

**Évaluation préalable pour le Défi concernant
Tolyltriphénylphosphonium, sel avec le 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-
(trifluorométhyl)éthylidène]bis(phénol) (1:1)**

**Numéro de registre du Chemical Abstracts Service
75768-65-9**

**Environnement Canada
Santé Canada**

Juillet 2010

Sommaire

En application de l'article 74 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* [LCPE (1999)], les ministres de l'Environnement et de la Santé ont effectué une évaluation préalable du tolyltriphénylphosphonium, sel avec le 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluorométhyl)éthylidène]bis(phénol) (1:1) [PTPTT], dont le numéro de registre du Chemical Abstracts Service est 75768-65-9. Une priorité élevée a été accordée à l'évaluation préalable de cette substance inscrite au Défi lancé par les ministres, car elle répond aux critères de la catégorisation écologique relatifs à la persistance, au potentiel de bioaccumulation et à la toxicité intrinsèque pour les organismes non humains et elle semblerait être commercialisée au Canada.

L'évaluation des risques que présente le PTPTT pour la santé humaine n'a pas été jugée hautement prioritaire à la lumière des résultats fournis par les outils simples de détermination du risque d'exposition et du risque pour la santé élaborés par Santé Canada aux fins de la catégorisation des substances de la *Liste intérieure*. La présente évaluation est donc axée principalement sur les renseignements présentant de l'intérêt pour l'évaluation des risques touchant l'environnement.

Le PTPTT est un sel organique utilisé au Canada principalement comme agent de réticulation et accélérateur de vulcanisation dans la production de fluoroélastomères, une catégorie de caoutchouc synthétique qui sert aux applications industrielles nécessitant des caoutchoucs très résistants aux produits chimiques et à la chaleur. Cette substance n'est pas produite de façon naturelle dans l'environnement. Elle ne serait pas fabriquée au Canada; toutefois, de 100 et 1 000 kg de ce sel ont été importés au pays en 2006 en vue de la fabrication de produits contenant des fluoroélastomères.

Les profils d'utilisation déclarés et certaines hypothèses permettent de croire qu'au Canada, la plus grande partie du PTPTT est transformée chimiquement durant la polymérisation des fluoroélastomères. Environ 0,1 % de la substance serait rejeté dans les eaux usées et 0,1 % aboutirait dans les sites d'enfouissement. Par contre, aucun rejet dans l'air ne devrait survenir. Le PTPTT est un composé ionique qui, selon de nouveaux renseignements, devrait libérer des cations de benzyltriphénylphosphonium (BTP) et du bisphénol AF (BPAF) s'il est rejeté dans le milieu aquatique. Le BPAF demeurera sous une forme neutre dans le milieu aquatique à un pH plus ou moins neutre ou acide, mais deviendra anionique si le pH est alcalin. En raison du comportement de dissociation du PTPTT, l'évaluation de cette substance est axée dans une grande mesure sur les produits de dissociation, soit le BTP et le BPAF.

La solubilité expérimentale et prévue du PTPTT et de ses produits de dissociation dans l'eau est faible; celle du BTP est modérée dans le 1-octanol (920 mg/L). En cas de rejet dans l'eau, le BTP et le BPAF obtenus après dissociation devraient principalement demeurer dans la colonne d'eau. Une petite partie de ces composés devrait se fixer aux matières solides en suspension et se déposer dans les sédiments. Ni le PTPTT ni ses

produits de dissociation sont volatils. Par ailleurs, ces substances devraient demeurer en grande partie immobiles si elles se retrouvent dans le sol.

Selon leurs propriétés physiques et chimiques, les produits de dissociation du PTPTT devraient être persistants dans tous les milieux, à l'exception de l'air. De plus, les données expérimentales portant sur la solubilité du BTP dans l'octanol et dans l'eau, ainsi que les données modélisées concernant la bioaccumulation du BTP et du BPAF, indiquent que le potentiel de bioaccumulation de ces substances dans les tissus adipeux des organismes est faible. Les produits de dissociation du PTPTT répondent donc aux critères de la persistance, mais ne répondent pas à ceux de la bioaccumulation prévus dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*. Les données sur la toxicité en milieu aquatique des produits de dissociation du PTPTT indiquent que le BTP présente un risque faible pour les organismes aquatiques. Par contre, le BPAF peut être nocif selon le niveau d'exposition.

Selon un scénario d'exposition très prudent, lequel prévoyait des rejets dans le milieu aquatique en provenance d'une exploitation industrielle (utilisateur de PTPTT), et en supposant que la dissociation du PTPTT en solution était complète, les concentrations environnementales estimées du BTP et du BPAF dans l'eau étaient inférieures aux concentrations estimées sans effet calculées pour des espèces aquatiques sensibles. Par conséquent, d'après les renseignements contenus dans le présent rapport d'évaluation préalable, il est conclu que le PTPTT ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité, à une concentration ou dans des conditions qui ont ou peuvent avoir un effet nocif immédiat ou à long terme sur l'environnement ou sa diversité biologique, ou qui constituent ou peuvent constituer un danger pour l'environnement essentiel pour la vie.

L'exposition de l'ensemble de la population canadienne au PTPTT par l'intermédiaire des milieux naturels devrait être négligeable en raison de la faible quantité importée au Canada annuellement, de la forme sous laquelle il est importé et de son utilisation. Le PTPTT importé se trouve dans des composés solides qui sont par la suite polymérisés dans des installations de traitement pour produire des fluoroélastomères. On croit que le PTPTT est presque entièrement consommé (transformé) durant ce procédé et que seules des quantités infimes demeureraient dans les produits manufacturés. Par conséquent, l'exposition de l'ensemble de la population à cette substance serait négligeable. Puisque la quantité de PTPTT qui pourrait être rejetée dans l'eau annuellement est très faible (< 1 kg), l'exposition à l'un ou l'autre des produits de dissociation devrait être négligeable. Ces produits n'ont donc pas été pris en compte dans l'évaluation préalable des effets sur la santé humaine.

Il existe peu de données à l'égard des effets du PTPTT sur la santé humaine; cependant, les données empiriques disponibles et l'information provenant des modèles de prévision n'indiquent pas un risque élevé.

Puisque l'exposition de la population générale au Canada devrait être négligeable, les risques pour la santé humaine sont donc considérés comme faibles. Compte tenu de la cancérogénicité du PTPTT, pour lequel il pourrait exister une probabilité d'effets nocifs à

n'importe quel niveau d'exposition, il est conclu, en se fondant sur le principe de prudence, que le PTPPT ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité, à une concentration ou dans des conditions qui constituent ou peuvent constituer un danger au Canada pour la vie ou la santé humaine.

D'après les renseignements disponibles, il est conclu que le Tolyltriphénylphosphonium, sel avec le 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluorométhyl)éthylidène]bis(phénol) (1:1) ne satisfait à aucun des critères de l'article 64 de la LCPE (1999).

Cette substance sera considérée pour inclusion dans la prochaine mise à jour de l'inventaire de la *Liste intérieure*. De plus, des activités de recherche et de surveillance viendront, le cas échéant, appuyer la vérification des hypothèses formulées au cours de l'évaluation préalable.

Introduction

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

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 :

- 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.

On a décidé d'accorder une priorité élevée à l'évaluation des risques pour l'environnement du phosphonium, triphényl(phénylméthyle), sel avec le 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluorométhyl)éthylidène]bis(phénol) (1:1), car cette substance a été jugée persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques et semble qu'elle est commercialisée au Canada.

Le volet du Défi portant sur cette substance a été publié dans la *Gazette du Canada* le 31 janvier 2009 (Canada, 2009). En même temps a été publié le profil de la 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 ses propriétés physiques et chimiques ont été reçus en réponse au Défi.

Même si l'évaluation des risques que présente le phosphonium, triphényl(phénylméthyle), sel avec le 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluorométhyl)éthylidène]bis(phénol) (1:1) pour l'environnement a reçu une priorité élevée aux fins de l'évaluation concernant l'environnement, cette substance ne répond pas aux critères de la catégorisation pour le PFRE ou le REI ni aux critères définissant un grave risque pour la santé humaine, compte tenu du classement attribué par d'autres organismes nationaux ou internationaux quant à sa cancérogénicité, à sa génotoxicité ou à sa toxicité sur le plan du développement ou à sa toxicité sur le plan de la reproduction. La présente évaluation est donc axée principalement sur les renseignements utiles à l'évaluation des risques écologiques.

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 (1999). Les évaluations préalables examinent les renseignements scientifiques et tirent des conclusions fondées sur la méthode du poids de la preuve et le principe de prudence.¹

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, de rapports de recherche de parties intéressées et d'autres documents consultés au cours de recherches documentaires menées récemment, jusqu'en septembre 2009. Les études les plus importantes ont fait l'objet d'une évaluation critique. Il est possible que les résultats de modélisation aient servi à formuler des conclusions.

Lorsqu'ils étaient disponibles et pertinents, les renseignements présentés dans l'évaluation des dangers provenant d'autres instances ont également été pris en compte. L'évaluation préalable n'est pas un examen exhaustif ou critique de toutes les données disponibles. Il s'agit plutôt d'un sommaire des renseignements essentiels qui appuient la conclusion proposée.

La présente évaluation préalable a été préparée par le personnel du Programme des substances existantes de Santé Canada et d'Environnement Canada et elle intègre les résultats d'autres programmes exécutés par ces ministères. Les sections écologiques de l'évaluation préalable ont également fait l'objet d'une étude consignée par des pairs ou d'une consultation de ces derniers. De plus, la version provisoire de la présente évaluation préalable a fait l'objet d'une consultation publique de 60 jours. Bien que les commentaires

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

externes aient été pris en considération, Santé Canada et Environnement Canada assument la responsabilité du contenu final et des résultats de l'évaluation préalable. Les méthodes utilisées dans les évaluations préalables du Défi ont été examinées par un Groupe consultatif du Défi indépendant. Les principales données et considérations sur lesquelles repose la présente évaluation sont résumées ci-après.

Identité de la substance

Nom de la substance

Aux fins du présent document, la substance dont il est question ici est appelée « PTPTT », sigle provenant du nom utilisé dans la Liste intérieure des substances, à savoir le tolyltriphénylphosphonium, sel avec le 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluorométhyl)éthylidène]bis(phénol) (1:1). L'information sur l'identité du PTPTT est présentée dans le tableau 1a. Comme la substance est un sel organique, elle devrait se dissocier lors de son rejet dans l'environnement et se dissoudre dans l'eau en des moles égales du cation de benzyltriphénylphosphonium (BTP) (n° CAS 15853-35-7) chargé positivement et de l'anion de 4,4'-[2,2,2-Trifluoro-1-(trifluorométhyl)éthylidène]diphénol chargé négativement, dont la forme neutre correspond au bisphénol AF (BPAF) (n° CAS 1478-61-1). En raison du comportement particulier du PTPTT en tant que sel, l'information sur les identités de ses produits de dissociation est également présentée dans les tableaux 1b et 1c. Il est à noter que les notations du système Simplified Molecular Input Line Entry System (SMILES) présentées dans les tableaux 1a et 1b ne reflètent pas la nature ionique de chaque composé, étant donné que les modèles de relations quantitatives structure-activité (RQSA) n'acceptent que la forme neutre d'une substance chimique comme donnée d'entrée.

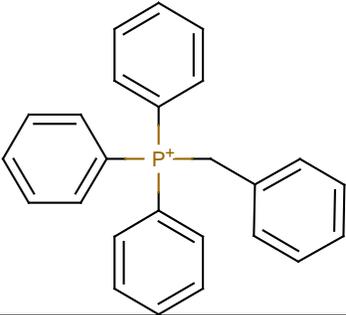
Tableau 1a. Identité de la substance - PTPPT

Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS)	75768-65-9
Nom dans la LIS	tolyltriphénylphosphonium, sel avec le 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluorométhyl)éthylidène]bis(phénol) (1:1)
Noms relevés dans les National Chemical Inventories (NCI)¹	<i>Phosphonium, triphenyl(phenylmethyl)-, salt with 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bis[phenol] (1:1) (PICCS, ASIA-PAC, NZIoC)</i> <i>benzyltriphenylphosphonium, salt with 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bis[phenol] (1:1) (EINECS)</i> <i>Phosphonium, triphenyl(phenylmethyl)-, salt with 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bis[phenol] (1:1) (AICS)</i> <i>Benzyltriphenylphosphonium, salt with 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bis[phenol] (1:1) (ECL)</i> <i>Phosphonium, triphenyl(phenylmethyl)-, salt with 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bis[phenol] (1:1) (PICCS)</i>
Autres noms	<i>Sel de 4,4'-(hexafluoroisopropylidène)diphénol</i> <i>benzyltriphénylphosphonium (1:1)</i>
Groupe chimique (groupe de la LIS)	Produits chimiques organiques définis
Principale classe chimique ou utilisation	Phénols
Principale sous-classe chimique	Substances fluorées
Formule chimique	C ₂₅ H ₂₂ P. C ₁₅ H ₉ F ₆ O ₂
Structure chimique	
SMILES utilisé dans les modèles de RQSA²	<chem>c1cccc(c1)P(c1ccccc1)(c1ccccc1)(Cc1ccccc1)Oc1ccc(C(C(F)(F)F)(C(F)(F)F)c2ccc(O)cc2)cc1</chem>
Masse moléculaire	688,645 g/mol

¹ National Chemical Inventories (NCI), 2009 : AICS (inventaire des substances chimiques de l'Australie); ASIA-PAC (listes des substances de l'Asie-Pacifique); ECL (liste des substances chimiques existantes de la Corée); EINECS (inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes); NZIoC (inventaire des substances chimiques de la Nouvelle-Zélande); PICCS (inventaire des produits et substances chimiques des Philippines) et TSCA (inventaire des substances chimiques visées par la *Toxic Substances Control Act*).

² Système *Simplified Molecular Line Input Entry System* utilisé dans la modélisation des relations quantitatives structure-activité issues d'EPIWEB (2009)

Tableau 1b. Identité de la substance - BTP

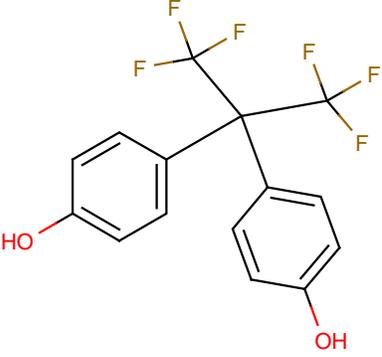
Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS)	15853-35-7
Nom dans la LIS	S.O.
Noms relevés dans les National Chemical Inventories (NCI)¹	<i>benzyltriphenylphosphonium</i> (EINECS, ENCS) <i>Phosphonium, triphenyl(phenylmethyl) - (ASIA-PAC)</i>
Autres noms	<i>NSC 167253</i> <i>Phosphonium, benzyltriphenyl-</i> <i>Triphenylbenzylphosphonium ion</i>
Groupe chimique (groupe de la LIS)	Produits chimiques organiques définis
Principale classe chimique ou utilisation	Composés à base de phosphonium; composés à base de phényle
Principale sous-classe chimique	Composés à base de phénylphosphonium
Formule chimique	C ₂₅ H ₂₂ P
Structure chimique	
SMILES utilisé dans les modèles de RQSA²	c1(ccccc1)CP(c1ccccc1)(c1ccccc1)c1ccccc1
Masse moléculaire	353,423 g/mol

¹ National Chemical Inventories (NCI), 2009: ASIA-PAC (listes des substances de l'Asie-Pacifique); EINECS (inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes) et ENCS (inventaire des substances chimiques existantes et nouvelles du Japon).

² Système *Simplified Molecular Line Input Entry System* utilisé dans la modélisation des relations quantitatives structure-activité issues d'EPIWEB (2009)

Tableau 1c. Identité de la substance - Bisphénol AF (BPAF)

Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS)	1478-61-1
Nom dans la LIS	4,4'-[2,2,2-Trifluoro-1-(trifluorométhyl)éthylidène]diphénol
Noms relevés dans les National Chemical Inventories (NCI)¹	<p><i>4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]diphenol</i> (EINECS)</p> <p><i>4,4'-[2,2,2-Trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bis[phenol]</i> (ENCS)</p> <p><i>Phenol, 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bis-</i> (AICS)</p> <p><i>4,4'-[2,2,2-Trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bisphenol</i> (ECL)</p> <p><i>BISPHENOL AF</i> (PICCS)</p> <p><i>BISPHENOL, 4,4'-[2,2,2-TRIFLUORO-1-(TRIFLUOROMETHYL)ETHYLIDENE]-</i> (PICCS)</p>
Autres noms	<p><i>1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2,2-bis(4-hydroxyphenyl)propane</i></p> <p><i>2,2-Bis(4'-hydroxyphenyl)hexafluoropropane</i></p> <p><i>2,2-Bis(4-hydroxyphenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropane</i></p> <p><i>2,2-Bis(4-hydroxyphenyl)hexafluoropropane</i></p> <p><i>2,2-Bis(4-hydroxyphenyl)perfluoropropane</i></p> <p><i>2,2-Bis(p-hydroxyphenyl)hexafluoropropane</i></p> <p><i>4,4'-(Hexafluoroisopropylidene)diphenol</i></p> <p><i>4,4'-[2,2,2-Trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bisphenol</i></p> <p><i>Bisphénol AF, BIS-AF, Bisphénol AE, Cheminox BAF</i></p> <p><i>Curative 30, GP 21, Hexafluorobisphenol A</i></p> <p><i>Hexafluorodiphenylolpropane</i></p> <p><i>Hexafluoroisopropylidenebis(4-hydroxybenzene)</i></p> <p><i>NSC 152522</i></p> <p><i>Phenol, 4,4'-(bis(trifluoromethyl)methylene)di-</i></p> <p><i>Phenol, 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]di-</i></p> <p><i>Phenol, 4,4'-[trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]di</i></p>
Groupe chimique (groupe de la LIS)	Produits chimiques organiques définis
Principale classe chimique ou utilisation	Phénols
Principale sous-classe chimique	Bisphénols
Formule chimique	C ₁₅ H ₁₀ F ₆ O ₂

Structure chimique	
SMILES utilisé dans les modèles de RQSA²	<chem>FC(F)(F)C(c1ccc(O)cc1)(c1ccc(O)cc1)C(F)(F)F</chem>
Masse moléculaire	336,23 g/mol

National Chemical Inventories (NCI), 2009 : AICS (inventaire des substances chimiques de l'Australie); ECL (liste des substances chimiques existantes de la Corée); EINECS (inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes); ENCS (inventaire des substances chimiques existantes et nouvelles du Japon) et PICCS (inventaire des produits et substances chimiques des Philippines).

² Système *Simplified Molecular Line Input Entry System* utilisé dans la modélisation des relations quantitatives structure-activité issues d'EPIWEB (2009)

Propriétés physiques et chimiques

Le tableau 2 présente les propriétés physiques et chimiques expérimentales, analogues et modélisées du PTPTT ainsi que ses produits de dissociation, le BTP et le BPAF, qui se rapportent à son devenir dans l'environnement. L'étude clé à partir de laquelle des données expérimentales ont été déclarées pour certaines de ces propriétés a fait l'objet d'un examen critique afin d'en assurer la validité. Cette étude (sommaire de rigueur d'étude) se trouve à l'annexe 1.

Les modèles fondés sur des relations quantitatives structure-activité (RQSA) ont été utilisés pour produire des données pour certaines des propriétés physiques et chimiques du PTPTT et de ses produits de dissociation, le BTP et le BPAF. Ces modèles (excepté WSKOWWIN, 2000) sont principalement fondés sur des méthodes d'addition de fragments; autrement dit, ils s'appuient sur la structure d'un produit chimique donné. Comme ces modèles n'acceptent que la forme neutre d'une substance chimique comme donnée d'entrée (forme SMILES), les valeurs modélisées figurant dans le tableau 2 s'appliquent aux formes neutres du PTPTT, du BTP et du BPAF.

La valeur expérimentale de $\log K_{oe}$, soit 2,6, et l'hydrosolubilité, soit 4,5 mg/L, produites pour le PTPTT (Environnement Canada, 2009a) ont été utilisées comme données d'entrée empiriques dans tous les modèles dans la mesure du possible, dans le but de produire des prévisions plus précises en diminuant la dépendance par rapport aux données modélisées. Il est à noter que même si la valeur de $\log K_{oe}$ du PTPTT et sa solubilité ont été mesurées indirectement en surveillant la solubilité du cation du BTP dans des solutions aqueuses et d'octanol, ces renseignements sont davantage pondérés par rapport aux renseignements modélisés. De plus, la valeur expérimentale de $\log K_{oe}$, soit 2,6, et la valeur de l'hydrosolubilité, soit 2,31 mg/L, ont été utilisées comme données d'entrée empiriques pour le BTP dans tous les modèles, dans la mesure du possible (Environnement Canada, 2009a).

Bien que des données relatives au point de fusion et à l'hydrosolubilité issues des fiches techniques santé-sécurité (FTSS) soient disponibles pour de nombreux sels d'arylphosphonium halogènes (Acros Organic N.V., 1999; Alfa Aesar Lancaster Synthesis, 2003; Fisher Scientific, 2005; Chemconserve, 2008a, 2008b, 2008c, 2008d, 2008e), on ne considère pas ces substances comme des analogues pertinents pour le PTPTT en raison des différences importantes dans les valeurs relatives à leur hydrosolubilité. En effet, les valeurs de l'hydrosolubilité déduites à partir d'analogues pour les sels d'arylphosphonium halogènes vont de 19 000 à 297 000 mg/L (Chemconserve, 2008a, 2008b, 2008c, 2008d, 2008e), par rapport à une valeur expérimentale de l'hydrosolubilité de 4,5 mg/L présentée par l'industrie (Environnement Canada, 2009a). De plus, il y a des incohérences entre la documentation et les données des fiches techniques santé-sécurité (FTSS). Par exemple, alors que pour la substance analogue du bromure de tétraphénylphosphonium (n° CAS 2751-90-8), la FTSS indique qu'elle a une hydrosolubilité de 19 000 mg/L, une étude réalisée par Bergeron *et al.* (2009) au sujet de l'interaction des sels d'arylphosphonium avec de l'ADN

pour moduler la cytotoxicité a observé que le bromure de tétraphénylphosphonium était insoluble dans l'eau.

Une valeur corrigée de log K_{oe} de 4,15 a été obtenue pour le BPAF au moyen de la « méthode d'ajustement de la valeur expérimentale du modèle » KOWWIN, d'après une valeur expérimentale de log K_{oe} de 3,32 pour le bisphénol A (BPA) (n° CAS 80-05-7) (Howard, 1989; Hansch *et al.*, 1995). Toutefois, la valeur de log K_{oe} non corrigée, soit 4,47, a été utilisée dans une modélisation ultérieure telle que EPIWEB, afin de produire des prévisions prudentes pour la caractérisation des risques. Comme la question de l'ionisation pour le PTPTT est importante et qu'il y a peu d'approches pour y répondre, une approche préventive est utilisée dans l'évaluation.

Tableau 2. Propriétés physiques et chimiques du PTPTT, du BTP, du BPAF et des substances analogues

Substance	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
Forme physique				
Sel de PTPTT	N/D	Poudre blanche fine et inodore		MSDS Online, 2006 ¹
Sel de PTPTT	N/D	Boulettes de couleur rose à pourpre		DuPont, 2006a ²
Point de fusion (°C)				
PTPTT (forme neutre) ³	Modélisé	310,51		MPBPWIN, 2000
Nouvelle substance notifiée (analogue du sel de PTPTT) ⁴	Expérimental	207-208		Environnement Canada, 1999a
		230-234		Environnement Canada, 1999b
BPAF (forme neutre) ⁵	Expérimental	160-163		Sigma-Aldrich 2008 ⁶
		159-164		Halocarbon, 2007 ⁷
	Modélisé	125,78		MPBPWIN, 2000

Substance	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
BTP (forme neutre) ³	Modélisé	174,03		MPBPWIN, 2000
Point d'ébullition (°C)				
PTPTT (forme neutre) ³	Modélisé	690,34		MPBPWIN, 2000
Nouvelle substance notifiée (analogue du PTPTT) ⁴	Expérimental	> 300		Environnement Canada, 1999a
BPAF (forme neutre) ⁵	expérimental	400		Halocarbon, 2007 ⁷
	Modélisé	347,16		MPBPWIN, 2000
BTP (forme neutre) ³	Modélisé	469,38		MPBPWIN, 2000
Masse volumique (kg/m³)				
Sel de PTPTT	Expérimental	1 380		DuPont, 2006a ²
Sel de PTPTT	Expérimental	1 400		MSDS Online, 2006 ¹
Pression de vapeur (Pa)				
PTPTT (forme neutre) ³	Modélisé	1,63 x 10 ⁻¹⁵ (1,22 x 10 ⁻¹⁷ mmHg)	25	MPBPWIN, 2000
Nouvelle substance notifiée (analogue du sel de PTPTT) ⁴	Expérimental	0,01 (7,5 x 10 ⁻⁵ mmHg)		Environnement Canada, 1999a
BPAF (forme neutre) ⁵	Expérimental	< 13,33 (< 0,1 mmHg)		Halocarbon, 2007 ⁷

Substance	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
	Modélisé	$6,98 \times 10^{-5}$ ($5,23 \times 10^{-7}$ mmHg)		MPBPWIN, 2000
BTP (forme neutre) ³	Modélisé	$6,16 \times 10^{-7}$ ($4,62 \times 10^{-9}$ mmHg)		MPBPWIN, 2000
Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mol)				
BPAF (forme neutre) ⁵	Modélisé	$1,07 \times 10^{-2}$ ($1,06 \times 10^{-7}$ atm·m ³ /mol) ⁸		HENRYWIN, 2000
BTP (forme ionique) ³	Modélisé	$9,45 \times 10^{-5}$ ($9,33 \times 10^{-10}$ atm·m ³ /mol) ⁸		HENRYWIN, 2000
Log K_{oe} (coefficient de partage octanol-eau) (sans dimension)				
Nouvelle substance notifiée (analogue du sel de PTPTT) ⁴	Calculé	0,2 ⁹		Environnement Canada, 1999a
BPAF (forme neutre) ⁵	Modélisé	4,47		KOWWIN, 2000
		4,15 ¹⁰		KOWWIN, 2000
BPAF (forme ionique)	Modélisé	1,87		Cahill, 2008 ¹¹
BTP (forme neutre)	Modélisé	5,78 ¹²		KOWWIN, 2000
BTP (forme ionique)	Expérimental	2,6		Environnement Canada, 2009a ¹³

Substance	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
Nouvelle substance notifiée (cation de l'analogue du sel de PTPTT) ⁴	Modélisé	-0,04 ¹⁴		Environnement Canada, 1999a
Log K_{co} (coefficient de partage carbone organique-eau) (sans dimension)				
Nouvelle substance notifiée (analogue du PTPTT) ⁴	Expérimental	3,80 ¹⁵	20	Environnement Canada, 1999a
		4,35 ¹⁶	20	
		5,09 ¹⁷	20	
BPAF (forme neutre) ⁵	Modélisé	3,73		PCKOCWIN, 2000
BTP (forme neutre) ³	Modélisé	5,02 ¹²		PCKOCWIN, 2000
BTP (forme ionique) ³	Modélisé	2,26		PCKOCWIN, 2000
Solubilité dans l'eau (mg/L)				
Sel de PTPTT	Expérimental	Insoluble		DuPont, 2006a ²
	Expérimental	Négligeable		MSDS Online, 2006 ¹
	Expérimental	4,5		Environnement Canada, 2009a ¹³
Nouvelle substance notifiée (analogue du sel de PTPTT) ⁴	Expérimental	120 000		Environnement Canada, 1999a
	Expérimental	175 000		Environnement Canada, 1997
BPAF (forme neutre) ⁵	Modélisé	4,3		WSKOWWIN, 2000

Substance	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
		0,84		WATERNT, 2000-2008
		1,73 ¹⁸		WATERNT, 2000-2008
BTP (forme ionique)	Expérimental	2,31		Environnement Canada, 2009a ¹³
BTP (forme ionique) ³	Modélisé	35,06	25	WSKOWWIN, 2000
		2,43 x 10 ⁻⁴		WATERNT, 2000-2008
Solubilité dans le 1-octanol (mg/L)				
BTP (forme ionique)	Expérimental	919		Environnement Canada, 2009a ¹³
pKa (constante de dissociation) (sans dimension)				
BPAF (forme neutre) ⁵	Modélisé	pKa1 = 8,11		ACD/pKaDB (2005)
		pKa2 = 8,86		
BTP (forme ionique)	Modélisé	N/D ¹⁹		ACD/pKaDB (2005)

¹ Cette information fait référence au sel de PTPTT ayant une pureté < 99 % (n° CAS 75768-65-9) (MSDS Online, 2006).

² Cette information fait référence aux produits commerciaux « VITON » Curative 50 (VC-50), RCR-7325 et RCX 7325 (RCX-7325) qui contiennent 0 à 90 % de bisphénol AF (n° CAS 1478-61-1) et 10 à 100 % de sel de PTPTT (n° CAS 75768-65-9) (DuPont, 2006a).

³ Comme les composés du sel sortent du champ d'EPIWEB, la modélisation a été réalisée en supposant une structure covalente pour la paire d'ions. Les facteurs de correction, à savoir des données expérimentales liées à l'hydrosolubilité du PTPTT (4,5 mg/L) et du BTP (2,31 mg/L), ainsi qu'une valeur expérimentale de log K_{oc} (2,6) pour les deux substances, ont été ajoutés dans EPIWEB comme données d'entrée pour la forme neutre du PTPTT et du BTP, sauf mention contraire.

⁴ Les données liées à cette substance semblable sur le plan structurel ont été communiquées par l'intermédiaire du *Règlement sur les renseignements concernant les substances nouvelles*. L'identité de la substance est considérée comme un renseignement commercial confidentiel.

⁵ La fraction substantielle de l'anion de BPAF sera transformée en sa forme neutre dans l'environnement naturel. Dès lors, la forme neutre a été utilisée dans les activités de modélisation.

⁶ La pureté du BPAF (n° CAS 1478-61-1) est de 97 % Sigma-Aldrich 2008).

⁷ La pureté du BPAF (n° CAS 1478-61-1) n'est pas précisée (Halocarbon, 2007).

⁸ Ces constantes de la loi de Henry ont été estimées à l'aide de la méthode d'EPIWEB relative à la pression de vapeur et à l'hydrosolubilité.

- ⁹ La valeur de $\log K_{oc}$ a été déterminée à l'aide de l'hydrosolubilité (120 000 mg/L) et de la solubilité dans le n-octanol de la substance (Environnement Canada, 1999a).
- ¹⁰ Cette valeur a été modélisée à l'aide de la méthode d'ajustement de la valeur expérimentale du modèle KNOWWIN (2000), qui a estimé le $\log K_{oc}$ des substances d'après la valeur expérimentale du $\log K_{oc}$, soit 3,32, pour l'analogue bisphénol A (n° CAS 80-05-7) (Howard, 1989; Hansch *et al.*, 1995).
- ¹¹ Les modifications de la valeur de $\log K_{oc}$, qui était de 4,47 pour la substance neutre, sont fondées sur les valeurs des fragments et les changements des exemples de produits chimiques pendant l'ionisation (Cahill, 2008).
- ¹² Cette valeur a été estimée sans facteurs de correction.
- ¹³ La solubilité du sel de PTPTT dans l'octanol et dans l'eau ont été déterminées en employant une méthode par agitation en flacon à 20 °C pendant une période de 25 heures sur un PTPTT contenant de la substance commerciale ayant un excès d'anion de BPAF. Le $\log K_{oc}$ de la substance a ensuite été estimé en divisant la solubilité respective dans l'octanol et dans l'eau des substances (Environnement Canada, 2009a)
- ¹⁴ Le $\log K_{oc}$ a été déterminé avec EPIWEB en remplaçant un groupe azotique par le groupe phosphoreux dans le contre-ion triphényl neutre (Environnement Canada, 1999a).
- ¹⁵ $\log K_{co}$ pour le limon argileux à une température de 20 °C d'après la ligne directrice 106 de l'OCDE (Environnement Canada, 1999a)
- ¹⁶ $\log K_{co}$ pour le loam limoneux à une température de 20 °C d'après la ligne directrice 106 de l'OCDE (Environnement Canada, 1999a)
- ¹⁷ $\log K_{co}$ pour le sable loameux à une température de 20 °C d'après la ligne directrice 106 de l'OCDE (Environnement Canada, 1999a)
- ¹⁸ Cette valeur a été modélisée à l'aide de la méthode d'ajustement de la valeur expérimentale du modèle KNOWWIN (2000), qui a estimé l'hydrosolubilité des substances en fonction de la valeur de 301 mg/L relative à l'hydrosolubilité de l'analogue bisphénol A (n° CAS 80-05-7) (Bayer AG, 1988).
- ¹⁹ Les résultats de modélisation indiquent que le BTP en tant que cation ne s'ionise pas davantage dans l'eau; dès lors, le cation devrait exister dans l'eau tel quel (ACD/pK_aDB, 2005).

Sources

Le PTPTT et ses produits de dissociation ne sont pas produits naturellement dans l'environnement.

Des enquêtes menées auprès de l'industrie en 2005 et 2006 par le truchement d'avis publiés dans la *Gazette du Canada* conformément à l'article 71 de la LCPE (1999) ont permis de recueillir des renseignements récents (Canada, 2006b, 2009). Comme le précisaient ces avis, elles visaient à recueillir des données sur les quantités des substances fabriquées et importées au Canada. Dans l'avis de 2006, on demandait également de fournir des données sur les quantités de PTPTT utilisées.

Aucune activité de fabrication de PTPTT dans des quantités supérieures au seuil de 100 kg/an n'a été déclarée en réponse à l'avis d'enquête publié en application de l'article 71 de la LCPE (1999) pour l'année civile 2006. Pas moins de quatre entreprises ont importé entre 100 et 1 000 kg de PTPTT au Canada en 2006 (Environnement Canada, 2009b). Le PTPTT est importé sous la forme d'un préimprégné fluoroélastomère qui est ensuite polymérisé dans des installations de traitement des fluoroélastomères (Environnement Canada, 2009a). Quatre autres entreprises ont également manifesté un intérêt en qualité d'intervenants par rapport à cette substance.

Les renseignements obtenus en réponse à l'avis d'enquête publié en application de l'article 71 de la LCPE (1999) pour l'année civile 2005 indiquent qu'il n'y a eu aucune fabrication de PTPTT au Canada en 2005 dans des quantités supérieures au seuil de déclaration de 100 kg. Cependant, les renseignements issus de cet avis d'enquête ont indiqué qu'une entreprise avait importé entre 1 001 et 100 000 kg de PTPTT au Canada (Environnement Canada, 2006).

La quantité déclarée dans la Liste intérieure des substances (LIS) comme ayant été fabriquée, importée ou commercialisée au Canada pendant l'année civile 1986 pour le PTPTT allait de 1 000 à 10 000 kg. Il y a eu moins de quatre déclarants pour les années civiles 1984 à 1986.

Il semble que le volume des importations et le nombre d'utilisateurs de PTPTT aient été relativement stables au Canada durant ces dernières décennies, ou semblent diminuer. En effet, une entreprise qui a déclaré avoir importé du PTPTT en 2006 a déclaré en avoir importé moins en 2008.

Ailleurs, le PTPTT a été utilisé en Suède entre 1999 et 2007 (l'année la plus récente pour laquelle des données étaient disponibles) (SPIN, 2009). Néanmoins, les volumes d'utilisation ont été considérés comme des renseignements confidentiels (SPIN, 2009). Le PTPTT est une substance existante dans l'Union européenne, mais elle ne figure pas sur les listes de substances produites en grandes ou en petites quantités (ESIS, 2009). Les États-Unis ne recueillent pas de renseignements liés à la fabrication et à l'importation du PTPTT en vertu de l'*Inventory Update Rule* visé par la *Toxic Substances Control Act* (TSCA) (US EPA, 2009).

Utilisations

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

En 2006, une entreprise importatrice de PTPTT a inclus son activité commerciale dans la catégorie « Other Chemical and Allied Products Merchant Wholesalers » (grossistes-marchands d'autres produits chimiques et de produits apparentés). Cette entreprise a déclaré avoir commercialisé la substance comme un polymère composé (Environnement Canada, 2009b).

Une autre entreprise importatrice de PTPTT a répertorié les activités commerciales suivantes (Environnement Canada, 2009b) :

- « Tous les autres services de réparation et d'entretien de véhicules automobiles CAN »;
- « Ateliers automobiles de changement d'huile et de lubrification »;
- « Autres services de réparation et d'entretien de véhicules automobiles »;
- « Réparation et entretien de véhicules automobiles »;
- « Toutes les autres activités de soutien pour le transport »;
- « Transport des produits pétroliers raffinés par pipeline »;
- « Transport du gaz naturel par pipeline »;
- « Transport du pétrole brut par pipeline »;
- « Magasins de pièces et accessoires pour automobiles É.-U. »;
- « Magasins de pièces, d'accessoires et de pneus pour automobiles É.-U. »;
- « Grossistes-distributeurs de produits chimiques (sauf le domaine agricole) et de produits apparentés CAN »;
- « Grossistes-distributeurs de machines, matériel et fournitures pour l'extraction minière et l'exploitation pétrolière et gazière CAN »;
- « Fabrication de machines et de matériel pour l'exploitation pétrolière et gazière »;
- « Fabrication de tous les autres produits chimiques divers CAN »; et
- « Fabrication de tous les autres produits chimiques divers CAN »

L'entreprise qui a déclaré avoir importé du PTPTT en 2005 était engagée principalement dans la fabrication de produits chimiques organiques de base (Environnement Canada, 2006).

Les codes d'utilisation de la LIS indiqués pour le PTPTT pendant l'année civile 1986 étaient :

- 40 – Agent technologique; et
- 56 – Automobile, aéronef et navire

L'examen des renseignements scientifiques et techniques disponibles indique que le PTPTT est un catalyseur présent à de faibles concentrations (égales ou inférieures à 5 %)

dans les préimprégnés fluoroélastomères non traités (3M, 2007a, 2007b, 2008; Changshu Xinhua Chemical Co. Ltd., 2006; DuPont, 2006b, 2006c; Rhodia, 2008). Le PTPTT est un système de traitement intégré comprenant un accélérateur de traitement des cations de phosphonium organique (BTP) et un agent de réticulation (BPAF) qui améliore le rendement et la résistance des composés fluoroélastomères à l'issue du traitement de réticulation (Dupont, 2006d; KOECT, 2000). La réticulation est une réaction chimique utilisée dans le traitement du caoutchouc pour modifier les propriétés des polymères d'un composé en formant des liaisons covalentes, hydrogènes ou autres entre des molécules des polymères (Datta, 2001). Le traitement du PTPTT contenant du fluoroélastomère est un processus en deux étapes impliquant un apport de chaleur et de pression dans un moule pour façonner un article, suivi d'un cycle au four à haute température à la pression atmosphérique pour obtenir les propriétés de traitement finales (KOECT, 2000). La chimie de ce processus de traitement indique que le PTPTT réagit au niveau chimique avec la chaîne polymérique (KOECT, 2000) et on a rapporté que le PTPTT est, essentiellement, entièrement consommé à l'issue du traitement, étant donné que seules des quantités infimes de PTPTT (en ppb) resteront libres dans le polymère (courriel de la Direction des aliments de Santé Canada adressé au Bureau de gestion du risque de Santé Canada en novembre 2009; source non citée).

La classe de fluoroélastomères composée de caoutchouc synthétique est extrêmement résistante aux substances chimiques, au pétrole et à la chaleur, tout en ayant une durée de vie utile au-delà de 200 ° C (IISRP, 2009). Ces matières sont utilisées dans des produits appartenant à un large éventail d'applications de haute performance, par exemple les joints toriques dans les circuits d'alimentation, de lubrification et hydrauliques, les joints et cordes de soupape, les joints de queue de soupape de murs pare-feu, arbres et pneus, les joints toriques de tuyaux d'alimentation et d'injecteurs de carburant, les réservoirs de carburant, les diaphragmes et les joints d'étanchéité statique dans plusieurs industries, notamment l'industrie de l'aérospatiale et de l'automobile (IISRP, 2009). Par exemple, on trouve du PTPTT dans des joints toriques et des bouchons de valves en acier inoxydable utilisées pour l'échantillonnage sanitaire dans les systèmes de traitement biopharmaceutique (Millipore Corporation, 2008).

La United States Food and Drugs Administration (FDA) a également autorisé l'utilisation du PTPTT à une concentration de 1,9 % par poids comme agent de vulcanisation dans la fabrication des copolymères d'hexafluoropropylène et de tétrafluoroéthylène de fluorure de vinyle réglementés par le titre 21 du CFR 177.2600 destiné à l'utilisation dans la fabrication d'articles réutilisables à base de caoutchouc qui peuvent entrer en contact avec tous les types d'alimentation à des températures allant jusqu'à 250° F (US FDA, 2000).

Rejets dans l'environnement

D'après les renseignements reçus en réponse à un avis d'enquête en application de l'article 71 de la LCPE (1999) pour l'année 2006, les rejets de PTPTT associés à son importation dans des préimprégnés fluoroélastomères sont probablement très faibles (Environnement Canada, 2009a, 2009b). En effet, les préimprégnés fluoroélastomères sont importés sous une forme solide, par exemple des blocs, des dalles, des boulettes ou des feuilles (3M, 2007a, 2007b, 2008; Dupont, 2006b, 2006c). Ces formes solides contiennent habituellement de faibles niveaux ($\leq 5\%$) de PTPTT (3M, 2007a, 2007b, 2008; Changshu Xinhua Chemical Co Ltd., 2006 et DuPont 2006b, 2006c) incorporé dans une matrice de polymères fluorés hydrophobes qui limite vraisemblablement son potentiel de rejet dans l'environnement. On pense que le PTPTT est ensuite presque entièrement consommé (transformé) pendant le traitement des préimprégnés fluoroélastomères (KOETC, 2000; novembre 2009 courriel de la Direction des aliments de Santé Canada adressé au Bureau de gestion du risque de Santé Canada en 2009; source non citée).

Environnement Canada a mis sur pied une méthode pour estimer les pertes d'une substance pendant différentes étapes de son cycle de vie, y compris son devenir dans un produit ou un article fini (Environnement Canada, 2009c). Cette méthode, appelée le débit massique, consiste en une analyse du cycle de vie et un tableur (outil de débit massique) qui intègrent les renseignements disponibles sur la fabrication, l'importation et l'utilisation pour la substance. En commençant par une masse désignée de la substance, dans le commerce, la perte de la substance à chaque étape du cycle de vie est par la suite évaluée jusqu'à ce que la totalité de la masse soit comptabilisée. 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 fin de compte, les pertes estimées fournissent le premier volet de l'analyse de l'exposition à une substance et aident à estimer les rejets dans l'environnement et à mettre l'accent sur la caractérisation de l'exposition plus tard dans l'évaluation.

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) déversements 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 (p. ex. 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, des industries, ainsi qu'en fonction des données publiées par différents

organismes. Les pertes dans les eaux usées concernent les déversements des eaux usées brutes non traitées avant tout traitement, que ce soit un traitement des eaux usées industrielles sur place ou un traitement des eaux usées municipales hors site. De la même manière, les pertes par transformation chimique font référence aux modifications de l'identité de la substance qui ont lieu au cours des étapes de fabrication, d'utilisation industrielle ou d'utilisation commerciale et 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 pertes estimées pour le PTPTT au cours de son cycle de vie sont présentées au tableau 3 (Environnement Canada, 2009c).

Tableau 3. Estimations des pertes de PTPTT durant son cycle de vie

Type de perte	Proportion (%)	Étapes pertinentes du cycle de vie
Eaux usées	0,1	Utilisation à des fins industrielles
Émissions atmosphériques	0,0	s.o.
Sol	0,0	s.o.
Transformation chimique	99,8	Utilisation à des fins industrielles
Site d'enfouissement	0,1	Utilisation commerciale et par les consommateurs
Incinération	0,0	s.o.
Recyclage	0,0	s.o.

Les pertes importantes de PTPTT devraient survenir à l'étape de l'utilisation industrielle par la transformation chimique (99,8 %). Une très petite proportion devrait être perdue dans les eaux usées (0,1 %), dans le cadre des activités de séchage et de manutention des conteneurs. Une petite proportion de PTPTT devrait également être perdue suite à l'élimination des déchets (site d'enfouissement 0,1%)

Les pertes estimées pour le PTPTT indiquent que la substance présente un potentiel de rejets dans l'environnement. En général, les eaux usées constituent une source courante de rejets d'une substance dans l'eau en provenance des installations de traitement des eaux usées et dans le sol par l'épandage de biosolides provenant des eaux usées traitées à la surface du sol. Finalement, les décharges ont le potentiel de lixivier des substances dans la nappe phréatique s'il n'y a aucune doublure ou système de cueillette du lixiviat, ou il peut y avoir des rejets de substances dans l'atmosphère par l'intermédiaire des gaz d'enfouissement, s'ils ne sont pas recueillis et brûlés.

Devenir dans l'environnement

La très faible pression de vapeur modélisée de $1,6 \times 10^{-15}$ Pa du PTPTT, cohérente avec le fait qu'il s'agit d'une molécule large et complexe, indique que le PTPTT n'est pas volatil. Par conséquent, on ne trouvera pas cette substance dans l'atmosphère. Le PTPTT devrait se dissocier entièrement et rapidement en son cation de BTP et son anion de

BPAF lorsqu'il sera rejeté dans le milieu aquatique (Environnement Canada, 2009a). Étant donné qu'il ne convient pas d'utiliser les prévisions QSAR pour décrire le devenir du PTPPT dans l'environnement, car en tant que sel il ne devrait pas se dissocier complètement en solution, la discussion suivante porte principalement sur le devenir dans l'environnement de ces produits de dissociation.

En cas de rejet dans l'air, aucune quantité de BTP ne devrait demeurer dans ce milieu. La pression de vapeur modélisée de $6,16 \times 10^{-7}$ Pa et la constante de la loi de Henry de $9,451 \times 10^{-5}$ Pa m³/mol indiquent que le BTP n'est pas volatil. Par conséquent, s'il est uniquement rejeté dans l'air, il quittera ce milieu pour passer dans l'eau et le sol.

Les substances comme le BTP que l'on trouve dans la colonne d'eau se lieront activement aux matières organiques en suspension et seront tôt ou tard déposés dans les sédiments en raison de leur charge (Perdue, 1985). Si le BTP était rejeté dans l'eau, il devrait s'adsorber fortement sur les matières en suspension et les sédiments étant donné son interaction électrostatique avec les matières particulaires dissoutes et en suspension chargées négativement. La volatilisation à partir de la surface de l'eau devrait être un processus peu important de son devenir d'après la constante estimée de la loi de Henry. Ainsi, si l'eau est un milieu récepteur, le BTP devrait rester à la fois dans la colonne d'eau et dans les sédiments.

Si le BTP était rejeté dans le sol, son adsorption sur place devrait être élevée en raison de sa nature cationique. En effet, les essais relatifs à l'adsorption et à la désorption réalisés sur la substance analogue notifiée en vertu de la ligne directrice 106 de l'OCDE sur le limon argileux, le loam limoneux et le sable loameux à 20 °C ont déterminé que plus de 95 % de la substance étaient adsorbés sur les trois sols, avec une désorption inférieure à 5 % après deux lavages des sols (Environnement Canada, 1999a).

La volatilisation à partir des surfaces de sol humides serait un processus peu important dans le devenir de la substance d'après la constante estimée de la loi de Henry. En raison de sa pression de vapeur, cette substance chimique ne se volatiliserait pas à partir des surfaces de sol sèches. Par conséquent, si le BTP est rejeté dans le sol, il demeurerait principalement dans ce milieu naturel.

Pour l'anion du BPAF, la constante de dissociation acide modérément élevée (pK_{a1}) de 8,11 indique que l'anion sera en grande partie protoné vers sa forme neutre dans des conditions légèrement acides ou plus ou moins neutres. Dès lors, dans des plans d'eau aux pH compris entre 6 et 7, plus de 90 % du BPAF seront non dissociés, ce qui indique que l'exposition biotique au BPAF proviendra principalement de la substance chimique neutre. D'après ses propriétés physiques et chimiques (tableau 2), les prévisions du modèle plurispécifique de Cahill, qui est en mesure de traiter les substances ionisantes (Cahill, 2008; pH supposé de 7) indiquent qu'en cas de rejets continus dans l'environnement, on trouvera la substance principalement dans le sol, l'eau ou les sédiments, d'après la voie d'entrée.

Tableau 4. Résultats du modèle plurispécifique de Cahill pour le BPAF au pH 7 (Cahill, 2008)

Substance rejetée dans :	Pourcentage de la substance répartie dans chaque milieu			
	Air	Eau	Sol	Sédiments
l'air (100 %) - neutre	0,7	3,0	88	1,3
l'air (100 %) - anion	0,0	0,2	6,8	0,1
l'eau (100 %) - neutre	0,0	64	0,0	29
l'eau (100 %) - anion	0,0	5,0	0,0	2,2
le sol (100 %) - neutre	0,0	1,4	91	0,6
le sol (100 %) - anion	0,0	0,1	7,1	0,1

En cas de rejet dans l'air, une quantité négligeable de la substance sous sa forme neutre devrait demeurer dans l'air (voir le tableau 4 ci-dessus). D'après les valeurs modélisées négligeables de la pression de vapeur ($6,98 \times 10^{-5}$ Pa) et de la constante de la loi de Henry ($1,071 \times 10^{-2}$ Pa·m³/mol), le BPAF est non volatil. Par conséquent, s'il n'est rejeté que dans l'air, il quittera ce milieu et se répartira principalement dans le sol (88 % neutre et 6,8 % anionique; voir le tableau 4 ci-dessus).

Si le BPAF était rejeté dans l'eau, il devrait s'adsorber relativement fortement sur les matières en suspension et les sédiments selon les estimations des valeurs modérément élevées du log K_{co} , soit $\sim 3,73$. La volatilisation à partir de la surface de l'eau devrait être un processus peu important de son devenir d'après la constante estimée de la loi de Henry. Par conséquent, si l'eau était un milieu récepteur, le BPAF devrait surtout demeurer dans l'eau et se répartir dans les sédiments (voir le tableau 4b ci-dessus).

Si le BPAF était rejeté dans le sol, son adsorption sur place devrait être élevée (la substance devrait être immobile), d'après la valeur estimée du log K_{co} . La volatilisation à partir des surfaces de sol humides serait un processus peu important dans le devenir de cette substance d'après la constante estimée de la loi de Henry. En raison de sa pression de vapeur, cette substance chimique ne se volatiliserait pas à partir des surfaces de sol sèches. Par conséquent, si le BPAF est rejeté dans le sol, il demeurera principalement dans ce milieu naturel (voir le tableau 4 ci-dessus).

Au vu des propriétés physiques et chimiques du BTP et du BPAF (tableau 2) et de leurs utilisations potentielles, si ces substances sont rejetées dans l'environnement, elles devraient se trouver dans l'eau, les sédiments et le sol, d'après le milieu dans lequel elles seront rejetées.

Persistence et potentiel de bioaccumulation

Persistence dans l'environnement

Aucune donnée expérimentale sur la dégradation du PTPTT ou ses produits de dissociation n'a pu être recueillie. En raison de l'importance écologique du milieu aquatique, du fait que la plupart des modèles disponibles s'appliquent à l'eau et que le PTPTT devrait être rejeté dans ce milieu (Environnement Canada, 2009b) et se dissocier en BTP et BPAF, la persistance du BTP et du BPAF dans l'eau a principalement été examinée au moyen de modèles de biodégradation fondés sur des relations quantitatives structure-activité (RQSA). Ni le BTP, ni le BPAF ne contiennent de groupes fonctionnels pouvant subir une hydrolyse.

Les tableaux 5a et 5b résument les résultats des modèles de RQSA disponibles au sujet de la dégradation du BTP et du BPAF dans l'air et dans l'eau.

Tableau 5a. Données modélisées sur la dégradation du BTP (forme neutre)

Processus du devenir	Modèle et base du modèle	Résultat et prévision du modèle	Demi-vie extrapolée (jours)
AIR			
Oxydation atmosphérique	AOPWIN, 2000	$t_{1/2} = 0,92$ jour	< 2
Réaction avec l'ozone	AOPWIN, 2000	s.o. ¹	s.o.
EAU			
Hydrolyse	HYDROWIN, 2000	s.o. ¹	s.o.
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 3 : enquête d'expert (biodégradation ultime)	2,5040 ² « se biodégrade rapidement »	< 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 4 : enquête d'expert (biodégradation primaire)	3,3559 ² « se biodégrade rapidement »	< 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 5 : MITI probabilité linéaire	-0,2336 ³ « se biodégrade très lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 6 : MITI, probabilité non linéaire	0,0044 ³ « se biodégrade très lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	TOPKAT, 2004 Probabilité	s.o. ^{1,3}	s.o.
Biodégradation (aérobie)	CPOP, 2008 % DBO (demande biochimique en oxygène)	% DBO = 25,6 « se biodégrade lentement »	<182

¹ Le modèle ne précise pas d'estimation pour ce type de structure.

² Le résultat s'exprime par une valeur numérique de 0 à 5.

³ Le résultat s'exprime par un taux de probabilité.

Tableau 5b. Données modélisées sur la dégradation du BPAF (forme neutre)

Processus du devenir	Modèle et base du modèle	Résultat et prévision du modèle	Demi-vie extrapolée (jours)
Oxydation atmosphérique	AOPWIN, 2000	$t_{1/2} = 0,133$ jour	< 2
Réaction avec l'ozone	AOPWIN, 2000	s.o. ¹	s.o.
EAU			
Hydrolyse	HYDROWIN, 2000	s.o. ¹	s.o.
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 3 : enquête d'expert (biodégradation ultime)	1,3 ² « se biodégrade lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 4 : enquête d'expert (biodégradation primaire)	2,74 ² « se biodégrade relativement lentement »	> 182 (pour une complète minéralisation)
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 5 : MITI probabilité linéaire	0,08 ³ « se biodégrade très lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 6 : MITI, probabilité non linéaire	0,00 ³ « se biodégrade très lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	TOPKAT, 2004 Probabilité	0,00 ³ « se biodégrade très lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	CPOP, 2008 % DBO (demande biochimique en oxygène)	% DBO = 0,10 « se biodégrade très lentement »	>182

¹ Le modèle ne précise pas d'estimation pour ce type de structure.

² Le résultat s'exprime par une valeur numérique de 0 à 5.

³ Le résultat s'exprime par un taux de probabilité.

Le modèle canadien de POP relatif à la biodégradation aérobie considère que les structures du BTP (forme neutre) et du BPAF sont de 80,77 % et 95,65 % dans le domaine du modèle, respectivement. Dès lors, malgré une certaine incertitude, les résultats du modèle canadien de POP en matière de biodégradation sont jugés fiables pour les deux substances. TOPKAT n'a pas pu estimer la biodégradation aérobie du BTP, car il s'est avéré que la structure se trouvait en dehors du domaine du modèle. La prévision de TOPKAT pour le BPAF indique que bien que la substance chimique ne se trouve pas dans la base de données du modèle, tous les fragments de la structure sont couverts.

Dans l'air, la demi-vie prévue par oxydation atmosphérique de 0,92 jour (voir le tableau 5a ci-dessus) indique que le BTP devrait s'oxyder rapidement. Cette substance ne devrait pas réagir avec d'autres espèces photo-oxydantes dans l'atmosphère, notamment l'O₃, et elle ne devrait pas se dégrader par photolyse directe. Des réactions avec des radicaux hydroxyles devraient donc constituer le plus important processus régissant le

devenir du BTP dans l'atmosphère. Des résultats semblables sont observés pour le BPAF (voir le tableau 5b ci-dessous), qui devrait s'oxyder rapidement, comme l'illustre une valeur de demi-vie de 0,133 jour. Bien qu'on ne prévoie ni une réaction du BPAF avec l'O₃ ni sa dégradation par photolyse, une réaction avec des nitrates pourrait être un processus important dans son devenir (AOPWIN, 2000). Avec des demi-vies de 0,92 jour et de 133 jours respectivement par des réactions avec des radicaux hydroxyyles, on considère que le BTP (forme neutre) et le BPAF (forme neutre) ne sont pas persistants dans l'air.

Les résultats du modèle de biodégradation du BTP (forme neutre) sont conflictuels. Deux des modèles de biodégradation ultime sur les quatre (sous-modèles BIOWIN 5 et 6) semblent indiquer que la biodégradation est très lente et que la demi-vie dans l'eau est supérieure à 182 jours, tandis que les deux autres (modèle canadien de POP et sous-modèle BIOWIN 3) indiquent une demi-vie inférieure ou égale à 182 jours (Environnement Canada, 2009d). Les résultats du modèle de biodégradation primaire (sous-modèle BIOWIN 4) indiquent un potentiel de dégradation primaire rapide, mais comme l'identité des produits de dégradation est inconnue, on accorde moins de poids à ce résultat. Le résultat du sous-modèle BIOWIN 3 (biodégradation ultime) semble indiquer que la substance a une demi-vie primaire inférieure ou égale à 182 jours, mais que la dégradation pourrait prendre « des mois ». Par contre, les résultats issus des sous-modèles BIOWIN 5 et 6 se trouvent tous deux bien en dessous du seuil de persistance suggéré (moins de 0,3), ce qui laisse penser clairement que la substance est persistante. La prévision du modèle canadien de POP semble indiquer que le taux de biodégradation ultime est lent (demi-vie d'environ deux mois en supposant une cinétique de dégradation de premier ordre), mais que la biodégradation primaire est probablement importante d'après le DBO prévu supérieur à 20 % (seuil de persistance pour le modèle canadien de POP - Environnement Canada, 2009c). Dès lors, compte tenu de la force comparative des résultats des sous-modèles BIOWIN 5 et 6 indiquant une dégradation lente et du fait que les résultats du sous-modèle BIOWIN 3 et du modèle canadien de POP indiquent que la demi-vie de dégradation ultime du BTP pourrait durer « des mois », tout porte à croire que le taux de biodégradation ultime est lent et que le BTP est probablement persistant (demi-vie supérieure à 182 jours) dans l'eau.

Les résultats relatifs à la biodégradation du BPAF issus du tableau 5b montrent que les trois modèles de biodégradation ultime BIOWIN (3, 5 et 6) laissent penser que cette substance ne se biodégrade pas rapidement et que sa demi-vie dans l'eau est supérieure à 182 jours. Tous les résultats de probabilité sont en fait inférieurs à 0,3, ce qui est la limite suggérée par Aronson *et al.* (2006) relativement à l'identification des substances ayant une demi-vie de plus de 60 jours (basé sur les modèles de probabilité MITI). Le résultat du modèle de dégradation ultime (BIOWIN 3) de 1,33 pourrait correspondre à une valeur de demi-vie comprise entre 180 et 240 jours (Aronson *et al.*, 2006). La conclusion d'ensemble de BIOWIN (2000) est que le BPAF n'est pas immédiatement biodégradable. D'autres modèles de biodégradation ultime (CPOP et TOPKAT) prévoient que le BPAF ne subit pas, dans un délai de 28 jours, de minéralisation avec une probabilité ou une étendue de biodégradation dont les valeurs se situent dans la plage des produits chimiques biodégradables. TOPKAT, qui stimule l'essai de biodégradation japonais MITI

de 28 jours a estimé une probabilité de zéro (0), une valeur bien en dessous de la limite suggérée pour les substances persistantes dans ce modèle ($< 0,3$) (Remarque : 0,7 est la valeur suggérée pour les produits chimiques non persistants) (TOPKAT, 2004). Le modèle canadien de POP a prévu une étendue de biodégradation de seulement 0,1 % d'après l'essai de biodégradation immédiate de l'OCDE 301 (% DBO), ce qui semblerait indiquer que la substance est probablement persistante (Aronson et Howard, 1999) et que sa demi-vie dans l'eau est supérieure à 182 jours.

L'utilisation d'un rapport d'extrapolation de 1:1:4 pour obtenir une demi-vie de biodégradation dans l'eau:le sol:les sédiments (Boethling *et al.*, 1995), les demi-vies de biodégradation ultime dans le sol sont également supérieures à 182 jours, et les demi-vies dans les sédiments sont supérieures à 365 jours pour le BTP et le BPAF.

Dès lors, compte tenu de l'ensemble des résultats modélisés et des caractéristiques structurales (p. ex. la présence de groupes trifluorométhyles dans le BPAF et de noyaux aromatiques non substitués empêchant stériquement l'attaque du phosphore dans le BTP, il existe des preuves plus fiables pour laisser penser que les demi-vies de biodégradation des produits de dissociation du PTPTT sont supérieures à 182 jours dans l'eau².

D'après les données modélisées (voir les tableaux 4a et 4b ci-dessus), les produits de dissociation du PTPTT, à savoir le BTP et le BPAF, répondent aux critères de la persistance dans l'eau, le sol et les sédiments (demi-vies dans le sol et l'eau ≥ 182 jours et demi-vie dans les sédiments ≥ 365 jours), mais ils ne répondent pas aux critères de la persistance dans l'air (demi-vie dans l'air ≥ 2 jours) énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Potentiel de bioaccumulation

Les valeurs expérimentales du log K_{oe} du BTP laissent croire que cette substance chimique a un potentiel de bioaccumulation relativement faible dans le biote (voir le tableau 2). Cependant, la valeur modélisée élevée du log K_{oe} pour l'autre produit de dissociation, le BPAF, semble indiquer que le potentiel de bioaccumulation de cette substance est plus élevé dans le biote.

Comme aucune donnée expérimentale sur les facteurs de bioaccumulation (FBA) ou de bioconcentration (FBC) n'est disponible pour les produits de dissociation du PTPTT, une méthode prédictive a été appliquée au moyen des modèles de FBA et de FBC disponibles indiqués dans les tableaux 6a et 6b ci-dessous. Selon le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000), une substance est bioaccumulative si son FBC ou son FBA est supérieur ou égal à 5 000. Les mesures des FBA constituent la méthode privilégiée pour évaluer le potentiel de bioaccumulation des substances, et ce, parce que les FBC ne tiennent pas suffisamment compte du potentiel de bioaccumulation des

² Il est à noter que les données empiriques issues de l'essai de biodégradation rapide en 28 jours sont de 1,5 % (MITI).

substances par l'alimentation, qui prédomine pour des substances ayant un $\log K_{oe}$ supérieur à $\sim 4,0$ (Arnot et Gobas, 2003). La modélisation cinétique du bilan massique devrait constituer la méthode de prévision la plus fiable pour déterminer le potentiel de bioaccumulation, car elle permet une correction du métabolisme dans la mesure où le $\log K_{oe}$ de la substance se trouve dans le domaine du $\log K_{oe}$ du modèle.

Il est à noter que le potentiel de bioaccumulation du BTP pourrait ne pas être estimé de façon précise en évaluant uniquement ses facteurs de bioconcentration et de bioaccumulation estimés en fonction du $\log K_{oe}$. En effet, les sels d'arylphosphonium ont une nature à la fois lipophile et cationique, ce qui leur assure un transport par les membranes plasmiques ou les parois cellulaires pour s'accumuler dans le cytoplasme ou la mitochondrie de cellules et se lier à l'ADN (Bergeron *et al.*, 2009). Par exemple, on sait que les cations lipophiles tels que le cation de la substance analogue du bromure de phosphonium-méthyltriphenyl (n° CAS 1779-49-3) s'accumulent dans la mitochondrie et les cellules (Ross *et al.*, 2006). Leur cationicité provoque leur attraction vers les parois cellulaires ou les bicouches lipidiques avec des potentiels énergétiques négatifs, tandis que leur nature lipophile (≥ 3 noyaux aromatiques) permet un transport aisé par la membrane pour s'accumuler dans l'intérieur des cellules ou des milieux cellulaires (Bergeron *et al.*, 2009). La structure du cation tétrasubstitué est relativement stable pour les modifications chimiques ultérieures une fois dans l'organisme (Bergeron *et al.*, 2009).

Néanmoins, la structure chimique stériquement encombrée du BTP pourrait avoir des effets négatifs sur sa cationicité. En effet, dans le cas de la substance analogue du bromure de tétraphénylphosphonium (TPP-Br, n° CAS 2751-90-8), on a montré que l'association électrostatique avec un ADN chargé négativement pouvait diminuer en présence des quatre grands cycles phényles, qui peuvent obscurcir partiellement sa nature cationique (Bergeron *et al.*, 2009). Le manque d'hydrosolubilité du bromure de tétraphénylphosphonium semble renforcer cette hypothèse (Bergeron *et al.*, 2009).

Le nouveau modèle BCFBAF, version 3.00, d'EPIWEB (2009) a été utilisé pour estimer le taux de biotransformation primaire du corps entier (k_M), les facteurs de bioconcentration (FBC) et les facteurs de bioaccumulation (FBA) pour les poissons, pour le BTP et le BPAF. On a estimé des taux métaboliques de 4,172/jour et de 0,3584/jour pour le BTP (forme neutre) et le BPAF (forme neutre), respectivement, pour un poisson générique de 10 grammes à une température de 15 ° C; ces valeurs ont ensuite été corrigées, dans le modèle Arnot-Gobas, en fonction du poids corporel de poissons de niveau trophique intermédiaire (184 g). Des poissons de niveau trophique intermédiaire ont été utilisés pour représenter les sorties globales du modèle, car, en raison de leur poids, ils représentent davantage les poissons susceptibles d'être consommés par des piscivores aviaires ou terrestres.

Tableau 6a. Prévisions des FBA et des FBC chez les poissons pour le BTP et le BPAF au moyen du modèle cinétique Arnot-Gobas (2003) corrigé en fonction du taux métabolique

Substance	Constante du taux métabolique k_M (1/jour) ¹	Log K_{oe} utilisé	FBC (L/kg)	FBA (L/kg)	Demi-vie biologique $t_{1/2}$ (jours)	Référence
BTP (forme ionique) (n° CAS 15853-35-7)	4,172	2,6	21,13	21,13	0,34	Niveau trophique moyen du FBA/FBC de Gobas (Arnot et Gobas, 2003)
	0	2,6	28,2	28,8	0,12	
BPAF (forme neutre) (n° CAS 1478-61-1)	0,3584	4,47	715,6	742,7	4,00	Niveau trophique moyen du FBA/FBC de Gobas (Arnot et Gobas, 2003)
	0	4,47	1 995	3 981	7,4	

¹ Constante du taux métabolique (k_M) (1/jour) pour un poisson de 10 grammes

² Demi-vie ($t_{1/2}$) calculée à l'aide de l'équation suivante : $t_{1/2} = \ln 2 / k_M$. Si $k_M = 0$, la demi-vie est calculée sur la base de la somme d'autres constantes du taux utilisées pour la perte de composés par poisson (matière fécale, pertes par les branchies, dilution attribuable à la croissance).

Les valeurs des FBC du BTP (forme ionique) et du BPAF (forme neutre) corrigées en fonction du métabolisme étaient de 21,13 L/kg et de 715,6 L/kg respectivement. Les valeurs des FBA des mêmes substances, corrigées en fonction du métabolisme, étaient de 21,13 L/kg et de 742,7 L/kg. Leurs demi-vies biologiques respectives normalisées pour un poisson de 10 grammes à 15 °C étaient d'environ 4 heures et 46,4 heures.

Tableau 6b : Données modélisées supplémentaires sur la bioaccumulation du BTP et du BPAF (forme neutre)

Substance	Log K _{oe} utilisé	Organisme d'essai	Paramètre	Valeur (poids humide en L/kg)	Référence
BTP (forme ionique)	2,6	Poisson	FBC	35,65 ± 2,7	OASIS Forecast, 2005
		Poisson	FBC	96,2	Modèle du FBC de base (FBC max.) Dimitrov <i>et al.</i> , 2005
		Poisson	FBC	24	BCFWIN, 2000
BPAF (forme neutre)	4,47	Poisson	FBC	11,59 ± 189,23	OASIS Forecast, 2005
		Poisson	FBC	2188	Modèle du FBC de base (FBC max.) Dimitrov <i>et al.</i> , 2005
		Poisson	FBC	416	BCFWIN, 2000

Certaines des valeurs modélisées du BTP (forme ionique) et du BPAF (forme neutre) figurant dans le tableau 6b (OASIS Forecast, 2005; modèle du FBC de base) se trouvent en dehors du domaine total du modèle et on estime donc qu'elles ne sont pas aussi fiables que d'autres prévisions.

Les preuves disponibles indiquent que les produits de dissociation du PTPTT devraient avoir des potentiels de bioaccumulation faibles. Par conséquent, en considérant les données disponibles, les produits de dissociation du PTPTT - le BTP et le BPAF - ne répondent pas aux critères de bioaccumulation (FBC ou FBA $\geq 5\ 000$) énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Potentiel d'effets nocifs sur l'environnement

Évaluation des effets sur l'environnement

A - Dans le milieu aquatique

Il existe des preuves expérimentales confirmant que la forme neutre du BPAF nuit aux organismes aquatiques à des concentrations relativement faibles (CL/CE₅₀ aiguë égale ou supérieure à 1,0 mg/L; voir le tableau 7a ci-dessous).

Tableau 7a. Données empiriques sur la toxicité aquatique

Substance	Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
BPAF	Poisson	Toxicité aiguë (96 heures)	CL ₅₀ ¹	< 1	Présentation d'étude Environnement Canada, 2007
	<i>Daphnie</i>	Toxicité aiguë (48 heures)	CE ₅₀ ²	3,2	Présentation d'étude Environnement Canada, 2007
	Algues	Toxicité aiguë (72 heures)	CE ₅₀ ²	0,156 ³ > 0,808 ⁴	Présentation d'étude Environnement Canada, 2007

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

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

³ L'effet mesuré est l'inhibition du rendement.

⁴ L'effet mesuré est l'inhibition du taux de croissance.

Étant donné qu'aucune donnée expérimentale acceptable n'est disponible concernant la toxicité aquatique de cette substance, des données modélisées ont été utilisées pour estimer la toxicité aquatique potentielle du BTP. Des données modélisées supplémentaires ont également été utilisées pour soutenir les données relatives à la toxicité aquatique expérimentale du BPAF. Le tableau 7b présente les prévisions d'écotoxicité qui ont été jugées fiables et qui ont été utilisées avec la méthode du poids de la preuve reposant sur des RQSA pour la toxicité aquatique (Environnement Canada, 2007). Les paramètres d'entrée utilisés pour la modélisation de l'écotoxicité sont présentés à l'annexe II.

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

Substances	Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
BTP (forme ionique)	Poisson	Toxicité aiguë (96 h)	CL501	813	ECOSAR, 20044
				20,84	AIEPS 2003–2007
		Toxicité aiguë (14 jours)	CL501	82,73	ECOSAR, 20044
		Toxicité chronique (30 jours)	ChV5	8,785	
	Daphnia	Toxicité aiguë (48 h)	CL501	49,93	ECOSAR, 20044
		Toxicité chronique	ChV5	6,364	
	Algues	Toxicité aiguë (96 h)	CE502	30,73	ECOSAR, 20044
		Toxicité chronique	ChV5	12,984	
BPAF (forme neutre)	Poisson	Toxicité aiguë (96 h)	CL501	1,129	ECOSAR, 2004
				0,245	OASIS Forecast, 2005
				7,94	AIEPS 2003–2007
		Toxicité chronique (30 jours)	ChV5	0,228	ECOSAR, 2004
	Daphnia	Toxicité aiguë (96 h)	CE502	1,624	ECOSAR, 2004
				0,810	TOPKAT, 2004
		Toxicité chronique	ChV5	0,571	ECOSAR, 2004
	Algues	Toxicité aiguë (96 h)	CE502	1,726	ECOSAR, 2004
		Toxicité chronique	ChV5	0,198	

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

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

³ Aucun effet à saturation n'est prévu pour cet organisme, étant donné que la valeur de toxicité est dix fois supérieure à la valeur de l'hydrosolubilité de 2,3 mg/L du BTP (Environnement Canada, 2009b) (ECOSAR, 2004).

⁴ Les valeurs expérimentales de l'hydrosolubilité de 2,31 mg/L et de log K_{oc} de 2,6 (Environnement Canada, 2009b) ont été ajoutées à ECOSAR.

⁵ Vtc - Valeur de toxicité chronique (ECOSAR, 2004)

Une gamme de prévisions de la toxicité aquatique a été obtenue à l'aide de modèles RQSA. Ces résultats indiquent que la forme ionique du BTP est modérément toxique pour les organismes aquatiques et que la forme neutre du BPAF pourrait être très dangereuse pour les organismes aquatiques (CL/CE₅₀ aiguë égale ou supérieure à 1,0 mg/L).

B - Dans d'autres milieux naturels

Bien qu'on n'ait trouvé aucune étude expérimentale acceptable sur les effets sur l'environnement du PTPTT, du BTP et du BPAF dans des organismes entiers, certains travaux sont disponibles au sujet de l'effet du BTP et du BPAF dans des lignées cellulaires de mammifères.

La capacité du BTP à s'accumuler dans le cytoplasme ou la mitochondrie des cellules de mammifères dans lesquelles il sera probablement persistant et pourra créer une liaison avec l'ADN a été notée précédemment (Bergeron *et al.*, 2009).

À la suite d'études sur des poissons, des invertébrés aquatiques, des amphibiens et des reptiles, on a relevé des preuves de perturbation des processus de reproduction et de développement découlant d'une exposition au bisphénol A (BPA), une substance analogue du BPAF (NTP, 2008), à des concentrations inférieures à celles provoquant des effets aigus (Canada, 2008). Même s'il y a une très grande variation dans les niveaux déclarés qui donnent lieu à des effets reliés aux hormones en raison de la présence de BPA dans des organismes aquatiques, de nombreuses valeurs se retrouvent dans la plage de 0,001 à 1 mg/L. Bien qu'aucune étude relative auxdits effets sur la faune ne soit disponible pour le BPAF, les activités perturbatrices du système endocrinien causées par le BPAF, le bisphénol A et 17 composés apparentés ont été examinées par différents tests *in vitro* et *in vivo* utilisant un gène rapporteur (Kitamura *et al.*, 2005). Les activités perturbatrices du système endocrinien des substances ont été examinées au moyen de tests réagissant aux hormones et utilisant un gène rapporteur : la lignée cellulaire MCF-7 du cancer du sein chez la femme pour l'activité œstrogénique, la lignée cellulaire NIH3T3 du fibroblaste chez la souris pour l'activité androgène, et la lignée cellulaire GH3 de l'hypophyse pour l'activité hormonale thyroïdienne (Kitamura *et al.*, 2005). Les résultats indiquent que le BPAF a montré une activité œstrogénique plus importante (CE₅₀ de 0,05 µM, soit 1,68 x 10⁻² mg/L) que celle du bisphénol A (CE₅₀ de 0,63 µM). En outre, le BPAF a montré une inhibition importante de l'activité androgène de la dihydrotestostérone dans le test relatif à la lignée cellulaire NIH3T3 utilisant comme rapporteur la luciférase, comme le prouve une CI₅₀ de 1,3 µM (0,437 mg/L) par rapport à

une CI_{50} de 4,3 μm pour le bisphénol A (Kitamura *et al.*, 2005). Toutefois, à l'instar du BPA, le BPAF n'a pas entravé l'activité thyroïdienne.

Un profil composé de l'information chimique du BPAF diffusé par le *National Toxicology Program* (NTP) en 2008 indique que le BPAF était un agoniste de l'œstrogène (liaisons avec des récepteurs des œstrogènes) dans les 10 études évaluées, un antagoniste (ou une substance sans effet) sur l'androgène dans une étude, et un antagoniste (ou une substance sans effet) sur la thyroïde dans une autre étude (NTP, 2008).

Il est prouvé que le BPAF provoque une perturbation du système endocrinien. Davantage d'études sont nécessaires pour déterminer ces effets sur la faune dans l'environnement.

Évaluation de l'exposition de l'environnement

Rejets industriels

L'exposition aquatique du PTPTT est prévue si la substance est rejetée par les utilisations industrielles vers une usine de traitement des eaux usées et que l'usine évacue son effluent dans des eaux réceptrices. La concentration de la substance, ou dans le présent cas de ses produits de dissociation, dans les eaux réceptrices près du point de rejet de l'usine de traitement des eaux usées est utilisée comme la concentration environnementale estimée (CEE) dans l'évaluation du risque que pose chaque produit de dissociation en milieu aquatique. On peut la calculer à l'aide de l'équation

$$C_{\text{eau-ind.}} = \frac{1000 \times Q \times L \times (1 - R)}{N \times F \times D}$$

où

$C_{\text{eau-ind.}}$:	concentration en milieu aquatique due aux rejets industriels, en mg/L
Q :	quantité de substance totale utilisée chaque année sur un site industriel, en kg/an
L :	pertes dans les eaux usées, fraction
R :	taux d'élimination de l'usine de traitement des eaux usées, fraction
N :	nombre de jours de rejets annuels, en j/an
F :	débit de l'effluent de l'usine de traitement des eaux usées, m^3/j
D :	facteur de dilution dans l'eau réceptrice, sans dimension

Comme le PTPTT est utilisé dans des installations industrielles avec le potentiel de rejet dans l'eau, un scénario de rejet industriel selon la pire éventualité sert à estimer la concentration en milieu aquatique des produits de dissociation de la substance. Le scénario est prudent, c'est-à-dire qu'il laisse entendre que la limite supérieure de l'intervalle de quantité des renseignements commerciaux confidentiels (RCC), à savoir 1 000 kg de PTPTT/an, est utilisée par une seule installation industrielle sur un petit site

hypothétique et les pertes dans les égouts sont de 0,1 % de la quantité totale découlant du nettoyage des résidus de contenants et d'équipement de traitement tous deux en une forme solide. Le scénario présume également que les rejets se produisent 250 jours par an, habituellement pour les petites et moyennes installations, et qu'ils sont envoyés dans une usine de traitement des eaux usées avec un taux d'élimination de zéro pour la substance. Au Canada, les eaux réceptrices sur un site aussi petit ont normalement une capacité de dilution de dix fois pour les effluents de l'usine de traitement des eaux usées, ce qui équivaut à 3 456 m³/jour (Environnement Canada, 2009d). Comme le PTPTT peut se dissocier entièrement et rapidement lorsqu'il est rejeté dans l'environnement aquatique, le scénario prudent suppose une dissociation totale du PTPTT en 5,13 mass% de BTP et 48,7 mass% de BPAF. D'après les hypothèses susmentionnées, 0,1% rejet de 1000 kg par année de PTPTT et engendre des concentrations dans l'eau de 5,94 x 10⁻⁵ mg/L pour le BTP et de 5,64 x 10⁻⁵ mg/L pour le BPAF

Caractérisation des risques pour l'environnement

La démarche suivie dans cette évaluation écologique préalable consistait à examiner les divers renseignements pertinents et à tirer des conclusions suivant la méthode du poids de la preuve et le principe de prudence requis par la LCPE (1999). Les éléments de preuve pris en compte comprenaient les résultats de calculs prudents du quotient de risque ainsi que des renseignements sur la persistance, la bioaccumulation, la toxicité, les sources et le devenir de la substance.

Lorsque le PTPTT entrera en contact avec la phase aqueuse, il se dissoudra et se dissociera en une mole de BTP et une mole de BPAF. Les deux produits de dissociation devraient être persistants dans l'eau, le sol et les sédiments, mais ils devraient avoir un potentiel de bioaccumulation faible à modéré. Le faible volume d'importation du composé d'origine du PTPTT au Canada, ainsi que les renseignements relatifs à son utilisation comme accélérateur de vulcanisation, indiquent un faible potentiel de rejets attribuables à des sources ponctuelles dans l'environnement canadien (0,2 % de la masse) (Environnement Canada, 2009c). Une fois cette substance rejetée dans les eaux de surface, on la trouvera essentiellement dans la colonne d'eau et les sédiments. Il a été démontré que les produits de dissociation ont un potentiel de toxicité modéré à élevé pour les organismes aquatiques.

Une analyse du quotient de risque, intégrant des estimations prudentes de l'exposition aux renseignements liés à la substance, a été réalisée pour le milieu aquatique, afin de déterminer si la substance pourrait avoir des effets nocifs sur l'environnement au Canada. Le scénario industriel générique présenté ci-dessus a suscité des concentrations environnementales estimées (CEE) de 5,94 x 10⁻⁵ mg/L pour le BTP et de 5,64 x 10⁻⁵ mg/L pour le BPAF (Environnement Canada, 2009e et 2009f, respectivement). Une concentration estimée sans effet (CESE) pour le BTP a été obtenue à partir de la valeur de toxicité aiguë de 6,36 mg/L pour la daphnie (ECOSAR, 2004) en divisant cette valeur par un facteur d'évaluation de 10 (pour tenir compte de la variabilité interspécifique et intraspécifique de la sensibilité et l'extrapolation des données modélisées aux données sur

le terrain), pour produire une valeur de 0,63 mg/L. Le quotient de risque obtenu (CEE/CESE) = $9,4 \times 10^{-5}$.

Une deuxième CESE a été obtenue pour le BPAF (forme neutre) à partir de la valeur expérimentale de la CE_{50} aiguë après 72 heures, soit 0,156, pour les algues (Études soumises en 2007) en divisant également cette valeur par un facteur d'évaluation identique de 100 (pour tenir compte de la variabilité interspécifique et intraspécifique de la sensibilité, de la toxicité aiguë et chronique et des données de laboratoire aux données sur le terrain), pour donner une valeur de $1,56 \times 10^{-3}$ mg/L. Le quotient de risque obtenu (CEE/CESE) = 0,03613.

Ces renseignements révèlent que le PTPTT ne peut pas causer d'effets écologiques nocifs au Canada.

Incertitudes dans l'évaluation des risques pour l'environnement

Il existe des incertitudes dans cette évaluation des risques en raison d'un manque de données sur les propriétés physiques et chimiques du PTPTT, notamment la portée de sa dissociation dans l'eau. Cependant, d'après les preuves expérimentales, une hypothèse de la dissociation totale de la substance à des pH pertinents du point de vue environnemental a été utilisée, et l'évaluation était axée sur le risque associé aux produits de dissociation du PTPTT, le BTP et le BPAF.

Le manque général de données expérimentales sur les propriétés physiques et chimiques propres aux produits de dissociation, notamment l'hydrosolubilité du BPAF et l'absence de coefficients de partage octanol-eau et carbone-eau pour les deux substances, constitue une source d'incertitude pour cette évaluation. Toutefois, des méthodes déduites à partir d'analogues, des données analogues et des données modélisées (y compris les valeurs modélisées à l'aide de la méthode d'ajustement de la valeur expérimentale d'EPIWEB, 2009) ont été utilisées pour déterminer des données prudentes sur les propriétés physiques et chimiques qui ont ensuite été utilisées pour une autre modélisation.

Comme les modèles des RQSA ne sont pas en mesure de représenter les composé ioniques ou chargés tels que le sel de PTPTT ou le cation du BTP, des structures neutres ont été utilisées pour obtenir des prévisions modélisées. Même s'il subsiste des doutes concernant les prévisions, elles sont jugées représentatives étant donné que la structure chimique stériquement encombrée du BTP semble avoir des effets négatifs sur sa cationicité, comme l'illustrent ses propriétés physiques et chimiques.

De plus, en ce qui concerne l'écotoxicité, le comportement de répartition prévu de ce produit chimique montre que les données disponibles sur les effets ne permettent pas d'évaluer comme il se doit l'importance du sol et des sédiments comme milieu d'exposition. En effet, la plupart des données relatives aux effets déterminés du BPAF et toutes les données relatives aux effets du BTP ont été estimées à partir de modèles et elles s'appliquent principalement aux expositions aquatiques pélagiques, bien que la colonne

d'eau ne soit peut-être pas le seul moyen préoccupant, d'après les estimations relatives à la répartition.

Des doutes subsistent dans la caractérisation du risque associé au potentiel de dérèglement endocrinien du BPAF. Bien qu'il existe des preuves selon lesquelles les BPAF provoquent des dérèglements endocriniens, il faut plus de données empiriques pour bien évaluer les risques associés à ce potentiel. Comme on a constaté que le BPAF répondait aux critères de la catégorisation écologique relatifs à la persistance et à la toxicité intrinsèque pour les organismes non humains et semble être commercialisé au Canada au moment de la caractérisation, il fera l'objet d'une évaluation plus approfondie des risques.

Potentiel d'effets nocifs sur la santé humaine

Évaluation de l'exposition

Aucune donnée documentaire n'a été relevée dans la documentation pour le PTPTT dans l'air, l'eau, le sol ou les sédiments, au Canada ou ailleurs. En raison de la quantité limitée de PTPTT importée chaque année au Canada, la forme sous laquelle cette substance est importée et son utilisation, les concentrations rejetées dans les milieux naturels, surtout l'eau, devraient être très faibles (c'est-à-dire moins d'un kilogramme par an).

Le PTPTT est utilisé comme agent de traitement dans certains fluoroélastomères précis, notamment les pièces à utilisation répétée telles que les joints d'étanchéité, les joints toriques et les valves pour le matériel de traitement des aliments (courriel de la Direction des aliments de Santé Canada adressé au Bureau de gestion du risque de Santé Canada en novembre 2009; source non citée). Pendant le traitement des préimprégnés fluoroélastomères, le PTPTT réagit au niveau chimique avec la chaîne polymérique et il est presque entièrement consommé (transformé). Les résidus demeurant dans le produit manufacturé final ne devraient subsister qu'en d'infimes quantités; par conséquent, les expositions issues de l'utilisation de ces produits devraient être négligeables.

La confiance générale dans la caractérisation de l'exposition pour les expositions dans l'environnement, l'alimentation et les produits de consommation est jugée faible en raison du manque de données expérimentales. Néanmoins, une certaine incertitude est associée à l'exposition au PTPTT par l'intermédiaire de ces sources, étant donné que la quantité importée au Canada est très faible et que les résidus dans les produits devraient être très faibles, les expositions par ces sources devraient être négligeables. Puisque la quantité de PTPTT qui pourrait être rejetée dans l'eau annuellement est très faible (< 1 kg), l'exposition à l'un ou l'autre des produits de dissociation devrait être négligeable. Ces produits n'ont donc pas été pris en compte dans l'évaluation préalable des effets sur la santé humaine.

Évaluation des effets sur la santé

Seules des données toxicologiques empiriques limitées sont disponibles pour le PTPTT. Aucune preuve de mutagénicité n'a été observée sur les souches TA98, TA100, TA1537 et TA1538 du *Salmonella typhimurium* exposées au PTPTT avec ou sans activation métabolique (Environnement Canada, 2009a). La toxicité aiguë est faible, avec une DL₅₀ de 4 385 mg/kg chez les rats (Environnement Canada, 2009a). Les résultats des modèles de prévision, résumés à l'annexe 2, ont également été pris en considération au moyen de quatre modèles différents, à savoir DEREK, TOPKAT, CASETTOX et Leadscope Model Applier. Les prévisions obtenues relativement à la cancérogénicité, à la génotoxicité, ainsi qu'à la toxicité pour le développement et la toxicité pour la reproduction étaient

majoritairement négatives (DEREK, 2008; TOPKAT, 2008; CASETOX, 2008; Leadscope, 2009). Le niveau de confiance à l'égard de la base de données toxicologiques est réputé faible en raison des données disponibles limitées pour le PTPTT.

Caractérisation du risque pour la santé humaine

Il est possible que la population générale soit exposée au PTPTT par les aliments (c'est-à-dire par son utilisation dans l'équipement de traitement des aliments) et d'autres produits de consommation; cependant, en raison de la quantité limitée de PTPTT importée au Canada et des niveaux résiduels très faibles dans ces produits, ces expositions devraient être négligeables.

Les données toxicologiques disponibles relatives au PTPTT sont limitées; cependant, les données empiriques disponibles et l'information issue des modèles de prévision n'indiquent pas un risque élevé.

Puisque l'exposition de la population générale au Canada devrait être négligeable, le risque pour la santé humaine est considéré comme faible.

Incertitudes de l'évaluation des risques pour la santé humaine

En raison du nombre limité de données disponibles pour le PTPTT, le niveau de confiance à l'égard de l'ensemble des données toxicologiques est jugé faible. Cependant, les données empiriques et l'information issues des modèles de prévision n'indiquent pas un risque élevé.

La confiance générale dans la caractérisation de l'exposition pour les expositions dans l'environnement, l'alimentation et les produits de consommation est jugée faible en raison du manque de données expérimentales. Une certaine incertitude est associée à l'exposition au PTPTT par l'intermédiaire de ces sources. Toutefois, étant donné que la quantité importée au Canada est très faible et que les résidus dans les produits devraient être très faibles, les expositions par ces sources devraient être négligeables.

Conclusion

D'après les renseignements présentés dans la présente évaluation préalable, il est conclu que le PTPTT ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité, à une concentration ou dans des conditions de nature à avoir ou à pouvoir avoir, immédiatement ou à long terme, un effet nocif sur l'environnement ou sur sa diversité biologique, ni à constituer ou pouvoir constituer un danger pour l'environnement essentiel pour la vie.

De plus, d'après les résultats issus des produits de dissociation de cette substance (BPT et BPAF), le PTPTT répond aux critères de la persistance, mais il ne répond pas aux critères de potentiel de bioaccumulation énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Il est aussi conclu que le PTPTT ne pénètre pas dans l'environnement en quantité, à des concentrations ou dans des conditions qui constituent ou peuvent constituer un risque pour la vie ou la santé humaine au Canada.

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

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

Références

3M. 2007a. Fiche signalétique : 3M FKM Pre-Compound FC-2174 [en ligne], Oakdale (MN). [consultée le 11 août 2009]. Accès :

http://multimedia.3m.com/mws/mediawebserver?66666UtN&ZUxL99X4XMtNxvLVu9KcuZgVU_LXT1u666666--

3M. 2007b. Fiche signalétique : Dyneon™ Fluoroelastomers FC-2100 Series, FC-3009J, FE-5730, FE 5730P, FE-5731Q, FT-2320, FT-2340Q, FT 2350, FX-2177A, FX-3725, FX-3800, FX-9038, FX-9143, FX-9194, FX-11818, MIP 8640X [en ligne], Oakdale (MN). [consultée le 11 août 2009]. Accès :

http://multimedia.3m.com/mws/mediawebserver?66666UtN&ZUxL99X4X&aMXfVoVu9KcuZgVU_LXT1u666666--

3M. 2008. Fiche signalétique : Dyneon™ Fluoroelastomers FC-2123, FC-2123Z, FC-2124, FC-2144, FC-2146X, FC-2153X, FE-5831Q, FX-2530R, FX-3729, FX-3730, FX-3734, FX-3735, FX-11891, FLS-2530 [en ligne], Oakdale (MN). [consultée le 11 août 2009]. Accès :

http://multimedia.3m.com/mws/mediawebserver?66666UtN&ZUxL99X4X&aMXfVoVu9KcuZgVU_LXT1u666666--

ACD/pK_aDB [module de prévision]. 2005. Version 9.04. Toronto (Ont.) : Advanced Chemistry Development. [consulté le 27 février 2009]. Accès : http://www.acdlabs.com/products/phys_chem_lab/pka/ [réserve de consultation]

Acros Organic N.V. 1999. Fiche signalétique : Benzyltriphenyl phosphonium bromide [en ligne]. Fair Lawn (NJ). [consultée le 17 août 2009]. Accès : <https://fscimage.fishersci.com/msds/88179.htm>

[AIES] Système expert d'intelligence artificielle. 2003-2007. Version 2.05. Ottawa (Ont.) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques, Division des substances nouvelles. Modèle élaboré par Stephen Niculescu. Disponible auprès de : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques, Section de l'évaluation des substances chimiques nouvelles.

[AOPWIN] Atmospheric Oxidation Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.92. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Alfa Aesar, Lancaster Synthesis 2003. Fiche signalétique : Benzyltriphenylphosphonium iodide, 98%. Ward Hill (MA), États-Unis.

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.

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.

Bayer AG. 1988. Fiche signalétique [cité dans Bureau européen des substances chimiques, 2003].

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

- Bergeron, K.L., Murphy, E.L., Majofodun, O., Munoz, L.D., Williams Jr, J.C. Almeida, K.H. 2009. Arylphosphonium salts interact with DNA to modulate cytotoxicity. *Mutation Research/Genetic Toxicology and Environmental Mutagenesis* 673:141-148.
- [BIOWIN] Biodegradation Probability Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 4.02. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm
- Boethling, R.S., Howard, P.H., Beauman, J.A., Larosche, M.E. 1995. Factors for intermedia extrapolations in biodegradability assessment. *Chemosphere* 30(4):741-752.
- Cahill, T. 2008. Multispecies Model, version 1.0, Department of Integrated Natural Sciences, Arizona State University, Glendale (AZ), États-Unis.
- Canada. 1999. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*. L.C., 1999, c. 33, *Canada Gazette*. Partie III., vol. 22, n° 3. Accès : <http://www.gazette.gc.ca/archives/p3/1999/g3-02203.pdf>
- Canada. 2000. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Règlement sur la persistance et la bioaccumulation, C.P. 2000-348, le 29 mars 2000, DORS/2000-107*. Accès : <http://www.gazette.gc.ca/archives/p2/2000/2000-03-29/pdf/g2-13407.pdf>
- 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, Canada Gazette*. Partie I, vol. 140, n° 49, p. 4109-4117. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partI/2006/20061209/pdf/g1-14049.pdf>
- Canada. Ministère de l'Environnement. 2006b. *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://canadagazette.gc.ca/partI/2006/20060304/pdf/g1-14009.pdf>
- Canada 2008. Évaluation préalable pour le Défi concernant le Phénol, 4,4'-(1-méthylethylidène)bis- (Bisphenol A), numéro de registre du Chemical abstract service (CAS) 80-05-7 [en ligne]. Accès : http://www.ec.gc.ca/substances/ese/fre/challenge/batch2/batch2_80-05-7_fr.pdf
- Canada. Ministère de l'Environnement, ministère de la santé. 2009. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis de première divulgation d'information technique concernant les substances identifiées dans le Défi, Gazette du Canada*. Partie I, vol. 143, n° 5, p. 196-213. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/tp-pr/p1/2009/2009-01-31/pdf/g1-14305.pdf#page=10>
- CASETOX [module de prévision]. 2008. Version 2.0. Beachwood (OH) : MultiCASE. [consulté le 30 sept. 2009]. Accès : <http://www.multicase.com/products/prod03.htm> [réserve de consultation].
- Changshu Xinhua Chemical Co. Ltd. 2006. Fiche signalétique : Precompounded FKM26 [en ligne]. Haiyu Town, China. [consultée le 11 août 2009]. Accès : <http://www.pvdf.cn/FKM-PRECOMPOUNDED/MSDS-FKM-precompound.pdf>
- Chemconserve. 2008a. Fiche signalétique : Benzyltriphenylphosphonium chloride [en ligne]. Zoetermeer (Pays-Bas). [consultée le 17 août 2009]. Accès : <http://www.chemconserve.com/files/16417290834a0046d003e40.pdf>
- Chemconserve. 2008b. Fiche signalétique : Butyltriphenylphosphonium chloride [en ligne]. Zoetermeer (Pays-Bas). [consultée le 17 août 2009]. Accès : <http://www.chemconserve.com/files/16444027214a0048809c9d0.pdf>

Chemconserve. 2008c. Fiche signalétique : Tetraphenylphosphonium bromide [en ligne]. Zoetermeer (Pays-Bas). [consultée le 17 août 2009]. Accès : <http://www.chemconserve.com/files/8831646444a0049dd12cc4.pdf>

Chemconserve. 2008d. Fiche signalétique : Methyltriphenylphosphonium bromide [en ligne]. Zoetermeer (Pays-Bas). [consultée le 17 août 2009]. Accès : <http://www.chemconserve.com/files/9207700864a00498555e9a.pdf>

Chemconserve. 2008e. Fiche signalétique : Ethyltriphenylphosphonium bromide [en ligne]. Zoetermeer (Pays-Bas). [consultée le 17 août 2009]. Accès : <http://www.chemconserve.com/files/8755588814a0048eda36d2.pdf>

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

Datta RN. 2001. Rubber Curing Systems, Rapra Review Report, 144, Volume 12, number 12, Rapra Technologies, ISSN 0889-3144

[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 30 septembre 2009]. Accès : <http://lhasa.harvard.edu/?page=toxicology.htm> [réserve de consultation].

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.

DuPont. 2006a. Fiche signalétique : Performance Elastomers, « VITON » Fluoroelastomers all in synonym list VIT011 [en ligne]. Wilmington (DE), États-Unis : DuPont Performance Elastomers L.L.C. [consultée le 11 août 2009]. Accès : <http://www.rtvanderbilt.com/documents/MSDS/US/54462.pdf>

DuPont. 2006b. Fiche signalétique : Performance Elastomers, « VITON » Fluoroelastomers all in synonym list VIT007A [en ligne]. Wilmington (DE) : DuPont Performance Elastomers L.L.C [consultée le 11 août 2009]. Accès : <http://www.rtvanderbilt.com/documents/MSDS/US/vit007a.pdf>

DuPont 2006c. Performance Elastomers, « VITON » Fluoroelastomers all in synonym list VIT007c [en ligne]. Wilmington (Del), US. DuPont Performance Elastomers L.L.C [cited August 11th 2009]. Available from <http://www.rtvanderbilt.com/documents/MSDS/US/vit007c.pdf>

DuPont. 2006d. Fiche technique : Bisphenol AF, 4,4'-(Hexafluoroisopropylidene)diphenol [en ligne]. Wilmington (DE) : DuPont Performance Elastomers L.L.C. [consultée le 17 août 2009]. Accès : http://www2.dupont.com/FluoroIntermediates/en_US/assets/downloads/BPAF_techsheat.pdf

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

Environnement Canada. 1997. Renseignements sur une substance présentés à la Division des substances nouvelles d'Environnement Canada dans le cadre du Programme de renseignements concernant les substances nouvelles.

Environnement Canada. 1999a. Renseignements sur une substance présentés à la Division des substances nouvelles d'Environnement Canada dans le cadre du Programme de renseignements concernant les substances nouvelles.

Environnement Canada. 1999b. Renseignements sur une substance présentés à la Division des substances nouvelles d'Environnement Canada dans le cadre du Programme de renseignements concernant les substances nouvelles.

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 concertant certaines substances considérées comme priorités pour suivi*. Données préparées par Environnement Canada, Santé Canada, Programme des substances existantes.

Environnement Canada. 2007. Guidance for conducting ecological assessments under CEPA, 1999: science resource technical series: draft module on QSARs. Document de travail préliminaire révisé. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

Environnement Canada. 2009a. Données tirées à partir des questionnaires volontaires relatifs aux substances contenues dans le lot 8 du Plan de gestion des produits chimiques. Préparé par Environnement Canada, Division des substances existantes.

Environnement Canada. 2009b. Données sur les substances du lot 8 recueillies en vertu de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis concernant les substances identifiées dans le huitième lot du Défi*. Données préparées par le Programme des substances existantes d'Environnement Canada.

Environnement Canada. 2009c. Assumptions, limitations and uncertainties of the mass flow tool for PTPPT, CAS RN 75768-65-9. Document de travail interne. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes. Disponible sur demande.

Environnement Canada. 2009d. Guidance for conducting ecological assessments under CEPA, 1999: science resource technical series, technical guidance module: the Industrial Generic Exposure Tool - Aquatic (IGETA). Document de travail. Gatineau (Qc): Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

[EPIWEB] Estimation Programs Interface for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2009. Version 4.0. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[ESIS] European Chemical Substances Information System. 2009. Version 5 [base de données sur Internet]. Bureau européen des substances chimiques (BESC). [consulté le 12 août 2009]. Accès : <http://ecb.jrc.it/esis>

Fisher Scientific 2005. Fiche signalétique : Benzyltriphenylphosphonium iodide, 98%. Loughborough (Royaume-Uni).

[FS] Fiche signalétique : 4,4'-(Hexafluoroisopropylidene)diphenol, 97%. [en ligne]. 2009. Oakville (Ont.) : Sigma-Aldrich. Accès : <http://www.sigmaaldrich.com/MSDS/MSDS/DisplayMSDSPage.do>

Halocarbon. 2007. Fiche signalétique : Bisphenol AF [en ligne]. River Edge (NJ) : U.S. HALOCARBON PRODUCTS CORPORATION. [consultée le 17 août 2009]. Accès : http://www.halocarbon.com/halocarbon_media/BisphenolAF_252.pdf

Hansch, C., Leo, A., Hoekman, D. 1995. Exploring QSAR: Hydrophobic, electronic, and steric constants.

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

Howard, P.H. 1989. Handbook of environmental fate and exposure data for organic chemicals. Volume I. Large production and priority pollutants. Chelsea (MI) : Lewis Publishers.

[HYDROWIN] Hydrolysis Rates Program for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.67. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[IISRP] International Institute of Synthetic Rubber Producers 2009. Synthetic rubber summaries: 06 Fluoroelastomers [en ligne]. Houston (TX). [consulté le 12 août 2009]. Accès : <http://test.iisrp.com/WebPolymers/06ModFluoroelastomersv1-4.pdf>

[KOECT] Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. 2000. Fluorocarbon Elastomers [en ligne]. 15 p. Accès : <http://www.mrw.interscience.wiley.com/emrw/9780471238966/kirk/article/fluogroo.a01/current/pdf>

Kitamura, S., Susuki, T., Sanoh, S., Kohta, R., Jinno, N., Sugihara, K., Yoshihara, S., Fujimoto, N., Hiromitsu, W., Ohta, S. 2005. Comparative study of the endocrine-disrupting activity of Bisphenol A and 19 related compounds. *Toxicol. Sci.* 84:249-259.

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

Leadscope [module de prévision]. 2009. Leadscope Model Applier Version 1.2.0-3. Columbus (OH) : Leadscope, Inc. [consulté le 30 sept. 2009]. Accès : http://www.leadscope.com/all_products.php [réserve de consultation]

Millipore Corporation. 2008. Fiche signalétique : Sanitary sampling valve [en ligne]. Billerica (MA). [consultée le 11 août 2009]. Accès : [http://www.millipore.com/msds.nsf/a73664f9f981af8c852569b9005b4e4ee/85256f0a005296f28525705a00478a80/\\$FILE/M114737.pdf](http://www.millipore.com/msds.nsf/a73664f9f981af8c852569b9005b4e4ee/85256f0a005296f28525705a00478a80/$FILE/M114737.pdf)

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

[MSDSonline]. Fiches signalétiques [en ligne]. 2006. Chicago (IL) : MSDSonline. [consultées le 12 août 2009]. Accès : <http://www.msdsonline.com>. [réserve de consultation].

[NCI] National Chemical Inventories. [base de données sur CD-ROM]. 2009. Columbus (OH) : American Chemical Society. [consultée le 24 août 2009]. Accès : <http://www.cas.org/products/cd/nci/index.html>

[NTP] National Toxicology Program 2008. Chemical information profile for Bisphenol AF .CAS No. 1478-61-1. Supporting nomination for Toxicological Evaluation by the National Toxicology Program. Septembre 2008.

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

[PCKOCWIN] Organic Carbon Partition Coefficient Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 2.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and

Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Perdue, E.M. 1985. Acidic functional groups of humic substances. *I* : Aiken, G.R. (éd.), *et al.* Humid substances in soil, sediment, and water, p. 493-527. Wiley.

Rhodia. 2008. Phosphorus Specialties. [en ligne] Paris (France) [consulté le 12 août 2009]. Accès : http://www.rhodia.com.br/pt/binaries/Novecare_Brochure_P4_2008_EN.pdf

Ross, M.F., Da Ros, T., Blaikie, F.H., Prime, T.A., Porteous, C.M., Severina, I.I., Skulachev, V.P., Kjaergaard, H.G., Smith, R.A.J., Murphy, M.P. 2006. Accumulation of lipophilic dications by mitochondria and cells. *Biochemical Journal* 400:199-208.

Sigma-Aldrich. 2008. Fiche signalétique : 4,4'-(Hexafluoroisopropylidene)diphenol, 97%. [consultée en 2009]. Oakville (Ont.) : Sigma-Aldrich. Accès : <http://www.sigmaaldrich.com/catalog/AdvancedSearchPage.do>

[SPIN] Substances in Preparations in Nordic Countries [base de données sur Internet]. 2009. Copenhague (Danemark) : Conseil des ministres des pays nordiques. [consultée le 4 sept 2009]. Accès : <http://195.215.251.229/Dotnetnuke/Home/tabid/58/Default.aspx>

Study Submission. 2007. Unpublished confidential data submitted to Environment Canada, Existing Substances Division under the requirements of Section 70 of the *Canadian Environmental Protection Act*, 1999, Identification No.: S70-2005-020

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

[USEPA] United States Environmental Protection Agency. 2009. Inventory Update Reporting, Past IUR Data, Non-confidential 2002 IUR Company/Chemical Records, CAS RN 75768659 [en ligne]. Washington (DC) : US EPA. [consulté le 12 août 2009]. Accès : http://www.epa.gov/cgi-bin/iursrch_2002.cgi

[US FDA] United States Food and Drug Administration. 2000. Threshold of Regulation Exemptions Issued Under 21 CFR 170.39 [en ligne]. Washington (DC) 20204 : Public Health Service, Department of Health and Human Services [consulté le 17 août 2009]. Accès : <http://www.fda.gov/ohrms/dockets/dailys/00/jan00/010300/1st0011.pdf>

[WATERNT] Water Solubility Program [modèle d'estimation]. 2000-2008. Version 1.01. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

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

Annexe 1 - Sommaire de rigueur d'étude
Évaluation de données expérimentales selon la méthode de Kollig*

Point	Pondération	Réponse	Note
Référence : 11344Submission001, détermination de la solubilité, de la stabilité et du coefficient de partage octanol/eau pour le tolyltriphénylphosphonium, sel avec le 4,4'-[2,2,2-trifluoro-1-(trifluorométhyl)éthylidène]bis(phénol), Environnement Canada, 2009a			
Substance d'essai : Deux substances commerciales contenant la substance portant le n° CAS 75768-65-9 Substance 1 : PTPTT Substance 2 : PTPTT			
Pourriez-vous réitérer l'expérience avec les renseignements disponibles?	5	O Directives et SOP présentés : 1. Directives du laboratoire relatives à la vérification de la solubilité et à la détermination de la limite de solubilité de la substance d'essai dans l'eau de dilution du milieu aquatique 2. Lignes directrices de l'OCDE (2005) pour les essais de produits chimiques : Méthode 105 - Hydrosolubilité 3. Lignes directrices de l'OCDE (2006) pour les essais de produits chimiques : Méthode 123 - Coefficient de partage (1-octanol/eau), méthode par agitation douce 4. Lignes directrices de l'US EPA sur les essais relatifs aux propriétés des produits : Méthode OPPTS 830.7550 - Coefficient de partage (n-octanol/eau), méthode par agitation du flacon La procédure expérimentale est claire.	5
Un objectif clair est-il énoncé?	1	O Effectuer une estimation valable de la valeur de log K _{oc} pour le PTPTT en mesurant la solubilité de la substance indépendamment dans l'octanol et dans l'eau.	1
La qualité de l'eau est-elle caractérisée ou définie (distillée ou déionisée)?	2	N Des essais liés à l'hydrosolubilité ont été réalisés avec de l'eau de pluie qui avait un pH de 7,86. L'eau n'est ni distillée, ni déionisée; elle a été sélectionnée en fonction de sa disponibilité, de sa caractérisation physique et chimique et de sa pertinence en tant que matrice environnementale des eaux souterraines. La solubilité dans le 1-octanol a été déterminée en utilisant de l'octanol d'une pureté > 98 % acheté auprès d'une source commerciale.	0

Les résultats sont-ils présentés dans les détails, de façon claire et compréhensible?	3	O	3
Les données proviennent-elles d'une source principale et non d'un article cité?	3	O	3
La substance chimique a-t-elle été testée à des concentrations inférieures à son hydrosolubilité?	5	S.O. L'objectif de l'étude était de déterminer la solubilité de la substance dans l'eau et l'octanol, dans le but de calculer une valeur de log K_{oc}	S.O.
Les matières particulaires étaient-elles absentes?	2	O La dissociation totale du PTPTT dans la solution acidifiée eau/méthanol utilisée comme phase mobile de la colonne a été confirmée par la forme pointue des fragments de BTP et de BPAF, l'absence d'anomalies de référence habituelles associées à la décomposition sur la colonne, et l'absence de tout signal détectable pour le PTPTT non dissocié (Environnement Canada, 2009a)	2
A-t-on évalué une substance chimique de référence de la constante connue?	3	O La solution mère principale contenant du chlorure de benzyltriphenylphosphonium et les normes de référence du BPAF ont été préparées afin de préparer des normes d'étalonnage pour la chromatographie en phase liquide à haute résolution avec détection spectrométrique de masse.	3
D'autres processus du devenir ont-ils été pris en considération?	5	N	0
Un contrôle (blanc) a-t-il été réalisé?	3	N	0
La température est-elle restée constante?	5	O Les bouteilles contenant des solutions saturées des matériaux d'essai dans le 1-octanol et dans l'eau de pluie ont été placées dans un bain d'eau à température contrôlée à 20 °C.	5
L'expérience a-t-elle été réalisée à une température presque ambiante (15-30 °C)?	3	O	3

La pureté de la substance chimique d'essai est-elle déclarée (> 98 %)?	3	O Cependant, la pureté des substances commerciales testées était inférieure à 98 %. Pour remédier à cette situation, la solubilité dans l'eau et le 1-octanol a été déterminée d'après les mesures du cation de benzyltriphenylphosphonium. La solubilité du PTPPT a ensuite été extrapolée par une conversion stoechiométrique.	1,5
L'identité de la substance chimique a-t-elle été prouvée?	3	O	3
La source de la substance chimique d'essai est-elle déclarée?	1	O	1,5
Résultats :			
Cation de BTP (benzyltriphenylphosphonium)	Hydrosolubilité = 2,31 mg/L Solubilité dans le 1-octanol = 919 mg/L K _{oc} = 398 Log K _{oc} = 2,60		
PTPPT	Hydrosolubilité = 4,5 mg/L K _{oc} = 398 Log K _{oc} = 2,60		
Note : Degré de fiabilité**	31/42 = 74 % 2		

* Kollig, H.P. 1988. Criteria for evaluating the reliability of literature data on environmental process constants. *Toxicol. Environ. Chem.* 17: 287-311.

** Le code de fiabilité pour les études écotoxicologiques de la catégorisation dans la LIS est utilisé.

Annexe 2 - Tableau sommaire des intrants des modèles de la persistance, de la bioaccumulation et de la toxicité

	Propriétés physico-chimiques et devenir	Devenir	Devenir	Profils de persistance, bioaccumulation et toxicité	Écotoxicité
Paramètres d'entrée des modèles	Suite EPIWIN (tous les modèles, notamment AOPWIN, KOCWIN, BCFWIN, BIOWIN et ECOSAR)	Modèle plurispécifique de Cahill	Modèle d'Arnot et Gobas pour le modèle	Modèle de POP canadien (incluant : Catabol, modèle de facteurs d'atténuation du FBC, modèle de toxicité OASIS)	Artificial Intelligence Expert System (AIES)/ TOPKAT
Code SMILES	PTPTT (75768-65-9, forme non ionique) <chem>c2cccc(c2)P(c3cccc3)(c4cccc4)(Cc1cccc1)Oc5ccc(C(C(F)(F)F)(C(F)(F)F)c6ccc(O)cc6)cc5</chem> BTP <chem>c(cccc1)(c1)CP(c(cccc2)c2)(c(cccc3)c3)c(cccc4)c4</chem> BPAF <chem>FC(F)(F)C(c(ccc(O)c1)c1)(c(ccc(O)c2)c2)C(F)(F)F</chem>		Identique à EPIWEB	Identique à EPIWEB	Identique à EPIWEB
Masse moléculaire (g/mol)	PTPTT = 688,66 BTP = 354,44 BPAF = 336,24	Neutre = 336,24 Anion = 335,24			
Point de fusion (°C)	*				
Point d'ébullition (°C)	*				
Température (°C)					
Masse volumique (kg/m³)					
Pression de vapeur (Pa)	*				
Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mol)	*	1,071x10 ⁻² Pa·m ³ /mol (HENRYWIN, 2000)			
Log K_{ae} Coefficient de partage air-eau (sans dimension)		Neutre = -5,4 (calcul à partir de la constante de la loi de Henry)			

		Anion = -15,4 (Cahill, 2008)			
Log K_{oc} (coefficient de partage octanol-eau) [sans dimension]	Sauf spécification contraire (se reporter aux notes de bas de page du tableau 2), le facteur de correction suivant a été utilisé pour le sel et son produit de dissociation : Log K _{oc} = 2,6 (Environnement Canada, 2009a)	Neutre = 4,47 (KOWWIN, 2000) Anion = 1,87 (Cahill, 2008)			BTP dans ECOSAR Log K _{oc} = 2,6 (Environnement Canada, 2009a)
K_{oc} (coefficient de partage octanol-eau) [sans dimension]					
Log K_{co} (coefficient de partage carbone organique/eau – L/kg)					
Solubilité dans l'eau (mg/L)	Sauf spécification contraire (se reporter aux notes de bas de page du tableau 2), le facteur de correction suivant a été utilisé pour le sel et son produit de dissociation : PTPTT = 4,5 mg/L BTP = 2,31 mg/L BPAF = 2,19 mg/L	Neutre = 4,3 x 10 ⁻³ g/L (WSKOWWIN, 2000)			BTP dans ECOSAR Hydrosolubilité = 2,31 mg/L (Environnement Canada, 2009a)
Log K_{oa} (coefficient de partage octanol-air) [sans dimension]					
Coefficient de partage sol-eau (L/kg)¹					
Coefficient de partage sédiments-eau (L/kg)¹					
Coefficient de partage particules en suspension-eau (L/kg)¹					
Coefficient de partage poisson-eau (L/kg)²					
Coefficient de partage					

aérosol-eau (sans dimension)³					
Coefficient de partage végétation-eau (sans dimension)¹					
Enthalpie (K_{oe})					
Enthalpie (K_{ac})					
Demi-vie dans l'air (jours)		0,13 jour (Cahill, 2008)			
Demi-vie dans l'eau (jours)		182 jours (Cahill, 2008)			
Demi-vie dans les sédiments (jours)		728 jours (Cahill, 2008)			
Demi-vie dans le sol (jours)					
Demi-vie dans la végétation (jours)⁴					
Constante cinétique de métabolisme (1/jour)					
Constante cinétique de biodégradation (jour 1 ou heure 1) – préciser					
Demi-vie de biodégradation en clarificateur primaire (t_{1/2-p}; h)					
Demi-vie de biodégradation en bassin d' aération (t_{1/2-s}; h)					
Demi-vie de biodégradation en bassin de décantation (t_{1/2-s}; h)					

¹ D'après le log K_{co}² D'après les données sur le FBC³ Valeur par défaut⁴ D'après la demi-vie dans l'eau

Annexe 3 : Résumé des résultats des modèles R(Q)SA relatifs à la santé humaine

PRÉVISIONS DES MODÈLES R(Q)SA SUR LA TOXICITÉ POUR LA CANCÉROGÉNICITÉ

Modèle/espèce	Souris		Rat		Rat	Souris	Rongeur	Mammifères
	Mâle	Femelle	Mâle	Femelle				
Model Applier	N	N	N	N	N	N	N	-
Multicase Casetox	HD	HD	HD	HD	-	-	HD	-
Topkat	HD	HD	HD	HD	-	-	-	-
Derek	-	-	-	-	-	-	-	HD

N – Négative

P – Positive

BB – Benigni-Bossa rule

HD – hors domaine

« - » – aucun modèle disponible dans la suite RQSA

AR – aucun résultat

PRÉVISIONS DES MODÈLES R(Q)SA SUR LA TOXICITÉ POUR LA GÉNOTOXICITÉ

Modèle/paramètres																						
<u>aberrations chromosomiques</u>	HD	HD	HD	N	N	N	HD	N	N	N	N	N	HD	-	N	N	N	N	N	N	N	-
aberrations chromosomiques - autres rongeurs	HD	-	-	HD	-	HD	-	-	-	-	HD	-	-	HD	-	-	-	-	-	-	HD	-
aberrations chromosomiques - rats	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	HD	-
<u>test du micronoyau sur des souris</u>	-	-	-	-	N	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	N
test du micronoyau sur des rongeurs																						
<u>drosophiles</u>																						
translocations hérissables des drosophiles																						
essai d'expression d'allèles récessifs létaux liés au sexe sur des drosophiles																						
mutation des mammifères																						
mutation létale dominante des mammifères																						
<u>synthèse de l'ADN non programmée (UDS)</u>																						
synthèse de l'ADN non programmée avec des lymphocytes humains																						
synthèse de l'ADN non programmée avec des hépatocytes de rats																						
<u>mutation du lymphome chez des souris</u>																						
<i>S. cerevisiae</i>																						
levure																						
hgprt																						
<i>E. coli</i>																						
<i>E. coli</i> W																						
microbes																						
<u>salmonella</u>																						
Alerte de cancer BB																						N

N – Négative

P – Positive

BB – Benigni-Bossa rule

HD – hors domaine

« - » – aucun modèle disponible dans la suite RQSA

AR – aucun résultat

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

Model Applier

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

Multicase Casetox

Paramètre/espèce	Hamster	Mammifères	Divers
Tératogénicité	-	HD	HD
Développement	HD	-	-

N – Négative

P – Positive

BB – Benigni-Bossa rule

HD – hors domaine

« - » – aucun modèle disponible dans la suite RQSA

AR – aucun résultat

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

Model Applier

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

Multicase Casetox

Souris	Rat	Lapin	Homme
HD	HD	HD	HD

N - Négative

P - Positive

BB - Benigni-Bossa rule

HD - hors domaine

« - » - aucun modèle disponible dans la suite RQSA

AR - aucun résultat