prévue de 0,053 jour pour la demi-vie liée à l'oxydation atmosphérique (voir le tableau 7-2) indique que cette substance devrait s'oxyder rapidement. La substance ne devrait pas réagir avec d'autres espèces photo-oxydantes comme l'ozone dans l'atmosphère et elle ne devrait pas se dégrader par photolyse directe. En conséquence, les réactions avec des radicaux hydroxyles devraient constituer le plus important processus du devenir du BAPP dans l'atmosphère. Avec une demi-vie de 0,053 jour sous l'effet des réactions avec ces radicaux, le BAPP est considéré comme non persistant dans l'air.

Les résultats de la biodégradation présentés au tableau 7-2 indiquent que les cinq modèles de biodégradation ultime (BIOWIN 3, 5, 6, TOPKAT et CATABOL) portent à croire que la biodégradation est très lente et que la demi-vie dans l'eau est supérieure à 182 jours. Les résultats du modèle de biodégradation primaire (sous-modèle BIOWIN 4) indiquent un potentiel de dégradation primaire assez rapide; cependant, comme l'identité des produits de dégradation est inconnue, on accorde moins de poids à ce résultat. Le résultat du modèle de dégradation ultime (BIOWIN 3) de 1,69 pourrait correspondre à une demi-vie de 180 à 240 jours, en présumant d'une cinétique du premier ordre (Aronson *et al.*, 2006). De même, les résultats de probabilité obtenus avec les sous-modèles BIOWIN 5 et 6 sont bien en deçà du seuil suggéré pour la persistance (inférieurs à 0,3), ce qui laisse clairement supposer que la substance est persistante dans ce milieu. La conclusion globale déduite de BIOWIN (2000) est que le BAPP n'est pas facilement biodégradable. D'autres modèles de biodégradation ultime (TOPKAT et CATABOL) prévoient que le BAPP ne subit pas de minéralisation dans un délai de 28 jours, dans une probabilité ou un degré de biodégradation se situant dans la plage des valeurs des produits chimiques très persistants. TOPKAT, qui simule l'essai de biodégradation de 28 jours du MITI au Japon, prévoit une probabilité de 0,02, ce qui est bien inférieur au seuil de coupure suggéré pour les substances persistantes dans ce modèle (inférieur à 0,3) (il convient de noter que 0,7 est la valeur suggérée pour les produits chimiques non persistants) (TOPKAT, 2004). Enfin, le modèle CATABOL prévoit un taux de biodégradation de seulement 5,1 % d'après l'essai de biodégradabilité facile 301 de l'OCDE (% DBO), ce qui laisse croire que la substance a probablement une demi-vie dans l'eau supérieure à 182 jours (Aronson et Howard, 1999).

En utilisant un ratio d'extrapolation de 1 : 1 : 4 pour la demi-vie associée à la biodégradation dans l'eau, le sol et les sédiments (Boethling *et al.*, 1995), on obtient également une demi-vie supérieure à 182 jours dans le sol et supérieure à 365 jours dans les sédiments. Le BAPP devrait donc être persistant dans le sol et les sédiments.

7.2 Potentiel de bioaccumulation

Faute de données expérimentales sur les facteurs de bioaccumulation (FBA) ou de bioconcentration (FBC) du BAPP dans quelque milieu naturel, une méthode prévisionnelle a été appliquée au moyen des modèles de FBA et de FBC disponibles en milieu aquatique, comme l'indique le tableau 7-3 qui suit (voir le tableau sommaire des intrants des modèles à l'annexe A). Les prévisions pour les organismes aquatiques seront utilisées comme données de substitution pour les organismes vivant dans les sédiments et le sol. Dans la mesure du possible, la valeur du $\log K_{oe}$ de 6,6 obtenue par la méthode d'ajustement de la valeur expérimentale a été utilisée comme donnée d'entrée dans tous les modèles, afin d'obtenir des prévisions plus précises. La mesure du FBA est la mesure préconisée pour évaluer le potentiel de bioaccumulation d'une substance, car le FBC peut ne pas prendre adéquatement en compte le potentiel de bioaccumulation par l'alimentation, lequel est un facteur majeur pour les substances dont les valeurs de $\log K_{oe}$ sont supérieures à $\sim 4,0$ (Arnot et Gobas, 2003). La modélisation cinétique du bilan massique est en principe considérée comme la méthode de prévision la plus fiable du potentiel de bioaccumulation, car elle suit le bilan massique d'une substance dans un organisme et permet de corriger les paramètres d'absorption et d'élimination dans la mesure où le $\log K_{oe}$ de la substance se situe dans le domaine du modèle.

Des estimations du FBC et du FBA, corrigées pour tenir compte du potentiel de biotransformation, ont été produites à l'aide du modèle BCFBAF (EPI Suite, 2000-2008). Les constantes cinétiques de métabolisme ont été calculées à partir des relations structure-activité décrites plus en détail dans Arnot *et al.* (2008a, 2008b 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; Nichols *et al.*, 2007), le modèle BCFBAF permet de normaliser la constante k_M pour un poisson de 10 g à 15 °C en fonction du poids corporel selon le poids corporel du poisson de niveau trophique intermédiaire dans le modèle Arnot-Gobas (184 g) (Arnot *et al.*, 2008b). Des poissons de niveau trophique intermédiaire ont été utilisés pour représenter les sorties globales du modèle, comme l'a laissé entendre le concepteur du modèle, et ce modèle est plus représentatif des poissons susceptibles d'être consommés par des piscivores aviaires ou terrestres. Après normalisation, la valeur médiane de k_M pour un poisson de 184 g est de 0,012 (1/jour).

Tableau 7-3. Données modélisées sur la bioaccumulation du BAPP

Organisme d'essai	Modèle et base du modèle	Paramètre	Valeur (poids humide en L/kg)	Référence
Poissons	BCFBAF Sous-modèle 1 : régression linéaire	FBC	9 892	BCFBAF, 2008

Organisme d'essai	Modèle et base du modèle	Paramètre	Valeur (poids humide en L/kg)	Référence
Poissons	BCFBAF Sous-modèle 2 : bilan massique	FBC	6 913	BCFBAF, 2008
Poissons	BCFBAF Sous-modèle 3 : Bilan massique d'Amot-Gobas	FBA	296 100	BCFBAF, 2008
Poissons	OASIS Forecast, 2005 (en tenant compte des facteurs d'atténuation)	FBC	1 091	Dimitrov <i>et al.</i> , 2005
Poissons	Modèle du FBC de base (FBC max.)	FBC	31 623	Dimitrov <i>et al.</i> , 2005

Les valeurs du FBC et du FBA du BAPP, corrigées par le modèle BCFBAF pour tenir compte du métabolisme, s'établissent respectivement à 6 913 L/kg et 296 100 L/kg. De structure peu complexe, le BAPP se situe dans le domaine structural du modèle et, comme il s'agit d'une substance chimique neutre dont le log K_{oe} est 6,6, on s'attend à ce qu'il soit absorbé par diffusion passive. On considère donc que cette substance se situe dans le domaine des propriétés mécanistes, physiques ou chimiques (domaine global des paramètres) des modèles. Selon le modèle OASIS, la valeur du FBC corrigée en fonction du métabolisme est de 1 091 L/kg (Dimitrov *et al.*, 2005). Cependant, comme seulement 52 % environ des fragments moléculaires de la substance sont couverts par ce modèle, cette valeur se situe en dehors du domaine global du modèle et elle n'est pas considérée comme étant aussi fiable que les prévisions établies par le modèle BCFBAF.

De récentes études liées aux données sur le FBC chez les poissons et aux paramètres de la taille moléculaire (Dimitrov *et al.*, 2002, Dimitrov *et al.*, 2005; BBM, 2008) laissent entendre que la probabilité qu'une molécule traverse la membrane cellulaire sous l'effet de la diffusion passive diminue de façon importante à mesure qu'augmente son diamètre maximal (D_{max}). La probabilité de diffusion passive diminue ainsi de façon notable lorsque le diamètre maximal est supérieur à environ 1,5 nm et elle diminue encore plus lorsque la molécule a un diamètre maximal supérieur à 1,7 nm. Sakuratani *et al.* (2008) ont également étudié l'effet du diamètre transversal sur la diffusion passive dans une série de tests portant sur quelque 1 200 substances chimiques nouvelles et existantes. Ils ont constaté que les substances dont le potentiel de bioconcentration n'est pas très élevé (FBC inférieur à 5 000) ont souvent un D_{max} supérieur à 2,0 nm et un diamètre transversal 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. Selon Arnot *et al.* (2010), la taille moléculaire influence la solubilité et le coefficient de diffusion dans l'eau et 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 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 d'autres éléments de preuve pertinents dans la cadre d'une méthode du poids de la preuve.

Le BAPP a une masse moléculaire de 410,52 g/mol et un D_{\max} de 2,2 nm, ce qui laisse croire que son taux d'absorption dans l'eau pourrait être légèrement réduit et que sa biodisponibilité *in vivo* pourrait être inférieure aux prévisions établies par modèle. Cependant, même si le D_{\max} du BAPP peut être supérieur à 2,0 nm ($D_{\max\text{-moyen}} = 1,8$ nm), sa masse moléculaire est inférieure à 450 g/mol, ce qui indique que le BAPP a un FBC supérieur à 5 000).

Les données disponibles indiquent que le BAPP devrait avoir un potentiel de bioaccumulation élevé compte tenu de ses propriétés physiques et chimiques (c.-à-d. log K_{oe} élevé, masse moléculaire moyenne et faible solubilité dans l'eau). Toutes les valeurs du FBC et du FBA corrigées en fonction du métabolisme indiquent que le FBC du BAPP est supérieur à 5 000, à l'exception de la valeur obtenue avec le modèle OASIS.

8. Potentiel de causer des effets nocifs sur l'environnement

8.1 Évaluation des effets sur l'environnement

Faute de données expérimentales sur la toxicité du BAPP pour les organismes aquatiques, des données modélisées ont été utilisées pour estimer la toxicité potentielle de cette substance en milieu aquatique. Le tableau 8-1 présente les prévisions de l'écotoxicité jugées fiables, qui ont été utilisées avec la méthode du poids de la preuve basée sur les RQSA pour évaluer la toxicité pour les organismes aquatiques (Environnement Canada, 2007b). Voir le tableau sommaire des intrants des modèles à l'annexe A.

Comme on s'attend à ce que le BAPP soit sous forme non dissociée aux pH normalement observés dans l'environnement (entre 6 et 9), les prévisions sur la toxicité pour les organismes aquatiques ont été établies en fonction de la forme neutre du BAPP. Dans la mesure du possible, la valeur de log K_{oe} (6,6) obtenue par la méthode d'ajustement de la valeur expérimentale a été utilisée comme facteur de correction dans les modèles, pour accroître la fiabilité des prévisions. Les concentrations prévues associées à la toxicité pour les organismes aquatiques peuvent comporter une source

additionnelle d'incertitude lorsqu'elles dépassent la solubilité du produit chimique dans l'eau. Étant donné que les concentrations modélisées pour la solubilité dans l'eau sont souvent incertaines, les valeurs de la toxicité qui ont dépassé les estimations de la solubilité jusqu'à un facteur de 10 ont été jugées acceptables.

Tableau 8-1. Données modélisées sur la toxicité pour les organismes aquatiques

Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
Poissons	Toxicité aiguë (96 h)	CL ₅₀ ^a	0,041 [^]	ECOSAR, 2008 (substance organique neutre RSA)
Poissons	Toxicité aiguë (96 h)	CL ₅₀ ^a	0,021	TOPKAT, 2004
Poissons	Toxicité aiguë (96 h)	CL ₅₀ ^a	9,22*	AIEPS, 2003-2007
Poissons	Toxicité chronique	VCh ^b	0,003	ECOSAR, 2008 (substance organique neutre RSA)
Daphnies	Toxicité aiguë (48 h)	CL ₅₀ ^a	0,041 [^]	ECOSAR, 2008 (substance organique neutre RSA)
Daphnies	Toxicité aiguë (48 h)	CL ₅₀ ^a	0,244*	TOPKAT, 2004
Daphnies	Toxicité aiguë (48 h)	CL ₅₀ ^a	2,44*	AIEPS, 2003-2007
Daphnies	Toxicité chronique	VCh ^b	0,008	ECOSAR, 2008 (substance organique neutre RSA)
Algues	Toxicité aiguë (96 h)	CE ₅₀ ^c	0,12*	ECOSAR, 2008 (substance organique neutre RSA)
Algues	Toxicité aiguë (96 h)	CE ₅₀ ^c	1,82*	AIEPS, 2003-2007
Algues	Toxicité chronique	VCh ^b	0,097*	ECOSAR, 2008 (substance organique neutre RSA)

^a CL₅₀ - Concentration d'une substance qu'on estime létale pour 50 % des organismes d'essai.

^b VCh - Valeur de toxicité chronique - concentration d'une substance qui causera des effets chroniques.

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

* Aucun effet n'est prévu chez ces organismes à saturation, car la valeur de toxicité dépasse la solubilité dans l'eau (0,0066 mg/L) par un facteur de plus de 10.

[^] Cette prévision est jugée non fiable, car le log K_{oe} de la substance dépasse le seuil de coupure de log K_{oe} (5).

Une fourchette de prévisions sur la toxicité pour les organismes aquatiques a également été obtenue à partir des différents modèles RQSA (tableau 8-1). Lorsque fiables, les résultats indiquent que la substance pourrait être très dangereuse pour les organismes aquatiques. De façon plus précise, la CL_{50} (96 h), calculée par le modèle TOPKAT pour les poissons (0,021 mg/L), ainsi que les valeurs de toxicité chronique (VCh), calculées par le modèle ECOSAR pour les poissons et les daphnies (respectivement 0,003 mg/L et 0,008 mg/L), indiquent que le BAPP aura des effets aigus et chroniques sur ces organismes en faibles concentrations.

Même si la valeur calculée de $\log K_{oe}$ (5,89) qui est utilisée est légèrement inférieure à la valeur de $\log K_{oe}$ choisie pour le BAPP (6,6), la CL_{50} sur 96 h prévue chez le poisson à partir du modèle TOPKAT est considérée comme fiable, car tous les fragments moléculaires sont inclus dans la base de données de ce modèle. Le modèle ECOSAR indique que le BAPP pourrait avoir un mode d'action s'apparentant à celui des amines aromatiques, en plus de la relation structure-activité (RSA) d'une substance organique neutre (toxicité de référence). Cependant, la plupart des prévisions du modèle ECOSAR sur le mode d'action des amines aromatiques ne sont pas jugées fiables lorsque la valeur de $\log K_{oe}$ est supérieure à 4,3 ou elles dépassent la valeur de solubilité dans l'eau modélisée pour le BAPP (0,0066 mg/L). Enfin, même si le seuil de coupure pour $\log K_{oe}$, utilisé pour prévoir la toxicité aiguë de référence chez les poissons et les daphnies par le modèle ECOSAR, est inférieur au $\log K_{oe}$ du BAPP (6,6), les estimations de la toxicité chronique chez les poissons et les daphnies (VCh) sont jugées fiables sur la base d'un seuil de coupure de 8 pour la fiabilité des prévisions de $\log K_{oe}$.

Selon le poids de la preuve basé sur les données modélisées pour le BAPP, on s'attend à ce que cette substance ait une toxicité aiguë et chronique pour les organismes aquatiques en faibles concentrations.

De plus, la boîte à outils RQSA de l'OCDE a été utilisée pour établir les profils en vue d'évaluer le potentiel de liaison du BAPP aux récepteurs des œstrogènes, un événement moléculaire déclencheur s'apparentant à la liaison des protéines (Schultz *et al.*, 2006) et pouvant provoquer une série d'effets nocifs (OCDE, 2009). La puissance de liaison dépend de la présence de groupements fonctionnels précis, ainsi que de la taille et de la forme de la molécule, deux paramètres qui peuvent être déterminés de façon approximative à partir de la masse moléculaire (OCDE, 2009). En raison de sa masse moléculaire (410,52 g/mol) qui se situe dans l'intervalle optimal des masses moléculaires des substances se fixant aux récepteurs des œstrogènes (200 à 500 g/mol) et de la présence de deux structures aromatiques avec un groupement amine libre, on considère que le BAPP a un fort potentiel de liaison aux récepteurs des œstrogènes.

On n'a trouvé aucune étude examinant les effets de cette substance sur l'environnement dans des milieux autres que l'eau.

8.2 Caractérisation du risque pour l'environnement

Le BAPP devrait être persistant dans l'eau, les sédiments et le sol, et devrait aussi avoir un potentiel de bioaccumulation élevé. Il est également considéré comme ayant une toxicité élevée pour les organismes aquatiques et peut se fixer aux récepteurs des œstrogènes.

Les substances persistantes demeurent longtemps dans l'environnement après y avoir été rejetées, ce qui accroît l'ampleur et la durée possibles de l'exposition. Celles dont la demi-vie dans les milieux mobiles (air et eau) est longue et qui sont sujettes à se répartir en proportions appréciables dans ces milieux peuvent causer une contamination étendue. Par ailleurs, le rejet de faibles quantités de substances bioaccumulables peut donner lieu à des concentrations élevées de ces substances dans les organismes exposés. Les substances fortement bioaccumulables et persistantes sont particulièrement préoccupantes en raison de la bioamplification possible dans les réseaux trophiques, ce qui peut entraîner une exposition interne très élevée en particulier chez les prédateurs des niveaux trophiques supérieurs.

Néanmoins, étant donné la faible quantité de BAPP importée au Canada, son profil d'utilisation et les pratiques de manutention et d'élimination connues qui sont en place pour ses utilisations actuelles, les rejets actuels dans l'environnement et l'exposition à cette substance devraient être très faibles. Par conséquent, il est conclu que le BAPP n'a actuellement aucun effet nocif sur l'environnement au Canada.

Même si l'exposition de l'environnement au BAPP n'est pas préoccupante aux niveaux actuels, cette substance devrait avoir un effet préoccupant sur l'environnement en raison de sa toxicité élevée pour les organismes aquatiques, de son potentiel à se lier aux récepteurs des œstrogènes et de son potentiel de bioaccumulation élevé. Par conséquent, la substance pourrait être préoccupante pour l'environnement si l'exposition devait augmenter.

8.3 Incertitudes de l'évaluation des risques pour l'environnement

Les concentrations prévues associées à une toxicité pour les organismes aquatiques peuvent comporter une source additionnelle d'incertitude lorsque ces valeurs dépassent la solubilité de la substance chimique dans l'eau. Étant donné que les concentrations modélisées pour la solubilité dans l'eau sont souvent incertaines, les valeurs de la toxicité qui ont dépassé les estimations de la solubilité jusqu'à un facteur de 10 ont été jugées acceptables.

9. Potentiel d'effets nocifs sur la santé humaine

9.1 Évaluation de l'exposition

9.1.1 Milieux naturels

Aucune donnée empirique sur les concentrations de BAPP dans les milieux naturels canadiens n'a été recensée. Les concentrations environnementales de BAPP ont donc été estimées à l'aide du modèle ChemCAN (2003), un modèle de la fugacité de niveau III propre au Canada, qui est utilisé pour estimer les concentrations moyennes dans divers milieux à partir des rejets annuels d'une substance.

Les rejets annuels ont été calculés à partir de la quantité totale utilisée dans le commerce en 2010, soit 500 kg en 2010 (communication personnelle en 2011 d'un « utilisateur industriel » au secteur de l'aérospatial, de l'automobile et du transport d'Environnement Canada; source non citée). Les pourcentages de perte prévus grâce à l'outil de débit massique (voir le tableau 6-1) ont été appliqués à cette quantité (500 kg) et ils ont été utilisés pour calculer la limite supérieure prudente de l'absorption journalière de BAPP pour la population canadienne en général. Cela a permis d'estimer que la limite supérieure de l'exposition totale dans les milieux naturels est inférieure à 1 nanogramme par kg de poids corporel (kg p.c.) par jour. En conséquence, l'exposition potentielle de la population au BAPP présent dans les milieux naturels au Canada devrait être négligeable.

Le BAPP ne devrait pas être présent dans les aliments et les boissons.

9.1.2 Produits de consommation

Le BAPP est utilisé comme additif dans des apprêts adhésifs structurels utilisés sur des pièces structurales d'aéronefs, en une concentration variant de 3 à 6 % en poids (Environnement Canada, 2010a). Comme on considère que ce produit n'est utilisé qu'en milieux industriels, la population canadienne en général ne devrait pas y être exposée par les produits de consommation.

9.2 Évaluation des effets sur la santé

Les seules données empiriques disponibles sur le BAPP portent sur les effets aigus sur la santé (annexe B). La toxicité aiguë du BAPP à la suite d'une exposition cutanée semble faible, la dose létale médiane (DL₅₀) la plus faible par voie cutanée étant supérieure à 8 000 mg/kg chez les rats mâles et femelles. La DL₅₀ la plus faible par voie orale a été de 308 mg/kg chez les rats femelles (NTIS, 1992a). Le BAPP n'a eu aucun effet irritant sur la peau des lapins, mais a provoqué une irritation passagère dans un des six yeux de lapins testés (NTIS, 1992a).

Comme les données empiriques sur les effets du BAPP sur la santé étaient limitées, on a également pris en considération des données pertinentes sur des substances

analogues. Deux analogues ont été choisis étant donné leur similarité chimique et la disponibilité de données empiriques sur les dangers; il s'agit du 4,4'-[1,4-phénylène(dioxy)]dianiline (n° CAS 3491-12-1) et de la dianiline A (n° CAS 2479-47-2). Le degré de similarité structurale a été quantifié à l'aide du coefficient d'association de Tanimoto dans SciFinder; des coefficients de 76 % et 74 % ont été établis, respectivement entre le BAPP et le 4,4'-[1,4-phénylène(dioxy)]dianiline et entre le BAPP et la dianiline A. Les structures de ces analogues sont présentées à l'annexe C.

Les paragraphes qui suivent présentent un résumé des données disponibles sur les dangers associés à ces deux analogues.

Dans le cas du 4,4'-[1,4-phénylène(dioxy)]dianiline (n° CAS 3491-12-1), les essais de génotoxicité *in vitro* donnent des résultats partagés, les résultats étant positifs au test de mutation dans les bactéries (Shimizu *et al.*, 1982) mais négatifs pour le test de synthèse d'ADN non programmée dans des cultures primaires d'hépatocytes (Mori *et al.*, 1988).

La dianiline A s'est révélée mutagène durant le test d'Ames réalisé sur les souches TA100 et TA98 en présence d'activation métabolique. En l'absence d'activation métabolique, une réponse mutagène positive a été observée chez la souche d'essai TA100 mais non chez TA98 (NTIS, 1992b). Dans une étude sur la cancérogénicité, des tumeurs de la vessie ont été observées chez un des trois chiens traités à la dianiline A pendant six ans, à une dose de 15,03 mg/kg p.c. par jour. Aucun changement anatomique macroscopique n'a été observé chez les deux autres chiens, mais les trois ont présenté des signes d'hématurie (NTIS, 1992c). Aucune autre donnée empirique sur les effets sur la santé n'a été relevée pour les analogues choisis.

Les résultats des modèles prévisionnels RQSA pour le BAPP ont été pris en considération dans quatre modèles différents - DEREK, TOPKAT, CASETOX et Leadscope Model Applier - lesquels ont donné des résultats partagés quant à la cancérogénicité, à la génotoxicité ainsi qu'à la toxicité pour le développement et la reproduction (DEREK, 2008; TOPKAT, 2004; CASETOX, 2008; Leadscope, 2005-2008). Un résumé des résultats du modèle est présenté à l'annexe D. Les modèles Model Applier et Multicase Casetox ont donné des prévisions positives en ce qui a trait aux paramètres de cancérogénicité chez les souris et les rats. Les prévisions de génotoxicité établies à partir des modèles Model Applier et Multicase Casetox ont été positives pour plusieurs paramètres durant les essais *in vivo*, y compris les aberrations chromosomiques, les micronoyaux et la mutation génétique chez *Drosophila melanogaster*, ainsi que durant les essais de mutation *in vitro* chez *Salmonella typhimurium*. En ce qui a trait aux paramètres de toxicité pour le développement, le modèle Model Applier a établi des prévisions positives pour la réduction de poids et la perte postimplantatoire chez les rats, alors que le modèle Multicase Casetox a donné des résultats positifs pour la tératogénicité. Ce dernier modèle a aussi donné des résultats positifs pour des paramètres liés à la reproduction chez les souris et les rats.

La confiance dans la base de données sur les effets du BAPP sur la santé est jugée très faible. Les seules données empiriques disponibles portent sur la toxicité aiguë et l'irritation et, pour les analogues choisis, seules des données sur la génotoxicité *in vitro* et une étude très limitée sur la cancérogénicité ont été recensées. Les modèles prévisionnels RQSA ont donné des résultats partagés en ce qui a trait à la génotoxicité, à la cancérogénicité, ainsi qu'à la toxicité pour le développement et la reproduction.

9.3 Caractérisation du risque pour la santé humaine

Très peu de données empiriques sur les effets du BAPP sur la santé ont été recensées. Les prévisions basées sur les relations quantitatives structure-activité indiquent des dangers potentiels (génotoxicité, cancérogénicité). On s'attend toutefois à ce que l'exposition de la population générale au BAPP dans les milieux naturels et par l'alimentation soit négligeable. De même, on ne prévoit aucune exposition de la population générale au BAPP provenant de l'utilisation de produits de consommation. Puisqu'on s'attend à ce que l'exposition de la population générale dans les milieux naturels au Canada soit négligeable, on considère que le risque pour la santé humaine est faible.

9.4 Incertitudes de l'évaluation des risques pour la santé humaine

L'incertitude associée à la caractérisation de l'exposition est élevée, vu l'absence de données empiriques sur les concentrations environnementales de BAPP, lesquelles concentrations ont été prévues à partir des quantités utilisées dans le commerce durant l'année civile 2006. Les hypothèses utilisées dans le modèle ajoutent également à l'incertitude. Cependant, comme la valeur maximale des quantités utilisées dans le commerce a été utilisée aux fins de la modélisation, il est probable que les données modélisées surestiment les concentrations réelles de BAPP dans les milieux naturels. La confiance à l'égard de l'estimation de l'exposition au BAPP dans l'environnement est faible.

En raison du caractère limité des données empiriques sur les effets du BAPP et de ses analogues sur la santé, ainsi que de l'utilisation de modèles sur les relations qualitatives structure-activité, la confiance à l'égard de la base de données sur les effets sur la santé est faible.

10. Conclusion

Compte tenu de tous les éléments de preuve contenus dans la présente évaluation préalable, le BAPP présente un risque faible de causer des effets nocifs sur les organismes et l'intégrité globale de l'environnement est faible. Il est conclu que le BAPP ne satisfait pas aux critères énoncés aux alinéas 64a) et b) de la LCPE, car il 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 la diversité biologique, et à mettre en danger l'environnement essentiel pour la vie.

D'après les renseignements limités sur les risques, notamment les résultats des RQSA pour le BAPP, on ne peut exclure que cette substance puisse présenter des risques de génotoxicité et de cancérogénicité. L'exposition au BAPP dans la population canadienne en général étant toutefois négligeable, il est donc conclu que le BAPP ne satisfait pas aux critères énoncés à l'alinéa 64c) de la LCPE, car il ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité ou concentration ou dans des conditions de nature à constituer un danger au Canada pour la vie ou la santé humaines.

Par conséquent, il est conclu que le BAPP ne satisfait à aucun des critères énoncés à l'article 64 de la LCPE (1999).

Références

ACD/pK_aDB [module de prévision]. 2005. Version 9.04. Toronto (Ont.) : Advanced Chemistry Development. Accès : http://www.acdlabs.com/products/phys_chem_lab/pka/ [réserve de consultation].

[AIEPS] Artificial Intelligence Expert Predictive System. 2003-2007. Version 2.05. Ottawa (Ont.) : Environnement Canada. Modèle élaboré par Stephen Niculescu. Disponible auprès d'Environnement Canada, Division des évaluations écologiques, Section de l'évaluation des substances chimiques nouvelles.

[AOPWIN] Atmospheric Oxidation Program for Microsoft 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/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>

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.

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., 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? *Integrat. Environ. Assess. Manag.* 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.

Aronson, D., Howard, P.H. 1999. Evaluating potential POP/PBT compounds for environmental persistence. North Syracuse (NY) : Syracuse Research Corp., Environmental Science Centre. N° rapport : SRC-TR-99-020.

Aronson, D., Boethling, B., Howard, P., Stiteler, W. 2006. Estimating biodegradation half-lives for use in chemical screening. *Chemosphere* 63:1953-1960.

ASTreat Model [Modèle sur l'élimination des usines de traitement des eaux usées]. 2006. Version 1.0. Cincinnati (É.-U.) : Procter & Gamble Company.

[BBM with Mitigating Factors] Baseline Bioaccumulation Model with Mitigating Factors. 2008. Gatineau (Qc) : Environnement Canada [Modèle basé sur celui de Dimitrov, S., Dimitrova, N., Parkerton, T., Comber, M., Bonnell, M., et O. Mekenyan. 2005. Base-line model for identifying the bioaccumulation potential of chemicals. SAR QSAR *Environ Res.* 16(6):531-554.]

[BCFBAF] BioConcentration Factor Program for Microsoft 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/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

[BDPP] Base de données sur les produits pharmaceutiques [base de données]. 2010. Ottawa (Ont.) : Direction des produits thérapeutiques, Santé Canada. [consulté en juillet 2010]. <https://health-products.canada.ca/dpd-bdpp/switchlocale.do?lang=fr&url=t.search.recherche>.

[BDIPSNH] Base de données d'ingrédients de produits de santé naturels homologués [base de données]. 2010. Ottawa (Ont.) Santé Canada. Accès : <http://webprod.hc-sc.gc.ca/nhpid-bdipsn/search-rechercheReq.do?lang=fra> [consulté en juillet 2010].

[BDPSNH] Base de données des produits de santé naturels homologués [base de données]. 2010. Ottawa (Ont.) : ministère de la Santé. Accès : <http://205.193.93.55/lnhpd-bdpsnh/start-debuter.do> [consultée en juillet 2010].

[BIOWIN] Biodegradation Probability Program for Microsoft 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/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

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.

Calabrese EJ, Kenyon EM. 1991. Air toxics and risk assessment. Chelsea (MI) : Lewis Publishers, Inc.

Canada. 1978. *Règlement sur les aliments et drogues*. C.R.C., c. 870. Accès : <http://laws.justice.gc.ca/fra/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^o 3. Accès : <http://laws-lois.justice.gc.ca/fra/lois/C-15.31/>.

Canada. 2000. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*. C.P. 2000-348, 29 mars 2000, DORS/2000-107. Accès : <http://laws-lois.justice.gc.ca/eng/regulations/SOR-2000-107/page-1.html>.

Canada. Ministère de l'Environnement, ministère de la Santé. 2006a. *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, n° 49, p. 4109-4117. Accès : <http://publications.gc.ca/gazette/archives/p1/2006/2006-12-09/pdf/g1-14049.pdf>.

Canada. Ministère de l'Environnement, ministère de la Santé. 2006b. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Publication après évaluation préalable de 148 substances inscrites sur la Liste intérieure des substances [paragraphe 77(1) de la Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)]*, *Gazette du Canada*. Partie I, vol. 140, n° 49, p. 4117-4123. Ottawa : Imprimeur de la Reine. Accès : <http://publications.gc.ca/gazette/archives/p1/2006/2006-12-09/pdf/g1-14049.pdf>.

Canada. Ministère de l'Environnement. 2006c. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis concernant certaines substances considérées comme priorité pour suivi*, *Gazette du Canada*. Partie I, vol. 140, n° 9, p. 435-459. Accès : <http://publications.gc.ca/gazette/archives/p1/2006/2006-03-04/pdf/g1-14009.pdf>.

Canada. Ministère de l'Environnement, ministère de la Santé. 2009a. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis de douzième divulgation d'information technique concernant les substances identifiées dans le Défi*, *Gazette du Canada*. Partie I, vol. 143, n° 52, p. 3839-3847. Accès : <http://publications.gc.ca/gazette/archives/p1/2009/2009-12-26/pdf/g1-14352.pdf>.

Canada. Ministère de l'Environnement. 2009b. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis concernant les substances du groupe 12 du Défi*. *Gazette du Canada*, Partie I, volume 143, n° 52, p. 3813-3834. Accès : <http://publications.gc.ca/gazette/archives/p1/2009/2009-12-26/pdf/g1-14352.pdf>.

CASETOX [module de prévision]. 2008. Version 2.0. Beachwood (OH) : MultiCASE. Accès : <http://www.multicase.com/products/prod03.htm> [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 : <http://oasis-lmc.org/?section=software&swid=1>.

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>.

Chuang, K.C., Bowles, K.J., Scheiman, D.A., Papadopoulos, D.S., Hardy-Green, D. 2001. Synthesis and characterization of a high Tg polyimide (DMBZ-15). *In* : Mittal, K.L. (éd.) Polyimides and other high temperature polymers: synthesis, characterization and applications. Vol 1, p. 113-127.

[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, 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.]

Cytec. 2001. Fiche technique : BR 6747-1 Water-based adhesive bonding primer system [Internet] Accès : <http://www.cytec.com/engineered-materials/products/Datasheets/BR%206747-1.pdf>.

[DEREK] Deducing Estimation from Existing Knowledge [module de prévision sur CD ROM]. 2008. Version 10.0.2. Cambridge (MA) : Harvard University, LHASA Group. [consulté le 27 juillet 2010]. Accès : <http://lhasa.harvard.edu/?page=toxicology.htm> [réserve de consultation].

Dimitrov, S.D., Dimitrova, N.C., Walker, J.D., Veith, G.D., Mekenyan, O.G. 2002. Predicting bioconcentration factors of highly hydrophobic chemicals. Effects 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.

[ECCC, SC] Environnement et Changement climatique Canada, Santé Canada. [modifié le 20 avril 2007]. Catégorisation de substances chimiques. Ottawa (Ont.) : gouvernement du Canada. <https://www.canada.ca/fr/sante-canada/services/substances-chimiques/approche-canada/categorisation-produits-chimiques.html>.

[ECOSAR] Ecological Structural Activity Relationships [modèle d'évaluation]. 2008. 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/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

Environnement Canada. 2006. Données pour certaines substances recueillies en vertu de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* : *Avis concernant certaines substances considérées comme priorités pour suivi*. Données compilées par Environnement Canada, Santé Canada; Division des substances existantes.

Environnement Canada. 2007a. Communication pour le NDTHPM (n° CAS 13080-86-9 BAPP) présenté à Environnement Canada, Division des substances existantes dans le cadre de l'initiative Plan de gestion des produits chimiques. Reçue le 8 février 2007.

Environnement Canada. 2007b. Guidance for Conducting Ecological Assessments under CEPA, 1999, Science Resource Technical Series, Technical Guidance Module : QSARs. Document de travail préliminaire révisé. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

Environnement Canada. 2008. Guidance for Conducting Ecological Assessments under CEPA 1999, Science Resource Technical Series, Technical Guidance Module: Mass Flow Tool. Document de travail. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

Environnement Canada. 2010a. Données sur les substances du lot 12 recueillies en vertu de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* : *Avis concernant certaines substances identifiées dans le douzième lot du Défi*. Données recueillies par Environnement Canada, Division des substances existantes.

Environnement Canada. 2010b. Assumptions, limitations and uncertainties of the Mass Flow Tool for BAPP, n° CAS 13080-86-9. Document provisoire interne. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

Environnement Canada, Santé Canada. 2008. Évaluation préalable pour le Défi concernant le Phénol, 4,4'-(1-méthyléthylidène)bis-(Bisphénol A), n° CAS 80-05-7 [en ligne]. Ottawa (Ont.) : Environnement Canada, Santé Canada. Accès : <https://www.ec.gc.ca/ese-ees/default.asp?lang=Fr&n=3C756383-1> [consulté le 1^{er} octobre 2010].

[EPIsuite] Estimation Programs Interface Suite for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 4.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : <http://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

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

Ghosh, M.K., Mittal, K.L. 1996. Polyimides: fundamentals and applications. New York (NY) : Marcel Dekker.

[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 : <http://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

Hu, T.M., Layton, W.L. 2001. Allometric scaling of xenobiotic clearance: uncertainty versus universality. *AAPS PharmSci.* Vol. 3(4):E29.

[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 : <http://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

[KOCWIN] Organic Carbon Partition Coefficient Program for Microsoft Windows [estimation model]. 2008. Version 2.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : <http://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

Kong, C., Zhang, Q., Gu, X., Chen, D. 2006. Synthesis, structures and properties of polyimide based on 2,2'-Bis(4-aminophenoxy phenyl) propane. *J. Macromol. Sci. A : Pure Appl. Chem.* 43:1825-1833.

[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 : <http://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

Leadscope Enterprise [gestion de données et d'aide à la décision]. c2005-2008. Version 2.4.15. Columbus (OH) : Leadscope Inc. Accès : http://www.leadscope.com/lse_product.php [réserve de consultation].

Lin, C.H., Chang, S.L., Hsieh, C.W., Lee, H.H. 2008. Aromatic diamine-based benzoaxines and their high performance thermosets. *Polymer* 49:1220-1229.

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.

Mori, H., Yoshimi, N., Sugie, S., Iwata, H., Kawai, K., Mashizu, N., Shimizu, H. 1988. Genotoxicity of epoxy resin hardeners in the hepatocyte primary culture/DNA repair test. *Mut. Res.* 204:683-688.

[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 : <http://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

[NCI] National Chemical Inventories [base de données sur CD-ROM]. 2007. Numéro 1. Columbus (OH) : American Chemical Society. Accès : <http://www.cas.org/products/cd/nci/index.html> [consultée le 10 juillet 2010].

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.

[NTIS] National Technical Information Service. 1992a. Initial submission : 2,2'-bis(4-aminophenoxyphenyl)propane : acute toxicity & primary irritancy studies (project report) with cover letter dated 022592. OTS0533991.

[NTIS] National Technical Information Service. 1992b. Initial submission : Bisaniline A: Ames/salmonella mutagenicity assay (final report) with cover letter dated 072392. OTS0540996.

[NTIS] National Technical Information Service. 1992c. Initial submission : final report on Bisaniline A with cover letter dated 080792. OTS0545983.

[OASIS Forecast] Optimized Approach based on Structural Indices Set. 2005. Version 1.20. Bourgas (Bulgarie) : Bourgas Prof. Assen Zlatarov University, Laboratory of Mathematical Chemistry. Accès : <http://oasis-lmc.org/?section=software>.

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2009. (Q)SAR Application Toolbox. Version 1.1. Accès : http://www.oecd.org/document/54/0,3343,en_2649_34379_42923638_1_1_1_1,00.html

[PMRA] Pest Management Regulatory Agency. 2007. Regulatory Note REG 2007-04 : PMRA list of formulants [Internet]. Ottawa (ON) : Health Canada, Pest Management Regulatory Agency.

Santé Canada. 2010. Liste critique des ingrédients dont l'utilisation est restreinte ou interdite dans les cosmétiques. 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 en octobre 2010].

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

Schultz, T.W., Carlson, R.E., Cronin, M.T.D., Hermens, J.L.M., Johnson, R., O'Brien, P.J., Roberts, D.W., Siraki, A., Wallace, K.D., et G.D. Veith. 2006. A conceptual framework for predicting toxicity of reactive chemicals: Models for soft electrophilicity. *SAR QSAR Environ Res.* 17:413-428.

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

Seika Group. 2010. Company guide [en ligne] Wakayama Seika Kogyo Ltd (fabricant) et Seika Corporation (division des ventes). Accès : http://www.waseika.com/pdf/company_guide.pdf.

Shimizu, H., Suzuki, Y., Suzuki, T., Akiyama, I., Sakitani, T., et N. Takemura. 1982. Mutagenicity of epoxy resin hardeners. *Jap. J. Ind. Health* 24:489-503 [cité dans Mori *et al.*, 1988].

Sigma-Aldrich. 2010. Fiche signalétique : 4,4'-(4,4'-Isopropylidenediphenyl-1,1'-diyldioxy)dianiline [Internet]. Oakville (Ont.) : Sigma-Aldrich. Accès : <http://www.sigmaaldrich.com>.

Suzhou Yinsheng Chemical Co., Ltd. 2003. 4,4'-(4,4'-Isopropylidenediphenyl-1,1'-diyldioxy)dianiline, CAS NO. 13080-86-9. Accès : <http://yinsheng.lookchemwww.dapsone.com/products/CasNo-13080-86-9-4-4---4-4--Isopropylidenediphenyl-1-1--diyldioxy-dianiline-11067np1.html> [consulté le 8 juillet 2010].

TCI America. 2010. 2,2-Bis[4-(4-aminophenoxy)phenyl]propane. Catalogue en ligne. Accès : <http://www.tciamerica.com/catalog/B1551.html> [consulté le 9 juillet 2010].

[TOPKAT] TOxicity Prediction by Komputer Assisted Technology [module de prévision]. 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. 2009. High Production Volume Information System (HPVIS). Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics. Accès : <http://www.epa.gov/hpvis/index.html>.

[WATERNT] Water Solubility Program [modèle d'évaluation]. 2008. Version 1.01. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : <http://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

[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 : <http://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

Xia J., et J.W. Miley, inventeurs; Milliken & Company, cessionnaire. 31 décembre 2002. Aromatic bis-acetoacetamide intermediates. United States Patent US 6,500,935 B2.

Annexes

Annexe A. Tableaux sommaires des intrants des modèles de la persistance, de la bioaccumulation et de la toxicité (PBT)

Tableau A-1. Tableau sommaire des intrants des modèles PBT - modèles physico-chimiques

Paramètres d'entrée des modèles	EPI Suite ^{MD} (tous les modèles, notamment AOPWIN, KOCWIN, BCFBAF, BIOWIN et ECOSAR)
Code SMILES	<chem>O(c(ccc(c1)C(c(ccc(Oc(ccc(N)c2)c2)c3)c3)(C)C)c1)c(ccc(N)c4)c4</chem>
Masse moléculaire (g/mol)	-
Point de fusion (°C)	--
Point d'ébullition (°C)	--
Température (°C)	-
Pression de vapeur (Pa)	--
Constante de la loi de Henry (Pa·m ³ /mol)	--
Log K _{ae} (sans dimension)	-
Log K _{oe} (sans dimension)	6,6
K _{oe} (sans dimension)	-
Log K _{co} (L/kg)	-
Solubilité dans l'eau (mg/L)	-
Log K _{oa} (sans dimension)	-

Abréviations : K_{ae}, coefficient de partage air-eau; K_{oa}, coefficient de partage octanol-air; K_{oc}, coefficient de partage carbone organique-eau; K_{oe}, coefficient de partage octanol-eau; SMILES, Simplified Molecular Input Line Entry System; « - », sans objet.

Tableau A-2. Tableau sommaire des intrants des modèles PBT – modélisation du devenir

Paramètres d'entrée des modèles	Modèles pour l'élimination par le traitement des eaux usées ^e	EQC ⁱ	Modèle Arnot-Gobas FBC/FBA
Code SMILES	-	-	-
Masse moléculaire (g/mol)	410,52 ^{f,g,h}	410,52 ^j	-
Point de fusion (°C)	-	246 ^j	-
Point d'ébullition (°C)	-	-	-
Température (°C)	-	20 ^j	-
Masse volumique (kg/m ³)	1,44 ^g	-	-
Pression de vapeur (Pa)	2,18 x 10 ^{-10 f,h}	2,18 x 10 ⁻¹⁰	-

Paramètres d'entrée des modèles	Modèles pour l'élimination par le traitement des eaux usées ^e	EQC ⁱ	Modèle Arnot-Gobas FBC/FBA
Constante de la loi de Henry (Pa·m ³ /mol)	5,1 x 10 ⁻⁹ h	-	-
log K _{ae} (sans dimension)	x ^g	-	-
log K _{oe} (sans dimension)	6,9 ^f	6,6 ^j	6.6
K _{oe} (sans dimension)	7 585 776 ^{g, h}	-	-
log K _{co} (L/kg)	-	-	-
Solubilité dans l'eau (mg/L)	0,003 ^{f, h}	6,0 x 10 ⁻³ j	-
log K _{oa} (sans dimension)	-	-	-
Coefficient de partage sol-eau (L/kg) ^a	-	-	-
Coefficient de partage sédiments-eau (L/kg) ^a	-	-	-
Coefficient de partage particules en suspension-eau (L/kg) ^a	135 021 ^g	-	-
Coefficient de partage poisson-eau (L/kg) ^b	-	-	-
Coefficient de partage aérosol-eau (sans dimension) ^c	-	-	-
Coefficient de partage végétation-eau (sans dimension) ^a	-	-	-
Enthalpie (K _{oe})	-	-	-
Enthalpie (K _{ae})	-	-	-
Demi-vie dans l'air (jours)	-	0,641 h ^j	-
Demi-vie dans l'eau (jours)	-	182 ^j	-
Demi-vie dans les sédiments (jours)	-	728	-
Demi-vie dans le sol (jours)	-	182 ^j	-
Demi-vie dans la végétation (jours) ^d	-	-	-
Constante cinétique de métabolisme (1/jour)	-	-	-
Constante cinétique de biodégradation (1/h) – Préciser	0,031	-	-
Constante cinétique de biodégradation (1/jour) – Préciser	0,74	-	-
Demi-vie de biodégradation en clarificateur primaire (t _{1/2-p}) (h)	22,4 ^f	-	-
Demi-vie de biodégradation en bassin d'aération (t _{1/2-s}) (h)	22,4 ^f	-	-
Demi-vie de biodégradation en bassin de décantation (t _{1/2-s}) (h)	22,4 ^f	-	-

Abréviations : FBC, facteur de bioconcentration; K_{ae}, coefficient de partage air-eau; K_{oa}, coefficient de partage octanol-air; K_{co}, coefficient de partage carbone organique-eau; K_{oe}, coefficient de partage octanol-eau; SMILES, Simplified Molecular Input Line Entry System

- ^a D'après le log K_{co} .
^b D'après les données sur le FBC.
^c Valeur par défaut.
^d D'après la demi-vie dans l'eau.
^e Les modèles pour l'élimination par le traitement des eaux usées sont STP, ASTreat et SimpleTreat. Les intrants requis varient selon le modèle.
^f Intranant pour STP.
^g Intranant pour ASTreat.
^h Intranant pour Simpletreat.
ⁱ Les intrants requis pour EQC sont différents selon qu'il s'agisse d'un produit chimique de type I ou de type II.
^j Intranant pour EQC pour un produit chimique de type I.

Tableau A-3. Tableau sommaire des intrants pour les modèles PBT – profil et écotoxicité

Paramètres d'entrée des modèles	CPOP (incluant : CATALOGIC, modèle de facteurs d'atténuation du FBC, modèle de toxicité OASIS)	AIES / DS TOPKAT/ ASTER
Code SMILES	-	-
Masse moléculaire (g/mol)	-	-
Point de fusion (°C)	-	-
Point d'ébullition (°C)	-	-
Température (°C)	-	-
Masse volumique (kg/m ³)	-	-
Pression de vapeur (Pa)	-	-
Constante de la loi de Henry (Pa·m ³ /mol)	-	-
Log K_{ae} (sans dimension)	-	-
Log K_{oe} (sans dimension)	6,6	-
K_{oe} (sans dimension)	-	-
Log K_{co} (L/kg)	-	-
Solubilité dans l'eau (mg/L)	-	-
Log K_{oa} (sans dimension)	-	-

Abréviations : AIES, Artificial Intelligence Expert System; K_{ae} , coefficient de partage air-eau; K_{oa} , coefficient de partage octanol-air; K_{co} , coefficient de partage carbone organique-eau; K_{oe} , coefficient de partage octanol-eau; SMILES, Simplified Molecular Input Line Entry System; « - », sans objet.

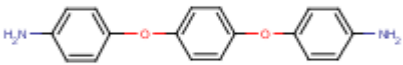
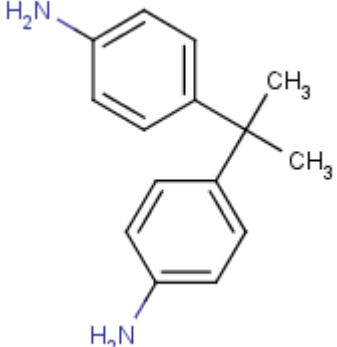
Annexe B. Résumé des données relatives aux effets du BAPP sur la santé

Paramètre	Concentration minimale avec effet /résultats
Toxicité aiguë	<p>DL₅₀ minimale par inhalation non précisée, exposition de 6,0 heures (à une concentration non connue), n'a tué aucun des 5 lapins (NTIS, 1992a).</p> <p>DL₅₀ minimale par voie orale = 308 mg/kg p.c. chez des rats femelles (NTIS, 1992a).</p> <p>DL₅₀ minimale par voie cutanée > 8 000 mg/kg p.c. chez des rats mâles et femelles (mortalité nulle en 14 jours) (NTIS, 1992a).</p> <p>[Aucune autre étude sur la toxicité aiguë n'a été recensée]</p>
Toxicité à court terme en doses répétées	[Aucune étude recensée]
Toxicité subchronique	[Aucune étude recensée]
Toxicité chronique et cancérogénicité	<p><i>Dianiline A (n° CAS 2479-47-2)</i></p> <p>Trois chiens ont été exposés à la dianiline A par voie orale à une dose de 52,63 mg/kg p.c. (0,3 g par chien, converti en fonction du poids corporel = 5,7 g par chien (Calabrese et Kenyon, 1991) deux fois par semaine (équivalent de 15,03 mg/kg p.c. par jour, soit 52,6 mg/kg p.c. × 2 jours/7 jours par semaine), pendant six ans. Des tumeurs à la vessie (carcinomes papillaires de grade II) ont été observées chez un chien, chez qui une importante fibrose de la substance corticale du rein a aussi été signalée. Aucun changement anatomique macroscopique n'a été décelé chez les deux autres chiens. Une hématurie (présence de globules rouges dans l'urine) a été rapportée chez les trois chiens.</p> <p>DMEO – effets non néoplasiques = 15,03 mg/kg p.c. par jour, d'après l'hématurie observée chez les trois chiens (NTIS 1992c).</p> <p>[Aucune étude recensée pour le BAPP]</p>
Toxicité pour le développement	[Aucune étude recensée]
Toxicité pour la reproduction	[Aucune étude recensée]

Paramètre	Concentration minimale avec effet /résultats
Génotoxicité et paramètres connexes <i>in vivo</i>	[Aucune étude recensée]
Génotoxicité et paramètres connexes <i>in vitro</i>	<p><i>Dianiline A</i> (n° CAS 2479-47-2)</p> <p>Test d'Ames</p> <p>Résultats positifs : chez <i>Salmonella typhimurium</i> (souches TA98 et TA100), 10 mg/gélose, en présence d'activateur S9 (NTIS, 1992b).</p> <p>Résultats positifs : chez <i>Salmonella typhimurium</i> (souche TA100), 10 mg/gélose, sans activateur S9 (NTIS, 1992b).</p> <p>Résultats négatifs : chez <i>Salmonella typhimurium</i> (souche TA98), 10 mg/gélose, sans activateur S9 (NTIS, 1992b).</p> <p><i>4,4'-[1,4-Phénylène(dioxy)]dianiline</i> (n° CAS 3491-12-1)</p> <p>Mutation chez les bactéries</p> <p>Résultats positifs : chez <i>Salmonella typhimurium</i>, souche et concentration non précisées (Shimizu et al. 1982)</p> <p>Synthèse d'ADN non programmée</p> <p>Résultats négatifs : Cultures primaires d'hépatocytes, lavées et exposées 10 µCi/mL de la substance d'essai pendant 20 h (Mori et al., 1988)</p> <p>[Aucune étude recensée pour le BAPP]</p>
Irritation	<p>Irritation cutanée</p> <p>Aucun effet irritant chez le lapin (NTIS, 1992a).</p> <p>Irritation oculaire</p> <p>Effet irritant (passager) : irritation mineure de la conjonctive sur un des six yeux de lapins testés, exposés à 100 mg par œil (rétablissement de cinq yeux après 24 h, rétablissement de tous les yeux après 48 h) (NTIS 1992a).</p>

Abréviations : kg p.c., kilogrammes de poids corporel; DL₅₀, dose létale médiane; DMEQ, dose minimale avec effet observé

Annexe C. Structures et données des analogues du BAPP examinés dans la partie de la présente évaluation portant sur la santé

Nom / n° CAS	Structure	Masse moléculaire (g/mol)	Méthode d'identification de l'analogue (% de similitudes)
4,4'-[1,4-Phénylène (dioxy)]dianiline / 3491-12-1		292,336	SciFinder (76)
Dianiline A / 2479-47-2		226,321	ChemID (74,03)

Annexe D. Sommaire des résultats des modèles RQSA pour le BAPP

Tableau D-1. Prévisions du modèle RQSA sur la cancérogénicité

Modèle/ espèce	Souris mâles	Souris femelles	Rats mâles	Rats femelles	Rats	Souris	Rongeurs	Mammifères
Model Applier	N	P	P	N	N	N	N	-
Multicase Casetox	NC*	NC*	P	P	-	-	-	-
TOPKAT	HD	NC*	N	HD	-	-	-	-
Derek	-	-	-	-	-	-	-	RAS

Abréviations : « - » – Aucun modèle disponible dans la suite RQSA; NC* – non concluant (prévision non fiable sur la base des critères propres au modèle définis par l'utilisateur, autres que le domaine d'applicabilité du modèle); N – négatif; HD – hors domaine; RAS – rien à signaler; P – positif.

Tableau D-2. Prévisions du modèle RQSA sur la génotoxicité

Modèle/paramètres	Model Applier	Multicase Casetox	TOPKAT
Aberrations chromosomiques	P	P	-
Aberrations chromosomiques – autres rongeurs	P	-	-
Aberrations chromosomiques - rat	HD	-	-
Test du micronoyau sur des souris	N	P	-
Test du micronoyau sur des rongeurs	P	-	-
<i>Drosophila</i>	N	P	-
<i>Drosophila</i> (translocations héréditaires)	N	-	-
<i>Drosophila</i> (mutations létales récessives liées au sexe)	N	-	-
Mutation (mammifères)	N	-	-
Mutations létales dominantes (mammifères)	N	-	-
Synthèse d'ADN non programmée	N	NC	-
Synthèse d'ADN non programmée (lymphocytes humains)	HD	-	-
Synthèse d'ADN non programmée (hépatocytes de rat)	N	-	-
Mutation (lymphomes de souris)	N	N	-
<i>S. cerevisiae</i>	N	-	-
Levure	N	-	-
HGPRT	N	-	-

Modèle/paramètres	Model Applier	Multicase Casetox	TOPKAT
<i>E. coli</i>	N	-	-
<i>E. coli w</i>	N	-	-
Activité microbienne	N	-	-
<i>Salmonella</i>	N	P	NC*

Abréviations : « - » – Aucun modèle disponible dans la suite RQSA; NC* – non concluant (prévision non fiable sur la base des critères propres au modèle définis par l'utilisateur, autres que le domaine d'applicabilité du modèle); N – négatif; HD – hors domaine; RAS – rien à signaler; P – positif.

Tableau D-3. Prévisions du modèle RQSA sur la toxicité pour le développement - Model Applier

Paramètre/espèce	Souris	Lapin	Rat	Rongeur
Retard	HD	HD	N	N
Réduction du poids	HD	HD	P	N
Mortalité fœtale	HD	HD	N	N
Perte postimplantatoire	HD	HD	P	N
Perte préimplantatoire	HD	HD	N	N
Structure	HD	HD	N	N
Viscères	HD	-	N	N

Abréviations : « - » – Aucun modèle disponible dans la suite RQSA; N – négatif; HD – hors domaine; P – positif.

Tableau D-4. Prévisions du modèle RQSA sur la toxicité pour le développement – Multicase Casetox

Paramètre/espèce	Hamster	Mammifère	Divers
Tératogénicité	-	P	N
Développement	N	-	-

Abréviations : « - » – Aucun modèle disponible dans la suite RQSA; N – négatif; P – positif.

Annexe E. Prévisions du modèle RQSA sur la toxicité pour la reproduction

Tableau E-1. Prévisions du modèle RQSA sur la toxicité pour la reproduction – Model Applier

Modèle/ paramètre/ espèce	Souris femelles	Rats femelles	Rongeurs femelles	Souris mâles	Rats mâles	Rongeurs mâles
Reproduction	HD	HD	HD	HD	HD	HD
Sperme	-	-	-	HD	HD	HD

Abréviations : HD – hors domaine; « - » – aucun modèle disponible dans la suite RQSA.

Tableau E-2. Prévisions du modèle RQSA sur la toxicité pour la reproduction – Multicase Casetox

Souris	Rats	Lapins	Humains
P	P	N	N

Abréviations : N – négatif; P – positif.