

Évaluation préalable pour le Défi

**1,3-Bis(1-isocyanato-1-méthyléthyl)benzène
(Diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylène)**

**Numéro de registre du Chemical Abstracts Service
2778-42-9**

**Environnement Canada
Santé Canada**

Novembre 2008

Synopsis

Conformément à l'article 74 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* [LCPE (1999)], les ministres de la Santé et de l'Environnement ont effectué une évaluation préalable du 1,3-bis(1-isocyanato-1-méthyléthyl)benzène (diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène), dont le numéro de registre du Chemical Abstracts Service est 2778-42-9. Une priorité élevée a été accordée à l'évaluation préalable de cette substance inscrite au Défi lancé par les ministres, car elle rencontre les critères environnementaux de la catégorisation (persistance, potentiel de bioaccumulation et toxicité intrinsèque pour les organismes non humains) et l'on croit qu'elle est commercialisée au Canada.

L'évaluation des risques que présente le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène pour la santé humaine n'a pas été jugée d'une priorité élevée à la lumière des résultats fournis par les outils simples de détermination du risque d'exposition et du risque pour la santé mis au point par Santé Canada aux fins de la catégorisation des substances figurant sur la Liste intérieure des substances. Par conséquent, la présente évaluation est axée sur les renseignements pertinents pour l'évaluation des risques pour l'environnement.

Le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène est une substance organique utilisée comme intermédiaire industriel incorporé dans divers polymères. Il n'est pas produit naturellement dans l'environnement. Aucune déclaration sur sa fabrication ou sur son importation au Canada en une quantité égale ou supérieure au seuil de déclaration de 100 kg, produite en réponse aux avis publiés en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999), n'a été soumise pour les années civiles 2005 et 2006. Cependant, six entreprises canadiennes et deux entreprises étrangères ont indiqué un intérêt pour cette substance en 2005 et en 2006. Aucun autre renseignement n'a été communiqué.

Puisqu'aucune déclaration d'importation ou de fabrication au Canada en une quantité égale ou supérieure au seuil de déclaration de 100 kg n'a été présentée pour 2005 et 2006, les rejets de diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène dans l'environnement canadien devraient être très faibles. Cette substance, qui réagit avec l'eau, devrait être hydrolysée rapidement en présence d'eau ou dans un milieu humide. Elle est semi-volatile; il est donc possible que les pertes par advection soient importantes en cas de rejet dans l'atmosphère.

Comme il réagit avec l'eau sous forme d'humidité, le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne devrait pas persister dans l'environnement. Un examen supplémentaire des données sur son hydrolyse indique qu'il se dégraderait rapidement dans l'eau ou les milieux humides tels que les sédiments et les sols humides. De même, l'hydrolyse et le potentiel de métabolisation et de dégradation de cette substance dans le tube digestif ont été étudiés de plus près. Elle ne répondrait donc plus aux critères de la persistance et de la bioaccumulation formulés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*.

Aux fins de la présente évaluation préalable, un scénario très prudent d'exposition à partir des rejets dans le milieu aquatique par une installation industrielle a été employé. Il a

indiqué pour l'eau une concentration environnementale estimée de plusieurs ordres de grandeur inférieure aux concentrations estimées sans effet calculées pour les poissons.

De plus, des activités de recherche et de surveillance viendront, le cas échéant, appuyer la vérification des hypothèses utilisées au cours de l'évaluation préalable.

D'après les renseignements disponibles, il est proposé de conclure que le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne répond à aucun des critères énoncés dans l'article 64 de la LCPE (1999).

Introduction

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

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

- celles qui répondent à tous les critères environnementaux de la catégorisation, notamment la persistance (P), le potentiel de bioaccumulation (B) et la toxicité intrinsèque (Ti) pour les organismes aquatiques, et que l'on croit être commercialisées au Canada, et/ou;
- 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 du classement attribué par d'autres organismes nationaux ou internationaux quant à la cancérogénicité, à la génotoxicité ou à la toxicité sur le plan du développement ou de la reproduction.

Le 9 décembre 2006, les ministres ont donc publié un avis d'intention dans la Partie I de la Gazette du Canada (Canada, 2006), dans lequel ils ont mis au défi l'industrie et les autres intervenants intéressés 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 comparativement les meilleures pratiques de gestion des risques et de gérance des produits pour ces substances jugées hautement prioritaires.

Le BNST est une substance dont l'évaluation des risques pour l'environnement a été jugée hautement prioritaire, car elle est persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques et l'on croit qu'elle est commercialisée au Canada. Le volet du Défi portant sur cette substance a été publié dans la Gazette du Canada le 12 mai 2007 (Canada, 2007). En même temps a été publié le profil de cette substance, qui présentait l'information technique (obtenue avant décembre 2005) sur laquelle a reposé sa catégorisation. De nouveaux renseignements sur la substance ont été communiqués en réponse au Défi.

Même si l'évaluation des risques que présente la substance 1,3-bis(1-isocyanato-1-méthyléthyl)benzène pour l'environnement est jugée hautement prioritaire, cette substance ne répond pas aux critères de la catégorisation pour le PFRE ou le REI ni aux

critères définissant un grave risque pour la santé humaine, compte tenu du classement attribué par d'autres organismes nationaux ou internationaux quant à sa cancérogénicité, à sa génotoxicité ou à sa toxicité sur le plan du développement ou de la reproduction]. La présente évaluation est donc axée principalement sur les renseignements présentant de l'intérêt pour l'évaluation des risques touchant l'environnement.

Les évaluations préalables effectuées aux termes de la LCPE (1999) mettent l'accent sur les renseignements jugés essentiels pour déterminer si une substance répond aux critères de toxicité des substances chimiques au sens de l'article 64 de la Loi :

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

Les évaluations préalables visent à examiner des renseignements scientifiques et à tirer des conclusions fondées sur la méthode du poids de la preuve et le principe de prudence.

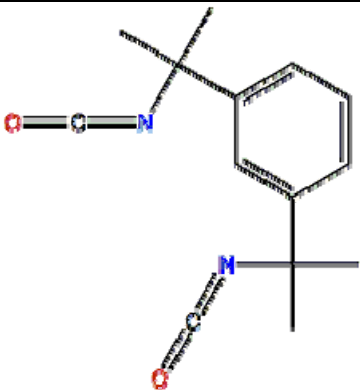
La présente ébauche d'évaluation préalable prend en considération les renseignements sur les propriétés chimiques, les dangers, les utilisations et l'exposition, y compris ceux fournis dans le cadre du Défi. Les données pertinentes pour l'évaluation préalable de cette substance ont été relevées dans des publications originales, des rapports de synthèse et d'évaluation, des rapports de recherche de parties intéressées et d'autres documents consultés lors de recherches documentaires menées récemment, jusqu'en février 2008 en ce qui concerne les sections environnementales du document. Les études importantes ont fait l'objet d'une évaluation critique; les résultats de la modélisation ont pu être utilisés dans la formulation des conclusions. Lorsqu'ils étaient disponibles et pertinents, les renseignements contenus dans les évaluations des dangers effectuées par d'autres instances ont été utilisés. L'évaluation préalable ne constitue pas un examen exhaustif ou critique de toutes les données disponibles. Elle fait plutôt état des études et des éléments d'information les plus importants pour appuyer la conclusion.

L'évaluation préalable a été préparée par le personnel du Programme des substances existantes de Santé Canada et d'Environnement Canada et intègre les résultats d'autres programmes exécutés par ces ministères. De plus, une version provisoire de la présente évaluation préalable a fait l'objet d'une consultation publique de 60 jours. Les principales données et considérations sur lesquelles repose la présente évaluation sont résumées ci-après.

Identité de la substance

Aux fins du présent document, la substance soumise à l'évaluation sera désignée par son nom commun, soit diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène. Le tableau 1 donne d'autres noms sous lesquels cette substance est connue et présente d'autres caractéristiques d'identification qui lui sont propres.

Tableau 1. Identité du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène

Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (N° CAS)	2778-42-9
Nom dans la LIS	1,3-bis(1-isocyanato-1-méthyléthyl)benzène
Noms dans les inventaires¹	<i>benzene, 1,3-bis(1-isocyanato-1-methylethyl)- (AICS, ASIA-PAC, TSCA)</i> <i>1,3-bis(1-isocyanato-1-méthyléthyl)benzène (EINECS)</i> <i>1,3-bis(1-isocyanato-1-methylethyl)benzene (ENCS, ECL)</i>
Autres noms	<i>α,α,α',α'-tetramethyl-m-phenylenedimethylene diisocyanate; α,α,α',α'-tetramethyl-m-xylylene diisocyanate; 1,3-bis(α-isocyanatoisopropyl)benzene; Isocyanic acid, α,α,α',α'-tetramethyl-m-xylylene ester; Isocyanic acid, m-phenylenediisopropylidene ester; m-bis(1-isocyanato-1-methylethyl)benzene; m-TMXDI; tetramethylm-xylylene diisocyanate</i>
Groupe chimique (Groupe de la LIS)	produits chimiques organiques définis
Principale classe chimique ou utilisation	isocyanates
Formule chimique	C ₁₄ H ₁₆ N ₂ O ₂
Structure chimique	
Simplified Molecular Input Line Entry System (SMILES)	<chem>O=C=NC(c1cc(ccc1)C(N=C=O)(C)C)(C)C</chem>
Masse moléculaire	244,30 g/mole

¹ National Chemical Inventories (NCI), 2007 : 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); ENCS (inventaire des substances chimiques existantes et nouvelles du Japon); TSCA (inventaire des substances chimiques visées par la *Toxic Substances Control Act* des États-Unis).

Propriétés physiques et chimiques

Le tableau 2 présente des propriétés physiques et chimiques (valeurs expérimentales et modélisées) du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène, qui se rapportent à son devenir dans l'environnement.

Tableau 2. Propriétés physiques et chimiques du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène

Propriétés	Type	Valeur ¹	Température (°C)	Référence
Point de fusion (°C)	expérimental	-10		Cytec Industries 2005
Point d'ébullition (°C)	expérimental	292		Cytec Industries 2005
	Modélisé	320	--	MPBPWIN, 2000
Masse volumique (kg/m³)	Aucune information disponible			
Pression de vapeur (Pa)	expérimental	0,43 ($3,2 \times 10^{-3}$ mm Hg)	25	Cytec Industries 2005
	modélisé	0,39 ($2,98 \times 10^{-3}$ mm Hg)	25	MPBPWIN, 2000 (application des points de fusion et d'ébullition expérimentaux aux calculs)
	modélisé	$1,4 \times 10^{-2}$ ($1,05 \times 10^{-4}$ mm Hg)	25	MPBPWIN, 2000
Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mole)	modélisé	$3,26 \times 10^{-1}$ ($3,22 \times 10^{-6}$ atm·m ³ /mole)	25	HENRYWIN, 2000
Log K_{oe} (coefficient de partage octanol/eau) [sans dimension]	modélisé	4,74	25	KOWWIN, 2000
Log K_{co} (coefficient de partage carbone organique/eau) [sans dimension]	modélisé	5,05		PCKOCWIN, 2000
Solubilité dans l'eau (mg/L)	expérimental	insoluble (réagit avec l'eau)		Cytec Industries 2005
	modélisé	2,289	25	WSKOWWIN, 2000 (si le point de fusion est appliqué aux calculs)

Propriétés	Type	Valeur ¹	Température (°C)	Référence
	modélisé	5,94	25	WATERNT, 2002
Solubilité dans d'autres substances (g/L)	expérimental	S.O.		
	modélisé	S.O.		
pK _a (constante de dissociation acide) [sans dimension]	expérimental	S.O.		
	modélisé	S.O.		

¹ Lorsqu'elles sont différentes, les valeurs originales indiquées par les auteurs ou estimées à l'aide des modèles sont présentées entre parenthèses.

Il importe de signaler que la méthode de modélisation appliquée à l'estimation des coefficients de partage octanol/eau (K_{oe}) est une méthode de modélisation par addition de fragments. Celle-ci ne tient pas compte adéquatement de l'hydrolyse rapide des groupements isocyanate de ce composé et elle établit le log K_{oe} en supposant que ces groupements sont incorporés dans la prévision finale du K_{oe} . Cependant, les groupements devant s'hydrolyser rapidement en amines, le K_{oe} prévu ne devrait pas avoir de signification réelle sur le plan de l'environnement. Le log K_{oe} du composé qui porte des groupements diamine devrait se chiffrer à 1,89, contrairement à la valeur prévue pour le diisocyanate, soit 4,74. Il s'ensuit que ce type chimique est à l'origine d'incertitudes dans les estimations de la relation quantitative structure-activité (RQSA).

Sources

On n'a relevé aucun renseignement indiquant que le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène serait produit naturellement dans l'environnement.

Les renseignements pour 2005 et 2006 la concernant qui ont été collectés en réponse aux avis publiés en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999) indiquent que le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène n'était ni fabriqué ni importé au Canada en une quantité égale ou supérieure au seuil de déclaration de 100 kg (Canada 2006b, Environnement Canada 2006; Environnement Canada 2007a). Six entreprises canadiennes et deux étrangères ont indiqué un intérêt pour cette substance.

Ailleurs, le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène a été reconnu comme substance chimique produite en grandes quantités (PGQ) dans les pays de l'Organisation de développement et de coopération économiques (OCDE, 1997) et aux États-Unis (Cytec Industries) ainsi que comme substance produite en faibles quantités dans l'Union européenne.

Utilisations

Aucune utilisation n'a été signalée en réponse à l'avis publié en vertu de l'article 71 de la LCPE (Canada 2006b; Environnement Canada 2006; Environnement Canada 2007a). Toutefois, le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène est utilisé comme monomère dans les polymères qui sont importés au Canada, comme le confirme le Programme des substances nouvelles. Plus d'une quarantaine de ces polymères ont été déclarés. Toutefois, cette substance a été classée dans la LIS comme « composé organique industriel » quant à son utilisation en 1984-1986.

De plus, un certain nombre d'utilisations a été indiqué dans le cadre du programme américain sur les substances PGQ. Le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène est un isocyanate aliphatique polyvalent que l'on retrouve dans de nombreuses utilisations finales. Le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène est un isocyanate aliphatique polyvalent que l'on retrouve dans de nombreuses utilisations finales. Cet intermédiaire industriel entre dans la fabrication de divers polymères dont il améliore la qualité. Il confère de meilleures propriétés physiques aux produits à base de polyuréthane, notamment sur le plan de la résistance et de l'adhésion, de l'apparence et de la souplesse. Les produits sont ainsi rendus plus durables. Voici des champs d'application des polymères contenant cette substance : produits de revêtement spéciaux, dispersions aqueuses, produits de revêtement pour automobiles, produits de revêtement du bois, encres, scellants, adhésifs, uréthanes thermoplastiques et laques. Les finis pour les tissus et les cuirs, les adhésifs, les peintures pour automobiles, les encres d'imprimerie, les scellants et les produits de revêtement du bois sont des exemples de produits commerciaux courants susceptibles de contenir du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène. Son utilisation dans les emballages alimentaires en vertu d'inscriptions spécifiques est approuvée par la Food and Drug Administration des États-Unis (US FDA) dans le Code of Federal Regulations (CFR), Title 21—Food and Drugs, Chapter I—Food and Drug Administration, Department of Health and Human Services (Cytec Industries 2005).

Rejets dans l'environnement

Puisqu'aucune déclaration d'importation ou de fabrication du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène en une quantité égale ou supérieure au seuil de déclaration de 100 kg n'a été reçue en 2006, en réponse à l'avis publié en vertu de l'article 71 (Environnement Canada 2007a), on peut supposer que les rejets de cette substance dans l'environnement canadien sont très faibles.

D'après Cytec Industries (2005), cette substance ne devrait pas être largement dispersée dans l'environnement en raison de son profil d'utilisation puisqu'elle ne devrait pas être utilisée directement, mais plutôt incorporée par réaction chimique aux polymères auxquels elle est ajoutée (Cytec Industries 2005).

L'incorporation de cette substance dans le polymère a pour effet de modifier la structure moléculaire du monomère et, par conséquent, la structure intégrale du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne peut pas être maintenue. Même si les polymères dont le monomère est constitué de cette substance peuvent être rejetés dans l'environnement aux différentes étapes de leur cycle de vie et que leurs composantes peuvent éventuellement s'y fractionner, le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène même ne serait pas rejeté dans son intégrité structurale. On ne s'attend pas à ce que le polymère contienne des matières résiduelles (diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène inaltéré) en raison de la réactivité de cette substance (voir la rubrique Persistance dans l'environnement).

Devenir dans l'environnement

Selon ses propriétés physiques et chimiques (tableau 2) et selon les résultats obtenus avec le modèle de fugacité de niveau III (tableau 3), le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne devrait pas se répartir de manière importante dans un autre milieu que celui dans lequel il a été émis. Cela est attribuable à sa grande réactivité (par hydrolyse), supérieure au taux de passage d'un milieu à un autre. Les pertes du composé provenant de l'environnement modélisé du modèle résultent seulement de réactions.

Tableau 3. Résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (EQC, 2003)

	Fraction de la substance répartie dans chaque milieu (%)			
Rejet de la substance dans :	Air	Eau	Sol	Sédiments
- l'air (100 %)	100,0	0,0	0,0	0,0
- l'eau (100 %)	2,0	98,0	0,0	0,0
- le sol (100 %)	0,0	0,0	100,0	0,0

Le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène devrait rapidement passer en réaction, principalement par hydrolyse, dans l'eau et le sol, et aussi dans l'air, par photo-oxydation. Il devrait donc réagir rapidement avec les radicaux hydroxyles dans l'air. Les réactions abiotiques devraient constituer le principal mécanisme de sa destruction dans l'environnement modélisé du modèle lorsqu'il est rejeté dans l'air, l'eau et le sol. Si l'on tient compte de sa semi-volatilité cependant, il devrait se produire une certaine perte par transport atmosphérique, par advection.

Persistance et potentiel de bioaccumulation

Persistance dans l'environnement

Le tableau 4a expose les données empiriques sur la dégradation du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène.

Tableau 4a. Données empiriques sur la persistance du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène

Milieu	Processus du devenir	Valeur pour la dégradation	Paramètre et unités de la dégradation	Référence
Air	Hydrolyse	0,527	Demi-vie (jours)	Cytec Industries 2005
Eau	Hydrolyse	13,7	% de la DTO (28 jours)	Cytec Industries 2005

* DO théorique = Demande en oxygène théorique

Les données empiriques sur la biodégradation du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène (Cytec, 2005) montrent un taux de 13,7 % sur 28 jours dans le cadre d'un essai de biodégradation immédiate (OCDE, 301 D) (tableau 4a). Cela signifierait que, abstraction faite de l'hydrolyse, sa demi-vie dans l'eau et le sol est supérieure à 182 jours (6 mois) (Environnement Canada, 2003). Toutefois, lorsque l'on tient compte de l'hydrolyse, la demi-vie de cette substance dans l'eau diminue considérablement, comme l'indiquent les données empiriques sur l'hydrolyse de Cytec Industries (2005). L'annexe 1 contient un sommaire de rigueur d'étude sur cette évaluation réalisée par Cytec Industries (2005). On prévoit toutefois que, dans des conditions dites normales, les diisocyanates aliphatiques réagissent avec l'eau pour former des polyurées insolubles et inertes (Infracor GmbH 2000; Sopac et Boltromeluk 1974). De la même manière, on a observé que les diisocyanates aromatiques, également réactifs en présence d'eau, s'hydrolysent rapidement en polyurées insolubles (Pemberton et Tury 2004; Heimbach et al. 1996; Yakabe et al. [Bieringer et coll., 1999] 2003). Dans certains cas, notamment lorsqu'il y a une dispersion élevée combinée à de faibles concentrations de la substance, il est possible que des diamines se forment par hydrolyse (Sopac et Boltromeluk 1974).

Environnement Canada estime que l'hydrolyse est l'un des principaux processus de dégradation de la plupart des substances. Dans le cadre des évaluations préalables, il se souciera des éventuels produits d'hydrolyse des substances à l'étude. En prenant comme hypothèse que les réactions chimiques et les produits d'hydrolyse du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène sont similaires à ceux d'autres diisocyanates aliphatiques et aromatiques, on prévoit qu'en plus des urées insolubles produites, la diamine de tétraméthyl-*m*-xylylène pourrait se former dans certaines conditions, en particulier lorsqu'il y a une forte dispersion à de faibles concentrations (Pemberton et Tury, 2004; Heimbach *et al.*, 1996 ; Yakabe *et al.*, 1999; Tury *et al.*, 2003).

La recherche documentaire n'a pas permis de trouver des données expérimentales sur la persistance des composés de diamine de tétraméthyl-*m*-xylylène. Il s'est toutefois effectué des travaux de modélisation de la biodégradation de ce composé. Le modèle BIOWIN Ultimate Survey estimant sa demi-vie dans l'eau à 37,5 jours, le produit d'hydrolyse de la diamine ne devrait pas persister dans l'eau. La méthode du poids de la preuve reposant sur des RQSA montre que la diamine de tétraméthyl-*m*-xylylène ne devrait pas persister dans l'eau.

Le tableau 4b présente les prévisions de la biodégradation du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène. Toutefois, on peut douter que les résultats des modèles reproduisent fidèlement l'hydrolyse rapide de cette substance, et on peut donc s'interroger sur la valeur des prévisions de la persistance dans l'eau, le sol et les sédiments.

Des données modélisées indiquent que le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène se dégrade rapidement dans l'air lorsqu'il réagit avec des radicaux hydroxyles (voir le tableau 4b). Nous n'avons retracé aucun renseignement traitant des réactions avec d'autres oxydants. Cependant, la version 2000 du modèle AOPWIN ne prévoit pas que ce composé réagisse avec l'ozone (tableau 4b). Les diisocyanates réagissent énergiquement avec l'eau, mais chez certains, comme le diisocyanate de toluène, la réaction avec l'eau contenue dans l'air n'est pas un processus déterminant du devenir de la substance (Tury *et al.*, 2003). Étant donné ses réactions avec les radicaux hydroxyles d'origine photochimique, le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne devrait pas être considéré comme persistant dans l'atmosphère. En outre, comme le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne persiste pas dans l'air, il ne devrait pas, non plus, avoir de potentiel de transport à grande distance (PTGD).

Tableau 4b. Données modélisées sur la persistance du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène

Milieu	Processus du devenir	Valeur pour la dégradation	Paramètre et unités de la dégradation	Référence
Air	oxydation atm.	1,056	demi-vie, jours	AOPWIN, 2000
Air	réaction avec l'ozone	pas de réaction	demi-vie, jours	AOPWIN, 2000
Eau	hydrolyse	< 10	demi-vie, minutes	HYDROWIN, 2000
Eau	biodégradation	60	demi-vie, jours	BIOWIN, 2000, Ultimate survey
Eau	biodégradation	0	probabilité	TOPKAT, 2004
Eau	biodégradation	0,04	probabilité	BIOWIN, 2000, MITI Non-linear

Si l'on applique un rapport d'extrapolation de 1:1:4 pour une eau : sol : une demi-vie de biodégradation des sédiments (Boethling *et al.* 1995), et la demi-vie de biodégradation de 60 jours selon le modèle de biodégradation ultime (Ultimate Survey Model) dans BIOWIN (2000), la demi-vie dans le sol devrait également être de <182 jours et la demi-vie dans les sédiments, de <365 jours. Cela indique que le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne devrait pas être persistant dans le sol et les sédiments.

Le poids de la preuve fondé sur les données susmentionnées montre que le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne répond pas aux critères de la persistance dans l'air (demi-vie ≥ 2 jours), l'eau ou le sol (demi-vie ≥ 182 jours), ou dans les sédiments (demi-vie ≥ 365 jours) énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Potentiel de bioaccumulation

Aucune valeur expérimentale n'a été obtenue sur la bioaccumulation de cette substance. Il est bien établi que d'autres diisocyanates aliphatiques, ainsi que des diisocyanates aromatiques qui devraient présenter le même profil de réactivité, s'hydrolysent rapidement en milieu humide (Infracor GmbH, 2000; Sopac et Boltromejuk, 1974 ; Pemberton et Tury, 2004; Heimbach *et al.*, 1996; Yakabe *et al.*, 1999; Tury *et al.*, 2003). Les modèles de bioaccumulation ne permettent pas de tenir compte du potentiel d'hydrolyse des substances. Il s'ensuit que les valeurs modélisées nous apprennent peu sur la bioaccumulation des substances qui réagissent presque instantanément dans l'environnement. Par ailleurs, s'il advenait que la substance mère soit absorbée, on peut prévoir qu'elle serait hydrolysée ou encore métabolisée dans le tractus digestif à telle vitesse que le potentiel de bioaccumulation deviendrait nul, étant donné la forte réactivité des diisocyanates.

La forte réactivité avec l'eau du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène complique la détermination d'une valeur expérimentale du log K_{oe} ; pour cette raison, la fiabilité des valeurs du log K_{oe} utilisées dans les modèles de bioaccumulation est douteuse.

Faute de données expérimentales sur la bioaccumulation (FBA; aussi appelé BAF) et la bioconcentration (FBC; aussi appelé BCF) du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène, une méthode du poids de la preuve reposant sur des RQSA (Environnement Canada, 2007) a été utilisée avec les modèles FBA et FBC indiqués au tableau 5.

Tableau 5. Données modélisées sur la bioaccumulation du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène

Organisme d'essai	Paramètre	Valeur en poids humide (kg)	Référence
Poisson	FBA	6 870	Gobas BAF T2MTL (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	FBC	2 700	Gobas BCF T2LTL (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	FBC	10 326	OASIS, 2005
Poisson	FBC	887	BCFWIN, 2000

Le modèle modifié du FBA de Gobas pour le niveau trophique intermédiaire a donné une valeur de 6 870 L/kg. Les résultats des calculs effectués selon le modèle FBC semblent indiquer que cette substance pourrait avoir un potentiel de bioconcentration élevé. Toutefois, en raison du caractère réactif des diisocyanates, les prévisions du log K_{oe} , et les modèles de bioaccumulation qui en dépendent, conduisent sans doute à une surestimation marquée du caractère lipophile des composés de ce type.

Dans la mesure où la diamine de tétraméthyl-*m*-xylylène peut se former par hydrolyse, en plus de polyurées insolubles, on doit penser au potentiel de bioaccumulation de celle-ci. On n'a pas relevé de valeur expérimentale pour le log K_{oe} de la diamine, mais la

version 2000 du modèle KOWWIN l'estime à 1,89. Cela signifie que le potentiel de bioaccumulation de ce produit d'hydrolyse de la diamine de tétraméthyl-*m*-xylylène est faible. Des données analogues sur la bioaccumulation possible des produits d'hydrolyse de diisocyanates aromatiques de réactivité comparable tendent à confirmer le faible potentiel de bioaccumulation de ces substances. Le FBC de la diamine de toluène paraît être de l'ordre empirique de moins de 5 à moins de 50 chez la carpe (MITI 1992).

Selon la méthode du poids de la preuve, le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne répond pas aux critères de la bioaccumulation (FBA ou FBC > 5 000) énoncés dans le Règlement sur la persistance et la bioaccumulation (Canada, 2000).

Potentiel d'effets écologiques nocifs

Évaluation des effets sur l'environnement

Milieu aquatique

Il existe des données expérimentales et modélisées selon lesquelles, même à d'assez faibles concentrations, le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène nuit aux organismes aquatiques (tableaux 6a et 6b).

Tableau 6a. Données empiriques sur la toxicité aquatique du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène

Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
Algue	toxicité aiguë (96 h)	CE ₅₀ ¹	0,36*	Cytec Industries 2003
Daphnie	toxicité aiguë (48 h)	CL ₅₀ ²	5,2	Cytec Industries 2005
Daphnie	toxicité aiguë (48 h)	CSEO ³	< 1,0	Cytec Industries 2005
Poisson	toxicité aiguë (96 h)	CL ₅₀ ²	0,67	Cytec Industries 2005
Poisson	toxicité aiguë (96 h)	CSEO ³	0,32	Cytec Industries 2005

¹ CE₅₀ – Concentration d'une substance qui est jugée susceptible de causer un effet subléthal toxique chez 50 % des organismes d'essai.

² CL₅₀ – Concentration d'une substance qui est jugée létale pour 50 % des organismes d'essai.

³ CSEO – Concentration sans effet observé, soit la concentration la plus élevée ne causant pas d'effet statistiquement significatif par rapport au groupe témoin dans un essai de toxicité.

* Valeur déterminante pour la toxicité intrinsèque aux fins de la catégorisation :

Les données empiriques concernant sa toxicité montrent qu'il est très dangereux pour les organismes aquatiques, sa CL₅₀ pour le poisson (*Pimephales promelas*) (Tête-de-boule) se chiffrant à 0,67 mg/L et sa CE₅₀ observée pour les algues (biomasse) se chiffrant à

0,36 mg/L (Cytec Industries 2005; Cytec Industries 2003). Un nombre élevé d'autres essais de toxicité chronique et de toxicité aiguë font état d'un danger modéré à élevé pour les organismes aquatiques (Cytec Industries 2005). L'annexe 1 contient des sommaires de rigueur d'études sur cette évaluation réalisée en 2003 par Cytek Industries.

Compte tenu de son hydrolyse rapide prévue, on peut difficilement savoir dans quelle mesure le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène est directement responsable des effets toxiques observés, ou dans quelle mesure un produit de son hydrolyse en serait responsable. Dans un cas comme dans l'autre, il semble que cette substance, ses produits d'hydrolyse ou une combinaison des deux présentent un danger grave pour les organismes aquatiques.

Une gamme de prévisions de la toxicité aquatique a été obtenue à l'aide des modèles RQSA examinés. Ces résultats nous apprennent que la substance à l'étude est modérément à très dangereuse pour les organismes aquatiques.

Tableau 6b. Données modélisées sur la toxicité aquatique du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène

Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
Poisson	toxicité aiguë (96 h)	CL ₅₀ ¹	1,35	ECOSAR, 2004
			≤ 0,6	TIMES 2007 (Canadian-POPs) for Unspecified Reactive Mode
			49,76	AIES, 2003-2005
			1,2	TOPKAT, 2004
Daphnie	toxicité aiguë (48 h)	CE ₅₀ ²	1,2	TOPKAT, 2004

¹ CE₅₀ – Concentration d'une substance qui est jugée susceptible de causer un effet subléthal toxique chez 50 % des organismes d'essai.

² CL₅₀ – Concentration d'une substance qui est jugée létale pour 50 % des organismes d'essai.

Autres milieux naturels

On n'a trouvé aucune étude acceptable sur les effets écologiques de cette substance dans d'autres milieux que l'eau.

Évaluation de l'exposition de l'environnement

Aucune donnée sur la concentration de diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène dans les milieux naturels (air, eau, sol et sédiments) au Canada n'a été trouvée. Par conséquent, les concentrations dans l'environnement sont évaluées à partir des renseignements disponibles, notamment des estimations de la quantité et du taux de rejet de la substance, ainsi que des renseignements sur les plans d'eau récepteurs.

L'outil générique d'estimation de l'exposition attribuable à des rejets industriels en milieu aquatique (IGETA) d'Environnement Canada a servi à estimer la concentration (la

pire éventualité raisonnable) de la substance dans un cours d'eau générique qui reçoit des effluents industriels. (Environnement Canada, 2008a). Le scénario générique vise à fournir des estimations fondées sur des hypothèses prudentes sur la quantité de la substance traitée et rejetée, le nombre de jours de traitement, le taux d'élimination de l'usine de traitement des eaux usées et la superficie du cours d'eau récepteur. Le scénario modélisé tient compte des données sur la charge obtenues de sources telles que des enquêtes industrielles, ainsi que des connaissances sur la distribution des rejets industriels au pays, et calcule la concentration environnementale estimée (CEE). L'équation et les données utilisées pour calculer la CEE dans le cours d'eau récepteur sont décrites dans le rapport de l'IGETA (Environnement Canada, 2008e). En supposant une quantité utilisée de 100 kg (soit le seuil de déclaration pour l'avis de 2005 en vertu de l'article 71 de la Loi, laquelle n'a été atteinte par aucune entreprise au Canada), la concentration environnementale estimée (CEE) dans l'eau était de 0,0006 mg/L.

Caractérisation du risque écologique

Une concentration estimée sans effet (CESE) prudente a été estimée à partir de la CSEO chez le poisson. Il apparaît donc peu probable que les concentrations de diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène dans les eaux de surface au Canada puissent causer des effets nocifs sur des populations d'organismes aquatiques. Un facteur de 100 a été appliqué afin de tenir compte de l'incertitude entourant l'extrapolation de la toxicité aiguë à la toxicité chronique (à long terme) et entourant l'extrapolation aux conditions sur le terrain de résultats obtenus au laboratoire. La CESE résultante s'élève à 0,0032 mg/L. Lorsqu'on le compare à la valeur prudente de la CEE calculée ci-dessus aux fins des rejets industriels, le quotient de risque (CEE/CESE) se chiffre à $0,0006/0,0032 = 0,19$. Il apparaît donc peu probable que les concentrations de diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène dans les eaux de surface au Canada puissent causer des effets nocifs sur des populations d'organismes aquatiques. Une marge de sécurité de cinq ordres de grandeur est associée à la valeur prudente du quotient de risque pour tenir compte des incertitudes entourant le calcul de la CEE et de la CESE.

Selon les renseignements disponibles, le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne persiste pas dans l'environnement et il n'est pas bioaccumulable si on applique les critères du *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000). En outre, dans l'eau, cette substance devrait s'hydrolyser rapidement et former des polyurées et des diamines insolubles. Nous ne détenons pas pour l'instant de renseignements sur sa concentration dans l'environnement. Toutefois, les données écotoxicologiques expérimentales indiquent que cette substance et que ses produits d'hydrolyse pourraient être nocifs pour les organismes aquatiques même à de faibles concentrations dans l'eau. Les quotients de risque associés à l'exposition aquatique montrent que sa concentration ne dépasse probablement pas celle où se manifestent des effets, même lorsque des hypothèses et des scénarios prudents sont évoqués. Par conséquent, il est peu probable que le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène nuise aux populations d'organismes aquatiques au Canada.

Incertitudes de l'évaluation des risques écologiques

Nous manquons de renseignements sur la concentration du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène dans l'environnement canadien. Cependant, comme il n'est ni importé ni fabriqué en grandes quantités au pays, cela devrait donner lieu à très peu de rejets dans l'environnement canadien.

De grandes incertitudes entourent aussi l'évaluation des propriétés physiques et chimiques ainsi que de la toxicité aquatique de cette substance. La solubilité dans l'eau et le log K_{oe} comptent pour beaucoup dans la détermination du devenir et de la biodisponibilité d'une substance, de même que dans l'estimation de sa toxicité aquatique. Il n'existe pas de données expérimentales sur ces propriétés dans le cas du diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène, car en raison de la rapidité de l'hydrolyse des diisocyanates aliphatiques, il est impossible de les mesurer. De la même façon, à cause de la réactivité de ce composé en milieu humide, les prévisions relatives à ces propriétés sont peu fiables. L'estimation du potentiel de bioaccumulation est également mise en question puisque ce paramètre est calculé à partir du log K_{oe} .

Il y a également de l'incertitude au sujet des produits d'hydrolyse puisque les hypothèses les concernant sont fondées sur des observations et sur des renseignements provenant d'autres diisocyanates aliphatiques et aromatiques (Infracor GmbH, 2000; Sopac et Boltromajuk, 1974; Pemberton et Tury, 2004; Heimbach *et al.*, 1996; Yakabe *et al.*, 1999; Tury *et al.*, 2003). Cependant, des renseignements émanant de Cytec Industries (2005) sur le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène montrent que la réaction de ce composé avec l'eau produit effectivement des urées insolubles.

L'évaluation de la toxicité aquatique de cette substance comporte également des incertitudes, car on ignore si la valeur observée empiriquement résulte d'effets toxiques directement attribuables au diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène (p. ex., à une partie de la substance qui n'aurait pas encore réagi), à ses produits d'hydrolyse ou encore à une combinaison des deux. Une autre source d'incertitude s'ajoute parfois à la toxicité intrinsèque de cette substance pour les organismes aquatiques; c'est le cas, par exemple, lorsque sa concentration dépasse sa solubilité dans l'eau (résultats prévus ou expérimentaux). Partant du fait que la concentration correspondant à la toxicité et que celle correspondant à la solubilité dans l'eau varient souvent de façon importante (jusqu'à plusieurs ordres de grandeur), l'existence de ces incertitudes est admise.

Quant à l'évaluation de l'exposition, la concentration environnementale estimée (CEE) tient compte seulement de la concentration dans l'eau, de sorte que l'exposition par le sol, les matières en suspension et les sédiments n'est pas envisagée. Par contre, à l'examen des scénarios relatifs au rejet dans l'environnement et aux quantités utilisées de diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène, il semble peu probable qu'au Canada, l'exposition soit importante pour l'instant. Les rejets potentiels de produits pouvant contenir cette substance n'ont pas été pris en considération dans le scénario d'exposition, ce qui rend la caractérisation de l'exposition incertaine.

Conclusion

D'après les renseignements disponibles, on conclut que le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité ou concentration ou dans des conditions de nature à avoir, immédiatement ou à long terme, un effet nocif sur l'environnement ou sur la diversité biologique, ni à mettre en danger l'environnement essentiel pour la vie.

Par conséquent, il est proposé de conclure que le diisocyanate de tétraméthyl-*m*-xylylène ne correspond pas à la définition de « substance toxique » énoncée dans l'article 64 de la LCPE (1999). De plus, cette substance ne répond pas aux critères de la persistance et de la bioaccumulation énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Références

[AIES] Artificial Intelligence Expert System. 2003-2005. Version 1.25. Modèle mis au point par Stephen Niculescu, Environment Canada, Ottawa (Ontario). Available from: Environment Canada, Existing Substances Division, New Substances Division, Ottawa, K1A 0H3.

[AOPWIN] Atmospheric Oxidation Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.91. 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

Arnot, J.A., et F.A.Gobas. 2003. A generic QSAR for assessing the bioaccumulation potential of organic chemicals in aquatic food webs. *QSAR Comb. Sci.* 22(3): 337-345.

Avis de deuxième divulgation d'information technique concernant les substances identifiées dans le Défi. Préparé par : Environnement Canada, Programme des substances existantes.
Environnement Canada. (2007b). Guidance for conducting ecological assessments under CEPA, 1999: science resource technical series: draft module on QSARs. Document de travail préliminaire. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes.

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

[BIOWIN] Biodegradation Probability Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 4.02. 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

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

Canada. 1999. Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999), L.C. 1999, chap. 33. Partie III. vol. 22, no 3. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partIII/1999/g3-02203.pdf>

Canada. 2000. Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Règlement sur la persistance et la bioaccumulation, C.P. 2000-348, 23 mars 2000, DORS/2000-107, Gazette du Canada, Partie II, vol. 134, no 7, p. 607-612. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partII/2000/20000329/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 de gestion et d'évaluation des risques que certaines substances présentent pour la santé des Canadiens et leur environnement. Gazette du Canada. Partie I, vol. 140, no 49, p. 4109-4117. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partI/2006/20061209/pdf/g1-14049.pdf>.

Canada. Ministère de l'Environnement, ministère de la Santé. 2006b. Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis concernant certaines substances considérées comme priorités pour suivi. Gazette du Canada, Partie I, vol. 140, no 9, p. 435-459. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partI/2006/20060304/pdf/g1-14009.pdf>

Canada. Ministère de l'Environnement. 2007. Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis concernant certaines substances identifiées dans le deuxième lot du Défi. Gazette du Canada, Partie I, vol. 141, no 19, p. 1186-1201. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partI/2007/20070512/pdf/g1-14119.pdf>

Cytec Industries. 2003. Isocyanic acid, m-phenylenediiso-propylidene, CAS# 2778-42-9 [rapport on Internet]. Washington (DC): US Environmental Protection Agency, High Production Volume (HPV) Challenge Program. [Cité en août 2008]. Accès : <http://www.epa.gov/hpv/pubs/summaries/isocyani/c13996rr.pdf>

Cytec Industries. 2005. Test plan for TMXDI® (meta) aliphatic isocyanate: Isocyanic acid, m-phenylenediiso-propylidene, CAS# 2778-42-9 [Internet]. Washington (DC): US Environmental Protection Agency, High Production Volume (HPV) Challenge Program. [Cité en août 2008]. Accès : <http://www.epa.gov/hpv/pubs/summaries/isocyani/c13996rt2.pdf>

[ECOSAR] Ecological Structural Activity Relationships [Internet]. 2004. Version 0.99h. 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

Environnement Canada 2003. Document d'orientation sur la catégorisation des substances organiques et inorganiques inscrites sur la Liste intérieure des substances du Canada. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes.

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

Environnement Canada. 2008a. Guidance for conducting ecological assessments under CEPA, 1999: science resource technical series, technical guidance module: Mega Flush consumer release scenario. Ébauche de document de travail préliminaire. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes.

Environnement Canada. 2008b. Rapport IGETA : CAS RN 68308-48-5, 03/03/2008. Rapport non publié. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes.

[EQC] Equilibrium Criterion Model. 2003. Version : Peterborough (Ont.) : Université Trent, Canadian Environmental Modelling Centre. Accès : <http://www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel/models/TaPL3.html>

Heimbach F, Jaeger K, Sporenberg W. 1996. Fate and Biological Effects of Polymeric MDI (4,4-diphenylmethane diisocyanate and homologues) in small artificial ponds. *Ecotox. Environ. Safety* 33: 143-153

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

[HYDROWIN] Hydrolysis Rates 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

Infracor GmbH 2000. Loslichkeits- und Abbauverhalten von Isophorondiisocyanat (IPDI) in Wasser. Lettre de W. Schleich à Degussa AG, en date du 26 juin 2000 [tel que cité dans l'ensemble de données IUCLID concernant l'IPDI].

[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

MITI (Ministry of International Trade & Industry). 1992. *Biodegradation and Bioaccumulation: Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan*, publié par le Chemicals Inspection and Testing Institute, Chemical Products Safety Division, Basic Industries Bureau, Ministry of International Trade and Industry, Tokyo (Japan).

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

[NCI] National Chemical Inventories [base de données sur CD-ROM]. 2007. Issue 1. Columbus (OH): American Chemical Society, Chemical Abstracts Service. [Cité le 11 décembre 2006]. Accès : <http://www.cas.org/products/cd/nci/require.html>

[OASIS Forecast] Optimized Approach based on Structural Indices Set [Internet]. 2005. Version 1.20 Bourgas (BG) : 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 1.66. 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

Pemberton D, Tury B. 2004. TDI Industry Risk Assessment: Sections on physico-chemical properties, environmental exposures, and environmental effects. GIL Report 2004/E.

Sopac ED, Boltromejuk LP. 1974. Gig. Sanit. 7:10-13 [as cited in IUCLID data for HDI]

[TIMES] Tissue MEtabolism Simulator [Computer Model]. 2007. Version 2.25. Bourgas (BG) : Bourgas Prof. Assen Zlatarov University, Laboratory of Mathematical Chemistry. Accès : <http://oasis-lmc.org/?section=software&swid=1>

[TOPKAT] Toxicity Prediction Program [Internet]. 2004. Version 6.2. Accès : <http://www.accelrys.com/products/topkat/index.html>

Tury B, Pemberton D, Bailey RE. 2003. Fate and Potential Environmental Effects of methylenediphenyl diisocyanate and toluene diisocyanate released into the atmosphere. J. Air & Waste Manage.Assoc. 53:61-66.

[WATERNT] Water Solubility Program [modèle d'estimation]. 2002. Version 1.00. 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

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

Yakabe Y, Henderson KM, Thompson WC, Pemberton D, Tury B, Bailey RE. 1999. Fate of methylenediphenyl diisocyanate and toluene diisocyanate in the aquatic environment. Environ Sci Technol. 33 (15): 2579-2583.

Annexe I – Sommaires de rigueur d'études

SOMMAIRE DE RIGUEUR D'ÉTUDE – Persistance

Point	Oui	Non
Référence : Cytec Industries. 2005. Test plan for TMXDI® (meta) aliphatic isocyanate: Isocyanic acid, m-phenylenediiso-propylidene, CAS# 2778-42-9 [Internet]. Washington (DC): US Environmental Protection Agency, High Production Volume (HPV) Challenge Program. [Cité en août 2008]. Accès : http://www.epa.gov/hpv/pubs/summaries/isocyanic/c13996rt2.pdf Précisions sur l'étude extraite du document IUCLID Dataset (201-15835), Cytek Industries, 21-01-2005 Accès : http://www.epa.gov/HPV/pubs/summaries/isocyanic/c13996rr3.pdf		
Substance : No CAS et identité : 2778-42-9; Isocyanic acid, m-phenylenediiso-propylidene		
Indication de la pureté de la substance? (O/N et précisez) 99,29 %	X	
Méthode		
Références (O/N)	X	
OCDE, UE, nationale ou autre méthode normalisée? (O/N) Guide de l'OCDE – ligne 111 « Taux d'hydrolyse en fonction du pH »	X	
Justification de la méthode ou du protocole non normalisé utilisé, le cas échéant? (O/N)	s/o	
Conception et conditions d'essai		
Type d'épreuve (hydrolyse, biodégradation, etc.) : hydrolyse		
Type de conditions d'épreuve (aérobie ou anaérobie) : s.o.		
Milieu d'épreuve (air, eau, sol ou sédiment) : eau		
Données disponibles sur la stabilité de la substance dans le milieu de préoccupation? : Non		
Données sur les témoins (O/N et indiquez s'ils sont positifs ou négatifs) positifs et négatifs		X
Nombre de répétitions (O/N et précisez)		X
Température (O/N et précisez) 25 °C	X	
Durée de l'épreuve (O/N et précisez) 24 heures	X	
Méthode/instrument d'analyse/technique utilisé (O/N)	X	
Pour photodégradation seulement		
Gaz réactants – réactions en phase gazeuse		
Source de lumière (O/N et précisez)		
Spectre de la lumière et/ou intensité relative fondée sur l'intensité des rayons solaires (O/N)		
Pour l'hydrolyse seulement		
Des concentrations mesurées sont-elles indiquées? (O/N)		X
Indication des valeurs du pH? (O/N et précisez)	X	
Pour biodégradation seulement		
Biodégradation immédiate ou intrinsèque? immédiate		
Concentration de la substance (O/N)		
Source d'inoculum (O/N)		
Concentration d'inoculum ou nombre de microorganismes (O/N)		
Résultats		
Paramètres déterminés/valeurs/unités: t1/2 pH4 : 0,4 h; t1/2 pH7 : 0,4 h; t1/2 pH9 : 0,3 h		
Données disponibles sur les produits de dégradation? Non		

Résultat global : 7/10 = 70 %
Code de fiabilité d'EC : 2
Catégorie de fiabilité (élevé, satisfaisante, faible) : Satisfaisante
Commentaires :

SOMMAIRE DE RIGUEUR D'ÉTUDE – Toxicité intrinsèque

Point	Oui	Non
Référence : Cytec Industries. 2003. Isocyanic acid, m-phenylenediiso-propylidene, CAS# 2778-42-9 [report on the Internet]..Washington (DC): US Environmental Protection Agency, High Production Volume (HPV) Challenge Program. [Cité en août 2008]. Accès : http://www.epa.gov/hpv/pubs/summaries/isocyani/c13996rr.pdf		
Substance : CAS 2778-42-9 et identité : 2778-42-9; Isocyanic acid, m-phenylenediiso-propylidene		
* Indication de la pureté de la substance? (O/N et précisez) 98 - 99 %	X	
Indication de la persistance/stabilité de la substance en milieu aquatique? (O/N)		X
Méthode		
(Références O/N)	X	
* OCDE, UE, nationale ou autre méthode normalisée? (O/N) Selon les méthodes dictées par le Committee on Methods for Toxicity Test with Aquatic Organisms, USEPA 660/3-75009. ABC Laboratories Protocol 7601.	X	
Justification de la méthode ou du protocole non normalisé utilisé, le cas échéant? (O/N)	s/o	
* BPL (bonnes pratiques de laboratoire) (O/N)	X	
Organismes d'essai (indication du nom latin ou des deux noms) (Pimephales promelas, tête-de-boule)		
Indication du nom latin ou des deux nom (latin et commun)? (O/N)	X	
Âge ou stade biologique de l'organisme (O/N)		X
Sexe (O/N)		X
Longueur et/ou poids de l'organisme (O/N)	X	
Nombre d'organismes par répétition (O/N) 10	X	
Type de nourriture et périodes d'alimentation au cours de la période d'acclimatation (O/N)	X	
Conception et conditions d'essai		
Type d'essai (toxicité aiguë ou chronique) : aiguë		
Type d'expérience (en laboratoire ou sur le terrain)? (O/N)	X	
Type de système (statique, semi-statique, dynamique) (O/N) statique	X	
Témoins négatifs ou positifs? (O/N et préciser) négatif	X	
Nombre de répétitions (y compris les témoins) et concentrations (O/N) 10 par concentration d'essai	X	
Voies d'exposition (nourriture, eau, les deux) (O/N)	X	
Durée d'exposition (O/N et préciser) 96 heures	X	
* Indication des concentrations mesurées? (O/N)		X
Conditions du milieu d'exposition (température, pH, conductivité électrique, dureté, COT, DCO, OD, principaux cations et anions; autres) (O/N)	X	
Le pH était-il dans l'intervalle de 6 à 9? oui		
La température était-elle dans l'intervalle de 5 à 28 °C? oui		

Photopériode et intensité de l'éclairage (O/N)		X
Préparation de solutions mères et de solutions d'essai (O/N)	X	
Renseignements sur l'agent émulsionnant ou le solubilisant utilisé pour les substances peu solubles ou instables (O/N)	s/o	
Intervalles des contrôles analytiques (O/N) observation quotidienne des poissons, évaluation tout au long de l'essai de la qualité de l'eau, des paramètres de la température, de l'oxygène dissous et du pH	X	
Méthodes statistiques utilisées (O/N)	X	
Résultats		
Paramètres/valeurs/unités de toxicité : 96 heures CSEO 0,32 mg/L		
Autres paramètres indiqués (p. ex. FBC/FBA, CMEO/CSEO, etc.): CL50 (96 heures) 0,67 mg/L		
*La valeur de la toxicité est-elle inférieure à celle de la solubilité de la substance dans l'eau? (O/N) solubilité de l'eau inconnue	s/o	
Autres effets nocifs (cancérogénicité, mutagénicité, etc.)	s/o	
Résultat : points importants – 3 / 4; résultat global : 18/23 = 78 %		
Code de fiabilité d'EC : 2		
Catégorie de fiabilité (élevée, satisfaisante, faible) : satisfaisante		
Commentaires : La solubilité de l'eau n'était pas indiquée; des concentrations nominales ont été utilisées.		