

Rapport d'évaluation préalable pour le Défi

***N*-[4-(Acétylamino)phényl]-4-[[5-(aminocarbonyl)-
2-chlorophényl]azo]-3-hydroxynaphtalène-2-carboxamide
(Pigment Orange 38)**

**Numéro de registre du Chemical Abstracts Service :
12236-64-5**

**Environnement Canada
Santé Canada**

Juillet 2008

Synopsis

Conformément à l'article 74 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* [LCPE (1999)], les ministres de l'Environnement et de la Santé ont effectué une évaluation préalable du *N*-[4-(acétylamino)phényl]-4-[[5-(aminocarbonyl)-2-chlorophényl]azo]-3-hydroxynaphtalène-2-carboxamide (aussi appelé « Pigment Orange 38 »), dont le numéro de registre du Chemical Abstracts Service (CAS) est 12236-64-5. Une priorité élevée a été donnée à l'évaluation préalable de cette substance inscrite au Défi lancé par les ministres, car elle répondait aux critères environnementaux de la catégorisation (persistance, potentiel de bioaccumulation et toxicité intrinsèque pour les organismes autres que les êtres humains) et l'on croit qu'elle est commercialisée au Canada.

L'évaluation des risques que présente la substance Pigment Orange 38 pour la santé humaine n'a pas été jugée hautement prioritaire à la lumière des résultats fournis par des outils simples de détermination du risque d'exposition et du risque pour la santé mis au point par Santé Canada aux fins de la catégorisation des substances figurant sur la Liste intérieure des substances (c.-à-d. qu'elle ne répondait pas aux critères pour être considérée comme présentant le plus fort risque d'exposition ou le risque d'exposition intermédiaire et qu'elle n'a pas été classée comme cancérigène, mutagène ou toxique pour le développement ou la reproduction par un autre organisme national ou international de réglementation). Pour ces raisons, la présente évaluation est axée sur l'information pertinente pour l'évaluation des risques pour l'environnement.

Le Pigment Orange 38 est une substance organique utilisée au Canada principalement comme pigment de coloration dans les plastiques et les encres. Il n'est pas produit naturellement dans l'environnement; il ne serait pas non plus fabriqué au Canada, mais il y aurait été importé en une quantité qui se situerait entre 100 et 1 000 kg en 2006 pour la fabrication de divers produits colorés.

Certaines hypothèses et les renseignements obtenus sur les utilisations au Canada permettent de croire que le Pigment Orange 38 aboutit en majeure partie dans les décharges. Les hypothèses et les paramètres utilisés pour arriver à cette conclusion se fondent sur des données de diverses sources, entre autres, enquêtes réglementaires, Statistique Canada, sites Web de fabricants et bases de données techniques. Il a été estimé qu'une proportion d'environ 5 p. 100 de la substance serait rejetée dans l'eau. Aucun rejet n'est prévu dans l'air et le sol. Les valeurs déterminées expérimentalement de la solubilité dans l'eau et l'octanol sont très faibles (de 10 à 100 µg/L selon de nouvelles données). Le Pigment Orange 38 est présent dans l'environnement surtout sous forme de microparticules non volatiles, plutôt stables chimiquement, qui tendent à se déposer, sous l'action de la pesanteur, soit dans les sédiments en cas de rejet dans des eaux de surface, soit dans le sol si la substance est rejetée dans l'air.

Étant donné ses propriétés physiques et chimiques, le Pigment Orange 38 devrait être persistant dans l'environnement. Toutefois, de nouvelles données expérimentales sur sa solubilité dans l'octanol et dans l'eau indiqueraient un faible potentiel d'accumulation dans les tissus adipeux des organismes. Le Pigment Orange 38 remplit donc le critère de la persistance, mais non celui relatif à la bioaccumulation du *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*. En outre, de

nouvelles données expérimentales sur la toxicité d'un analogue chimique, ainsi que de nouvelles estimations de la toxicité tenant compte d'estimations révisées du potentiel de bioaccumulation, indiqueraient que les solutions saturées de la substance ne causent pas d'effets nocifs aigus aux organismes aquatiques.

Aux fins de la présente évaluation préalable, un scénario très prudent d'exposition à partir des rejets de Pigment Orange 38 dans le milieu aquatique par une installation industrielle (un utilisateur du pigment) a été choisi. 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, les daphnies et les algues.

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

Compte tenu des renseignements disponibles, le Pigment Orange 38 ne remplit aucun des critères de l'article 64 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*.

Introduction

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

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

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

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

Le Pigment Orange 38 est une substance dont l'évaluation des risques pour l'environnement a été jugée hautement prioritaire puisqu'elle est persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques et que l'on croit être commercialisée au Canada. Le volet du Défi portant sur cette substance a été lancé le 3 février 2007 au moyen d'un avis paru dans la *Gazette du Canada* (Canada, 2007a). Le profil de cette substance a été publié en même temps. Ce profil présentait l'information technique, obtenue avant décembre 2005, sur laquelle a reposé la catégorisation de cette substance. En réponse au Défi, on a reçu des documents présentant des renseignements.

Même si l'évaluation des risques pour l'environnement du Pigment Orange 38 est jugée hautement prioritaire, cette substance ne répond pas aux critères de PFRE ou de REI et de grave danger au plan de la santé humaine lorsqu'on examine les classements attribués par d'autres organismes nationaux ou internationaux concernant sa cancérogénicité, sa génotoxicité ou sa

toxicité pour le développement ou la reproduction. Par conséquent, la présente évaluation est axée principalement sur les renseignements relatifs à l'évaluation des risques pour l'environnement.

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

« 64. [...] est toxique toute substance qui pénètre ou peut pénétrer dans l'environnement en une quantité ou concentration ou dans des conditions de nature à :

- a) avoir, immédiatement ou à long terme, un effet nocif sur l'environnement ou sur la diversité biologique;
- b) mettre en danger l'environnement essentiel pour la vie;
- c) constituer un danger au Canada pour la vie ou la santé humaine. »

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

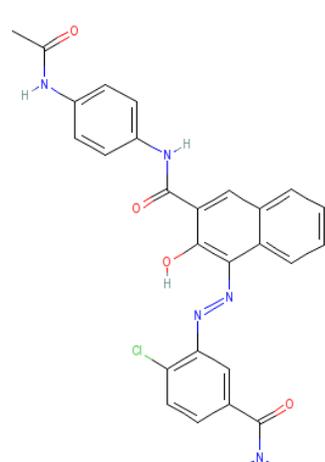
Cette évaluation préalable inclue l'examen des renseignements sur les propriétés chimiques, les dangers, les utilisations et l'exposition, à l'inclusion des renseignements additionnels fournis dans le cadre du Défi. Des données pertinentes à l'évaluation préalable de cette substance ont été relevées dans des publications originales, des rapports de synthèse et d'évaluation, des rapports de recherche de parties intéressées et d'autres documents accessibles lors de recherches menées dernièrement, jusqu'en juillet 2007. Les études importantes ont fait l'objet d'évaluations critiques. Les études clés ont fait l'objet d'évaluation critique ; les résultats de la modélisation ont pu être utilisés dans la formulation de conclusions. L'information disponible et pertinente présentée dans des évaluations des dangers faites par d'autres instances a également été utilisée. La présente évaluation préalable n'est pas le résultat d'un examen exhaustif ou critique de toutes les données disponibles, mais il fait plutôt état des études et des éléments de preuve les plus importants pour appuyer la conclusion.

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

Identité de la substance

Aux fins du présent rapport, la substance est appelée « Pigment Orange 38 ». Ce pigment appartient au groupe des pigments organiques de naphthol AS de type III dont l'entité de base est le 3-hydroxy-2-naphthanilide (tableau 1; Herbst et Hunger, 2004).

Tableau 1. Identité de la substance

Numéro de registre CAS	12236-64-5
Nom dans la LIS	<i>N</i> -[4-(Acétylamino)phényl]-4-[[5-(aminocarbonyl)-2-chlorophényl]azo]-3-hydroxynaphtalène-2-carboxamide
Noms dans les inventaires	2-Naphthalenecarboxamide, <i>N</i> -[4-(acetylamino)phenyl]-4-[[5-(aminocarbonyl)-2-chlorophenyl]azo]-3-hydroxy-(TSCA, AICS, PICCS, ASIA-PAC); <i>N</i> -[4-(Acétylamino)phényl]-4-[[5-(aminocarbonyl)-2-chlorophényl]azo]-3-hydroxynaphtalène-2-carboxamide (EINECS); Pigment Orange 38 (ENCS, PICCS); C.I. Pigment Orange 038 (ECL); C.I. PIGMENT ORANGE 38 (PICCS).
Autres noms	2-Naphthanilide, 4'-acetamido-4-[(5-carbamoyl-2-chlorophenyl)azo]-3-hydroxy-; Novoperm Orange HFG; Novoperm Red HFG; Permanent Red HFG; PV-Red HFG.
Groupe chimique	Produits chimiques organiques définis
Sous-groupe chimique	Pigments organiques monoazoïques (pigments de naphthol AS, type III)
Formule chimique	C ₂₆ H ₂₀ ClN ₅ O ₄
Structure chimique	
SMILES	O=C(Nc(ccc(NC(=O)c(c(O)c(N=Nc(c(ccc1C(=O)N)Cl)c1)c(c2ccc3)c3)c2)c4)c4)C
Masse moléculaire	501,93 g/mole

Source : National Chemical Inventories (NCI) 2007 : 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); PICCS (inventaire des produits et substances chimiques des Philippines); TSCA (Inventaire des substances chimiques visées par la *Toxic Substances Control Act*); ASIA-PAC (inventaires combinés des pays de l'Asie-Pacifique).

Propriétés physiques et chimiques

L'industrie des pigments synthétise des pigments organiques qui sont peu et même très peu solubles (de moins de $1,0 \text{ mg/L}^{-1}$ à moins de $0,01 \text{ mg/L}^{-1}$) dans presque tous les solvants. Cette propriété découle de la volonté de l'industrie de fabriquer des produits qui conserveront leur couleur longtemps et dans n'importe quel type de matériau. Pour l'améliorer, l'industrie conçoit des produits dans lesquels les forces d'interaction entre les molécules sont élevées. Dans le cas des dérivés du naphthol AS, elle a introduit dans la molécule des substituants comme $-\text{CONH}_2$, $-\text{SO}_2\text{NH}-$ et $-\text{Cl}$ (Herbst et Hunger, 2004; Lincke, 2003). Les liaisons intermoléculaires résultantes créent une structure cristalline qui explique la stabilité des pigments organiques (Lincke, 2003).

Comme la plupart des pigments organiques, les pigments de naphthol AS de type III n'existent généralement pas en tant que molécules individuelles. Ils se présentent plutôt principalement sous la forme de particules de taille submicronique. Ils forment des poudres typiquement composées de particules primaires (cristallites du pigment), d'agrégats et d'agglomérats. Les fabricants de pigments fournissent habituellement les spécifications physiques de leurs produits, dont la taille moyenne des particules de la poudre (voir le tableau 2). Les utilisateurs peuvent ainsi déterminer le pigment qui convient le mieux pour colorer leurs produits, étant donné que la performance du pigment est principalement régie par la composition granulométrique (Herbst et Hunger, 2004).

Le tableau 2 présente les propriétés physiques et chimiques (valeurs modélisées et expérimentales) du Pigment Orange 38 qui ont trait à son devenir dans l'environnement. Des modèles de relations quantitatives structure-activité (RQSA) sont typiquement utilisés pour estimer ces propriétés, les constantes de vitesse et la répartition dans l'environnement. Ils fondent leurs estimations sur les caractéristiques des molécules individuelles. Pour le $\log K_{oe}$ établi par modélisation, ils ont indiqué une valeur de 5,79 (KOWWIN, 2000) selon laquelle la solubilité du Pigment Orange 38 serait beaucoup plus élevée dans l'octanol que dans l'eau. Or, les données expérimentales sur la solubilité révèlent plutôt que cette substance est à peu près aussi soluble dans les deux solvants. Le coefficient de partage déterminé par modélisation est donc probablement surestimé. En conséquence, la valeur modélisée du $\log K_{oe}$ n'a pas été prise en considération dans cette évaluation.

Les valeurs expérimentales de la solubilité indiquées dans le tableau 2 ont été déterminées selon une méthode vigoureuse comportant de longs temps de contact des particules avec le solvant, ainsi qu'une étape de filtration pour éliminer le plus de particules possible dans la suspension. Les études qui les ont produites ont fait l'objet d'examen critiques et, bien que dans aucune l'on n'ait fait état de l'utilisation de substances de référence dont la solubilité est connue, elles ont été jugées suffisamment fiables aux fins de la présente évaluation des risques.

Tableau 2. Propriétés physiques et chimiques du Pigment Orange 38

Propriété	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
État physique	expérimental	poudre rouge jaunâtre translucide	--	Herbst et Hunger, 2004
Taille moyenne des particules cristallines (nm)	expérimental	165	--	Clariant, 2007
Point de fusion (°C)	expérimental	n.d.	n.d.	--
	modélisé	350	--	MPBPWIN, v. 1.41
Point d'ébullition (°C)	expérimental	n.d.	n.d.	--
	modélisé	848	--	MPBPWIN, v. 1.41
Masse volumique (g/cm ³)	expérimental	1,46	n.d.	Clariant, 2007
	modélisé	n.d.	n.d.	--
Pression de vapeur (Pa)	expérimental	n.d.	n.d.	--
	modélisé	$8,69 \times 10^{-21}$	25	MPBPWIN, v. 1.41
Constante de la loi de Henry (Pa·m ³ /mole)	expérimental	n.a.	n.a.	--
	modélisé	$2,36 \times 10^{-23}$	25	HENRYWIN, v. 3.10
Log K _{oc} (coefficient de partage octanol/eau) [sans dimension]	expérimental	0,79	24 – 25	voir le texte
	modélisé	n.a.	n.a.	voir le texte
Log K _{co} (coefficient de partage carbone organique/eau) [L/kg]	expérimental	n.d.	n.d.	--
	modélisé	n.d.	n.d.	--
Solubilité dans l'eau (µg/L)	expérimental	24,9	24 – 25	Étude présentée, 2007b
	modélisé	11,2	25	WSKOWWIN, v. 1.41
Solubilité dans d'autres solvants (µg/L)	expérimental (octanol)	155	24 – 25	Étude présentée, 2007b
Log pK _a (constante de dissociation acide) [sans dimension]	expérimental	n.d.	n.d.	--
	modélisé	12,66 (groupe fonctionnel le plus pertinent) ¹	25	ACD/pK _a DB, 2005

n.d. : non disponible; n.a. : non applicable.

¹ Des propriétés acido-basiques sont requises pour qu'une substance chimique agisse comme découpleur de la phosphorylation oxydative (voir plus loin la section sur l'évaluation des effets écologiques). Les valeurs indiquées s'appliquent à la molécule individuelle solubilisée.

Sources

Il ne semble pas que le Pigment Orange 38 soit produit naturellement dans l'environnement. D'après une enquête menée à la suite de l'avis publié en application de l'article 71 de la LCPE, aucune entreprise ne l'aurait fabriqué au Canada en une quantité dépassant le seuil de déclaration de 100 kg au cours de l'année civile 2006. Une entreprise a déclaré avoir importé cette

substance, soit un volume de 100 à 1 000 kg par année, pour fabriquer divers produits colorés (Environnement Canada, 2007a).

Des produits contenant le Pigment Orange 38 non comptabilisés dans l'enquête pourraient entrer au Canada. On ignore les quantités en cause. D'après les données de l'Environmental Protection Agency des États-Unis (US EPA, 2002), les volumes importés et produits de Pigment Orange 38 dans ce pays se situaient dans l'intervalle de 4,5 à 225 tonnes en 1986 et 1994; aucune production ou importation n'a été déclarée en 1990, 1998 et 2002. La base de données SPIN sur les substances dans les préparations dans les pays nordiques révèle une baisse de la consommation du pigment au Danemark, soit de 6,8 tonnes en 2000 à 0,8 tonne en 2001 et 2002. Elle indique également des utilisations en Suède, de 1999 à 2004, et au Danemark en 2003 et 2004, mais les quantités ne sont pas précisées (SPIN, 2006).

Utilisations

Compte tenu des soumissions faites en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999), le seul code d'utilisation courant connu pour le Pigment Orange 38 est en tant que colorant – pigment/teinture/encre (Environnement Canada, 2007a). Au Canada, le Pigment Orange 38 est réglementé en vertu de la *Loi sur les aliments et drogues* pour l'utilisation d'un système d'encre pour du matériel d'emballage qui ne serait pas en contact avec les aliments (Santé Canada, 2007).

À l'échelle internationale, le Pigment Orange 38 est notamment utilisé :

- comme pigment pour les plastiques (CII, 2007; Clariant, 2007; Herbst et Hunger, 2004);
- comme colorant pour les PVC, les oléfines et les polyesters insaturés, de même que pour les crayons et les dispersions de cire (Heitzman, 2007; Herbst et Hunger, 2004);
- comme colorant dans les encres d'imprimerie (CII, 2007; Herbst et Hunger, 2004);
- pour colorer dans la masse des filaments, fibres et films faits en acétate secondaire (Herbst et Hunger, 2004);
- comme colorant dans les peintures et les revêtements – dans les secteurs du traitement et du revêtement des produits métalliques fabriqués, de la machinerie et de l'équipement et dans l'industrie de la construction (Herbst et Hunger, 2004; SPIN, 2006).

Les utilisations au Canada comme colorant – pigment/teinture/encre sont considérées comme similaires à celles identifiées ci-haut.

Rejets dans l'environnement

L'entreprise qui a déclaré avoir importé le Pigment Orange 38 en 2006 n'a pas indiqué de rejets de cette substance dans l'environnement.

Outil de débit massique

Les données empiriques sur les rejets de substances particulières dans l'environnement sont rares. À l'aide d'un outil de débit massique, on a estimé les rejets possibles du Pigment Orange 38 dans l'environnement à différentes étapes de son cycle de vie. Pour chaque type d'utilisation connue de la substance, on a estimé la proportion et la quantité de la substance rejetée dans les différents milieux naturels ainsi que la proportion de la substance transformée chimiquement ou éliminée comme déchet. Les hypothèses et les paramètres utilisés pour produire ces estimations reposent sur des données de diverses sources, dont les résultats d'enquêtes réglementaires, les données de Statistique Canada, les sites Web de fabricants et des bases de données techniques. Des données spécialement pertinentes sont les facteurs d'émission, généralement exprimés comme la fraction d'une substance rejetée dans l'environnement plus particulièrement aux étapes de sa fabrication, de son traitement ou de son utilisation en contexte industriel. Elles se trouvent notamment dans les scénarios d'émission, qui sont souvent élaborés sous les auspices de l'Organisation de coopération et de développement économiques (OCDE), et dans les hypothèses par défaut utilisées par différents organismes internationaux de réglementation des produits chimiques. Il est à noter que le niveau d'incertitude concernant la masse et la quantité d'une substance libérée dans l'environnement augmente généralement aux étapes plus avancées du cycle de vie.

Les résultats indiquent que le Pigment Orange 38 devrait aboutir en majeure partie (93 p. 100) dans les installations de gestion des déchets où sont acheminés pour leur élimination les articles qui en contiennent. Les calculs supposent que la substance n'est pas rejetée dans des milieux naturels à partir de ces sites, bien qu'à long terme des rejets demeurent possibles. Une petite fraction des déchets solides étant incinérées, la transformation d'une fraction de la substance est prévue. En se fondant en grande partie sur les données contenues dans les documents de l'OCDE qui présentent des scénarios d'émission aux étapes du traitement et de l'utilisation, on a estimé que 4,8 p. 100 du Pigment Orange 38 pourrait être rejeté dans l'eau (tableau 3).

On ne dispose pas de données sur le volume de produits de consommation importés au Canada contenant du Pigment Orange 38, mais on peut supposer que les quantités de Pigment Orange 38 rejetées dans les différents milieux naturels ne devraient pas différer considérablement des estimations présentées ici. Toutefois, les quantités envoyées aux installations de gestion des déchets seraient plus élevées si les produits importés étaient pris en considération.

Devenir dans l'environnement

Le Pigment Orange 38 a, d'après les données modélisées, une très faible pression de vapeur et une valeur négligeable de la constante de la loi de Henry ($\sim 10^{-23}$ Pa·m³/mole), ce qui concorde avec le fait qu'il s'agit d'une grosse molécule complexe (Baughman et Perenich, 1988; Danish EPA, 1998). Il ne devrait pas se volatiliser à des températures réalistes sur le plan environnemental.

En raison de la très faible solubilité de ce pigment dans l'eau, la biodégradation aérobie peut être considérée comme étant non applicable. En outre, le contact direct avec le biote est improbable si le pigment est emprisonné dans les objets colorés.

Tableau 3. Estimation du devenir du Pigment Orange 38 d'après l'outil de débit massique : rejets et pertes dans l'environnement, transformation chimique et prise en charge par un moyen de gestion des déchets

Devenir	Proportion de la masse (%) ¹	Principale étape du cycle de vie en cause ²
Rejets selon le milieu récepteur :		
dans le sol	0,0	utilisation par les consommateurs
dans l'air	0,0	fabrication
dans les égouts ³	4,8	fabrication, formulation et utilisation par les consommateurs
Transformation chimique	2,2	élimination des déchets
Envoi à des sites d'élimination des déchets (ex. : décharges, incinérateurs)	93,0	élimination des déchets

¹ Pour le Pigment Orange 38, des données tirées de documents de l'OCDE présentant des scénarios d'émission ont été utilisées pour estimer les rejets dans l'environnement et la répartition de la substance (OCDE, 2006 et 2004). Les chiffres indiqués pour les rejets dans l'environnement ne tiennent pas compte des mesures qui peuvent atténuer les rejets à certains endroits (comme les installations de traitement des eaux usées). Les hypothèses utilisées pour produire ces estimations sont résumées dans un document disponible auprès d'Environnement Canada (2007b).

² Étapes applicables : production, formulation, usage industriel, utilisation par les consommateurs, vie utile des articles ou produits, élimination des déchets.

³ Eaux usées avant toute forme de traitement.

L'état particulier du Pigment Orange 38 devrait influencer de façon importante sur son devenir dans l'environnement. La taille de ses particules, sa masse volumique de 46 p. 100 supérieure à celle de l'eau (voir Reynolds *et al.*, 1987; Wetzel, 2001), sa stabilité chimique et sa faible solubilité dans l'eau indiquent qu'il se déposerait, sous l'action de la pesanteur, dans les sédiments s'il était rejeté dans les eaux de surface et qu'il tendrait à demeurer dans le sol s'il était rejeté dans les milieux terrestres.

Persistance et potentiel de bioaccumulation

Persistance

Selon Jaffe (1996), lorsqu'un pigment est incorporé dans un matériau (comme le plastique), on s'attend à ce qu'il soit durable et résiste aux agressions chimiques et physiques combinées du climat, du rayonnement solaire, de la chaleur, de l'eau et des polluants industriels.

Les industries qui fabriquent des pigments reconnaissent que leurs produits sont persistants. Par exemple, la Color Pigments Manufacturers Association, Inc. (CPMA, 2003) a déclaré que les

pigments étaient conçus pour être durables ou persistants dans l'environnement puisqu'ils servent à colorer des produits tels que des revêtements, des encres et des peintures.

La persistance dans l'environnement en milieu anoxique des pigments de naphthol AS de type III, groupe auquel appartient le Pigment Orange 38, est une importante source d'incertitude. Les colorants azoïques seraient dégradés dans des eaux anoxiques par réduction anaérobie de la liaison azoïque ($-N=N-$; Van der Zee, 2002). Les pigments de naphthol AS de type III ont également des chromophores azoïques dans leur structure chimique. Toutefois, on n'a pas trouvé de données indiquant une dégradation possible de ces pigments en milieu aquatique en l'absence d'oxygène. En principe, le cristal devrait d'abord être dissous pour libérer les molécules qui le composent et rendre accessibles les liaisons azoïques pour la réduction biotique.

À la lumière des données indiquées précédemment, selon la méthode du poids de la preuve, Environnement Canada juge que le Pigment Orange 38 répond aux critères de la persistance énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Bioaccumulation

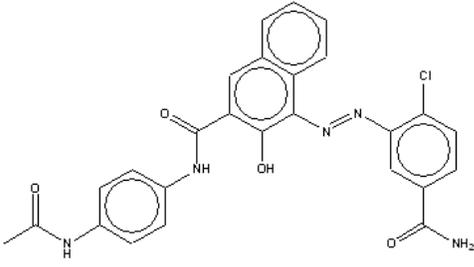
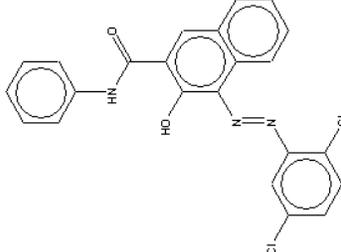
Il existe un rapport prévisible entre K_{oe} et le facteur de bioconcentration dans les lipides (Mackay, 1982). Dans le cas du Pigment Orange 38, le logarithme du rapport C_o/C_e a été calculé à partir des valeurs expérimentales de la solubilité dans l'octanol (C_o) et dans l'eau (C_e) (tableau 2), et ce rapport établi à l'aide des données expérimentales a été préféré au $\log K_{oe}$ déterminé par modélisation. Cette approche s'appuie sur l'observation que la répartition dans l'octanol est un bon indicateur du potentiel de migration d'une substance dans la phase lipide chez le biote aquatique (Bertelsen *et al.*, 1998) et, dans le cas des pigments, sur l'observation qu'une solubilité réduite dans l'octanol correspond à une réduction similaire du facteur de bioconcentration (FBC) et du facteur de bioaccumulation (FBA) chez un organisme aquatique (Banerjee et Baughman, 1991).

De nouvelles estimations du FBC et du FBA ont donc été produites pour le Pigment Orange 38 à l'aide de modèles de relations quantitatives structure-activité (RQSA) en utilisant le $\log (C_o/C_e)$ fondé sur des données expérimentales plutôt que le $\log K_{oe}$ surestimé par KOWWIN (2000). Des estimations modélisées du FBC et du FBA ont aussi été obtenues pour un analogue raisonnablement proche du Pigment Orange 38, soit le Pigment Red 2 (n° CAS 6041-94-7), en utilisant également un $\log (C_o/C_e)$ calculé à partir de valeurs expérimentales de la solubilité (Étude présentée, 2007b). Le tableau 4 montre que les nouvelles estimations modélisées du FBC et du FBA sont bien inférieures à 1 000 (\log FBC ou \log FBA de 3) à la fois pour le Pigment Orange 38 et son analogue, le Pigment Red 2.

Dans le choix des analogues chimiques, les recommandations de l'OCDE (2007) ont généralement été respectées. Dans ce cas-ci, la nature cristalline des pigments (OCDE, 2007) et, donc, leur solubilité dans l'eau et l'octanol constituent un facteur clé dans le choix d'un analogue à des fins de comparaison. Les pigments Orange 38 et Red 2 ont des valeurs raisonnablement similaires pour la solubilité dans l'eau et dans l'octanol. Les valeurs pour la solubilité dans l'eau et l'octanol du Pigment Red 2 sont respectivement de 5,4 et 8 630 $\mu\text{g/L}$ (Étude présentée, 2007b; les valeurs de la solubilité du Pigment Orange 38 sont données dans le tableau 2).

Le Pigment Orange 38 devrait donc avoir un faible potentiel de bioaccumulation en raison de son affinité très limitée pour la phase lipidique chez les organismes vivants. Cette conclusion est appuyée par les valeurs déterminées expérimentalement du FBC de six pigments organiques représentatifs, valeurs qui sont toutes inférieures à 100 en poids humide (MITI, 1992).

Tableau 4. Données modélisées sur la bioaccumulation du Pigment Orange 38 et de son analogue, le Pigment Red 2

Structure chimique			
Pigment Orange 38 ^a		Pigment Red 2 ^a	
			
Organisme d'essai	Paramètre	Valeur (poids humide) (L/kg)	Référence
Pigment Orange 38 [log (C _o /C _e) = 0,79]			
Poisson	FBA	1,34	Gobas BAF T2MTL (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	FBC	1,23	Gobas BCF T2LTL (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	FBC	16,1	OASIS, 2005
Poisson	FBC	10 ^b	BCFWIN, v. 2.15
Pigment Red 2 [log (C _o /C _e) = 3,2]			
Poisson	FBA	114	Gobas BAF T2MTL (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	FBC	70,1	Gobas BCF T2LTL (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	FBC	376	OASIS, 2005
Poisson	FBC	10 ^b	BCFWIN, v. 2.15

^a La structure chimique du Pigment Orange 38 diffère de celle du Pigment Red 2 à deux égards : présence d'un groupement NHCOCH₃ additionnel sur un noyau benzénique terminal et d'un groupement H₂NOC au lieu d'un chlore sur l'autre noyau benzénique terminal.

^b Valeur par défaut pour les pigments azoïques non ionisables.

L'analyse des données précédentes selon la méthode du poids de la preuve permet de conclure que le Pigment Orange 38 ne répond pas au critère de la bioaccumulation (FBC ou FBA > 5 000) énoncé dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Potentiel d'effets écologiques nocifs

Une évaluation quantitative axée sur l'exposition et les effets écologiques a été réalisée dans le cadre de l'évaluation du potentiel d'effets nocifs selon la méthode du poids de la preuve.

Tout d'abord, une concentration environnementale estimée (CEE) a été déterminée à partir d'une analyse des voies d'exposition. Ensuite, des organismes pertinents comme paramètres ont été choisis, et, pour chacun, une concentration estimée sans effet (CESE) prudente, représentative du pire cas raisonnable, a été déterminée. Celle-ci a été calculée à partir de la valeur critique de la toxicité (VCT) la plus faible pour l'organisme considéré en la divisant par un facteur approprié.

Évaluation de l'exposition environnementale

On n'a pas trouvé de données sur les concentrations du Pigment Orange 38 dans l'environnement canadien. Les estimations obtenues à l'aide de l'outil de débit massique ont indiqué que plus de 90 p. 100 du pigment, en masse, aboutit dans les installations d'élimination des déchets. La migration du pigment à partir de ces installations est peu probable, ou est estimée minime, en raison de la mobilité géochimique négligeable que laisse prévoir sa très faible solubilité dans l'eau et les solvants organiques. Par conséquent, les rejets de cette substance à l'étape de la gestion des déchets devraient être négligeables.

Les rejets dans l'eau liés à l'utilisation de la substance pourraient atteindre environ 5 p. 100 de la masse totale du pigment d'après les estimations fournies par l'outil de débit massique. Les données industrielles semblent indiquer que ces rejets proviendraient d'utilisateurs industriels qui ont employé le pigment pour fabriquer d'autres produits colorés (Environnement Canada, 2007a). Le modèle IGETA (Industrial Generic Exposure Tool – Aquatic), élaboré par Environnement Canada pour estimer les concentrations dans les eaux de surface, a été choisi pour modéliser le pire cas raisonnable de rejets dans le milieu aquatique par une installation industrielle (un utilisateur du pigment). 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 CEE. La masse maximale du produit acheté en une année par une installation industrielle (1 000 kg; Environnement Canada, 2007a) a servi à calculer la charge pour l'estimation de la CEE. D'après les résultats du modèle IGETA, la CEE annuelle moyenne serait de 0,005 6 mg/L dans le cours d'eau récepteur.

Évaluation des effets écologiques

A – Dans le milieu aquatique

On n'a pas trouvé de données expérimentales sur la toxicité du Pigment Orange 38, mais il en existait pour le Pigment Red 2, qui est un analogue raisonnablement proche du Pigment Orange 38 (tableau 4, n° CAS 6041-94-7). Des estimations de l'écotoxicité du Pigment Orange 38 ont également été calculées à partir du log (C_o/C_e) expérimental (0,79). Ces données expérimentales et estimées (tableaux 5a et 5b) sont jugées fiables et ont été utilisées avec la méthode du poids de la preuve pour déterminer le potentiel de toxicité de ce pigment pour les organismes aquatiques.

Des daphnies (*Daphnia magna*) juvéniles ont été exposées à une solution saturée de Pigment Red 2 pendant 48 heures dans des conditions statiques (Étude présentée, 2007c; tableau 5a). Le pH a été maintenu entre 7,7 et 8,1, la température a oscillé entre 18 et 22 °C et la teneur en

oxygène dissous a varié entre 8,1 et 8,9 mg/L. La dureté de l'eau utilisée était de ~ 250 mg CaCO₃/L. Un traitement expérimental a consisté à placer cinq daphnies dans un béccher en verre de 50 mL. Une concentration d'essai a été établie (100 mg/L) en utilisant quatre répétitions par essai. Pour préparer la solution saturée, une solution mère contenant 100 mg de Pigment Red 2 dans un litre d'eau d'essai a d'abord été préparée. Elle a été brassée à la température ambiante pendant 24 heures à l'aide d'un agitateur rotatif réglé à 20 tours par minute. Les particules non dissoutes ont été extraites par filtration sur membrane (0,45 µm). Cette méthode respecte les recommandations de l'OCDE concernant les substances très peu solubles (OCDE, 2000). Le produit n'a pas été mesuré au cours de l'essai. Aucun effet biologiquement significatif (immobilisation) n'a été observé dans la solution saturée.

Cette étude a été jugée suffisamment fiable aux fins de la présente évaluation. Notamment, une substance toxique de référence a été utilisée, et les bonnes pratiques de laboratoire ont été appliquées.

Des prévisions de la toxicité pour les organismes aquatiques recalculées en utilisant le log (C_o/C_e) ont été fournies par le modèle ECOSAR (ECOSAR, 2004) avec comme hypothèse que le mode d'action toxique du Pigment Orange 38 est la narcose comme les phénols. Toutefois, le modèle ASTER (1999) a indiqué un mode d'action par « découplage de la phosphorylation oxydative » en plus de la narcose pour ce pigment. Un facteur de 100 (Environnement Canada, 2003) a donc été appliqué pour extrapoler du mode d'action toxique de référence à ce mode d'action plus toxique. Il convient de faire remarquer que ces modes d'action ont été prévus pour la molécule solubilisée (tableau 1). Le tableau 5b présente les résultats de la modélisation de l'écotoxicité.

Les données modélisées sont toutes nettement supérieures aux valeurs estimées pour la solubilité dans l'eau de la substance et concordent donc avec les résultats de l'essai de toxicité aiguë qui indiquent l'absence d'effets à la concentration de saturation.

Tableau 5a. Valeur expérimentale de la toxicité aquatique du Pigment Orange 38

Organisme	Type d'essai	Paramètre	Durée	Valeur	Référence
Daphnie	tox. aiguë	CE ₅₀ ¹	48 heures	aucun effet en solution saturée (100 mg/L)	Étude présentée, 2007c

¹Immobilisation.

Tableau 5b. Valeurs modélisées de la toxicité aquatique du Pigment Orange 38

Organisme	Paramètre	Durée	Valeur (mg/L)	Classe chimique / mode d'action	Référence
Poisson	CL ₅₀	14 jours	7 568	RSA pour composé organique neutre (toxicité de référence)	ECOSAR, 2004
Poisson	CL ₅₀	14 jours	75,7	découplage de la phosphorylation oxydative	ASTER, 1999
Poisson	CL ₅₀	96 heures	408	phénols	ECOSAR, 2004
Daphnie	CL ₅₀	48 heures	84,1	phénols	ECOSAR, 2004
Algue verte	CE ₅₀	96 heures	2 910	phénols	ECOSAR, 2004

B – Dans d'autres milieux

On n'a trouvé aucune donnée empirique ou estimée sur les effets du Pigment Orange 38 chez les organismes non aquatiques. Toutefois, à la lumière des scénarios de rejets et des quantités utilisées au Canada, une exposition appréciable par le sol, les matières en suspension ou les sédiments est actuellement peu probable.

Caractérisation du risque écologique

La démarche utilisée pour cette évaluation écologique préalable a consisté à examiner les renseignements scientifiques disponibles et à dégager des conclusions en appliquant la méthode du poids de la preuve et le principe de prudence conformément à l'article 76.1 de la LCPE (1999). On s'est penché plus particulièrement sur l'analyse du quotient de risque, la persistance, la bioaccumulation, la toxicité, les sources et le devenir dans l'environnement.

À la lumière des données publiées, le Pigment Orange 38 a été jugé persistant. Toutefois, il a été jugé non bioaccumulable au sens du *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* de la LCPE (1999) (Canada, 2000) en raison de sa très faible solubilité observée dans l'octanol, des faibles valeurs de son FBC déterminées par modélisation et des faibles valeurs déterminées expérimentalement du FBC d'un certain nombre de pigments organiques analogues (MITI, 1992).

De nouvelles données empiriques sur un analogue chimique ainsi que des données modélisées sur la toxicité pour les organismes aquatiques indiquent l'absence d'effets aigus à la concentration de saturation et portent également à conclure que ce pigment n'est pas très nocif. Le fait que les concentrations produisant un effet soient supérieures à la limite de solubilité est source d'incertitude, mais le protocole de l'OCDE (2000) offre actuellement la meilleure démarche pour évaluer les substances très peu solubles.

Comme le Pigment Orange 38 a été jugé persistant mais non bioaccumulable, une évaluation quantitative de l'exposition et des effets écologiques a été effectuée pour évaluer le potentiel d'effets nocifs selon la méthode du poids de la preuve.

Compte tenu du peu de données empiriques sur l'exposition au Canada, le modèle IGETA a été utilisé avec des données industrielles pour estimer les CEE dans les pires scénarios. Les CESE ont été estimées pour trois catégories d'organismes : les poissons, les daphnies et les algues. Un facteur de 100 a été appliqué pour extrapoler des effets aigus aux effets chroniques et des espèces de laboratoire à différentes espèces sur le terrain. Les VCT et les CESE fondées sur les données les plus prudentes quant aux effets sont présentées dans le tableau 6. Dans tous les cas, les quotients de risque calculés sont bien inférieurs à 1, ce qui porte à croire que la substance ne devrait pas être présente à des concentrations susceptibles d'être nocives pour les organismes aquatiques.

Étant donné la grande persistance de la substance dans l'environnement, une exposition chronique est probable. Toutefois, compte tenu de l'absence d'effets aigus à la concentration de saturation, de la solubilité relativement faible de la substance (25 µg/L) et de son faible potentiel de bioaccumulation, l'exposition à cette substance dans l'environnement à long terme ne devrait pas entraîner d'effets nocifs chez les organismes aquatiques.

Tableau 6. Valeurs utilisées pour la caractérisation du risque associé au Pigment Orange 38

Organisme	VCT	CESE	CEE	Scénario	Quotient de risque (CEE/CESE)
	(mg/L)				
Poisson	75,7	0,757	0,005 6	modèle IGETA : rejet dans un cours d'eau par une installation industrielle	0,007 4
Daphnie	84,1	0,841			0,006 6
Algue	2 910	29,1			0,000 2

Compte tenu de ces données et des quantités importées relativement faibles de ce produit, le Pigment Orange 38 est jugé peu susceptible d'avoir des effets écologiques nocifs au Canada.

Incertitudes de l'évaluation du risque écologique

Sont résumées dans les paragraphes qui suivent les principales incertitudes associées à l'évaluation du risque que présente le Pigment Orange 38.

On ne sait à peu près rien sur la stabilité à long terme du Pigment Orange 38 dans les sédiments anoxiques et les couches anoxiques du sol des décharges.

Les matériaux nanométriques sont définis de manière informelle comme des substances mesurant moins de 100 nm dans au moins une dimension. Des données toujours plus nombreuses indiquent que des processus non spécifiques comme la pinocytose peuvent donner lieu à l'absorption de nanoparticules (Leroueil *et al.*, 2007). Les pigments organiques, comme le Pigment Orange 38, se présentent typiquement sous la forme de particules comprenant un certain pourcentage de particules de taille nanométrique (tableau 2). Les mécanismes et le potentiel de bioaccumulation de ces particules, de même que le rapport entre leur bioaccumulation et leur toxicité, ne sont pas bien compris à l'heure actuelle. De plus, il est possible que certains

processus moins couramment pris en considération dans l'étude du devenir dans l'environnement contribuent substantiellement à faciliter l'absorption des nanoparticules du pigment par le biote (p. ex. l'importance de l'agrégation dans la nature; Wiesner *et al.*, [2006]).

Conclusion

À la lumière des renseignements présentés dans cette évaluation préalable, il est conclu que le Pigment Orange 38 ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité ou concentration ou dans des conditions de nature à avoir, immédiatement ou à long terme, un effet nocif sur l'environnement ou sur la diversité biologique, ou à mettre en danger l'environnement essentiel pour la vie. De même, il est conclu que le Pigment Orange 38 est persistant mais qu'il ne répond pas au critère relatif à la bioaccumulation énoncé dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

En conséquence, il est conclu que le Pigment Orange 38 n'est pas toxique au sens de l'alinéa 64a) de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement* (1999).

Références

- ACD/pK_aDB [module de prévision]. 2005. Version 9.04. Toronto (ON) : Advanced Chemistry Development. http://www.acdlabs.com/products/phys_chem_lab/pka/.
- Arnot, J.A., et F.A.P.C. Gobas. 2003. « A generic QSAR for assessing the bioaccumulation potential of organic chemicals in aquatic food webs ». *QSAR Comb. Sci.* 22(3) : 337-345.
- [ASTER] *Assessment Tools for the Evaluation of Risk* [Internet]. 1999. Duluth (Minnesota) : U.S. Environmental Protection Agency (US EPA), Mid-Continent Ecology Division. [Janv. 2008]. http://www.epa.gov/med/Prods_Pubs/aster.htm (accès restreint).
- Banerjee, S., et G.L. Baughan. 1991. « Bioconcentration factors and lipid solubility ». *Environ. Sci. Technol.* 25(3) : 536-539.
- Baughman, G.L., et T.A. Perenich. 1988. « Investigating the fate of dyes in the environment ». *Amer Dyest Rep* 77 : 19-48.
- [BCFWIN] *BioConcentration Factor Program for Windows* [modèle d'estimation]. 2000. Version 2.15. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm.
- Bertelsen, S.L., A.D. Hoffman, C.A. Gallinat, C.M. Elonen et J.W. Nichols. 1998. « Evaluation of Log K_{OW} and tissue lipid content as predictors of chemical partitioning in fish tissues ». *Environ. Toxicol. Chem.* 17(8) : 1447-1455.
- Canada, Ministère de l'Environnement, Ministère de la Santé. 2006. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis d'intention d'élaborer et de mettre en œuvre des mesures d'évaluation et de gestion des risques que certaines substances présentent pour la santé des Canadiens et leur environnement. Gazette du Canada (Partie I)*, vol. 140, n° 49, p. 4109-4117. <http://canadagazette.gc.ca/partI/2006/20061209/pdf/g1-14049.pdf>.
- Canada. 2000. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement : Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*, C.P. 2000-348, 23 mars 2000, DORS/2000-107, *Gazette du Canada (Partie II)*, vol. 134, n° 7, p. 607-612. Ottawa : Imprimeur de la Reine. <http://canadagazette.gc.ca/partII/2000/20000329/pdf/g2-13407.pdf>
- Canada. 1999. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*. L.C. (1999), ch. 33, partie 5, art. 77. *Gazette du Canada (Partie III)*, vol. 22, n° 3. Ottawa : Imprimeur de la Reine. <http://canadagazette.gc.ca/partIII/1999/g3-02203.pdf>
- [CII] *Color Index International* [base de données sur Internet]. 2002-. Quatrième édition. Research Triangle Park (NC) : American Association of Textile Chemists and Colorists. [Juillet 2007]. <http://www.colour-index.org/>
- Clariant. 2007. Site Web visité le 3 juin 2007. <http://www.clariant.com/C1256C70004F0C0D/vwWebPagesByID/866B6064B0115030C12571A8004993B9>
- [CPMA] Color Pigments Manufacturers Association, Inc. 2003. Commentaires de la Color Pigments Manufacturers Association, Inc., sur l'ébauche du *Document d'orientation sur la catégorisation des substances organiques et inorganiques inscrites sur la Liste intérieure des substances du Canada* ainsi que sur les estimations calculées par Environnement Canada et les données empiriques concernant environ 12 000 produits chimiques organiques définis figurant sur la LIS. Disponibles auprès de la Division des substances existantes, Environnement Canada, Ottawa, K1A 0H3.
- [Danish EPA] Danish Environmental Protection Agency. 1998. 1998. *Survey of azo-colorants in Denmark: Consumption, use, health and environmental aspects*. Ministère de l'Environnement et de l'Énergie, Danemark.

[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. www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Environnement Canada et Santé Canada. 2006. *Avis concernant certaines substances considérées comme priorités pour suivi*. Ministère de l'Environnement, *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*. Publié dans la *Gazette du Canada* (Partie I), vol. 140, n° 9, p. 435 à 459. <http://canadagazette.gc.ca/partI/2006/20060304/pdf/g1-14009.pdf>

Environnement Canada. 2007a. Données recueillies sur les substances du lot 1 aux fins de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* en réponse à l'*Avis concernant certaines substances identifiées dans le Défi, publié le 9 décembre 2006 dans l'Avis d'intention d'élaborer et de mettre en œuvre des mesures d'évaluation et de gestion des risques que certaines substances présentent pour la santé des Canadiens et leur environnement*. Préparées par Environnement Canada et Santé Canada, Programme des substances existantes.

Environnement Canada. 2007b.. *Assumptions, limitations and uncertainties of the Mass Flow Tool for Pigment Orange 38, CAS RN 12236-64-5*. Document interne (ébauche). Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes. Offert sur demande.

Environnement Canada. 2003. *Document d'orientation sur la catégorisation des substances organiques et inorganiques inscrites sur la Liste intérieure des substances du Canada*. Direction des substances existantes, Environnement Canada, Gatineau, Canada, 135 p.

Étude présentée. 2007a. Étude confidentielle inédite présentée à Environnement Canada, Division des substances existantes, dans le cadre du Défi du Plan de gestion des produits chimiques. Disponible sous la forme de sommaire de rigueur d'étude, numéro 13365Challenge001. (Voir l'annexe I).

Étude présentée. 2007b. Étude confidentielle inédite présentée à Environnement Canada, Division des substances existantes, dans le cadre du Défi du Plan de gestion des produits chimiques. Disponible sous la forme de sommaire de rigueur d'étude, numéro 13365Challenge004. (Voir l'annexe I).

Étude présentée. 2007c. Étude confidentielle inédite présentée à Environnement Canada, Division des substances existantes, dans le cadre du Défi du Plan de gestion des produits chimiques. Disponible sous la forme de sommaire de rigueur d'étude, numéro 13365Challenge006. (Voir l'annexe I).

Heitzman, S. 2007. *Organic orange pigments for use in plastics*. Sun Chemical Corporation. 7 pages. <http://63.87.252.12/performancepigments/library/CAD%20organic%20oranges%20for%20plastics.pdf>

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

Herbst, W., et K. Hunger. 2004. *Industrial organic pigments*, 3^e édition. Weinheim (Allemagne) : Wiley-VCH, Verlag GmbH & Co. KGaA. 660 p.

Jaffé, E.E. 1996. « Pigments ». In : J.I. Kroschwitz et M. Howe-Grant (éd.). *Kirk-Othmer encyclopedia of chemical technology*, 4^e éd. New York (NY) : John Wiley and Sons. Vol. 19, p. 41-78.

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

Leroueil, P.R., S. Hong, A. Mecke, J.R. Baker, Jr., B.G. Orr et M.M. Banaszak Holl. 2007. « Nanoparticle interaction with biological membranes: does nanotechnology present a Janus face? » *Acc. Chem. Res.* 40(5) : 335-342.

Lincke, G. 2003. « Molecular stacks as a common characteristic in the crystal lattice of organic pigment dyes. A contribution to the 'insoluble-soluble' dichotomy of dyes and pigments from the technological point of view ». *Dyes and Pigments* 59(1) : 1-24.

Mackay, D. 1982. « Correlation of bioconcentration factors ». *Environ. Sci. Technol.* 16(5) : 274-278.

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

[MITI] Ministry of International Trade & Industry (Japon), Basic Industries Bureau, Chemical Products Safety Division. 1992. *Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan*. Tokyo (Japon) : Japan Chemical Industry Ecology-Toxicology & Information Centre.

[NCI] *National Chemical Inventories* [base de données sur CD-ROM]. 2007. Columbus (OH) : American Chemical Society. [cité en juillet 2007]. <http://www.cas.org/products/cd/nci/index.html>.

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

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2007. *Guidance on grouping of chemicals*. Paris, France : OECD series on testing and assessment, numéro 80. ENV/JM/MONO(2007)28 (non classifié). 99 p.

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2006. *Emission Scenario Document on Transport and Storage of Chemicals* [Internet]. Paris (France) : OCDE, Direction de l'environnement, Division Environnement, Santé et Sécurité. [Septembre 2006]. [http://www.ois.oecd.org/olis/2004doc.nsf/LinkTo/env-jm-mono\(2004\)8](http://www.ois.oecd.org/olis/2004doc.nsf/LinkTo/env-jm-mono(2004)8).

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2004. *Emission scenario document on plastics additives* [Internet]. Paris (France) : OCDE, Direction de l'environnement. (Series on Emission Scenario Documents, n° 3). Rapport ENV/JM/MONO(2004)8, JT00166678. [cité en septembre 2006]. [http://www.ois.oecd.org/olis/2004doc.nsf/LinkTo/env-jm-mono\(2004\)8](http://www.ois.oecd.org/olis/2004doc.nsf/LinkTo/env-jm-mono(2004)8).

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2000. *Guidance document on aquatic toxicity testing of difficult substances and mixtures*. Paris (France) : OECD series on testing and assessment, numéro 23. ENV/JM/MONO(2000)6 (non classifié). 53 p.

Reynolds, C.S., R.L. Oliver et A.E. Waltsby. 1987. « Cyanobacterial dominance: the role of buoyancy regulation in dynamic lake environments ». *New Zealand J. Mar. Fresh. Res. abs.* 21: 379-390.

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

[US EPA] United States Environmental Protection Agency. 2002. *Toxic Substances Control Act-Inventory Update Rule (TSCA-IUR). Production Volume Information*. Données inédites, 1986, 1990, 1994, 1998, 2002. Pour s'informer sur la disponibilité, communiquer avec la Division des substances existantes, Environnement Canada, Ottawa, K1A 0H3.

Van der Zee, F.P. 2002. *Anaerobic azo dye reduction* [thèse de doctorat]. Wageningen (Pays-Bas) : Université de Wageningen.

Wetzel, R.G. 2001. *Limnology*, 3^e éd. San Diego (Californie) : Academic Press. 1 006 pages.

Wiesner, M.R., G.V. Lowry, P. Alvarez, D. Dionysiou et P. Biswas. 2006. « Assessing the risks of manufactured nanomaterials ». *Environ. Sci. Technol.* 40(14) : 4336-4345.

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

Annexe I - Sommaires de rigueur d'études
Évaluation de données expérimentales selon la méthode de Kollig*

Question	Pondération	Réponse	Note
Référence : 13365Challenge001. Determination of the solubility in water and in octanol at ambient temperature – Sample: pure Pigment Orange 38.			
Substance d'essai : n° CAS 12236-64-5; Pigment Orange 38			
Pourriez-vous répéter l'expérience avec l'information disponible?	5	assez bien	3,5
Un objectif clair est-il énoncé?	1	oui	1
La qualité de l'eau est-elle caractérisée ou précisée (distillée ou désionisée)?	2	oui (eau et octanol)	2
Les résultats sont-ils présentés de façon détaillée, claire et compréhensible?	3	passable	1,5
Les données proviennent-elles d'une source primaire plutôt que d'un article cité?	3	source primaire	3
La substance a-t-elle été testée à des concentrations inférieures à sa limite de solubilité dans l'eau?	5	s.o.	s.o.
Y avait-il absence de particules?	2	détail non fourni	0
A-t-on fait un essai avec une substance de référence ayant une constante connue?	3	détail non fourni	0
D'autres processus intervenant dans le devenir ont-ils été pris en considération?	5	s.o.	s.o.
A-t-on fait un essai témoin (à blanc)?	3	détail non fourni	0
La température a-t-elle été maintenue constante?	5	supposée	4
L'expérience a-t-elle eu lieu à une température proche de la température ambiante (15 - 30 °C)?	3	oui	3
La pureté de la substance d'essai est-elle précisée (> 98 %)?	3	oui	3
L'identité de la substance a-t-elle été attestée?	3	partiellement	1,5
La source de la substance est-elle indiquée?	1	oui	1
Résultats : ($\bar{X} \pm$ erreur type)			
solubilité (eau) : $24,9 \pm 4,4$ µg/L		solubilité (octanol) : 155 ± 16 µg/L	
Note globale :		23,5/37 ou 63,5 %	
Degré de fiabilité**		satisfaisant	

* 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 des études écotoxicologiques pour la catégorisation des substances de la LIS est utilisé.

Évaluation de données expérimentales selon la méthode de Kollig*

Question	Pondération	Réponse	Note
Référence : 13365Challenge004. Determination of the solubility in water and in octanol at ambient temperature – Sample: pure Pigment Red 2.			
Substance d'essai : n° CAS 6041-94-7; Pigment Red 2			
Pourriez-vous répéter l'expérience avec l'information disponible?	5	assez bien	3,5
Un objectif clair est-il énoncé?	1	oui	1
La qualité de l'eau est-elle caractérisée ou précisée (distillée ou désionisée)?	2	oui (eau et octanol)	2
Les résultats sont-ils présentés de façon détaillée, claire et compréhensible?	3	OK	2,5
Les données proviennent-elles d'une source primaire plutôt que d'un article cité?	3	source primaire	3
La substance a-t-elle été testée à des concentrations inférieures à sa limite de solubilité dans l'eau?	5	s.o.	s.o.
Y avait-il absence de particules?	2	supposée	2
A-t-on fait un essai avec une substance de référence ayant une constante connue?	3	détail non fourni	0
D'autres processus intervenant dans le devenir ont-ils été pris en considération?	5	s.o.	s.o.
A-t-on fait un essai témoin (à blanc)?	3	détail non fourni	0
La température a-t-elle été maintenue constante?	5	supposée	4
L'expérience a-t-elle eu lieu à une température proche de la température ambiante (15 - 30 °C)?	3	oui	3
La pureté de la substance d'essai est-elle précisée (> 98 %)?	3	qualitativement	1,5
L'identité de la substance a-t-elle été attestée?	3	supposée	3
La source de la substance est-elle indiquée?	1	oui	1
Résultats : ($\bar{X} \pm$ erreur type)			
solubilité (eau) : $5,4 \pm 1,2$ µg/L		solubilité (octanol) : $8\,630 \pm 140$ µg/L	
Note globale :		26/37 ou 70 %	
Degré de fiabilité**		satisfaisant	

* 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 des études écotoxicologiques pour la catégorisation des substances de la LIS est utilisé.

Formulaire et instructions pour sommaire de rigueur d'étude : toxicité intrinsèque pour les organismes aquatiques

N°	Point	Pondération	Oui/non	Précisions
1	13365Challenge006. Acute immobilization test (Static 48 h) to <i>Daphnia magna</i> , STRAUS, Limit-Test.			
2	Identité de la substance : n° CAS	s.o.		6041-94-7
3	Identité de la substance : nom(s) chimique(s)	s.o.		Pigment Red 2
4	Composition chimique de la substance	2		s.o.
5	Pureté chimique	1	O	> 95,9 %
6	Indication de la persistance/stabilité de la substance en milieu aquatique?	1	N	
Méthode				
7	Références	1	O	
8	Méthode normalisée (OCDE, UE, nationale ou autre)?	3	O	OCDE 202
9	Justification de la méthode ou du protocole non normalisé utilisé, le cas échéant	2		
10	BPL (bonnes pratiques de laboratoire)	3	O	
Organisme d'essai				
11	Identité de l'organisme : nom	s.o.		<i>Daphnia magna</i>
12	Indication du nom latin ou des deux noms (latin et commun)?	1	O	
13	Âge ou stade biologique de l'organisme d'essai	1	O	
14	Longueur et/ou poids	1		s.o.
15	Sexe	1		s.o.
16	Nombre d'organismes par répétition	1	O	5
17	Charge en organismes	1	N	
18	Type de nourriture et périodes d'alimentation au cours de la période d'acclimatation	1	Y	algues, <i>ad libidum</i>
Conception et conditions des essais				
19	Type d'essai (toxicité aiguë ou chronique)	s.o.	O	tox. aiguë
20	Type d'expérience (en laboratoire ou sur le terrain)	s.o.	O	en laboratoire

21	Voies d'exposition (nourriture, eau, les deux)	s.o.	O	eau
22	Durée d'exposition	s.o.	O	48 heures
23	Témoins négatifs ou positifs (préciser)	1	O	positifs et négatifs
24	Nombre de répétitions (y compris les témoins)	1	O	4
25	Des concentrations nominales sont-elles indiquées?	1	O	1
26	Des concentrations mesurées sont-elles indiquées?	3	N	
27	Type de nourriture et périodes d'alimentation durant les essais à long terme	1		s.o.
28	Les concentrations ont-elles été mesurées périodiquement (spécialement dans les essais de toxicité chronique)?	1	N	
29	Les conditions du milieu d'exposition pertinentes pour la substance sont-elles indiquées? (ex. : pour la toxicité des métaux - pH, COD/COT, dureté de l'eau, température)	3	O	pH, concentration d'oxygène dissous
30	Photopériode et intensité de l'éclairage	1	O	16/8 clarté/obscurité, 20 $\mu\text{S}/\text{cm}^2/\text{s}$
31	Préparation de solutions mères et de solutions d'essai	1	O	voir ci-dessous
32	Un agent émulsionnant ou stabilisant a-t-il été employé, si la substance était peu soluble ou instable?	1	N	
33	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, sa concentration est-elle indiquée?	1		s.o.
34	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, des données sont-elles fournies sur son écotoxicité?	1		s.o.
35	Intervalles des contrôles analytiques	1	N	pour immobilisation des daphnies seulement.
36	Méthodes statistiques utilisées	1	O	
Renseignements d'intérêt pour la qualité des données				
37	Le paramètre déterminé est-il directement attribuable à la toxicité de la substance, non à l'état de santé des organismes (p. ex. lorsque la mortalité des témoins est > 10 %) ou à des facteurs physiques (p. ex. effet d'ombrage)?	s.o.	O	absence supposée d'effet d'ombrage
38	L'organisme d'essai convient-il à l'environnement canadien?	3	O	
39	Les conditions d'essai (pH, température, OD, etc.) sont-elles typiques pour l'organisme d'essai?	1	O	
40	Le type et la conception du système (statique, semi-statique, dynamique; ouvert ou fermé; etc.) correspondent-ils aux propriétés de la substance et à la nature ou aux habitudes de l'organisme?	2	O	
41	Le pH de l'eau d'essai était-il dans la plage des valeurs typiques de l'environnement canadien (6 à 9)?	1	O	entre 7,7 et 8,1
42	La température de l'eau d'essai était-elle dans la plage des valeurs typiques de l'environnement canadien (5 à 27 °C)?	1	O	16 à 22 °C

43	La valeur de la toxicité était-elle inférieure à celle de la solubilité de la substance dans l'eau?	3		s.o.
Résultats				
44	Valeurs de la toxicité (indiquer paramètres et valeurs)	s.o.	s.o.	CE ₅₀ > 100 mg/L (fraction adaptée à l'eau)
45	Autres paramètres indiqués – p. ex. FBC/FBA, CMEO/CSEO (préciser)?	s.o.	N	
46	Autres effets nocifs indiqués (cancérogénicité, mutagénicité, etc.)?	s.o.	N	
47	Note globale : ... %	78,4		
48	Code de fiabilité d'EC :	2		
49	Catégorie de fiabilité (élevée, satisfaisante, faible) :	confiance satisfaisante		
50	Commentaires	<p><i>L'essai de toxicité a été réalisé au point de saturation, c.-à-d. à la concentration maximale de la substance à l'état dissous qui peut être obtenue dans les conditions d'essai. Pour préparer la solution saturée, une solution mère contenant 100 mg de la substance dans un litre d'eau a d'abord été préparée. Elle a été brassée à la température ambiante pendant 24 heures à 20 tours par minute (agitateur rotatif). Les particules non dissoutes ont été extraites par filtration sur membrane (0,45 µm). Dans le rapport présenté, il est mentionné que la méthode recommandée est conforme aux recommandations données dans le document 23 de la Series on Testing and Assessment de l'OCDE. La concentration d'essai devrait être une solution saturée à la limite maximale de solubilité (< 20 µg/L, déterminée expérimentalement).</i></p>		