

**Évaluation préalable pour le Défi concernant
bis[3-(3,5-di-*tert*-butyl-4-hydroxyphényl)propionate] de
(1, 2-dioxoéthylène)bis(iminoéthylène)
(acide benzopropanoïque)**

**Numéro de registre du Chemical Abstracts Service
70331-94-1**

**Environnement Canada
Santé Canada**

Juillet 2010

Sommaire

En application de l'article 74 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* [LCPE (1999)], les ministres de l'Environnement et de la Santé ont effectué une évaluation préalable du bis[3-(3,5-di-*tert*-butyl-4-hydroxyphényl)propionate] de (1,2-dioxoéthylène)bis(iminoéthylène) [acide benzopropanoïque], dont le numéro de registre du Chemical Abstracts Service est 70331-94-1. Une priorité élevée a été accordée à l'évaluation préalable de cette substance inscrite au Défi, car il a été établi qu'elle répond aux critères de la catégorisation écologique relatifs à la persistance, au potentiel de bioaccumulation et à la toxicité intrinsèque pour les organismes non humains et elle semble être commercialisée au Canada.

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

L'acide benzopropanoïque est une substance organique utilisée au Canada comme antioxydant dans les plastiques. Cette substance n'est pas produite de façon naturelle dans l'environnement. Elle ne serait pas non plus fabriquée au Canada, mais un total de 153 kg ont toutefois été importés au pays en 2006.

Les profils d'utilisation déclarés et certaines hypothèses permettent de croire que la plus grande partie de l'acide benzopropanoïque aboutit dans les sites d'enfouissement. Environ 4 % de la substance serait rejetée dans l'eau, et un autre 4 %, dans le sol. La solubilité estimée de l'acide benzopropanoïque dans l'eau est très faible. Cette substance n'est pas volatile et tend à se déposer principalement dans les sédiments si elle est rejetée dans l'eau, et dans le sol, si elle est rejetée dans le sol ou dans l'air.

D'après ses propriétés physiques et chimiques et les données relatives à certains analogues chimiques, l'acide benzopropanoïque est persistant dans l'eau, le sol et les sédiments. La valeur de son coefficient modélisé de partage octanol-eau est de 6,68. Toutefois, de nouvelles données modélisées sur la bioaccumulation qui tiennent compte de la biotransformation semblent indiquer que son potentiel de bioaccumulation dans les tissus adipeux des organismes est faible. Elle répond donc aux critères de la persistance, mais ne répond pas à ceux de la bioaccumulation prévus dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*.

Aux fins de la présente évaluation préalable, on a choisi un scénario d'exposition très prudent, lequel prévoyait les rejets d'acide benzopropanoïque dans le milieu aquatique en provenance d'une exploitation industrielle (fabricant de plastiques). La concentration environnementale estimée dans l'eau était d'un ordre de grandeur plus faible que la concentration estimée sans effet.

Il est donc conclu que l'acide benzopropanoïque ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité, à une concentration ou dans des conditions qui ont ou peuvent avoir un effet nocif immédiat ou à long terme sur l'environnement ou sa diversité biologique qui met ou peut mettre en danger l'environnement essentiel pour la vie.

L'exposition de l'ensemble de la population canadienne à l'acide benzopropanoïque par l'intermédiaire des milieux naturels devrait être négligeable en raison des faibles quantités importées au Canada annuellement. Par ailleurs, les aliments devraient constituer la principale source d'exposition de l'ensemble de la population à l'acide benzopropanoïque, et ce, en raison de la migration de cette substance à partir des matériaux d'emballage de produits alimentaires.

La quantité de données concernant les effets de l'acide benzopropanoïque sur la santé humaine est modérée; cependant, les données empiriques disponibles et l'information provenant des modèles de prévision n'indiquent pas un risque élevé. Selon les renseignements disponibles, les marges entre les estimations de l'absorption quotidienne probable à partir des matériaux d'emballage de produits alimentaires et les concentrations associées à des effets chez les animaux de laboratoire sont considérées comme adéquates en matière de protection. On peut donc conclure que le l'acide benzopropanoïque ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité, à une concentration ou dans des conditions de nature à constituer un danger au Canada pour la vie ou la santé humaines.

D'après les renseignements disponibles, il est conclu que le bis[3-(3,5-di-*tert*-butyl- 4-hydroxyphényl)propionate] de (1,2-dioxoéthylène)bis(iminoéthylène)ne satisfait à aucun des critères de l'article 64 de la LCPE (1999).

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

Introduction

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

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

- celles qui répondent à tous les critères environnementaux de la catégorisation, notamment la persistance (P), le potentiel de bioaccumulation (B) et la toxicité intrinsèque pour les organismes aquatiques (Ti), et que l'on croit être commercialisées au Canada;
- celles qui répondent aux critères de la catégorisation pour le plus fort risque d'exposition (PFRE) ou qui présentent un risque d'exposition intermédiaire (REI) et qui ont été jugées particulièrement dangereuses pour la santé humaine, compte tenu des classifications qui ont été établies par d'autres organismes nationaux ou internationaux concernant leur cancérogénicité, leur génotoxicité ou leur toxicité pour le développement ou la reproduction.

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

On a décidé d'accorder une attention hautement prioritaire à l'évaluation des risques pour l'environnement du bis[3-(3,5-di-*tert*-butyl-4-hydroxyphényl)propionate] de (1, 2-dioxoéthylène)bis(iminoéthylène), car cette substance a été jugée persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques et il semble qu'elle soit commercialisée au Canada.

Le volet du Défi portant sur cette substance a été publié dans la *Gazette du Canada* le 31 janvier 2009 (Canada, 2009a et 2009b). En même temps a été publié le profil de cette substance, qui présentait l'information technique (obtenue avant décembre 2005) sur laquelle a reposé sa catégorisation. Des renseignements sur les utilisations de la substance et l'exposition à cette dernière ont été reçus en réponse au Défi.

Même si l'évaluation des risques que présente le bis[3-(3,5-di-*tert*-butyl-4-hydroxyphényl)propionate] de (1, 2-dioxoéthylène)bis(iminoéthylène) pour l'environnement a été jugée hautement prioritaire, cette substance ne répond ni 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 utiles à l'évaluation des risques écologiques.

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. Les évaluations préalables visent à examiner les renseignements scientifiques et à tirer des conclusions fondées sur le poids de la preuve et le principe de prudence.¹

La présente évaluation préalable prend en considération les renseignements sur les propriétés chimiques, les dangers, les utilisations de la substance en question et l'exposition à celle-ci, y compris l'information supplémentaire fournie dans le cadre du Défi. Les données pertinentes pour l'évaluation préalable de cette substance sont tirées de publications originales, de rapports de synthèse et d'évaluation, de rapports de recherche de parties intéressées et d'autres documents consultés au cours de recherches documentaires menées récemment, jusqu'en août 2009 (sections du document concernant les aspects écologiques) et jusqu'en novembre 2009 (sections du document concernant les effets sur la santé humaine). Les études les plus importantes ont fait l'objet d'une évaluation critique. Il est possible que les résultats de modélisation et les données empiriques aient servi à formuler des conclusions. Lorsqu'ils étaient disponibles et pertinents, les renseignements présentés dans l'évaluation des dangers provenant d'autres instances ont également été pris en compte. L'évaluation préalable n'est pas un examen exhaustif ou critique de toutes les données disponibles. Il s'agit plutôt d'un sommaire des renseignements essentiels qui appuient la conclusion proposée.

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

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

externes aient été pris en considération, Santé Canada et Environnement Canada assument la responsabilité du contenu final et des résultats de l'évaluation préalable. Les méthodes utilisées dans les évaluations préalables du Défi ont été examinées par un Groupe consultatif du Défi indépendant.

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

Identité de la substance

Nom de la substance

Aux fins du présent document, la substance est appelée « acide benzopropanoïque », appellation tirée du nom commun de la substance.

Tableau 1. Identité de la substance - Acide benzopropanoïque

Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS)	70331-94-1
Nom dans la LIS	bis[3-(3,5-di-<i>tert</i>-butyl-4-hydroxyphényl)propionate] de (1, 2-dioxoéthylène)bis(iminoéthylène)
Noms relevés dans les National Chemical Inventories (NCI)¹	<i>Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, (1,2-dioxo-1,2-ethanediyl)bis(imino-2,1-ethanediyl) ester</i> (TSCA, AICS, ASIA-PAC) <i>(1,2-dioxoéthylène)bis (iminoéthylène) bis(3-(3,5-di-<i>tert</i>-butyl-4-hydroxyphényl)propionate)</i> (EINECS) <i>Oxalylbis(imino-2,1-ethylene) bis[3,5-di-<i>tert</i>-butyl-4-hydroxybenzenpropionate]</i> (ENCS) <i>3,5-Bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxybenzene-propanoic acid (1,2-dioxo-1,2-ethanediyl)bis(imino-2,1-ethanediyl) ester</i> (ECL) <i>3,5-Bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxybenzenepropanoic acid (1,2-dioxo-1,2-ethanediyl)bis(imino-2,1-ethanediyl) ester</i> (ECL)
Autres noms	<i>2,2'-Oxalyldiamidobisethyl 3-(3,5-di-<i>tert</i>-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate;</i> <i>2,2'-Oxalyldiamidobisethyl-3-(3,5-di-<i>tert</i>-butyl-4-hydroxyphenyl) propionate;</i> <i>2,2'-Oxamidobis[ethyl 3-(3,5-di-<i>tert</i>-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate];</i> <i>2,2'-Oxamidodiethyl bis[3-(3,5-di-<i>tert</i>-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate];</i> <i>Naugard XL 1;</i> <i>XL 1</i>
Groupe chimique (groupe de la LIS)	Produits chimiques organiques définis
Principale classe chimique ou utilisation	Phénols encombrés
Principale sous-classe chimique	Esters, amines secondaires, amines aliphatiques
Formule chimique	C ₄₀ H ₆₀ N ₂ O ₈

Structure chimique	
SMILES²	<chem>O=C(C(=O)NCCOC(=O)CCc1cc(c(c1)C(C)(C)C)O)C(C)(C)C</chem> <chem>NCCOC(=O)CCc2cc(c(c2)C(C)(C)C)O)C(C)(C)C</chem>
Masse moléculaire	696,9 g/mol

¹ National Chemical Inventories (NCI), 2007 : AICS (inventaire des substances chimiques de l'Australie); ASIA-PAC (listes des substances de l'Asie-Pacifique); LIS (Liste intérieure des substances du Canada); 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).

² Simplified Molecular Input Line Entry System

Propriétés physiques et chimiques

Pratiquement aucune donnée expérimentale sur les propriétés physiques et chimiques de l'acide benzopropanoïque n'a été relevée. Le tableau 2a présente les propriétés physiques et chimiques modélisées de l'acide benzopropanoïque qui se rapportent à leur devenir dans l'environnement.

Les modèles sont basés sur les relations quantitatives structure-activité (RQSA). Ces modèles (excepté WSKOWWIN, 2000) sont principalement fondés sur des méthodes d'addition de fragments; autrement dit, ils s'appuient sur la structure d'un produit chimique donné. Les sous-structures de l'acide benzopropanoïque, notamment les groupes ester et amide, les groupes de phénols et les carbones tertiaires, sont incluses dans les ensembles d'étalonnage des modèles et elles sont utilisées par les modèles pour déterminer les propriétés physiques et chimiques de cette substance.

Une recherche documentaire a été réalisée et le programme ChemIDplus® (US NLM, 2008) a été utilisé pour trouver des substances analogues appropriées de l'acide benzopropanoïque. Cette recherche n'a décelé aucun produit analogue pertinent dans les valeurs physiques et chimiques et les données sur la persistance et la bioaccumulation qui ont été mesurées. En raison du manque d'analogues ayant des données mesurées définies par la méthode susmentionnée, la base de données des substances nouvelles du Canada a été consultée en quête d'analogues.

Tableau 2a. Propriétés physiques et chimiques de l'acide benzopropanoïque

Propriété	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
État physique	Expérimental	Solide (poudre)	-	Mayzo Inc. (2005)
Point de fusion (°C)	Expérimental	170-180		Mayzo Inc. (2005)
	Modélisé	350		MPBPWIN, 2000
Point d'ébullition (°C)	Modélisé	847		MPBPWIN, 2000
Masse volumique (kg/m ³)	Aucune information disponible			
Pression de vapeur (Pa)	Modélisé	4,39 x 10 ⁻²⁰ (3,29 x 10 ⁻²² mm Hg)	25	MPBPWIN, 2000
Constante de la loi de Henry (Pa·m ³ /mol)	Modélisé	9,3 x 10 ⁻¹⁵ (9,1 x 10 ⁻²⁰ atm·m ³ /mol)	25	HENRYWIN, 2000
Log K _{oe} (coefficient de partage octanol-eau) (sans dimension)	Modélisé	6,68 ¹		KOWWIN, 2000
Log K _{co} (coefficient de partage carbone organique/eau) (sans dimension)	Modélisé, fondé sur le log K _{oe}	4,32		PCKOCWIN, 2000
Solubilité dans l'eau (mg/L)	Mesuré	< 100	20	Mayzo Inc. (2005)
	Modélisé	0,0033 ²	25	WSKOWWIN, 2000

Propriété	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
pK _a (constante de dissociation) (sans dimension)	modélisé	11,48 (sous forme d'acide)		ACD/pKaDB, 2005

¹ Valeur ajustée du modèle KOWWIN basée sur la valeur expérimentale du log K_{ow} de 7,18 pour la substance B (voir le tableau 2b)

² Modélisé en fonction de la valeur ajustée du log K_{ow} de 6,68

Des données analogues ont été relevées dans les déclarations de substances nouvelles reçues en vertu du *Règlement sur les renseignements concernant les substances nouvelles (substances chimiques et polymères)* de la LCPE (1999) (Canada, 2005). Les structures des deux analogues définis sont semblables à environ la moitié du dimère de l'acide benzopropanoïque. Elles contiennent la structure phénolique encombrée et un ester aliphatique, mais pas le groupe amide. Les substances ne sont peut-être pas déterminées pour des raisons de confidentialité. Elles sont définies ici comme la « substance A » et la « substance B ». Les données relatives aux propriétés physiques et chimiques pour ces substances analogues sont incluses dans le tableau 2b.

Tableau 2b. Propriétés physiques et chimiques des substances A et B

Propriété	Substance	Valeur	Température (°C)	Méthode
Masse moléculaire (g)	A	334,5		
	B	390,6		
Point de fusion (°C)	A	38-45		ASTM E 537-86 et méthode A1 ¹
	B	-20 (point de figeage)		OCDE 102
Point d'ébullition (°C)	A	347 (avec décomposition)	100,78 kPa	ASTM E 537-86 et méthode A2 ¹
	B	370 (avec décomposition)		OCDE (1995b), méthode 103
Masse volumique (kg/m ³)	A	1 030 (1,03 g/mL)	20	Pycnomètre et méthode A3 ¹
	B	959 0,959 g/mL	20	OCDE (1995d), méthode 109
Pression de vapeur (Pa)	A	< 1,2 x 10 ⁻⁴	25	Méthode A4 ¹
	B	2 x 10 ⁻⁵	25	OECD (2006), Method 104
Log K _{ow} (coefficient de partage octanol-eau) (sans dimension)	A	>4,06		Méthode A8 ¹
	B	7,18		OCDE (2004a), méthode 117

Log K _{co} (coefficient de partage carbone organique-eau) (sans dimension)	A	4,23		Ligne directrice provisoire de l'OCDE (décembre 1998) (devenue méthode 121; OCDE, 2001)
	B	>5,63		OCDE (2001), méthode 121
Solubilité dans l'eau (mg/L)	A	<0,102 0,077	20	OCDE (1981), méthode 116 WSKOWWIN, 2000
	B	<0,121 0,00018 ³ 0,00085	20	OCDE (1995d), méthode 105 WSKOWWIN, 2000
Liposolubilité (mg/L)	A	Miscible dans toutes les proportions	37	OCDE (1981), méthode 116
	B	N/D		
pK _a (constante de dissociation) (sans dimension)	A	12,53		² Estimée à l'aide de PALLAS (2001)
	B	N/D		

¹ Commission européenne (1992).

² Dérégations accordées : sa valeur ne sera pas mesurée, car elle devrait être supérieure à 10

³ Hydrosolubilité apparente de 0,00018 pour la substance B, obtenue à partir d'une étude de toxicité des algues (se reporter au tableau 7c)

ASTM - American Society for Testing and Materials

OCDE - Organisation de coopération et de développement économiques

Afin de comparer directement les propriétés physiques et chimiques de l'acide benzopropanoïque aux analogues (substances A et B), les propriétés des trois substances ont été modélisées dans EPI Suite (2008) sans ajustement pour les valeurs empiriques déterminées, comme pour l'acide benzopropanoïque du tableau 2a. Cette comparaison est présentée dans le tableau 2c ci-dessous.

Comme on peut le constater en comparant les tableaux 2a et 2b, les estimations des points de fusion et d'ébullition de l'acide benzopropanoïque sont beaucoup plus élevées que les points mesurés pour les substances analogues. Leurs valeurs modélisées de la pression de vapeur sont bien inférieures à celles mesurées pour les analogues; toutefois, les valeurs de la pression de vapeur sont faibles pour les trois substances. Pour pratiquement toutes les propriétés, celles de la substance B sont plus semblables à l'acide benzopropanoïque qu'à

celles de la substance A, y compris les principales propriétés du log K_{oe} et de l'hydrosolubilité, qui sont les propriétés les plus importantes entraînant la bioaccumulation et l'écotoxicité.

Des données empiriques sur la persistance et sur la toxicité des substances A et B sont utilisées en tant que données analogues pour l'acide benzopropanoïque afin d'appuyer les données modélisées (se reporter aux chapitres sur la persistance et sur potentiel de provocation de dégâts écologiques du présent rapport). On estime que ces produits sont des analogues adéquats pour ces résultats finaux. Les substances A et B ont une structure proche de celle de l'acide benzopropanoïque. De ce fait, elles sont hydrolysées et subissent une biodégradation comme l'acide benzopropanoïque (se reporter à la section sur la persistance). En ce qui concerne la toxicité, les substances A et B auraient la même réaction toxique que l'acide benzopropanoïque, étant donné que ces substances sont également des esters. La substance B est un meilleur analogue que la substance A étant donné que sa valeur prévue de log K_{oe} et son hydrosolubilité sont plus près de celles de l'acide benzopropanoïque que la substance A (tableau 2c). Le logarithme K_{OE} prévoit pour la substance B une valeur supérieure de 0,51, en unités logarithmiques, à la valeur de l'acide benzopropanoïque, et une hydrosolubilité plus élevée, mais d'environ 1,5 dans l'ordre de grandeur de l'acide benzopropanoïque. Les différences entre les propriétés de l'acide benzopropanoïque et des substances A et B, et la manière dont ces différences touchent leurs toxicités prévues ou mesurées seront développées dans le chapitre sur l'évaluation des effets sur l'environnement.

Tableau 2c. Comparaison des propriétés physiques et chimiques de l'acide benzopropanoïque prévues par EPI Suite (2008) avec les substances A et B

Propriété	Acide benzopropanoïque	Substance A	Substance B
Masse moléculaire (g)	696,9	334,5	390,6
Point de fusion (°C)	349,8	148	172
Point d'ébullition (°C)	847	398	438
Pression de vapeur (Pa)	$2,6 \times 10^{-18}$	$1,5 \times 10^{-5}$	$6,9 \times 10^{-7}$
Log K_{oe} (coefficient de partage octanol-eau; sans dimension)	7,92	6,53	8,43
Log K_{co} (coefficient de partage carbone organique-eau; sans dimension)	5,01	4,64	5,68
Solubilité dans l'eau (mg/L)	$2,4 \times 10^{-5}$	$7,7 \times 10^{-2}$	$8,5 \times 10^{-4}$

Sources

L'acide benzopropanoïque n'est pas une substance d'origine naturelle.

Des enquêtes menées en 2005 et 2006 par le truchement d'avis publiés dans la *Gazette du Canada* conformément à l'article 71 de la LCPE (1999) ont permis de recueillir des renseignements. (Canada, 2006b et 2009b). Ces avis visaient à recueillir des données sur la fabrication et l'importation d'acide benzopropanoïque au Canada.

Moins de quatre entreprises ont déclaré avoir importé un total de 153 kg d'acide benzopropanoïque en 2006 (Canada, 2009b). Moins de quatre autres entreprises ont manifesté un intérêt pour cette substance en tant qu'importateurs en 2006, si bien qu'il pourrait y avoir une certaine activité d'importation dans des quantités inférieures au seuil de 100 kg/an. Aucun renseignement indiquant la fabrication ou l'importation au Canada d'acide benzopropanoïque au-dessus du seuil de déclaration de 100 kg durant l'année civile 2005 n'a été reçu (Canada, 2006b; Environnement Canada, 2006). Cette substance a été importée en 2006 dans de la poudre de polychlorure de vinyle chloré (PVC-C) utilisée dans le moulage de feuilles et de profilés et dans le moulage par extrusion et injection (Environnement Canada, 2009a). Il semble qu'actuellement, l'acide benzopropanoïque ester est beaucoup moins commercialisé au Canada qu'il y a 20 ans. La quantité d'acide benzopropanoïque que les entreprises ont déclaré avoir fabriquée ou importée au Canada durant l'année civile 1986 se situait entre 10 000 kg et 100 000 kg (Environnement Canada, 1988).

Ailleurs, l'acide benzopropanoïque est répertorié comme une substance chimique produite en faible quantité en Europe (ESIS, 2009). Cette substance a été déclarée en vertu de l'Inventory Update Rule visée par la Toxic Substances Control Act des États-Unis pour les périodes de déclaration suivantes : 1986, 1994, 1998, 2002 et 2006 (USEPA, 1986-2002; USEPA, 2006). En 2006, moins de 500 000 livres de cette substance ont été produites ou importées aux États-Unis (USEPA, 2006). En 1998 et en 2002, 500 000 à 1 million de livres de cette substance ont été produites ou importées aux États-Unis (USEPA, 2009). L'acide benzopropanoïque a été utilisé en Suède au cours des années 2001 et 2002 dans des quantités comprises entre 10 et 15 tonnes par an, respectivement (SPIN, 2009). Il a aussi été utilisé en Suède plus récemment (de 2003 à 2007), bien que les renseignements relatifs à la quantité soient confidentiels (SPIN, 2009).

Étant donné que cette substance est utilisée dans d'autres pays, notamment aux États-Unis pour fabriquer des pièces de véhicules (USEPA, 2006), il est probable qu'elle entre sur le marché canadien comme composante de produits manufacturés. Les renseignements disponibles ne sont pas suffisants actuellement pour déterminer une estimation quantitative de l'importance de cette source.

Utilisations

En 2006, un importateur canadien d'acide benzopropanoïque a déclaré qu'il est utilisé en tant qu'antioxydant dans les produits de polychlorure de vinyle chloré (PCV-C) (Environnement Canada, 2009a). Les produits PCV-C sont utilisés dans différentes industries, notamment les transports en commun, l'aérospatiale, le fenêtrage, le chauffage, la ventilation et la climatisation, les piscines et les installations thermales, les composantes électriques, l'irrigation, ainsi que les mines (information provenant du site Web du fabricant; source non citée). Au Canada, la majorité de cette substance est vendue à un fabricant de tuyaux en plastique. On ne connaît aucune utilisation de cette substance par les consommateurs.

L'acide benzopropanoïque est utilisé comme antioxydant et stabilisateur thermique (Mayzo Inc., 2005). Les applications habituelles d'utilisation finale comprennent l'isolation des fils et des câbles, la fabrication de films et de feuilles ainsi que les pièces pour automobiles. L'acide benzopropanoïque va stabiliser le polypropylène, le polyéthylène, le polystyrène, le polyester, le terpolymère d'éthylène-propylène-diène (élastomère EPDM), l'acétate de vinyle-éthylène et le polystyrène-butadiène-acrylonitrile (ABS) (Mayzo Inc., 2005). Son utilisation est approuvée par la FDA des États-Unis dans les adhésifs et les polymères pour les applications en contact avec les aliments dans des quantités ne pouvant dépasser 0,1 % du poids du produit fini (Mayzo Inc., 2005).

Quinze tonnes d'acide benzopropanoïque ont été utilisées en Suède pour la fabrication de matières plastiques en 2002 (SPIN, 2009).

Aux États-Unis, la substance a été utilisée dans la fabrication de sièges et de garnitures intérieures de véhicules automobiles en tant que stabilisateur (USEPA, 2006).

Rejets dans l'environnement

En 2006, aucun client ou importateur canadien n'a signalé des rejets d'acide benzopropanoïque dans l'air, l'eau ou le sol, ni aucun transfert de la substance à des installations de gestion de déchets (Environnement Canada, 2009a). On ne connaît aucune utilisation de cette substance par les consommateurs. Étant donné que cette substance est importée sous une forme solide et qu'elle est utilisée uniquement dans des applications industrielles, les rejets de cette substance dans l'environnement ne devraient pas être généralisés.

Les pertes d'acide benzopropanoïque par différentes voies pendant son cycle de vie sont estimées en fonction des données issues d'enquêtes réglementaires, des industries, ainsi qu'en fonction des données publiées par différents organismes. Les pertes sont regroupées en six types : (1) déversements dans les eaux usées; (2) émissions atmosphériques; (3) émissions dans le sol; (4) transformation chimique; (5) élimination sur les sites d'enfouissement; et (6) élimination par incinération. Des pertes peuvent se produire à une

ou plusieurs étapes du cycle de vie de la substance; celles-ci comprennent l'utilisation industrielle, l'utilisation commerciale et par les consommateurs, ainsi que l'élimination. Pour aider à estimer ces pertes, une feuille de calcul (outil de début massique) a été utilisée; elle intègre toutes les données et hypothèses requises pour l'estimation (Environnement Canada, 2008 et 2009c). À moins de disposer de données précises sur le taux ou le potentiel de rejet de cette substance provenant des sites d'enfouissement et des incinérateurs, l'outil de débit massique ne permet pas de quantifier les rejets dans l'environnement à partir des sites d'élimination des déchets.

Les pertes estimées pour les 153 kg d'acide benzopropanoïque importés au Canada au cours de son cycle de vie pour le pire des scénarios prudents sont présentées au tableau 3 (Environnement Canada, 2009c). Dans ce scénario, les déversements dans les eaux usées concernent les déversements des eaux usées non traitées (p. ex., aucun traitement des eaux usées industrielles sur place ou traitement des eaux usées municipales hors site). En général, les pertes dans les eaux usées constituent une source courante de rejets dans l'eau par les usines de traitement des eaux usées et dans le sol par l'épandage de biosolides). Les pertes par transformation chimique se rapportent aux modifications de l'identité de la substance qui ont lieu au cours des étapes de fabrication, d'utilisation industrielle ou d'utilisation commerciale et par les consommateurs, mais elles excluent celles qui ont lieu pendant les opérations de gestion des déchets telles que l'incinération et le traitement des eaux usées.

L'utilisation finale des matières plastiques (c'est-à-dire les tuyaux en plastique) représentent la plus grande proportion (8 %) des rejets dans l'environnement (sol et eaux usées), tandis que la conversion et la composition industrielles de l'acide benzopropanoïque dans les matières plastiques ne représentent que 0,043 % (Environnement Canada, 2009c). On a présumé que la moitié des rejets issus des tuyaux en plastique pendant leur cycle de vie vont dans l'eau et l'autre moitié dans le sol (du tuyau qui est soit enterré, soit situé au-dessus du sol). Les rejets sont dispersifs (c.-à-d. un grand nombre de très petites sources), mais les rejets totaux dans l'environnement, c.-à-d. dans les eaux usées et le sol, sont faibles (6,1 kg vers chaque élément – voir le tableau 3).

Tableau 3. Estimation des pertes d'acide benzopropanoïque pendant son cycle de vie

Type de perte	Proportion (%)	Masse (kg)	Étapes pertinentes du cycle de vie
Eaux usées	4,0	6,1	Utilisation industrielle, utilisation commerciale et par les consommateurs
Émissions atmosphériques	0,0	0,0	
Sol	4,0	6,1	Utilisation commerciale et par les consommateurs
Transformation chimique	0,0	0,0	
Sites d'enfouissement	89,2	136	Élimination
Incinération	2,8	4,3	Élimination

L'acide benzopropanoïque ne devrait pas être rejeté dans l'environnement par des voies autres que les eaux usées et le sol. La majorité de cette substance sera éliminée dans des sites d'enfouissement. En raison des valeurs élevées des logs K_{oe} et K_{co} de cette substance, on prévoit qu'elle devrait s'adsorber considérablement sur le sol et les sédiments, donc il ne devrait pas y avoir d'infiltrations dans les eaux souterraines.

Cette substance devrait être présente dans les articles manufacturés et les produits de consommation (voir la section « Utilisations » ci-dessus). Bien que l'on ne possède aucun renseignement sur les quantités d'articles manufacturés et de produits de consommation contenant de l'acide benzopropanoïque qui sont importées au Canada, on prévoit que les proportions des pertes selon les différentes voies ne différeront pas énormément des quantités estimées ici. Cela dit, les quantités rejetées dans l'environnement et confiées à la gestion des déchets seraient plus élevées si l'importation de ces articles entraînait en ligne de compte. Toutefois, les renseignements disponibles ne sont pas suffisants actuellement pour donner une estimation quantitative de ces pertes.

Devenir dans l'environnement

D'après les propriétés physiques et chimiques de l'acide benzopropanoïque (tableau 2), les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (tableau 4) semblent indiquer que cette substance devrait demeurer principalement dans le sol et les sédiments, selon le milieu dans lequel elle est rejetée.

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

Substance rejetée dans :	Pourcentage de la substance répartie dans chaque milieu			
	Air	Eau	Sol	Sédiments
l'air (100 %)	0,40	0,28	86,4	13,0
l'eau (100 %)	0	2,1	0	97,9
le sol (100 %)	0	0	99,9	0,13

Si la substance est rejetée dans l'air, une infime quantité de celle-ci y demeure. Les valeurs modélisées faibles de la pression de vapeur ($4,39 \times 10^{-20}$ Pa) et de la constante de la loi de Henry ($9,3 \times 10^{-15}$ Pa·m³/mol) indiquent que l'acide benzopropanoïque est non volatil. Par conséquent, si cette substance n'est rejetée que dans l'air, elle va se répartir dans le sol et, dans une moindre mesure, dans les sédiments.

Si l'acide benzopropanoïque est rejeté dans l'eau, il s'adsorbera fortement sur les matières en suspension et les sédiments (~ 98 %), étant donné les valeurs élevées estimées du log K_{co} (4,32). La volatilisation à partir de la surface de l'eau est un processus peu important de son devenir d'après la constante estimée de la loi de Henry. Par conséquent, si l'eau est

un milieu récepteur, l'acide benzopropanoïque se répartira essentiellement dans les sédiments (voir le tableau 4).

L'acide benzopropanoïque devrait avoir une adsorption sur place élevée (c'est-à-dire qu'il devrait être immobile), d'après l'estimation élevée de sa valeur de $\log K_{co}$. La volatilisation à partir des surfaces de sol humides sera un processus peu important dans le devenir de cette substance, d'après la constante estimée de la loi de Henry. Dès lors, s'il est rejeté dans le sol, l'acide benzopropanoïque demeurera dans le sol (voir le tableau 4).

La première constante de dissociation acide relativement élevée (pK_a) de 11,5 pour les groupes fonctionnels amide (ACD/pKaDB, 2005) indique que la moitié du produit chimique sera dissociée à un pH de 11,5. Dans les plans d'eau ayant des pH pertinents du point de vue de l'environnement (entre 6 et 9), 100% du produit seront non dissociés, ce qui indique que l'exposition biotique à l'acide benzopropanoïque proviendra de la substance chimique neutre. La proportion relativement faible de la substance chimique dissociée indique également que le comportement de répartition prévu à l'aide des logarithmes K_{oc} et K_{co} est approprié.

Persistence et potentiel de bioaccumulation

Persistence

On n'a découvert aucune donnée expérimentale sur la dégradation de l'acide benzopropanoïque. Dès lors, une relation quantitative structure-activité (RQSA) et une méthode du poids de la preuve reposant sur des analogues (Environnement Canada, 2007) ont été appliquées à l'aide des données présentées dans les tableaux 5a, 5b et 5c ci-dessous.

Le tableau 5b résume les résultats de la dégradation dans divers milieux naturels que prédisent les modèles RQSA disponibles. Des données empiriques en matière d'hydrolyse et de biodégradation ont été définies pour les substances analogues A et B (voir la section « Propriétés physiques et chimiques ») et elles sont présentées dans les tableaux 5b et 5c ci-dessous.

Les composantes de la structure de l'acide benzopropanoïque sont bien reflétées par les ensembles d'étalonnage des modèles dans EPI Suite (2008), qui comprend le modèle de biodégradation BIOWIN (2000), ainsi que les modèles de bioaccumulation Arnot-Gobas (2003) et BCFWIN (2000). En effet, ces modèles représentent les sous-structures suivantes d'acide benzopropanoïque : alcool aromatique, ester, amide, carbone tertiaire sans hydrogènes, et substituant d'alkyle sur le noyau aromatique.

D'après les résultats du modèle canadien de POP (CPOP, 2008), l'acide benzopropanoïque obtient une note de 92 % pour le domaine de la structure. L'ensemble d'étalonnage du modèle canadien de POP contient des substances avec des esters et des

benzènes et des structures di-tert-butylphénol, et ainsi il modélise cette substance de façon adéquate.

Tableau 5a. Données modélisées sur la dégradation de l'acide benzopropanoïque

Processus du devenir	Modèle et base du modèle	Résultat et prévision du modèle	Demi-vie extrapolée (jours)
AIR			
Oxydation atmosphérique	AOPWIN, 2000	$t_{1/2} = 2,08$ heures	< 2
Réaction avec l'ozone	AOPWIN, 2000	s.o. ¹	N/D
EAU			
Hydrolyse	HYDROWIN, 2000	$t_{1/2} = 1,03$ an (pH de 7) $t_{1/2} = 38$ jours (pH de 8)	N/D
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 3 : enquête d'expert (biodégradation ultime)	0,94 ² « se biodégrade lentement »	> 182 ⁴
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 4 : enquête d'expert (biodégradation primaire)	3,0 ² « se biodégrade rapidement »	< 182 ⁴
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 5 : MITI probabilité linéaire	0,20 ³ « se biodégrade lentement »	> 182 ⁴
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 6 : MITI, probabilité non linéaire	0,005 ³ « se biodégrade très lentement »	> 182 ⁴
Biodégradation (aérobie)	TOPKAT, 2004 Probabilité	-2,5 ³ « se biodégrade très lentement »	> 182 ⁴
Biodégradation (aérobie)	Modèle canadien de POP (CPOP, 2008) % DBO (demande biochimique en oxygène)	% DBO = 6,3 « se biodégrade très lentement »	> 182 ⁴

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

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

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

⁴ Les prévisions en matière de demi-vie concernant les modèles BIOWIN, TOPKAT et CPOP sont déterminées en fonction d'Environnement Canada, 2009b.

Dans l'air, une valeur de demi-vie de l'oxydation atmosphérique prévue de 2,08 heures sous l'effet des réactions avec des radicaux hydroxyles (tableau 5a) démontre que cette substance va s'oxyder rapidement. Cette substance ne devrait pas réagir dans l'atmosphère avec d'autres espèces photooxydantes, comme le O₃. Les réactions avec des radicaux hydroxyles constitueront donc le plus important processus régissant son devenir dans l'atmosphère, ce qui permet de conclure que la substance n'est pas persistante dans l'air.

Une valeur de demi-vie par hydrolyse prévue de 1,03 an à un pH de 7 et de 38 jours à un pH de 8 (voir le tableau 5) montre que cette substance est soumise à une hydrolyse dans

des conditions alcalines. Si la substance est exposée à une portion de l'intervalle de pH pertinent du point de vue de l'environnement pour les eaux de surface (en général entre 6 et 9), elle devrait résister à l'hydrolyse. L'acide benzopropanoïque aura une demi-vie de moins de 38 jours à des valeurs de pH supérieures à 8, une demi-vie de 1,03 an à des valeurs de pH comprises entre 7 et 8, et une demi-vie supérieure à un an à des valeurs de pH inférieures à 7. Ces prévisions modélisées sont très semblables aux données mesurées de l'hydrolyse pour les substances analogues A et B (tableau 5b).

Tableau 5b. Données empiriques pour l'hydrolyse des substances analogues A et B

Substance	Méthode d'essai	Température (°C)	pH	Demi-vie
A	Point C7 de la directive 92/69/CEE ¹	25	4,7 9	> 1 an 28,9 jours
B	OCDE (2004b), méthode 111	25	4,7 8	> 1 an 15,2 jours ²

¹Commission européenne (économique) (1992)

² Une solution d'acétonitrile à 1% a été ajoutée comme cosolvant, étant donné que la substance n'est pas très soluble. Par conséquent, les demi-vies d'hydrolyse dans de l'eau pure seraient plus lentes que celles présentées ici.

Tableau 5c. Données empiriques pour la biodégradation des substances analogues A et B

Substance	Méthode d'essai	Description	Valeur de la biodégradation	Durée (j)	Conclusion
A	OCDE 301B ¹	Aérobic, évolution du CO ₂	6 %	28	Ne se biodégrade pas immédiatement
B	MITI japonais – OCDE 301C ¹	Aérobic, DBO ²	3 %	28	Ne se biodégrade pas immédiatement

¹OCDE (1992)

²DBO = demande biologique en oxygène

Tous les modèles de biodégradation, sauf le modèle de biodégradation primaire BIOWIN, prévoient que l'acide benzopropanoïque va se biodégrader lentement (tableau 5a), ce qui laisse penser que sa demi-vie de dégradation ultime dans l'eau serait supérieure à 182 jours. Bien que le modèle BIOWIN prévoie que la substance subira une dégradation primaire relativement rapide, l'identité des produits de dégradation n'est pas connue. Les prévisions du modèle de dégradation ultime sont appuyées par les données empiriques relatives aux substances analogues (tableau 5c), qui concluent que ces substances ne sont pas immédiatement biodégradables. Par conséquent, le poids de la preuve porte à croire que la demi-vie de biodégradation ultime de l'acide benzopropanoïque est supérieure à 182 jours dans l'eau.

L'utilisation d'un rapport d'extrapolation de 1:1:4 pour obtenir une demi-vie de biodégradation dans l'eau:les sols:les sédiments (Boethling *et al.*, 1995), la demi-vie de biodégradation ultime dans le sol est également supérieure à 182 jours, et la demi-vie dans les sédiments est supérieure à 365 jours. Ceci indique que l'acide benzopropanoïque est persistant dans le sol et les sédiments en tant que fonction des processus de dégradation biotique.

Étant donné que l'acide benzopropanoïque ne devrait pas se répartir considérablement dans l'air, la modélisation du potentiel de transport à grande distance n'a pas été effectuée.

L'acide benzopropanoïque s'hydrolyse lentement à des valeurs de pH inférieures à 8 et il sera donc stable dans de nombreuses eaux de surface canadiennes. De même, il ne se biodégrade pas rapidement, comme la structure phénolique encombrée est résistante à la biodégradation. Donc, les données modélisées et analogues (tableaux 5a, 5b et 5c) montrent que l'acide benzopropanoïque satisfait aux critères de persistance dans l'eau, le sol et les sédiments (demi-vies dans le sol et l'eau \geq 182 jours et demi-vie dans les sédiments \geq 365 jours), mais qu'il ne satisfait pas aux critères de persistance dans l'air (demi-vie \geq 2 jours) énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Potentiel de bioaccumulation

La valeur du log K_{oe} de 6,68 pour l'acide benzopropanoïque (tableau 2a) laisse penser qu'il a un potentiel de bioaccumulation dans l'environnement. Faute de données expérimentales disponibles sur les facteurs de bioaccumulation (FBA) et de bioconcentration (FBC) de l'acide benzopropanoïque, une méthode prédictive a été appliquée au moyen des modèles de FBA et de FBC disponibles, comme l'indique le tableau 6a ci-dessous. Selon le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000), une substance est bioaccumulable si ses facteurs de bioaccumulation et de bioconcentration sont supérieurs ou égaux à 5 000. Toutefois, le calcul des facteurs de bioaccumulation est la mesure préconisée pour évaluer le potentiel de bioaccumulation des substances. En effet, le facteur de bioconcentration ne prend pas en compte de manière adéquate le potentiel de bioaccumulation des substances par l'alimentation, lequel est un facteur majeur pour les substances dont le log K_{oe} est supérieur à $\sim 4,0$ (Arnot et Gobas, 2003). La modélisation cinétique du bilan massique devrait constituer la méthode de prévision la plus fiable pour déterminer le potentiel de bioaccumulation de l'acide benzopropanoïque, car elle permet une correction du métabolisme dans la mesure où le log K_{oe} de la substance se trouve dans le domaine du log K_{oe} du modèle.

Le modèle cinétique Arnot-Gobas (2003) corrigé en fonction du taux métabolique dans le cadre du programme BCFBAF (2008) d'EPISuite a été utilisé pour modéliser les FBA et les FBC de l'acide benzopropanoïque (tableau 6a). Des poissons de niveau trophique intermédiaire ont été utilisés pour représenter les sorties globales du modèle car, en raison de leur poids, ils représentent davantage les poissons susceptibles d'être consommés par des piscivores aviaires ou terrestres. D'après le résultat du modèle, la constante estimée

du taux de biotransformation (valeur k_M) était trop élevée. Dès lors, une valeur par défaut de 25/jour a été utilisée pour un poisson de 10 grammes. D'après le fichier d'aide du programme BCFBAF :

Pour les molécules ayant des fragments qui semblent facilement biotransformés (p. ex., se reporter aux coefficients de régression pour les esters, les urées, etc.), le modèle peut prévoir des valeurs $k_{M,N}$ extrêmement rapides. Lorsque le modèle prévoit des valeurs qui dépassent les valeurs constantes proposées pour le taux maximum de l'ensemble de l'organisme (Arnot *et al.*, 2008), les valeurs maximales pour l'ensemble de l'organisme sont fournies et recommandées pour remplacer les prévisions du modèle original.

C'est ce qui s'est produit avec l'acide benzopropanoïque, en raison du groupe d'esters immédiatement biotransformé.

Des données modélisées supplémentaires sur le facteur de bioconcentration (FCA) de l'acide benzopropanoïque sont présentées au tableau 6b.

Tableau 6a. Tableau 6a. Prévisions des FBA et des FBC chez les poissons pour l'acide benzopropanoïque au moyen du modèle cinétique Arnot-Gobas (2003) corrigé en fonction de la transformation métabolique

Organisme d'essai	Paramètre	Valeur (en poids humide en L/kg)	Référence
Poisson	FBA	0,98	Niveau trophique moyen du FBA de Gobas (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	FBC	0,95	Niveau trophique moyen du FBA de Gobas (Arnot et Gobas, 2003)

Tableau 6b : Données modélisées supplémentaires sur la bioaccumulation de l'acide benzopropanoïque

Organisme d'essai	Paramètre	Valeur (poids humide en L/kg)	Référence
Poisson	FBC	6,7	Dimitrov <i>et al.</i> , 2005
Poisson	FBC	300	BCFWIN, 2000

Le modèle modifié du FBA de Gobas pour le niveau trophique intermédiaire chez les poissons a estimé le facteur de bioaccumulation (FBA) à 0,98 L/kg, ce qui indique que l'acide benzopropanoïque n'a pas de potentiel de bioconcentration dans les tissus des poissons et de bioamplification dans les chaînes alimentaires (tableau 6a). Les résultats des calculs du modèle des FBC (tableau 6b) fournissent une preuve additionnelle qui appuie le faible potentiel de bioconcentration de cette substance. D'après les valeurs

disponibles obtenues par modélisation cinétique, corrigées en fonction du métabolisme, et compte tenu des preuves empiriques de potentiel métabolique, l'acide benzopropanoïque ne répond pas aux critères de bioaccumulation (FBC ou FBA égal ou supérieur à 5 000) énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Potentiel d'effets nocifs sur l'environnement

Évaluation des effets sur l'environnement

A - Dans le milieu aquatique

Il existe des preuves modélisées selon lesquelles l'acide benzopropanoïque, ainsi que des preuves expérimentales selon lesquelles les analogues de cette substance, nuisent aux organismes aquatiques à des concentrations relativement faibles (voir les tableaux 7a, 7b et 7c ci-dessous).

Une gamme de valeurs sur la toxicité aquatique a été obtenue à partir des différents modèles QSAR, notamment EPIsuite (2008), OASIS Forecast (2005) et AIEPS (2003-2007), comme l'indique le tableau 7a. Les prévisions indiquées dans le tableau 7a sont valables, étant donné qu'aucune des valeurs limites maximales du $\log K_{oe}$ et du poids moléculaire précisées dans les modèles n'a été dépassée. Le modèle AIEPS n'emploie pas de valeurs limites pour des paramètres tels que le $\log K_{oe}$, etc. L'ensemble d'étalonnage d'AIEPS (2003–2007) n'est pas idéal pour l'acide benzopropanoïque étant donné qu'il ne contient aucun di-tert butyl phénol. L'acide benzopropanoïque est modélisé comme « réactif, non précisé » par OASIS, ce qui laisse entendre un mode d'action d'ester et une toxicité supérieure à une narcose de base.

Dans EPIsuite (2008), la toxicité de l'acide benzopropanoïque a été modélisée comme un ester, un polyphénol, et également comme une substance organique neutre (toxicité de référence); cependant, la valeur limite du $\log K_{oe}$ pour la classe des esters est 5,0 (pour les valeurs aiguës) au lieu de 7,0 pour la classe des polyphénols; dès lors, seuls les résultats aigus pour la classe des polyphénols sont présentés dans le tableau 7a. Étant donné que les concentrations pour la toxicité et l'hydrosolubilité sont souvent incertaines, les valeurs de la toxicité qui ont dépassé les estimations de la solubilité jusqu'à un facteur de 10 ont été jugées acceptables. La plupart des prévisions de toxicité ont dépassé l'hydrosolubilité prévue de cette substance (0,0033 mg/L) de plus d'un facteur de 10; par conséquent, aucun effet à la saturation n'est prévu (ECOSAR, 2004). Les résultats d'ECOSAR pour les trois catégories chimiques qui n'ont pas dépassé la solubilité de cette substance d'un facteur de plus de 10 étaient les valeurs chroniques pour le poisson, la daphnie (catégorie des polyphénols) et la mysis effilée (catégorie des esters) (voir le tableau 7a). D'après ces prévisions de toxicité, l'acide benzopropanoïque a le potentiel de

nuire de façon chronique aux organismes aquatiques à de faibles concentrations (moins de 0,1 mg/L).

Tableau 7a. Données modélisées relatives à la toxicité aquatique de l'acide benzopropanoïque

Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur ¹ (mg/L)	Référence
Poisson	Aigu (96 heures)	CL ₅₀ ²	0,12*	ECOSAR, 2004
			≤ 0,19*	OASIS Forecast, 2005
			4,01*	AIEPS, 2003-2007
	Chronique (30 jours)	-	0,016	ECOSAR, 2004
<i>Daphnie</i>	Chronique (21 jours)	-	0,021	ECOSAR, 2004
<i>Daphnia</i>	Toxicité aiguë (48 h)	CL ₅₀	≤ 0,15*	OASIS Forecast, 2005
			18,3*	AIEPS, 2003-2007
	Toxicité chronique (21 jours)	-	0,021	ECOSAR, 2004
	Toxicité aiguë	CE ₅₀ ³	51,8*	AIEPS, 2003-2007
		-		
Algues	Chronique	-	0,10*	ECOSAR, 2004
Mysis effilée (eau de mer)	Chronique	-	0,0001	ECOSAR, 2004

¹ Les valeurs suivies d'un * dépassent l'hydrosolubilité prévue de plus d'un facteur de 10. Tous les résultats concernent la classe des polyphénols, sauf la valeur relative à la mysis effilée, qui a trait à la classe des esters.

² CL₅₀ - Concentration d'une substance qu'on estime létale pour 50 % des organismes d'essai.

³ CE₅₀ - La concentration d'une substance qui est estimée causer un effet chez 50 % des organismes d'essai.

Les données empiriques sur la toxicité des substances analogues A et B sont présentées dans les tableaux 7b et 7c, respectivement.

La concentration et la stabilité du matériel d'essai dans les solutions d'essai ont été vérifiées par une analyse chimique au début et à la fin des essais aigus, et tous les quelques jours pendant l'étude de reproduction de la *Daphnia*.

Pour la substance B, « bien que dans certains cas, les concentrations trouvées dans les... échantillons d'essai se trouvent juste au-dessus de celles de la limite de dosage, les résultats obtenus ont été considérés valables ». Le sommaire de rigueur d'étude à propos des algues se trouvant à l'annexe 1 contient de plus amples renseignements à ce sujet.

Pour la substance A, la valeur la plus faible avec effet était la concentration minimale avec effet observé (CMEO), mesurée à 0,11 mg/L à partir de l'étude de reproduction de la *Daphnia* (tableau 7b). Pour la substance B, aucun effet toxique ou sublétalement n'a été observé.

chez la truite arc-en-ciel ou la *Daphnia magna* aux niveaux de concentration les plus élevés possible à l'état dissous (tableau 7c). La valeur la plus faible avec effet était la CMEO de 0,00018 mg/L (concentration mesurée) issue de l'étude sur les algues (tableau 7c). Cette concentration est considérée comme la limite d'hydrosolubilité de cette substance, d'après le rapport d'étude.

Tableau 7b. Données empiriques sur la toxicité aquatique de la substance analogue A

Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur ¹ (mg/L)
Algues (<i>Desmodesmus subspicatus</i>)	Chronique (96 heures), croissance, taux de croissance	CE ₅₀ ² CSEO ³	> 1 000 (> 1,24*) 1 000 (1,24*)
<i>Daphnia magna</i>	Aigu (48 heures)	CE ₅₀ ² CSEO ³	110 (0,27) 56 (n.a.)
<i>Daphnia magna</i>	Reproduction (21 jours)	CE ₅₀ ² CMEO ⁴ CSEO ³	20 (n.a.) 32 (0,11) 10 (0,048)
Truite arc-en-ciel (<i>Oncorhynchus mykiss</i>)	Aigu (96 heures)	CL ₅₀ ⁵ CSEO ³	1500 (n.a.) 560 (0,66)

¹ Les valeurs données sont les taux de charge pour la fraction aqueuse et non les concentrations mesurées. Les valeurs entre parenthèses sont les concentrations moyennes mesurées pendant la durée de l'étude. Les valeurs suivies d'un * dépassent l'hydrosolubilité prévue de 0,08 mg/L de plus d'un facteur de 10.

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

³ CSEO - La concentration sans effet observé est la concentration la plus élevée ne causant pas d'effet statistiquement significatif par rapport aux témoins dans un essai de toxicité.

⁴ CMEO - La concentration minimale avec effet observé est la concentration la plus faible d'une substance causant des effets statistiquement significatifs par rapport au groupe témoin dans un essai de toxicité.

⁵ CL₅₀ - Concentration d'une substance qu'on estime létale pour 50 % des organismes d'essai.

n.a. - non applicable

* valeur approximative basée sur un taux de charge de 100 mg/L.

Tableau 7c. Données empiriques sur la toxicité aquatique de la substance analogue B

Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur ¹ (mg/L)
Algues (<i>Desmodesmus subspicatus</i>)	Chronique (72 heures), croissance, taux de croissance	CE ₅₀ ² CMEO ³ CSEO ⁴	> 100 (> 0,00018) 100 (0,00018) 50 (0,00014)
<i>Daphnia magna</i>	Aigu (48 heures)	CE ₅₀ ² CSEO ⁴	100 (> 0,0082) 100 (0,0082)

Truite arc-en-ciel (<i>Oncorhynchus mykiss</i>)	Aigu (96 heures)	CL ₅₀ ⁵ CSEO ⁴	100 (> 0,0011) 100 (0,0011)
--	---------------------	--	--------------------------------

¹ Les valeurs données sont les taux de charge pour la fraction aqueuse et non les concentrations mesurées. Les valeurs entre parenthèses sont les concentrations moyennes mesurées pendant la durée de l'étude.

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

³ CME0 - La concentration minimale avec effet observé est la concentration la plus faible d'une substance causant des effets statistiquement significatifs par rapport au groupe témoin dans un essai de toxicité.

⁴ CSEO - La concentration sans effet observé est la concentration la plus élevée ne causant pas d'effet statistiquement significatif par rapport aux témoins dans un essai de toxicité.

⁵ CL₅₀ - Concentration d'une substance qu'on estime létale pour 50 % des organismes d'essai.

Le logarithme K_{OE} prévoit pour la substance A a une valeur inférieure de 1,39, en unités logarithmiques, par rapport à l'acide benzopropanoïque, et une hydrosolubilité de plus de trois ordres de grandeur par rapport à cette substance (se reporter au tableau 2c). Par conséquent, la substance A est susceptible d'être plus biodisponible que l'acide benzopropanoïque. D'après la valeur de son log K_{oe} qui est plus élevée que celle de l'acide benzopropanoïque (voir le tableau 2c), la substance B semble moins biodisponible que l'acide benzopropanoïque, mais quelque peu plus bioaccumulative. Cependant, sa toxicité mesurée pour les algues (CME0 de 0,00018 mg/L; tableau 7c) est similaire à la plus faible valeur valide prévue pour l'acide benzopropanoïque (valeur chronique de la mysis effilée de 0,0001 mg/L; tableau 7a).

D'après les données modélisées et analogues susmentionnées (tableaux 7a, 7b et 7c), y compris l'étude de reproduction de la *Daphnia* pour la substance A et l'étude sur les algues pour la substance B, il existe des preuves confirmant que l'acide benzopropanoïque a le potentiel de nuire aux organismes aquatiques après une exposition à plus long terme (chronique) à de faibles concentrations.

B - Dans d'autres milieux naturels

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

On a trouvé et pris en considération des données sur les mammifères dans la section « Potentiel d'effets nocifs sur la santé humaine » de la présente ébauche d'évaluation préalable.

Évaluation de l'exposition de l'environnement

On n'a relevé aucune donnée relative aux concentrations de cette substance dans l'environnement au Canada ou ailleurs; par conséquent, les concentrations dans l'eau ont été estimées sur la base des renseignements disponibles, y compris les estimations relatives aux quantités de la substance, aux taux de rejet, ainsi qu'à la taille des eaux réceptrices, tel qu'il est décrit ci-dessous.

A - Rejets par les consommateurs

On n'a réalisé aucun scénario de rejet basé sur les utilisations des produits manufacturés contenant de l'acide benzopropanoïque, car ces rejets devraient être largement dispersés et ne seraient donc pas attribuables à des sources ponctuelles concentrées produites par des activités industrielles. Au Canada, cette substance est utilisée principalement dans les tuyaux en plastique (Environnement Canada, 2009a). Les rejets d'acide benzopropanoïque dans l'environnement découlant de l'utilisation de tuyaux en plastique devraient être relativement faibles (environ 12 kg/an; voir le tableau 3), d'après la description de la section « Rejets dans l'environnement ».

B - Rejets industriels

Comme l'acide benzopropanoïque est utilisé de manière industrielle et pourrait être rejeté dans l'eau, le pire des scénarios prudents a été mis au point pour les rejets industriels (Environnement Canada (2009d), dans le but d'estimer la concentration aquatique de la substance. Le scénario est prudent, à savoir qu'il suppose que la quantité totale de la substance utilisée par l'industrie canadienne (153 kg) est utilisée par une seule installation industrielle sur un petit site hypothétique. On a estimé les pertes dans les égouts à 0,055 %, ce qui représente les pertes dans le pire des cas pour un scénario prudent de processus ouvert pour la composition et la conversion des matières plastiques, d'après le document Emission Scenario Document for plastics additives (OCDE, 2004). Le scénario présume également que les rejets se produisent 250 jours par an, habituellement pour les petites et moyennes installations, et qu'ils sont envoyés dans une usine de traitement des eaux usées. Les taux d'élimination de 92,4 %, 98,5 % et 78,7 % ont été estimés à l'aide des modèles d'usines de traitement des eaux usées SimpleTreat (1997), STP Model (2001) et ASTreat (2006), respectivement (Environnement Canada, 2009e). Le résultat du modèle ASTreat, qui laisse prudemment croire que la substance n'est pas biodégradable, a été utilisé dans le calcul. Au Canada, les eaux réceptrices sur un site aussi petit ont normalement une capacité de dilution de dix fois pour l'effluent de l'usine de traitement des eaux usées. Parmi les 1074 emplacements municipaux d'élimination connus au Canada, 66 % d'entre eux ont un facteur de dilution supérieur à 10 fois au 10^e centile du débit (Environnement Canada, 2009f). Le débit de l'usine de traitement des eaux usées est prudemment estimé à 3456 m³/jour, ce qui correspond au 10^e centile des débits de l'effluent de l'usine de traitement des eaux usées au Canada (Environnement Canada, 2009f).

L'équation et les paramètres d'entrée utilisés pour calculer la concentration environnementale estimée (CEE) de l'acide benzopropanoïque dans les eaux réceptrices sont décrits dans Environnement Canada (2009g, 2009h). D'après les hypothèses susmentionnées la CEE aquatique est très faible ($2,1 \times 10^{-6}$ mg/L) (Environnement Canada, 2009g).

Caractérisation des risques pour l'environnement

L'acide benzopropanoïque est une substance peu étudiée. La plupart des données relatives à ses propriétés physiques et chimiques sont estimées, et aucune donnée mesurée n'a été découverte quant à sa persistance, sa bioaccumulation ou sa toxicité. Toutefois, deux substances analogues comportant des données mesurées ont été déterminées, et ces substances analogues sont réputées appropriées en tant que substances de comparaison, d'après leurs structures et les données physiques et chimiques s'y rapportant (voir la section « Propriétés physiques et chimiques »).

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

On s'attend à ce que l'acide benzopropanoïque soit persistant dans l'eau, le sol et les sédiments, mais il devrait avoir un faible potentiel de bioaccumulation. Le faible volume d'importation de cette substance au Canada et les renseignements relatifs à ses utilisations indiquent une faible possibilité de rejet dans l'environnement au Canada. Une fois rejetée dans l'environnement, cette substance se répartira surtout dans le sol et les sédiments. Cette substance a prouvé qu'elle présentait un potentiel de toxicité intrinsèque élevé pour les organismes aquatiques.

Une analyse du quotient de risque, intégrant des estimations prudentes de l'exposition aux renseignements liés à la substance, a été réalisée pour le milieu aquatique, afin de déterminer si la substance pourrait avoir des effets nocifs sur l'environnement au Canada. Un pire des scénarios prudents d'exposition pour la fabrication des matières plastiques contenant de l'acide benzopropanoïque, présenté à la section « Évaluation de l'exposition de l'environnement » ci-dessus, a engendré une CEE de $2,1 \times 10^{-6}$ mg/L. Les concentrations estimées sans effet (CESE) étaient basées sur la dose minimale avec effet observé (DMEO), tirée de l'étude sur l'inhibition de la croissance des algues pour la substance B (0,00018 mg/L; voir le tableau 7c), étant donné que pratiquement toutes les prévisions de la toxicité reposant sur des RQSA n'ont montré aucun effet à la concentration de saturation (tableau 7a). On a obtenu la CESE en divisant cette DMEO par un facteur d'évaluation de 10 pour tenir compte de la variabilité interspécifique et intraspécifique de la vulnérabilité, ce qui a donné une CESE de 0,000018 mg/L. Le quotient de risque obtenu (CEE/CESE) équivaut à 0,1. Dès lors, d'après le pire des scénarios prudents d'exposition au Canada, les effets nocifs de l'acide benzopropanoïque sur les organismes aquatiques est peu probable.

Lorsque l'acide benzopropanoïque est rejeté dans un plan d'eau, on prévoit qu'il va se répartir principalement dans les matières particulaires en suspension et les sédiments benthiques (voir le tableau 4), où les organismes vivant dans le sol seront exposés à la substance. Un quotient de risque pour l'acide benzopropanoïque basé sur l'exposition

dans l'eau interstitielle des sédiments peut être calculé en fonction des valeurs de la concentration environnementale estimée (CEE) et de la concentration estimée sans effet (CESE) en milieu aquatique qui sont présentées à la section « Exposition de l'environnement » ci-dessous et utilisées pour la caractérisation des risques liés aux sédiments. Dans le calcul, les sédiments benthiques et leur eau interstitielle sont censés être en équilibre avec l'eau sus-jacente, et les organismes benthiques et pélagiques sont censés montrer des sensibilités similaires à la substance. Par conséquent, la CEE et la CESE pour l'eau interstitielle sont jugées identiques pour le milieu aquatique. Cette approche d'équilibre aboutirait à un quotient de risque (CEE/CESE) du milieu sédimentaire identique à celui du milieu aquatique.

Une analyse quantitative des risques pour les organismes vivant dans le sol n'était pas possible, en raison du manque de données sur la toxicité liée au sol. Néanmoins, aucun effet n'est prévu sur les organismes vivant dans le sol, au vu des valeurs faibles du volume d'importation et des rejets de cette substance, ainsi que de l'exposition faible qui en découle.

Incertitudes dans l'évaluation des risques pour l'environnement

Il n'existe aucune donnée expérimentale relative à la plupart des propriétés physiques et chimiques, à la persistance, à la bioaccumulation et à la toxicité de l'acide benzopropanoïque. Toutefois, les estimations modélisées sont valables et sont jugées fiables, comme les composantes structurelles de cette substance sont bien couvertes par les ensembles d'étalonnage des modèles. En outre, les résultats modélisés étaient relativement en accord avec les données empiriques relatives aux substances analogues, à savoir qu'on n'observe aucun effet aux limites d'hydrosolubilité des substances dans la plupart des cas, ou que dans certains cas, des effets se produisent aux limites d'hydrosolubilité ou juste en dessous de celles-ci.

Pour ce qui est de l'écotoxicité, le comportement de répartition prévu de ce produit chimique montre que les données disponibles sur les effets ne permettent pas d'évaluer comme il se doit l'importance du sol et des sédiments comme milieu d'exposition. En effet, les seules données sur les effets qui ont été relevées s'appliquent principalement à l'exposition des organismes pélagiques, même si la colonne d'eau n'est pas le milieu le plus préoccupant d'après les estimations sur la répartition (voir le tableau 4).

Étant donné que cette substance est utilisée dans d'autres pays, notamment aux États-Unis, il est possible qu'elle entre sur le marché canadien comme composante de produits manufacturés ou de consommation. Les quantités estimées d'acide benzopropanoïque rejetées dans l'environnement et confiées à la gestion des déchets seraient plus élevées si l'importation de ces articles était prise en compte. Toutefois, les estimations des rejets d'acide benzopropanoïque ester fondées sur ses utilisations finales sont très faibles. Les renseignements disponibles ne sont pas suffisants actuellement pour déterminer une estimation quantitative des rejets issus des articles importés et des sites d'élimination des déchets.

Potentiel d'effets nocifs sur la santé humaine

Évaluation de l'exposition

Aucune donnée n'a été relevée pour l'acide benzopropanoïque dans l'air, l'eau, le sol ou les sédiments, au Canada ou ailleurs. En raison de la quantité importée au Canada chaque année, les concentrations de cette substance dans les milieux environnementaux devraient être négligeables.

À la suite d'une présentation industrielle en 1982, Santé Canada a évalué l'exposition à l'acide benzopropanoïque découlant de son utilisation dans les emballages alimentaires comme antioxydant dans le polyéthylène haute et basse densité (c'est-à-dire le PEHD et le PEBD), à un seuil d'utilisation de 0,1 % pour les produits en contact avec des aliments gras et de 0,5 % pour les produits en contact avec tout autre type d'aliment. L'exposition à la substance a été évaluée également relativement à son utilisation dans le polypropylène et le polystyrène choc à des seuils de 0,5 % pour les produits en contact avec tous les types d'aliments. La dose journalière probable (DJP) a été estimée à 20 µg/kg-p.c. (courriel de la Direction des aliments de Santé Canada adressé au Bureau de gestion du risque de Santé Canada en 2009; source non citée). Depuis 1982, Santé Canada n'a reçu aucune autre présentation concernant l'utilisation de l'acide benzopropanoïque dans les matières plastiques utilisées pour les emballages alimentaires, ce qui indique que cette substance n'est vraisemblablement pas utilisée actuellement dans ce but.

L'acide benzopropanoïque peut également être utilisé comme antioxydant dans les matières plastiques disponibles à la consommation, notamment l'isolation des fils et des câbles, les pièces pour automobiles et les tuyaux (Mayzo Inc., 2005). Les concentrations résiduelles d'acide benzopropanoïque dans ces produits sont inconnues, mais elles devraient être faibles, et donc l'exposition issue des produits de consommation ne serait pas significative.

La confiance générale à l'égard de la caractérisation de l'exposition pour les expositions dans l'environnement, l'alimentation et les produits de consommation est jugée faible en raison du manque de données expérimentales. Une certaine incertitude est associée à l'acide benzopropanoïque par ces voies; cependant, étant donné que la quantité importée au Canada est infime, l'exposition devrait être minimale pour l'ensemble de la population.

Évaluation des effets sur la santé

Certaines données toxicologiques empiriques sont disponibles pour l'acide benzopropanoïque. Aucune preuve de mutagénicité n'a été observée sur les souches TA98, TA100, TA1535, TA1537 et TA1538 du *Salmonella typhimurium* exposées à l'acide benzopropanoïque avec ou sans activation métabolique (Jonmaire *et al.*, 1985). Une étude de reproduction portant sur une génération de rats nourris avec des aliments contenant 0, 2 000, 6 325 ou 20 000 ppm d'acide benzopropanoïque pendant 72 jours a entraîné une diminution importante du poids corporel et de l'alimentation à une dose de 2 000 ppm chez les parents mâles et les femelles. Les rats se trouvant dans le groupe

traité avec une dose élevée ont subi une augmentation de poids significative jusqu'au jour 14, mais ils étaient comparables à ceux du groupe témoin au jour 21 (courriel de la Direction des aliments de Santé Canada relatif à une étude inédite adressé au Bureau de l'évaluation des risques de Santé Canada en 2009; source non citée). Lors d'une étude de 90 jours, en utilisant 30 rats de la génération F1 de l'étude de reproduction, les animaux ont été nourris avec des aliments contenant 0, 2 000, 6 325 ou 20 000 ppm d'acide benzopropanoïque. Les seuls effets observés étaient une augmentation du poids relatif du foie chez les femelles à une dose de 2 000 ppm et chez les mâles et les femelles dans les groupes d'exposition moyenne et élevée (courriel de la Direction des aliments de Santé Canada relatif à une étude inédite adressé au Bureau de l'évaluation des risques de Santé Canada en 2009; source non citée). Une étude sous-chronique (90 jours) des effets de cette substance a été réalisée chez des chiens mâles et femelles de race beagle exposés à des doses d'acide benzopropanoïque de 0, 2 000, 6 300 et 20 000 ppm dans leur nourriture. Les analyses réalisées visaient le poids corporel, la consommation de nourriture, le poids des organes, l'hématologie, la chimie clinique, l'urine et l'histopathologie des groupes témoins et à exposition élevée. Le temps de Quick a diminué chez les femelles exposées à des doses moyennes et faibles par rapport à celles du groupe témoin. Toutefois, le temps de Quick moyen du groupe se trouvait dans des limites normales et les femelles du groupe à exposition élevée étaient comparables aux femelles du groupe témoin. Les auteurs en ont conclu qu'il était difficile d'attribuer une importance biologique à ce résultat (Jonmaire *et al.*, 1985). La toxicité aiguë est faible, avec un DL₅₀ chez les rats de plus de 10 g/kg (Jonmaire *et al.*, 1985).

Les résultats des modèles de prévision ont également été pris en considération dans quatre modèles différents, DEREK, TOPKAT, CASETOX, 2008 et Leadscope Model Applier, dont les prévisions relatives à la cancérogénicité, à la génotoxicité et à la toxicité pour le développement ou la reproduction étaient majoritairement négatives (DEREK, 2008; TOPKAT, 20048; CASETOX, 2008; Leadscope, 2009). Un résumé des résultats du modèle est présenté à l'annexe III.

Caractérisation du risque pour la santé humaine

La principale source d'exposition de l'ensemble de la population à l'acide benzopropanoïque devrait avoir lieu par l'entremise de l'alimentation (c'est-à-dire la migration de cette substance à partir des emballages alimentaires). Une comparaison entre une dose minimale modérée avec effet observé d'acide benzopropanoïque de 2 000 ppm (convertie en 60 mg/kg p.c./jour, sur la base des facteurs de conversion de Santé Canada, 1994) pour l'augmentation du poids relatif du foie des rats femelles de la génération F1 et des preuves très limitées au sujet de la diminution du temps de Quick observée chez les chiennes et de la dose journalière probable estimée dans la nourriture (20 µg/kg p.c.) entraîne une marge d'exposition d'environ 3 000. Cette marge est réputée pertinente pour représenter les incertitudes dans la base de données à la lumière de la nature prudente des estimations relatives à l'exposition et à la dose avec effet, ainsi que la probabilité selon laquelle cette substance n'est plus utilisée dans les matières plastiques des emballages alimentaires.

Incertitudes de l'évaluation des risques pour la santé humaine

Même si certaines données sont disponibles pour l'acide benzopropanoïque, le niveau de confiance à l'égard de l'ensemble des données toxicologiques est jugé faible à modéré, en particulier dans le cas d'une exposition chronique. Cependant, les données empiriques et l'information issues des modèles de prévision n'indiquent pas un risque élevé.

Conclusion

D'après les renseignements contenus dans la présente évaluation préalable, il est conclu que l'acide benzopropanoïque ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité, à une concentration ou dans des conditions qui ont ou peuvent avoir, immédiatement ou à long terme, un effet nocif sur l'environnement ou sur la diversité biologique, ou qui constituent ou peuvent constituer un danger pour l'environnement essentiel pour la vie humaine ou la santé au Canada.

De plus, cette substance répond aux critères de persistance, mais ne répond pas aux critères relatifs au potentiel de bioaccumulation énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Il est aussi conclu que l'acide benzopropanoïque ester ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité ou concentration ou sous des conditions qui constituent ou peuvent constituer un danger à la santé humaine au Canada

Il est par conséquent conclu que l'acide benzopropanoïque ne satisfait à aucun des critères énoncés à l'article 64 de la LCPE (1999).

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

Références

- ACD/pK_aDB [module de prévision]. 2005. Version 9.04. Toronto (Ont.) : Advanced Chemistry Development. [consulté le 27 février 2009]. Accès : http://www.acdlabs.com/products/phys_chem_lab/pka/ [réserve de consultation]
- [AIES] Système expert d'intelligence artificielle. 2003-2007. Version 2.05. Ottawa (Ont.) : Environnement Canada. Modèle élaboré par Stephen Niculescu. Disponible auprès de Environnement Canada, Division des évaluations écologiques, Section de l'évaluation des substances chimiques nouvelles.
- [AOPWIN] Atmospheric Oxidation Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.92. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm
- Arnot, J.A., Gobas, F.A.P.C. 2003. A generic QSAR for assessing the bioaccumulation potential of organic chemicals in aquatic food webs. *QSAR Comb. Sci.* 22(3):337-345.
- Arnot, J.A., Mackay, D., Bonnell, M. 2008. Estimating metabolic biotransformation rates in fish from laboratory data. *Environ. Toxicol. Chem.* 27(2):341-351.
- ASTreat Model [modèle sur l'élimination des usines de traitement des eaux usées]. 2006. Version 1.0. Cincinnati (US) : Procter & Gamble Company. [consulté en septembre 2009]. Disponible auprès de Procter & Gamble Company, C.P. 538707, Cincinnati (OH), 45253-8707, États-Unis.
- [ASTM] American Society for Testing and Materials. E 537 (1986) : Test method for assessing the thermal stability of chemicals by methods of differential thermal analysis.
- [BCFBAF] Bioaccumulation Program for Windows [modèle d'évaluation]. Version 3.00. 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. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm
- [BIOWIN] Biodegradation Probability Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 4.02. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm
- Boethling, R.S., Howard, P.H., Beauman, J.A., Larosche, M.E. 1995. Factors for intermedia extrapolations in biodegradability assessment. *Chemosphere* 30(4):741-752.
- Canada. 1999. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*. L.C., 1999, c. 33, *Canada Gazette*. Partie III, vol. 22, n° 3. Accès : <http://www.gazette.gc.ca/archives/p3/1999/g3-02203.pdf>
- Canada. 2000. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*. C.P. 2000-348, 23 mars 2000, DORS/2000-107, *Gazette du Canada*. Partie II, vol. 134, n° 7, p. 607-612. Accès : <http://www.gazette.gc.ca/archives/p2/2000/2000-03-29/pdf/g2-13407.pdf>
- Canada. 2005. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Règlement sur les renseignements concernant les substances nouvelles (substances chimiques et polymères)*. C.P. 2005-1494, 31 août 2005, DORS/2005-247, *Gazette du Canada*. Partie II, vol. 139, n° 19, p. 1864-1903. <http://www.gazette.gc.ca/archives/p2/2005/2005-09-21/pdf/g2-13919.pdf>
- Canada. Ministère de l'Environnement, ministère de la Santé. 2006a. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis d'intention d'élaborer et de mettre en œuvre des mesures d'évaluation et de gestion des risques que certaines substances présentent pour la santé des Canadiens et leur environnement*,

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

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

Canada. Ministère de l'Environnement, ministère de la santé. 2009a. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis de huitième divulgation d'information technique concernant les substances identifiées dans le Défi*, *Gazette du Canada*. Partie I, vol. 143, n° 5, p. 192-196. Accès : <http://www.gazette.gc.ca/rp-pr/p1/2009/2009-01-31/pdf/g1-14305.pdf>

Canada. Ministère de l'Environnement. 2009b. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis concernant les substances du groupe 8 du Défi*, *Gazette du Canada*. Partie I, vol. 143, n° 5, p. 196-213. Accès : <http://www.gazette.gc.ca/rp-pr/p1/2009/2009-01-31/pdf/g1-14305.pdf>

CASETOX [module de prévision]. 2008. Version 2.0. Beachwood (OH) : MultiCASE. [consulté le 30 septembre 2009]. Accès : <http://www.multicase.com/products/prod03.htm> [réserve de consultation].

Commission européenne. 1992. European Commission Directive 92/69/EEC of 31 July 1992, adapting to technical progress for the seventeenth time Council Directive 67/548/EEC on the approximation of laws, regulations and administrative provisions relating to the classification, packaging and labelling of dangerous substances. [Cited 14 Dec. 09]. Comprend : Partie A : Methods for the determination of physico-chemical properties, et Partie C : Methods for the determination of ecotoxicity. Accès : <http://www.legaltext.ee/text/en/PH0613.htm>

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

[DEREK] Deducing Estimation from Existing Knowledge [module de prévision sur CD-ROM]. 2008. Version 10.0.2. Cambridge (MA) : Harvard University, LHASA Group. [consulté le 30 septembre 2009]. Accès : <http://lhasa.harvard.edu/?page=toxicology.htm> [réserve de consultation].

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

[ECOSAR] Ecological Structural Activity Relationships [en ligne]. 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/episutedl.htm

Environnement Canada. 1988. Données de la Liste intérieure des substances (LIS) 1984-1986, recueillies en vertu du paragraphe 25(1) de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1988)*, et conformément au guide de déclaration à la Liste intérieure des substances [guide], Ministère des Approvisionnement et Services. Préparé par Environnement Canada.

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

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

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

Environnement Canada. 2009a. Données sur les substances du lot 8 recueillies en vertu de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis concernant certaines substances identifiées dans le huitième lot du Défi*, *Gazette du Canada*. Partie I, vol. 143, n° 5, p. 196-213. Données compilées par Environnement Canada, Division de la mobilisation et de l'élaboration des programmes.

Environnement Canada. 2009b. Guidance for conducting ecological assessments under CEPA, 1999: science resource technical series, technical guidance module: Mass Flow Tool. Document de travail. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes.

Environnement Canada. 2009c. Mass Flow Tool for Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, (1,2-dioxo-1,2-ethanediy)bis(imino-2,1-ethanediy) ester (Benzenepropanoic acid ester), CAS RN 70331-94-1. Document provisoire interne. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

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

Environnement Canada. 2009e. STP Removal Predictions for Batch 8 CAS# 70331-94-1. Division des évaluations écologiques. Rapport daté du 27 janvier 2009.

Environnement Canada. 2009f. Exposure Database 2009, Environnement Canada, unité d'exposition de la Division des évaluations écologiques. [consultée le 7 juillet 2009].

Environnement Canada. 2009g. Rapport IGETA : CAS RN 70331-94-1. Oct. 2009. Rapport inédit. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

Environnement Canada. 2009h. Guidance for Conducting Ecological Assessments under CEPA, 1999, Science Resource Technical Series, Technical Guidance Module: The Industrial Generic Exposure Tool - Aquatic (IGETA). Document de travail. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

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

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

[ESIS] European Chemical Substances Information System. 2009. Information concernant le CAS RN 70331-94-1. Ispra (Italie) : Commission européenne, Centre commun de recherche, Institute for Health and Consumer Protection, Bureau européen des substances chimiques. [consulté le 9 juin 2009]. Accès : <http://ecb.jrc.ec.europa.eu/esis/>

European Commission Directive 92/69/EEC of 31 July 1992, adapting to technical progress for the seventeenth time Council Directive 67/548/EEC on the approximation of laws, regulations and administrative provisions relating to the classification, packaging and labelling of dangerous substances. [consultée le 14 déc. 09]. Comprend la partie C.7. Dégradation - Abiotique Dégradation Hydrolyse as a Function of pH. Accès : <http://www.legaltext.ee/text/en/PH0613.htm>

[HENRYWIN] Henry's Law Constant Program for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 3.10. Washington (D.C.) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (N.Y.) : Syracuse Research Corporation. Accès : 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

Jonmaire, P.W., Sowinski, E.J., Gephart, L.A., Becci, P.J. 1985. Subchronic feeding study in beagle dogs of 2,2'-oxamidobis[ethyl(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl) propionate]. *J. Toxicol. Environ. Health* 16(2):277-283.

[KOCWIN] The Soil Adsorption Coefficient Program [modèle d'estimation]. 2000-2008. Version 2.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

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

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

Mayzo Inc. 2005. Fiche technique : BNX MD-1097. 8 mars 2005. Accès : <http://www.mayzo.com/pdf/BNXMD1097.pdf>

[MPBPWIN] Melting Point Boiling Point Program pour 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. Numéro 1. Columbus (OH) : American Chemical Society. [consultée en juin 2009]. Accès : <http://www.cas.org/products/cd/nci/index.html>

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

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 1981. Lignes directrices de l'OCDE pour les essais de produits chimiques. Essai n° 116 : Liposolubilité des substances solides et liquides. Le 12 mai 1981. Accès : http://www.oecd.org/document/40/0,3343,en_2649_34377_37051368_1_1_1_1,00.html

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 1992. Lignes directrices de l'OCDE pour les essais de produits chimiques. Essai 301 : Biodégradabilité facile. Comprend les méthodes A, B, C, D, E et F. Adoptées par le Conseil le 17 juillet 1992. Accès : http://www.oecd.org/document/40/0,3343,en_2649_34377_37051368_1_1_1_1,00.htmldataoecd/17/16/1948209.pdf

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 1995a. Lignes directrices de l'OCDE pour les essais de produits chimiques. Essai 102 : Point de fusion. Dernière mise à jour le 27 juillet 1995. Accès : http://www.oecd.org/document/40/0,3343,en_2649_34377_37051368_1_1_1_1,00.html

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 1995b. Lignes directrices de l'OCDE pour les essais de produits chimiques. Essai 103 : Point d'ébullition. Dernière mise à jour le 27 juillet 1995. Accès : http://www.oecd.org/document/40/0,3343,en_2649_34377_37051368_1_1_1_1,00.html

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 1995c. Lignes directrices de l'OCDE pour les essais de produits chimiques. Essai 109 : Densité des liquides et des solides. Dernière mise à jour le 27 juillet 1995. Accès : http://www.oecd.org/document/40/0,3343,en_2649_34377_37051368_1_1_1_1,00.html

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 1995d. Lignes directrices de l'OCDE pour les essais de produits chimiques. Essai 105 : Solubilité dans l'eau. Dernière mise à jour le 27 juillet 1995. Accès : http://www.oecd.org/document/40/0,3343,en_2649_34377_37051368_1_1_1_1,00.html

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2001. Lignes directrices de l'OCDE pour les essais de produits chimiques. Essai 121 : Estimation du pH. Dernière mise à jour le 13 avril 2004. Accès : http://www.oecd.org/document/40/0,3343,en_2649_34377_37051368_1_1_1_1,00.html

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2004a. Lignes directrices de l'OCDE pour les essais de produits chimiques. Essai 117 : Coefficient de partage (n-octanol/eau), méthode HPLC. Dernière mise à jour le 13 avril 2004. Accès : http://www.oecd.org/document/40/0,3343,en_2649_34377_37051368_1_1_1_1,00.html

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2004b. Lignes directrices de l'OCDE pour les essais de produits chimiques. Essai 111 : Hydrolyse en fonction du pH. Dernière mise à jour le 13 avril 2004. Accès : http://www.oecd.org/document/40/0,3343,en_2649_34377_37051368_1_1_1_1,00.html

[OCDE 2004] Organisation de coopération et de développement économiques. 2004. Emission Scenario Document on Plastics Additives [en ligne]. Paris (France) : Direction de l'environnement de l'OCDE, Division environnement, santé et sécurité. ENV/JM/MONO(2004)8, JT00166678 [consulté en février 2008]. Accès : [http://www.olis.oecd.org/olis/2004doc.nsf/LinkTo/env-jm-mono\(2004\)8](http://www.olis.oecd.org/olis/2004doc.nsf/LinkTo/env-jm-mono(2004)8)

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2006. Lignes directrices de l'OCDE pour les essais de produits chimiques. Essai 104 : Pression de vapeur. Dernière mise à jour le 23 mars 2006. Accès : <http://www.oecd.org/dataoecd/17/16/1948209.pdf>
http://www.oecd.org/document/40/0,3343,en_2649_34377_37051368_1_1_1_1,00.html

PALLAS. 2001. Software from CompuDrug. Accès : <http://www.compudrug.com/index2.php?id=90>

[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

Santé Canada. 1994. L'évaluation du risque à la santé humaine des substances d'intérêt prioritaire : Annexe E - Valeurs de référence relatives à la dose et au poids corporel chez les animaux de laboratoire. [en ligne]. Ottawa (Ont.) : Santé Canada, Direction de l'hygiène du milieu, Division des substances environnementales. [consulté le 9 octobre 2009]. 35 p. Accès : <http://www.hc-sc.gc.ca/ewh-semt/pubs/contaminants/approach/index-fra.php>

SimpleTreat [modèle sur l'élimination des usines de traitement des eaux usées]. 1997. Version 3.0. Bilthoven (Pays-Bas) : Institut national néerlandais de la santé publique et de l'environnement (RIVM)

[traduction]. [consulté en septembre 2009]. Disponible auprès du National Institute for Public Health and the Environment (RIVM), Laboratory for Ecological Risk Assessment, C.P. 1, 3720 BA Bilthoven (Pays-Bas).

[SPIN] Substances in Preparations in Nordic Countries [base de données sur Internet]. 2009. Résultats de recherche pour le n° de CAS 70331-94-1. Copenhagen (Danemark) : Conseil des ministres des pays nordiques. [consulté le 31 août 2009]. Accès : <http://195.215.251.229/Dotnetnuke/Home/tabid/58/Default.aspx>

STP Model [modèle sur l'élimination des usines de traitement des eaux usées]. 2001. Version 1.5. Peterborough (Ont.) : Trent University, Canadian Environmental Modelling Centre. [consulté en septembre 2009]. Accès : <http://www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel/models/VBSTP.html>

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

[USEPA] United States Environmental Protection Agency. 1986-2002. Non-confidential Inventory Update Reporting (IUR) records by chemical for the years 1986, 1990, 1994, 1998, and 2002. Search results for CAS RN 70331-94-1. Washington (DC) : USEPA, Office of Pollution Prevention and Toxics. [consulté le 13 août 2009]. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/iur/tools/data/2002-vol.html>

[USEPA] United States Environmental Protection Agency. 2006. Non-confidential 2006 Inventory Update Reporting (IUR) records by chemical. Search results for CAS RN 70331-94-1. Washington (DC) : USEPA, Office of Pollution Prevention and Toxics. [consulté le 13 août 2009]. Accès : <http://cfpub.epa.gov/iursearch/index.cfm?s=chem>

[USEPA] United States Environmental Protection Agency. 2009. Inventory Update Reporting for years 1986-2002, records by chemical. Search results for CAS 70331-94-1. Washington (DC) : USEPA, Office of Pollution Prevention and Toxics. [consulté le 10 septembre 2009]. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/iur/tools/data/2002-vol.htm>

[US NLM] United States National Library of Medicine. 2008. ChemIDplus program. Division of Specialized Services. Mis à jour en mai 2008. [consulté en septembre 2009]. Accès : <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/chemidheavy.jsp>

[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

Annexe I. Sommaire de rigueur d'étude pour l'étude de toxicité des algues pour la substance B

Formulaire pour sommaire de rigueur d'étude				
Non	Point	Pondération	Oui/Non	Précisions
1	Étude sur l'inhibition de la croissance des algues pour la substance B			
2	Identité de la substance : n° CAS	N/D		
3	Identité de la substance : nom(s) chimique(s)	N/D		
4	Composition chimique de la substance	2	O	
5	Pureté chimique	1	O	> 99 %
6	Indication de la persistance/stabilité de la substance en milieu aqueux?	1	O	Substance instable - baisse de la concentration pendant la durée de l'essai. Résultats fondés sur les concentrations moyennes géométriques mesurées.
Méthode				
7	Référence	1	O	OCDE 201
8	Méthode normalisée (OCDE, UE, nationale, ou autre)?	3	O	
9	Justification de la méthode ou du protocole si une méthode non normalisée a été utilisée	2	N/D	
10	BPL (bonnes pratiques de laboratoire)	3	O	
Organisme d'essai				
11	Identité de l'organisme : nom	N/D		<i>Desmodesmus subspicatus</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	N/D	
14	Longueur et/ou poids	1	N/D	
15	Sexe	1	N/D	
16	Nombre d'organismes par répétition	1	O	Indication de la densité cellulaire
17	Charge en organismes	1	O	
18	Type de nourriture et périodes d'alimentation au cours de la période d'acclimatation	1	N/D	
Conception et conditions des essais				
19	Type d'essai (toxicité aiguë ou chronique)	N/D		72 h
20	Type d'expérience (en laboratoire ou sur le terrain)	N/D		En laboratoire
21	Voies d'exposition (nourriture, eau, les deux)	N/D		Eau
22	Durée de l'exposition	N/D		72 h

23	Témoins négatifs ou positifs (préciser)	1	O	Contrôle positif - bichromate de potassium Contrôle négatif - aucun ajout de substance d'essai
24	Nombre de répétitions (y compris les témoins)	1	O	3 réplicats pour chaque concentration, 6 réplicats pour les groupes témoins
25	Des concentrations nominales sont-elles indiquées?	1	O	Solution saturée à raison de 6,25 %, 12,5 %, 25 %, 50 %, 100 % v/v
26	Des concentrations mesurées sont-elles indiquées?	3	O	
27	Type de nourriture et périodes d'alimentation durant les essais à long terme	1	N/D	
28	Les concentrations ont-elles été mesurées périodiquement (spécialement dans les essais de toxicité chronique)?	1	O	Concentrations mesurées à 0 et 72 heures
29	Les conditions des milieux d'exposition étaient-elles pertinentes pour la substance? (p. ex. : pour la toxicité des métaux - pH, COD/COT, dureté de l'eau, température)	3	O	
30	Photopériode et intensité de l'éclairage	1	O	Éclairage constant
31	Préparation de solutions mères et de solutions d'essai	1	O	
32	Un agent émulsionnant ou stabilisant a-t-il été employé si la substance était peu soluble ou instable?	1	N	Aucun agent émulsionnant n'a été utilisé, bien que la substance chimique soit peu soluble. Méthode spéciale utilisée pour créer une solution d'essai.
33	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, sa concentration est-elle indiquée?	1	N/D	
34	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, des données sont-elles fournies sur son écotoxicité?	1	N/D	
35	Intervalles des contrôles analytiques	1	O	Densité cellulaire mesurée à 0, 24, 48 et 72 heures
36	Méthodes statistiques utilisées	1	O	
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	N/D	O	

	d'ombrage »)?			
38	L'organisme d'essai convient-il à l'environnement au Canada?	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	Statique, non-renouvellement
41	Le pH de l'eau d'essai était-il dans la plage des valeurs typiques de l'environnement au Canada (6 à 9)?	1	O	pH = 7,2-7,3
42	La température de l'eau d'essai était-elle dans la plage des valeurs typiques de l'environnement au Canada (5 à 27 °C)?	1	O	24 °C
43	La valeur de la toxicité était-elle inférieure à celle de la solubilité de la substance dans l'eau?	3	O	CMEO à la limite d'hydrosolubilité; CSEO ci-dessous
Résultats				
44	Valeurs de la toxicité (fournir paramètres et valeurs)	N/D		CE ₅₀ (taux de croissance) > 0,00018 mg/L
45	Autres paramètres indiqués - p. ex., FBC/FBA, CMEO/CSEO (préciser)?	N/D		CMEO = 0,00018 mg/L, CSEO = 0,00014 mg/L
46	Autres effets nocifs indiqués (p. ex., carcinogénicité, mutagénicité)?	N/D	N/D	
47	Note : ... %			45/45 = 100 %
48	Code de fiabilité d'Environnement Canada :			
49	Catégorie de fiabilité (élevée, satisfaisante, faible) :			
				Élevée

50	Remarques	<p>En raison de la faible solubilité aqueuse de la substance, une méthodologie spéciale a été utilisée pour préparer les solutions d'essai; elle consistait à mélanger la matière d'essai dans l'eau d'essai pendant 24 à 96 heures à un taux de charge élevé pour produire une solution saturée. Aucun agent émulsionnant n'a été utilisé. Après le mélange, la phase aqueuse a été retirée par un siphonnement à mi-profondeur et elle a été centrifugée à 40 000 g pendant 30 minutes pour produire la solution saturée à 100 % v/v. Cette solution saturée a ensuite été diluée pour préparer les concentrations d'essai. Des études de détermination des doses ont été effectuées une fois la solution filtrée. Néanmoins, l'analyse des échantillons filtrés de l'essai montraient des concentrations mesurées inférieures à la limite de quantification, indépendamment du volume préalable utilisé, qui indiquait que la matière d'essai absorbait la matrice du filtre. « Toutefois, les observations effectuées quant à la solution saturée ont fait état d'une solution claire et incolore; donc, si de la matière dispersée était présente, elle l'était à un niveau si faible qu'elle n'exerçait aucun effet physique sur les organismes d'essai. »</p> <p>« Bien que dans certains cas, les concentrations trouvées dans les... échantillons d'essai se trouvent juste au-dessus de celles de la limite de dosage, les résultats obtenus ont été considérés valables. ... Dans ce cas précis, des réajustements procéduraux ont été effectués avec les échantillons d'essai pour prendre en considération tout écart analytique qui pourrait s'être produit. Alors que ces résultats se trouvaient en dehors des critères d'acceptation habituels (80-120 %), on a estimé qu'ils montraient que la vulnérabilité de la méthode d'analyse était satisfaisante par rapport aux concentrations d'essai très faibles employées, et que dès lors, les concentrations d'essai mesurées obtenues étaient valables. »</p>
----	------------------	---

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

	Propriétés physico-chimiques et devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Profils de persistance, bioaccumulation et toxicité	Écotoxicité
Paramètres d'entrée des modèles	EPIsuite (tous les modèles, notamment AOPWIN, KOCWIN, BCFBAF, BIOWIN et ECOSAR)	STP (1) ASTreat (2) SimpleTreat (3) (différents intrants requis selon le modèle)	EQC (différents intrants requis selon le type de substances - type I ou II)	Modèle d'Arnot et Gobas pour le FBC/FBA	POP canadiens (notamment le modèle de Dimitrov, le modèle de toxicité OASIS)	Système expert d'intelligence artificielle Système expert (AIEPS)
Code SMILES	<chem>O=C(C(=O)NCCOC(=O)CCc1cc(c(c(c1)C(C)(C)C)O)C(C)(C)C)NCCOC(=O)CCc2cc(c(c(c2)C(C)(C)C)O)C(C)(C)C</chem>				Identique à EPIWIN	Identique à EPIWIN
Masse moléculaire (g/mol)	696,93	696,93	696,93			
Point de fusion (°C)	175		175			
Point d'ébullition (°C)						
Température des données (°C)			20			
Masse volumique (kg/m³)		1,36				
Pression de vapeur (Pa)		4,4 x 10 ⁻²⁰	4,4 x 10 ⁻²⁰			
Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mol)		4,39 x 10 ⁻¹⁹	1,0 x 10 ⁻¹¹			
Log K_{ae} (coefficient de partage air-eau) (sans dimension)						

Log K_{oc} (coefficient de partage octanol-eau) (sans dimension)	6,68	6,68	6,68	6,68	6,68	
Log K_{co} (coefficient de partage carbone organique/eau - L/kg)						
Solubilité dans l'eau (mg/L)	0,0033	0,0033	0,0033			
Log K_{oa} (coefficient de partage octanol-air) (sans dimension)						
Coefficient de partage sol-eau (L/kg)¹		1,0 x 10 ⁵				
Demi-vie dans l'air (heures)			1,04			
Demi-vie dans l'eau (jours)			273			
Demi-vie dans les sédiments (jours)			819			
Demi-vie dans le sol (jours)			273			
Constante cinétique de métabolisme (1/jour)				25/jour		
Constante cinétique de biodégradation (jour 1 ou heure 1) - préciser		0,0159/heure 1 (3) 0,38/jour 1 (2)				
Demi-vie de biodégradation en clarificateur primaire (t_{1/2-p}; h)		43,6 (1)				
Demi-vie de biodégradation en bassin d'aération (t_{1/2-s}; h)		43,6 (1)				

Demi-vie de biodégradation en bassin de décantation ($t_{1/2-s}; h$)		43,6 (1)				
--	--	----------	--	--	--	--

¹ d'après le log K_{co}

² d'après les données sur le FBC

³ valeur par défaut

Annexe III : Résumé des résultats des modèles R(Q)SA relatifs à l'acide benzopropanoïque

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

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

MA – Model applier

CT – Multicase Casetox

TK – Topkat

TT – Toxtree

BB – Benigni-Bossa rule

HD – hors domaine

« - » aucun modèle disponible dans la suite RQSA

AR – aucun résultat

N – Négative

P – Positive

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

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

MA – Model applier

CT – Multicase Casetox

TK – Topkat

TT – Toxtree

BB – Benigni-Bossa rule

HD – hors domaine

« - » aucun modèle disponible dans la suite RQSA

AR – aucun résultat

N – Négative

P – Positive

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

Model Applier

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

Multicase Casetox

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

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

Model Applier

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

Multicase Casetox

Souris	Rat	Lapin	Homme
HD	HD	HD	HD

MA – Model applier

CT – Multicase Casetox

TK – Topkat

TT – Toxtree

BB – Benigni-Bossa rule

HD – hors domaine

« - » aucun modèle disponible dans la suite RQSA

AR – aucun résultat

N – Négative

P – Positive