

**Évaluation préalable pour le Défi concernant
le
 α -(3,5-dibromo-2-méthyl-4-oxo-2,5-cyclohexadiénylidène)- α -
(3,5-dibromo-4-hydroxyphényl)toluènesulfonate de sodium
(PBTBO)**

**Numéro de registre du Chemical Abstracts Service
62625-32-5**

**Environnement Canada
Santé Canada**

Août 2009

Synopsis

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 α -(3,5-Dibromo-2-méthyl-4-oxo-2,5-cyclohexadiénylidène)- α -(3,5-dibromo-4-hydroxyphényl)toluènesulfonate de sodium (PBTBO), dont le numéro de registre du Chemical Abstracts Service est 62625-32-5. Une priorité élevée a été accordée à l'évaluation préalable de cette substance inscrite au Défi, car elle répondait initialement aux critères environnementaux de la catégorisation écologique relatifs à la persistance, au potentiel de bioaccumulation et à la toxicité intrinsèque pour les organismes non humains et l'on croit qu'elle est commercialisée au Canada.

L'évaluation des risques que présente le PBTBO 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 figurant sur la *Liste intérieure*. Par conséquent, la présente évaluation est axée sur les renseignements utiles à l'évaluation des risques pour l'environnement.

Le PBTBO est une substance organique pouvant être utilisée comme réactif analytique dans les laboratoires. Une quantité totale de 2363 kg a été importée au Canada en 2006. D'après les utilisations possibles de cette substance, celle-ci pourrait aboutir dans les plans d'eau. Comme on s'attend à ce que le PBTBO soit très soluble dans l'eau, et comme ce produit n'est pas volatil et n'a pas tendance à se lier aux particules (d'après les données sur un produit chimique analogue), il pourrait être présent dans les eaux de surface, mais pas dans les sédiments.

D'après ses propriétés physiques et chimiques, le PBTBO ne se dégrade pas rapidement dans l'environnement et il devrait être persistant dans l'eau et le sol. Le PBTBO a un potentiel nul d'accumulation dans les organismes. Il a donc été déterminé que la substance répond aux critères de la persistance prévus dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*, mais non au critère de la bioaccumulation. De plus, le PBTBO n'est pas très dangereux pour les organismes aquatiques ($CL_{50}/CE_{50} > 1,0$ mg/L).

Dans le cadre de la présente évaluation préalable, on a retenu un scénario d'exposition très conservateur, selon lequel une installation (utilisateur de la substance) rejette du PBTBO en milieu aquatique. La concentration environnementale estimée était de quelques ordres de grandeur inférieure aux concentrations estimées sans effet calculées pour les poissons, les daphnies et les algues. Par conséquent, cette substance ne devrait pas avoir d'effets nocifs sur l'environnement aquatique.

Cette substance s'inscrira 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.

D'après les renseignements disponibles, le PBTBO ne remplit aucun des critères prévus à l'article 64 de la LCPE (1999).

Introduction

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

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

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

Le 9 décembre 2006, les ministres ont donc publié un avis d'intention dans la Partie I de la *Gazette du Canada* (Canada, 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.

L'évaluation des risques que pose le α -(3,5-dibromo-2-méthyl-4-oxo-2,5-cyclohexadiénylidène)- α -(3,5-dibromo-4-hydroxyphényl)toluènesulfonate de sodium pour l'environnement a été jugée hautement prioritaire car cette substance est persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques et l'on croit qu'elle est commercialisée au Canada. Le volet du Défi portant sur le α -(3,5-dibromo-2-méthyl-4-oxo-2,5-cyclohexadiénylidène)- α -(3,5-dibromo-4-hydroxyphényl)toluènesulfonate de sodium a été lancé le 17 novembre 2007 au moyen d'un avis paru dans la *Gazette du Canada* (Canada, 2007). En même temps a été publié le profil de cette substance, qui présentait l'information technique (obtenue avant décembre

2005) sur laquelle a reposé sa catégorisation. Des renseignements portant sur la quantité de cette substance sur le marché ont été transmis en réponse au Défi.

Même si l'évaluation des risques que présente le α -(3,5-dibromo-2-méthyl-4-oxo-2,5-cyclohexadiénylidène)- α -(3,5-dibromo-4-hydroxyphényl)toluènesulfonate de sodium pour l'environnement a été jugée hautement prioritaire, cette substance ne répond pas aux critères de la catégorisation pour le PFRE ou le REI, et on estime qu'elle ne pose pas un grave danger 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 d'intérêt pour l'évaluation des risques touchant l'environnement.

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

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

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

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

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. Cette évaluation préalable a fait l'objet d'une consultation et d'une étude consignée par des pairs. Par ailleurs, une ébauche de cette évaluation a fait l'objet d'une période de commentaires du public de 60 jours. Bien que des commentaires 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 principales données et considérations sur lesquelles repose la présente évaluation sont résumées ci-après.

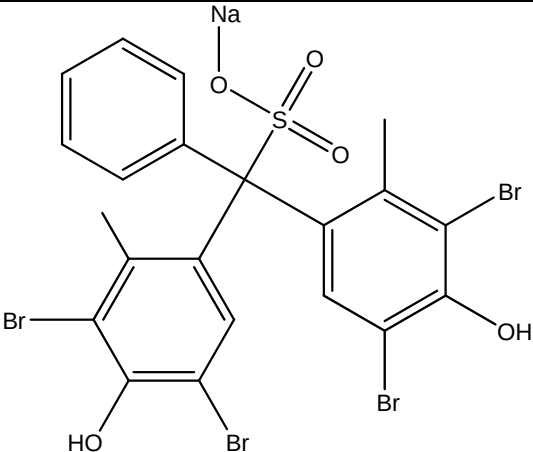
Identité de la substance

Nom de la substance

Aux fins du présent document, la substance dont il est question ici est appelée PBTBO.

Tableau 1. Identité de la substance – PBTBO

Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS)	62625-32-5
Nom dans la liste intérieure des substances (LIS)	α-(3,5-dibromo-2-méthyl-4-oxo-2,5-cyclohexadiénylidène)-α-(3,5-dibromo-4-hydroxyphényl)toluènesulfonate de sodium
Noms relevés dans les National Chemical Inventories (NCI)¹	<i>Phenol, 4,4'-(2,2-dioxido-3H-1,2-benzoxathiol-3-ylidene)bis[2,6-dibromo-3-methyl-, monosodium salt (TSCA, PICCS, ASIA-PAC, NZIoC)</i> <i>α-(3,5-dibromo-2-méthyl-4-oxo-2,5-cyclohexadiénylidène)-α-(3,5-dibromo-4-hydroxyphényl)toluènesulfonate de sodium (EINECS)</i> <i>PHENOL, 4,4'-(3H-1,2-BENZOXATHIOL)-3-YLIDENE)BIS[2,6-DIBROMO-3-METHYL, S,S-DIOXIDE, MONOSODIUM SALT (PICCS)</i>
Autres noms	Aucun
Groupe chimique (Groupe de la LIS)	Produits chimiques organiques définis
Principale classe chimique ou utilisation	Colorants de triarylméthane
Principale sous-classe chimique	Bromophénolsulfophtaléines
Formule chimique	C ₂₁ H ₁₃ Br ₄ O ₅ S.Na

Structure chimique	
SMILES	<chem>O=S(O[Na])(C(C1=CC(Br)=C(O)C(Br)=C1C)(C2=CC(Br)=C(O)C(Br)=C2C)C3=CC=CC=C3)=O</chem>
Masse moléculaire	722,02 g/mol

¹ Source : National Chemical Inventories (NCI), 2006 : ASIA-PAC (listes de substances de l'Asie-Pacifique); EINECS (Inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes); PICCS (inventaire des produits et substances chimiques des Philippines); TSCA (inventaire des substances chimiques visées par la *Toxic Substances Control Act* des États-Unis); NZIoC (inventaire des substances chimiques de la Nouvelle-Zélande).

Il est à noter que le PBTBO est un isomère de structure du sel monosodique de *S,S*-dioxyde de 2,2',6,6'-tétrabromo-3,3'-diméthyl-4,4'-(3*H*-2,1-benzoxathiol-3-ylidène)diphénol (n° CAS 67763-24-0). Selon les NCI, le nom commun de cette substance est le *bromocresol green sodium salt*. Cependant, dans bien des sources (par exemple les bases de données en ligne sur les produits chimiques, les fiches signalétiques, etc.), le nom « bromocresol green sodium salt » est utilisé comme synonyme pour les substances correspondants aux deux n° CAS (c'est-à-dire 62625-32-5 et 67763-24-0), ce qui peut être confondant. On a soigneusement vérifié que les renseignements cités dans le présent rapport d'évaluation concernent spécifiquement la substance portant le n° CAS 62625-32-5.

La structure du PBTBO est souvent représentée avec un cycle benzoxathiole fermé et un ion sodium associé à l'un des groupes de phénols. Cependant, une fois dans l'eau, ce cycle s'hydrolyse pour former un groupe sulfonate ionique. L'ion sodium s'associe ainsi au groupe sulfonate. Le SMILES pour la forme neutre de cette structure (p. ex. l'atome de sodium remplacé par un atome d'hydrogène) a été intégré comme donnée d'entrée aux divers modèles utilisés dans cette évaluation.

Propriétés physiques et chimiques

Le tableau 2 présente les valeurs modélisées des propriétés physiques et chimiques du PBTBO qui se rapportent à son devenir dans l'environnement. Étant donné le manque de données expérimentales sur cette substance, on a dû chercher un analogue de structure sur lequel des données expérimentales existaient. Cet analogue étroitement apparenté est le bleu de tétrabromophénol (n° CAS 115-39-9), substance également évaluée dans le cadre du Défi. Les renseignements sur la dénomination chimique du bleu de bromophénol sont fournis au tableau 3.

Une étude importante utilisée comme source de données expérimentales sur certaines propriétés physiques et chimiques de l'analogue bleu de tétrabromophénol a fait l'objet d'une évaluation critique; on voulait ainsi s'assurer que les résultats pouvaient être employés à l'appui des conclusions. L'examen de cette étude (Sommaire de rigueur d'études) se trouve à l'annexe 1. On a trouvé une étude pertinente lors de recherches documentaires menées récemment.

On privilégie, lorsqu'il en existe, les données expérimentales sur des analogues plutôt que les données modélisées sur la substance évaluée, surtout si les modèles ne produisent pas des résultats exacts. Vu le peu de données expérimentales sur le PBTBO et le bleu de tétrabromophénol (son analogue), on a eu recours à des modèles de relations quantitatives structure-activité (RQSA) pour générer des données sur les propriétés physiques et chimiques du PBTBO. Ces modèles (à l'exception de 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. Seules les formes neutres d'un produit chimique peuvent être fournies comme données d'entrée à ces modèles (forme SMILES); par conséquent, les valeurs modélisées figurant au tableau 2 concernent le PBTBO non dissocié.

Tableau 2. Propriétés physiques et chimiques de la forme neutre du PBTBO

Propriété	Type	Valeur	Température (°C)	Références
État physique	n.d.			
Point de décomposition (°C)	Analogue ¹	279		PhysProp, 2006
	Modélisé	308,21		MPBPWIN, 2000
Point d'ébullition (°C)	Modélisé	704,68		MPBPWIN, 2000
Pression de vapeur (Pa)	Modélisé ²	$1,38 \times 10^{-17}$ ($1,68 \times 10^{-19}$ mm Hg)	25	MPBPWIN, 2000
Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mol)	Modélisé	$2,23 \times 10^{-16}$ ($2,20 \times 10^{-21}$ atm·m ³ /mol)	25	MPBPWIN, 2000

Log K_{oe} (coefficient de partage octanol-eau) (sans dimension)	Analogue ¹ (forme ionique)	-3,07	25	Franco <i>et al.</i> , 1999
	Modélisé	6,32		KOWWIN, 2000
Log K_{co} (coefficient de partage carbone organique-eau – L/kg) (sans dimension)	Analogue ¹⁻³ (forme ionique)	-2,91 à -2,02	25	Franco <i>et al.</i> , 1999
	Modélisé	4,755		KOCWIN, 2000 (Méthode K _{oe})
Solubilité dans l'eau (mg/L)	Analogue ¹	4 000	n.d.	O'Neil, 2001
	Modélisé ²⁻⁴	> 100 000	25	WSKOWWIN, 2000
pK_a (constante de dissociation acide) (sans dimension)	Modélisé pK _{a1} pK _{a2} pK _{a3}	6,27 5,55 -0,5 ⁵		ACD, 2005

n.d. : non disponible.

¹ Données expérimentales sur l'analogue de structure bleu de tétrabromophénol (n° CAS 115-39-9).

² En fournissant au modèle les données expérimentales recensées sur le point de fusion de l'analogue.

³ Calculé par Environnement Canada d'après les coefficients d'adsorption de Freundlich et le % de carbone organique cités aux tableaux 3 et 1, respectivement, dans Franco *et al.*, 1999.

⁴ En fournissant au modèle les données expérimentales recensées sur le log K_{oe} (forme ionique) de l'analogue.

⁵ Une valeur négative indique une ionisation complète.

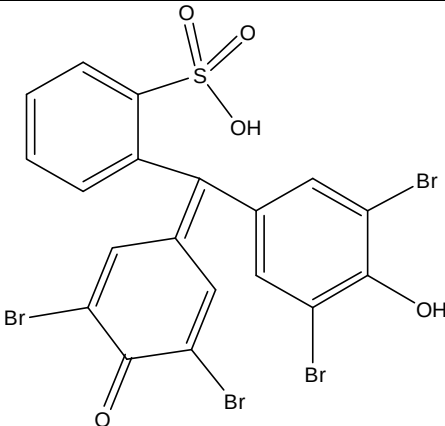
Le PBTBO étant un sel, il se dissociera dans l'eau, où il sera présent sous forme ionique. En outre, d'après les valeurs modélisées du pK_a (-0,5 à 6,27), cette substance devrait complètement s'ioniser aux pH enregistrés dans l'environnement (de 6 à 9). Cela est confirmé par le fait que le changement de couleur de l'indicateur de pH vert de bromocrésol (un isomère de structure) se produit dans une gamme de pH de 3,8 à 5,4 (pH-meter.Info, 2005). Le pK_a du vert de bromocrésol correspondrait donc au point milieu de cet intervalle (pH 4,6). Les valeurs de pK_a pour le PBTBO n'ont pas été modélisées et ont, par conséquent, été exclues de la catégorisation.

D'après la valeur quantitative de la solubilité de l'analogue (4 000 mg/L) et compte tenu du fait que le PBTBO est un sel de pK_a relativement faible, cette substance est probablement très soluble dans l'eau. En ce qui concerne les autres propriétés physiques et chimiques, les données sur l'analogue présentées au tableau 2 laissent supposer que le PBTBO ne se bioaccumule pas dans les organismes, ne se lie pas aux particules et est très mobile dans le sol. La volatilité du produit ne peut être évaluée car les valeurs modélisées de la pression de vapeur et de la constante de la loi de Henry ne sont probablement pas fiables (voir plus bas). Cependant, comme la substance est sous forme ionique aux pH

enregistrés dans l'environnement, il est probable qu'elle soit faiblement volatile. L'incidence des propriétés physiques et chimiques de la substance sur le devenir de celle-ci dans l'environnement est traitée de manière plus approfondie plus loin dans le rapport.

Comme le montre le tableau 2, bien des modèles ne donnent pas de bons résultats pour ce qui est de l'estimation des propriétés physiques et chimiques du PBTBO. Les valeurs modélisées du $\log K_{oe}$ et du $\log K_{co}$, en particulier, diffèrent des valeurs expérimentales mesurées pour l'analogue de structure, et ce, par de nombreux ordres de grandeur. Cela est très probablement dû au fait que les structures des substances ionisables comme le PBTBO sont mal traduites par les ensembles d'étalonnage de certains des modèles utilisés. Étant donné que les données modélisées sont moins fiables, les données sur les analogues présentées dans le tableau 2 pour le bleu de bromophénol ont été utilisées selon les exigences de la présente évaluation.

Tableau 3. Identité du bleu de tétrabromophénol, analogue de structure du PBTBO

Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS)	115-39-9
Nom dans la LIS	Bleu de tétrabromophénol
Principale classe chimique ou utilisation	Colorants de triarylméthane
Principale sous-classe chimique	Phénolsulfophtaléines
Formule chimique	C ₁₉ H ₁₀ Br ₄ O ₅ S
Structure chimique	
SMILES	<chem>OS(C1=CC=CC=C1/C(C2=CC(Br)=C(O)C(Br)=C2)=C(C=C3Br)/C=C(Br)C3=O)(=O)=O</chem>
Masse moléculaire	669,96 g/mol

Sources

Il n'existe aucun rapport selon lequel le PBTBO serait produit de manière naturelle dans l'environnement.

D'après les renseignements recueillis en réponse à un avis publié en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999), 2 363 kg de PBTBO ont été importés au cours de l'année civile 2006 au Canada. Pour cette même année, aucune entreprise n'a déclaré avoir fabriqué ou utilisé cette substance au Canada en quantité dépassant les seuils fixés (soit 100 kg pour la fabrication et 1 000 kg pour l'utilisation). Au total, six entreprises canadiennes se sont désignées comme parties intéressées, c'est-à-dire comme ayant des intérêts commerciaux à l'égard de cette substance (Environnement Canada, 2007). Un avis semblable publié en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999) au cours de l'année civile 2005 a également révélé que les importations de PBTBO au Canada se situaient entre 1 001 et 100 000 kg. Cette année-là, cinq entreprises canadiennes se sont désignées comme parties intéressées (Canada, 2006b).

Selon les rapports, la quantité fabriquée, importée ou commercialisée au Canada au cours de l'année civile 1986 était de 100 kg. Le nombre de déclarants pour les années civiles 1984 à 1986 était inférieur à 4.

Utilisations

Aucun renseignement sur les utilisations n'a été transmis en réponse à l'avis émis en application de l'article 71 de la LCPE (1999) au cours de l'année civile 2006 (Environnement Canada, 2007). Le dépouillement des sources publiées a permis de recenser les possibles utilisations suivantes pour le PBTBO : indicateur de pH et réactif analytique dans les essais microbiologiques, chimiques et biochimiques. Cependant, des incertitudes demeurent dans une certaine mesure au sujet de ces utilisations puisque la substance portant le n° CAS 62625-32-5 est souvent confondue avec son isomère, le *bromocresol green sodium salt* (n° CAS 67763-24-0) (voir la section « Identité de la substance » du présent rapport).

Rejets dans l'environnement

Une quantité totale de 2 363 kg de la substance a été importée au Canada en 2006 (Environnement Canada, 2007). D'après les renseignements fournis en réponse à l'avis publié en vertu de l'article 71, elle aurait selon toute vraisemblance été vendue à divers clients un peu partout au pays. Le PBTBO étant susceptible d'être employé surtout comme réactif de laboratoire, les rejets de cette substance dans l'environnement au Canada pourraient être dispersés, mais cependant très faibles. En effet, les types d'installations ayant recours à ce type de substance (p. ex. des centres de recherche, des établissements universitaires) sont répartis dans l'ensemble du Canada. Ce genre de réactif est susceptible d'y être utilisé en très petites quantités (se mesurant en gouttes).

Débit massique

Un outil basé sur le débit massique a été élaboré pour estimer les rejets potentiels de PBTBO dans l'environnement à différentes étapes de son cycle de vie (Environnement Canada, 2008a). Les données empiriques sur les rejets de substances spécifiques dans l'environnement sont rares. On estime donc, pour chaque type d'utilisation connue, la proportion et la quantité des rejets dans les différents milieux naturels, ainsi que la proportion de la substance qui est transformée chimiquement ou envoyée dans des lieux d'élimination des déchets (tableau 4). Les hypothèses et les paramètres d'entrée employés pour effectuer ces estimations sont fondés sur le jugement scientifique professionnel.

Cette substance est utilisée sous forme de solution. Celle-ci peut être importée ou préparée sur place à partir de la substance pure (Environnement Canada, 2007). Lorsque la solution est préparée sur place, des rejets peuvent se produire en cours de processus. Une valeur de 2 % représentant les pertes ou les déversements de solution préparée a été retenue comme étant le pire des scénarios associés à la manipulation du produit. On a supposé que le produit déversé était jeté dans l'évier. On a aussi présumé que, après utilisation dans les centres de recherche et les établissements similaires, la solution contenant du PBTBO ne serait pas traitée comme un déchet dangereux. Par conséquent, il est probable qu'elle soit vidée dans un évier et acheminée vers les égouts. Selon le pire des scénarios, on pose l'hypothèse selon laquelle 100 % de la solution mise au rebut atteint les égouts. Si l'on suppose que la totalité de la masse de PBTBO importée au Canada au cours d'une année est utilisée, notamment pour la préparation de solutions, on obtient les résultats figurant au tableau 4, à savoir que 2 363 kg de cette substance sont rejetés dans les égouts (d'après les données de 2006).

Tableau 4. Estimation des rejets et des pertes de PBTBO dans l'environnement, de sa transformation chimique et des quantités transférées aux lieux d'élimination d'après le cycle de vie de cette substance

Analyse selon les étapes du cycle de vie du PBTBO	Masse totale (kg) importée au Canada			
	Étapes du cycle de vie			Total (kg)
	Formulation de produit	Utilisation du produit		
		Utilisations industrielles ²	Utilisation par les consommateurs	
À l'égout ¹	47	2 316	0	2 363
Sol	0	0	0	0
Air	0	0	0	0
Transformation chimique	0	0	0	0
Évacuation des déchets en vue de l'élimination	0	0	0	0
Total	47	2 316	0	2 363

¹ C'est-à-dire dans les eaux usées avant tout traitement.

² C'est-à-dire les utilisations dans un endroit autre qu'une résidence.

Devenir dans l'environnement

Étant donné ses propriétés physiques et chimiques (tableau 2) et sa voie d'entrée possible dans l'environnement, le PBTBO devrait aboutir principalement dans l'eau. Compte tenu de la tendance à l'ionisation du PBTBO, on peut penser que la répartition de cette substance chimique dans l'environnement sera prédite de manière plus exacte par les valeurs de $\log K_{oe}$ et de $\log K_{co}$ dont on dispose pour la forme ionique que par les valeurs relatives à la forme neutre de l'analogue de structure identifié (tableau 2).

L'outil de débit massique montre que, après avoir été utilisé comme réactif analytique en laboratoire, le PBTBO est selon toute vraisemblance jeté dans l'évier. De là, il est acheminé jusqu'aux stations d'épuration des eaux usées (SEEU). On présume qu'aucune dégradation n'a lieu dans ces installations, et que le produit demeurera donc dans les eaux usées, sans se loger dans les boues d'épuration, ceci d'après sa forte solubilité attendue dans l'eau (tableau 2; données sur l'analogue) et les faibles valeurs de $\log K_{oe}$ et de $\log K_{co}$ pour les formes ioniques (tableau 2; < 1 , données sur l'analogue). De la même manière, une fois qu'il a été rejeté dans des eaux réceptrices, le PBTBO demeurera principalement dans la colonne d'eau plutôt que de se distribuer dans les sédiments, ceci compte tenu de sa forte solubilité attendue dans l'eau et des faibles valeurs de $\log K_{oe}$ et de $\log K_{co}$ pour la forme ionique. Le PBTBO ne se volatiliserait pas dans l'air à partir de l'eau, vu sa tendance à se dissocier aux pH naturels dans l'eau.

Persistance et potentiel de bioaccumulation

Persistance dans l'environnement

Les renseignements qui précèdent sur le profil de rejets plausible et le devenir subséquent du PBTBO dans l'environnement donnent à penser que cette substance sera présente surtout dans l'eau, mais pas dans les sédiments ou le sol. On ne s'attend pas non plus à ce qu'elle soit présente dans l'air.

Il n'existe pas de données empiriques sur la dégradation du PBTBO ou de son analogue de structure. D'après l'Ecological and Toxicological Association of Dyes and Organic Pigments Manufacturers (ETAD, 1995), les colorants, à part quelques exceptions, sont considérés comme essentiellement non biodégradables en conditions aérobies. Des évaluations répétées de la biodégradabilité immédiate et intrinsèque à l'aide d'essais reconnus (par exemple, les essais de l'OCDE) ont confirmé cette caractéristique (Pagga et Brown, 1986; ETAD, 1992). Étant donné la structure chimique du PBTBO, rien ne permet de penser que sa biodégradation serait considérablement différente de celle d'autres colorants décrits par l'ETAD (1995).

En l'absence de données expérimentales, on a eu recours aux modèles prédictifs RQSA de dégradation cités au tableau 5, ci-dessous, pour évaluer la persistance du PBTBO.

Compte tenu de l'importance écologique du milieu aquatique, du fait que la plupart des modèles s'appliquent à ce milieu, et du fait que l'on s'attend à ce que le PBTBO soit rejeté dans ce milieu et y demeure, on a principalement examiné la biodégradation dans l'eau. Bien que les modèles de dégradation soient fondés sur la structure des substances et ne traitent que la forme neutre du PBTBO, la plupart des valeurs modélisées (tableau 5) sont jugées fiables, car les ensembles d'étalonnage des modèles utilisés comportaient certaines substances chimiques de structure comparable à celle du PBTBO.

Tableau 5. Données modélisées sur la dégradation du PBTBO

Processus du devenir	Modèle et fondement du modèle	Résultat	Interprétation	Demi-vie extrapolée (jours)	Référence ou source de l'extrapolation
EAU					
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 1 : probabilité linéaire	0,37	Biodégradation lente dans l'eau	s.o.	s.o.
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 2 : probabilité non linéaire	0,023	Biodégradation lente dans l'eau	s.o.	s.o.
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 3 : enquête d'expert (biodégradation ultime)	1,07	Résiste à la biodégradation dans l'eau	180 720	U.S. EPA, 2002 <i>Aronson et al.</i> , 2006
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 4 : enquête d'expert (biodégradation primaire)	2,19	La biodégradation primaire dans l'eau prend des mois	60 120	U.S. EPA, 2002 <i>Aronson et al.</i> , 2006
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 5 : probabilité linéaire du MITI	-0,37	Biodégradation lente dans l'eau	> 60	<i>Aronson et al.</i> , 2006
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 6 : probabilité non linéaire du MITI	0,00	Biodégradation lente dans l'eau	> 60	<i>Aronson et al.</i> , 2006
Biodégradation (anaérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 7 : probabilité linéaire	-0,53	Biodégradation lente	s.o.	s.o.
Biodégradation	BIOWIN, 2000 Conclusion générale	Non	Ne se biodégrade pas facilement dans l'eau	s.o.	s.o.
Biodégradation (aérobie)	TOPKAT, 2004 Probabilité (MITI 1)	Ne fait pas partie du domaine acceptable	s.o.	s.o.	s.o.
Biodégradation (aérobie)	CATABOL, 2004-2008	Ne fait pas partie	s.o.	s.o.	s.o.

	DBO*, % (OCDE 301C)	du domaine acceptable			
--	------------------------	-----------------------------	--	--	--

* DBO : demande biologique en oxygène

Dans la molécule de PBTBO, le lien ester entre le carbone central et l'atome d'oxygène du cycle benzoxathiole est susceptible d'être hydrolysé; cependant, on ne connaît pas la vitesse de cette transformation.

Les résultats présentés dans le tableau 5 montrent que, selon la plupart des modèles de probabilité (BIOWIN 2, 5, 6 et 7), la biodégradation du PBTBO serait lente. En fait, toutes les valeurs de probabilité, sauf celles dérivées de BIOWIN 1, sont inférieures à 0,3, qui est la valeur de démarcation proposée par Aronson *et al.* (2006) pour identifier les substances dont la demi-vie est supérieure à 60 jours (d'après les modèles de probabilité du MITI), et inférieures à 0,5, qui est la valeur de démarcation proposée par les concepteurs de modèles pour définir une biodégradation lente. La demi-vie obtenue à l'aide du modèle d'enquête sur la biodégradation primaire (BIOWIN 4), qui est de l'ordre de « mois », est réputée correspondre à la demi-vie d'environ 60 jours estimée par l'U.S. EPA (2002), et à la demi-vie de 120 jours estimée par Aronson *et al.* (2006). Le résultat obtenu à l'aide du modèle d'enquête sur la biodégradation ultime (BIOWIN 3), soit « résiste à la biodégradation », est réputé correspondre à la demi-vie d'environ 180 jours estimée par l'U.S. EPA (2002), et à la demi-vie de 720 jours estimée par Aronson *et al.* (2006). On s'attend aussi à ce que la substance se dégrade lentement en conditions anaérobies. La conclusion générale tirée de l'application du modèle BIOWIN est que la substance ne se biodégrade pas facilement. D'autres modèles de la dégradation ultime (CATABOL et TOPKAT) n'ont pas produit de résultat acceptable car la substance ne faisait pas partie de leurs domaines d'applicabilité respectifs.

Lorsque l'on considère les résultats des modèles de probabilité et la conclusion générale du modèle BIOWIN, on observe un consensus selon lequel la demi-vie du PBTBO dans l'eau serait supérieure à 182 jours.

En utilisant un ratio d'extrapolation de 1:1 (eau:sol) pour la demi-vie associée à la biodégradation (Boethling, 1995), on obtient aussi une demi-vie > 182 jours pour la biodégradation dans le sol. Cela indique que le PBTBO devrait être persistant dans le sol. Cependant, cette substance ne devrait pas atteindre ce milieu.

Dans l'ensemble, les données empiriques sur les colorants provenant de l'ETAD (1992, 1995) de même que les données modélisées (tableau 5) montrent que le PBTBO répond aux critères de la persistance dans l'eau et le sol (demi-vie $\geq$ 182 jours énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000). Cette substance ne devrait pas être présente dans le sol, l'air ou les sédiments.

Potentiel de bioaccumulation

Il n'existe pas de données expérimentales sur le facteur de bioaccumulation (FBA) ou le facteur de bioconcentration (FBC) du PBTBO ou d'un analogue de structure. Comme le PBTBO est un sel, il devrait être présent sous forme ionique dans l'environnement. La valeur expérimentale du log K_{oe} pour l'analogue bleu de tétrabromophénol sous forme ionique est de -3,07 (tableau 2), ce qui est le signe d'un faible potentiel de bioaccumulation. L'ionisation n'a pas été prise en compte pendant la catégorisation en regard du potentiel de bioaccumulation.

Comme on ne dispose pas de données expérimentales sur le FBA ou le FBC du PBTBO, on a plutôt employé une méthode prédictive fondée sur les modèles du FBA et du FBC dont on disposait, comme le montre le tableau 6 ci-dessous. La valeur expérimentale du log K_{oe} pour l'analogue bleu de tétrabromophénol sous forme ionique a été fournie comme donnée d'entrée aux modèles. Les valeurs modélisées de la bioaccumulation ne tiennent pas compte de la métabolisation possible de la substance; par conséquent, la bioaccumulation pourrait avoir été surestimée. Cependant, comme les facteurs de bioconcentration et de bioaccumulation prédits pour le PBTBO sont faibles, cela ne devrait pas avoir d'incidence sur les conclusions quant à la bioaccumulation.

Le modèle modifié du FBA de Gobas pour le niveau trophique intermédiaire prévoit un FBA inférieur à 1 L/kg chez les poissons, ce qui signifie que le PBTBO ne peut se bioconcentrer ni se bioamplifier dans l'environnement.

Les résultats des calculs de modélisation des FBC ajoutent aux éléments indiquant que cette substance a un faible potentiel de bioconcentration. La valeur très faible de 3,16 assignée au FBC constitue une valeur par défaut recommandée avec le modèle BCFWIN pour les substances dont le log K_{oe} est inférieur à 1; ce résultat n'est donc pas un FBC issu d'un modèle expressément pour le PBTBO.

Tableau 6. FBA et FBC prévus pour le PBTBO chez les poissons

Organisme d'essai	Paramètre	Valeur en poids humide (L/kg)	Références
Poissons	FBA	< 1	Gobas, FBA, T2MTL (Arnot et Gobas, 2003)
Poissons	FBC	< 1	Gobas, FBC, niveau trophique intermédiaire (Arnot et Gobas, 2003)
Poissons	FBC	3,16	BCFBAF, 2000
Poissons	FBC	Ne fait pas partie du domaine acceptable	Modèle du FBC de base (Dimitrov <i>et al.</i> , 2005)

D'après les données expérimentales sur le log K_{oe} de l'analogue bleu de bromophénol et les valeurs modélisées pour le PBTBO, on a conclu que ce dernier ne répond pas aux

critères de la bioaccumulation (FBC ou FBA $\geq 5\,000$) énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Potentiel d'effets nocifs sur l'environnement

Évaluation des effets sur l'environnement

A – Dans le milieu aquatique

Comme il a été mentionné précédemment, le PBTBO, une fois rejeté dans l'environnement, aura tendance à demeurer dans l'eau. On s'attend à ce qu'il soit persistant dans ce milieu. Par conséquent, les effets de cette substance sur les écosystèmes aquatiques pourraient être préoccupants.

Comme le PBTBO est un sel, il sera présent sous forme ionique dans les écosystèmes aquatiques. Comme on s'attend à ce que le produit soit très soluble dans l'eau, les organismes aquatiques pourraient y être exposés.. Cependant, comme on croit que le produit a peu d'affinité pour les lipides (voir le tableau 6), il ne devrait pas s'accumuler de manière importante dans les tissus des organismes exposés.

Il n'existe pas de données expérimentales acceptables sur la toxicité aquatique de cette substance ou d'un analogue de structure. Des données modélisées ont donc été utilisées pour estimer cette toxicité potentielle (tableau 7). On a fourni au modèle ECOSAR les valeurs expérimentales de solubilité dans l'eau et de log K_{oe} (pour la forme ionique) de l'analogue, telles qu'elles figurent au tableau 2. Il n'a pas été possible de soumettre ces valeurs aux autres modèles employés (OASIS Forecast et AIEPS) car seules les données sur la structure chimique sont acceptées comme données d'entrée par ces modèles.

OASIS Forecast produit une valeur de K_{oe} d'après la structure qui lui est fournie (forme neutre), et l'utilise pour générer une estimation de la toxicité. AIEPS consiste, quant à lui, en un réseau neuronal probabiliste basé sur un modèle de prévision qui utilise des fragments structuraux et la présence ou l'absence d'atomes entre la substance modélisée et celles comprises dans l'ensemble d'étalonnage. Ce modèle calcule ensuite une prévision pour trois paramètres de toxicité aiguë (tête-de-boule, *Daphnia magna* et *Pseudokirchneriella subcapitata*).

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

Organisme	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Références
Poissons	Toxicité aiguë (96 heures)	CL ₅₀ ¹	> limite de solubilité dans l'eau ³	ECOSAR, 2004
			0,68	OASIS Forecast, 2005
<i>Daphnia</i>	Toxicité aiguë (48 heures)		0,0299	AIEPS, 2003-2007
<i>Daphnie</i>	Toxicité aiguë (48 heures)	CL ₅₀ ¹	> limite de solubilité dans l'eau ³	ECOSAR, 2004

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

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

³ La solubilité de l'analogue bleu de tétrabromophénol dans l'eau est de 4 000 mg/L (voir le tableau 2).

Les prévisions concernant la toxicité en milieu aquatique obtenues à l'aide du modèle ECOSAR sont fiables dans une certaine mesure. En effet, tant le log K_{oe} (données sur l'analogue) que la masse moléculaire du PBTBO font partie du domaine d'applicabilité de ce modèle (limite de 7,0 pour le log K_{oe}, et de 1 000 g/mol pour la masse moléculaire). Cependant, les analogues les plus étroitement apparentés dans l'ensemble d'étalonnage du modèle ECOSAR sont les chlorophénols, ce qui laisse penser que les valeurs prédites en ce qui concerne la toxicité intrinsèque du PBTBO sont incertaines. Quoi qu'il en soit, ces résultats de modélisation semblent indiquer que le PBTBO ne constitue pas un grave danger pour les organismes aquatiques (c'est-à-dire que le rapport CL/CE₅₀ associé à l'exposition aiguë est supérieur à 1,0 mg/L), conformément aux observations faites pour de nombreuses substances dont le log K_{oe}.

Les résultats produits par le modèle OASIS Forecast indiquent que le PBTBO est très toxique (c'est-à-dire que sa CL₅₀ est inférieure ou égale à 1,0 mg/L), mais on estime que cette valeur n'est pas fiable. En effet, l'écart entre cette valeur et les prédictions du modèle ECOSAR est en partie attribuable au fait que la valeur modélisée du log K_{oe} pour la molécule neutre est utilisée dans les calculs produits par OASIS Forecast. Comme on peut le voir au tableau 2, cette valeur n'est pas représentative du comportement de partage de la molécule sous forme ionique. En outre, la structure chimique du PBTBO n'est pas bien reflétée dans les ensembles d'étalonnage d'OASIS.

Étant donné la grande persistance du PBTBO dans l'environnement (voir le tableau 5), une exposition chronique est probable. Toutefois, vu les effets toxiques aigus vraisemblablement faibles de la substance et son potentiel de bioaccumulation peu élevé, sa toxicité chronique en milieu aquatique devrait elle aussi être faible.

B – Dans d'autres milieux

On n'a trouvé aucune étude concernant les effets de cette substance sur l'environnement dans d'autres milieux que l'eau (par exemple dans les sédiments ou les sols). Cependant, le PBTBO ne devrait pas être présent dans ces milieux.

Évaluation de l'exposition de l'environnement

Il n'existe pas de données de surveillance environnementale pour cette substance. D'après les renseignements fournis en réponse à l'avis publié en vertu de l'article 71 de la LCPE (Environnement Canada, 2007), et d'après une analyse du cycle de vie (tableau 4), jusqu'à 2 363 kg de PBTBO pourraient se retrouver dans les milieux aquatiques au Canada chaque année. Même si le PBTBO ne répond pas aux critères relatifs au potentiel de bioaccumulation définis dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000), il peut être persistant dans l'environnement et, selon le degré d'exposition, pourrait avoir des effets nocifs sur l'environnement. Cet aspect a été étudié grâce à une évaluation quantitative de l'exposition associée au rejet de cette substance dans les écosystèmes aquatiques.

On a estimé les concentrations dans l'environnement sur la base des renseignements disponibles, y compris les estimations relatives aux quantités de la substance, les taux de rejet possibles et les caractéristiques des éventuels plans d'eau récepteurs. L'outil d'exposition générique industriel – Milieu aquatique (Industrial Generic Exposure Tool – Aquatic, ou IGETA) d'Environnement Canada a servi à estimer la concentration de la substance dans un cours d'eau générique qui reçoit des effluents industriels (Environnement Canada, 2008b). Cet outil est fondé sur le pire des scénarios, c'est-à-dire le cas où la substance serait entièrement rejetée par une seule installation, à un point de déversement unique dans un cours d'eau. Le scénario générique visait à fournir des estimations fondées sur des hypothèses prudentes quant à la quantité de substance traitée et rejetée, au nombre de jours d'utilisation, au taux d'élimination à la station d'épuration des eaux usées et à la taille du cours d'eau récepteur. L'outil modélise un scénario de rejet industriels utilisant des estimés de chargement basés sur des données provenant d'enquêtes industrielles et sur la connaissance de la distribution des évacuations industrielles à travers le pays. L'outil calcule une concentration environnementale estimée (CEE) en présumant une dilution instantanée dans un cours d'eau récepteur de petite taille. L'équation et les données utilisées pour calculer la CEE dans le cours d'eau récepteur sont décrites dans Environnement Canada (2008c). La quantité totale de 2 316 kg qui pourrait être rejetée dans les écosystèmes aquatiques (tableau 4) a été utilisée comme estimation raisonnable, suivant le pire des scénarios de la quantité de substance rejetée chaque année par une seule installation. Les autres paramètres clés étaient les suivants : 261 jours d'activité (jours ouvrables seulement, d'après les utilisations attendues), aucune élimination aux stations d'épuration des eaux usées (pire des scénarios) et débit de 0,65 m³/s dans le cours d'eau récepteur (15^e centile de la

distribution des débits dans les cours d'eau au pays). La CEE ainsi obtenue est de 0,15 mg/L.

Caractérisation des risques pour l'environnement

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 intrinsèque, les sources et le devenir de la substance dans l'environnement.

Une analyse du quotient de risque qui intègre des estimations prudentes de l'exposition à la substance et des données sur ses répercussions écologiques a été réalisée pour le milieu aquatique afin de déterminer si la substance peut avoir ou non des effets nocifs sur l'environnement. Le scénario d'exposition général décrit précédemment a donné une concentration environnementale estimée (CEE) de 0,15 mg/L. Une concentration estimée sans effet (CESE) a été déterminée en sélectionnant la valeur critique de la toxicité (VCT) la plus faible pour un type d'organisme donné (une CE_{50} ou la limite de solubilité dans l'eau de la substance; voir le tableau 7) et en la divisant par un facteur d'évaluation de 1 000 (pour tenir compte de la variabilité interspécifique et intraspécifique de la sensibilité en vue d'utiliser les données de toxicité modélisées permettant de représenter les conditions naturelles, et estimer la concentration sans effet à court terme à partir d'une CL_{50}). La CEE calculée à l'aide de l'IGETA a ensuite été utilisée en combinaison avec la CESE pour calculer le quotient de risque.

Le quotient de risque calculé pour chacun des trois types d'organismes soumis au modèle est inférieur à 1 (tableau 8). Étant donné que l'IGETA fournit une estimation prudente de l'exposition, et vu le facteur élevé d'évaluation employé pour estimer les seuils d'effet chronique (CESE), les résultats montrent que l'exposition locale attribuable à une source ponctuelle de rejets industriels de PBTBO en milieu aquatique présente un faible risque pour l'environnement.

Tableau 8. Analyse du quotient de risque associé au PBTBO en milieu aquatique

Organisme	VCT	CESE	CEE	Scénario	Quotient de risque (CEE/CESE)
	(mg/L)				
Poissons	4 000	4	0,15	Modèle IGETA : rejet dans un cours d'eau par une installation	0,037
<i>Daphnia</i>					
Algues					

En résumé, les renseignements recueillis laissent supposer que le PBTBO n'aurait pas d'effets nocifs sur les milieux naturels s'il était rejeté dans l'environnement au Canada. Après son rejet, la substance se retrouvera principalement dans l'eau, où l'on s'attend à ce qu'elle soit persistante. Par contre, le PBTBO ne devrait pas se bioaccumuler dans les organismes. Il est probable que la toxicité aiguë de la substance soit faible pour les organismes aquatiques. Une analyse du quotient de risque fondée sur le pire des scénarios industriels a montré qu'aucun risque ne serait associé à l'exposition des organismes aquatiques au PBTBO.

Incertitudes dans l'évaluation des risques pour l'environnement

Il n'existe pas de données expérimentales sur les propriétés physiques et chimiques, la dégradation, les facteurs de bioaccumulation ou l'écotoxicité du PBTBO. Les lacunes dans les données expérimentales ont été comblées de manière satisfaisante par le recours aux données sur un analogue de structure (le bleu de tétrabromophénol) et par l'utilisation de modèles RQSA. Si des incertitudes sont associées à l'utilisation de ces modèles pour estimer les propriétés chimiques et biologiques, il demeure que les méthodes employées ont permis une interprétation significative des renseignements.

Conclusion

D'après les renseignements contenus dans le rapport d'évaluation préalable, le PBTBO ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité ou concentration ou dans des conditions de nature à avoir, immédiatement ou à long terme, un effet nocif sur l'environnement ou sur la diversité biologique, ni à mettre en danger l'environnement essentiel pour la vie.

En conséquence, il est conclu que le PBTBO ne correspond pas à la définition de « substance toxique » énoncée dans l'article 64 de la LCPE (1999). De plus, le PBTBO répond aux critères de la persistance énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000), mais non aux critères de la bioaccumulation tels que définis dans le même règlement.

Références

[ACD] Advanced Chemistry Development, Inc. 2005. ACD/pKa DB. ACD/Labs Release 9.00. Product Version 9.0. Copyright 1994-2005. Accès : <http://www.acdlabs.com>.

[AIEPS] Artificial Intelligence Expert Predictive System. 2003-2007. Version 2.05. Ottawa (Ont.) : Environnement Canada, Division des substances existantes, Division des nouvelles substances. Modèle conçu par Stephen Niculescu. Accès : Environnement Canada, Division des substances existantes, Division des nouvelles substances.

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

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

[BCFBAF] BioConcentration Factor Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 3.00. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2008]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm.

[BIOWIN] Biodegradation Probability Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 4.10. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2009]. 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, chap. 33, partie 5, art. 77. *Gazette du Canada*, Partie III, vol. 22, n° 3. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partIII/1999/g3-02203.pdf>.

Canada. 2000. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*, C.P. 2000-348, 23 mars 2000, DORS/2000-107. *Gazette du Canada*, Partie II, vol. 134, n° 7, p. 607-612. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partII/2000/20000329/pdf/g2-13407.pdf>.

Canada. Ministère de l'Environnement, ministère de la Santé. 2006a. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis d'intention d'élaborer et de mettre en oeuvre des mesures d'évaluation et de gestion des risques que certaines substances présentent pour la santé des Canadiens et leur environnement*. *Gazette du Canada*, Partie I, vol. 140, n° 49, p. 4109-4117. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partI/2006/20061209/pdf/g1-14049.pdf>.

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

Canada. Ministère de l'Environnement, ministère de la Santé. 2007. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis de quatrième divulgation d'information technique concernant les substances identifiées dans le Défi*. *Gazette du Canada*, Partie I, vol. 141, n° 46, p. 3192-3196. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partI/2007/20071117/pdf/g1-14146.pdf>.

CATABOL. [modèle informatique]. c2004–2008. Version 5.10.2. Bourgas (BG) : Bourgas Prof. Assen Zlatarov University, Laboratory of Mathematical Chemistry. Accès : <http://oasis-lmc.org/?section=software&swid=1>

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 [Internet]. 2004. Version 1.00.. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2009] Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm.

Environnement Canada. 2007. Données sur les substances du lot 4 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 quatrième lot du Défi*. Préparé par : Environnement Canada, Programme des substances existantes.

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

Environnement Canada. 2008b. 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 substances existantes.

Environnement Canada. 2008c. IGETA report (62625-32-5 IGETA report 2008-05-30). Ébauche. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes.

ETAD (Ecological and Toxicological Association of Dyes and Organic Pigments Manufacturers). 1992. Draft Guidelines for the Assessment of Environmental Exposure to Dyestuffs.

ETAD (Ecological and Toxicological Association of Dyes and Organic Pigments Manufacturers). 1995. Health & Environmental Information on Dyes Used in Canada. An overview to assist in the implementation of the New Substances Notification Regulation under the Canadian Environmental Protection Act. Prepared by the ETAD Canadian Affiliates. Juillet 1995. Report 7/21/95.

Franco, I., Leita, L., Vischetti, C., de Nobili, M. 1999. Adsorption of five model organic compounds on a peat at different stages of drying. *J. Soil Contamination.* 8(4):423-440.

[HENRYWIN] Henry's Law Constant Program for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 3.10. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2008]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm.

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

[KOCWIN] Organic Carbon Partition Coefficient Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 2.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2009]. 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) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution

Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm.

Kulichenko, S.A., Fesenko, S.A., Fesenko, N.I. 2001. Color indicator system for acid-base titration in aqueous micellar solutions of the cationic surfactant tridecylpyridinium. *J. Anal. Chem.* 56(11):1002-1006.

[MPBPWIN] Melting Point Boiling Point Program for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.43. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm.

[NCI] National Chemical Inventories [base de données sur CD-ROM]. 2006. Columbus (OH) : American Chemical Society. [consulté en mai 2008]. Accès : <http://www.cas.org/products/cd/nci/index.html>.

[OASIS Forecast] Optimized Approach based on Structural Indices Set [Internet]. 2005. Version 1.20. Bourgas (Bulgarie) : Laboratory of Mathematical Chemistry. [consulté en mai 2009]. Accès : <http://oasis-lmc.org/?section=software>.

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 1995. OECD Guideline for Testing of Chemicals. Test No. 107 Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method [Internet]. Guideline adopted 27 July 1995. Paris (FR): OECD, Environment Directorate. Available from: <http://oberon.sourceoecd.org/vl=1533603/cl=13/nw=1/rpsv/ij/oecdjournals/1607310x/v1n1/s7/p1>

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2000. OECD Guideline for Testing of Chemicals. Test No. 106 – Adsorption – Desorption Using a Batch Equilibrium Method [Internet]. Guideline adopted 21st January 2000. Paris (FR): OECD, Environment Directorate. Available from: <http://oberon.sourceoecd.org/vl=1627150/cl=27/nw=1/rpsv/ij/oecdjournals/1607310x/v1n1/s6/p1>

O'Neil, M.J. (éd.). 2001. The Merck Index - An encyclopaedia of chemicals, drugs, and biologicals. 13^e édition. Whitehouse Station (NJ) : Merck and Co., Inc. p. 1447.

Pagga, U., Brown, D. 1986. The degradation of dyestuffs: Part II Behaviour of dyestuffs in aerobic biodegradation tests. *Chemosphere*. 15(4):478-491.

[PCKOCWIN] Organic Carbon Partition Coefficient Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.66. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2008]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm.

pH-meter.Info [Internet]. c2005. Marki (Pologne) : ChemBuddy. [consulté le 24 juillet 2008]. Accès : <http://www.ph-meter.info/pH-measurements-indicators>.

[PhysProp] Interactive PhysProp Database [base de données sur Internet]. 2006. Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2008]. Accès : <http://www.syrres.com/esc/physdemo.htm>.

[TOPKAT] Toxicity Prediction Program [Internet]. 2004. Version 6.2. San Diego (CA) : Accelrys Software Inc. [consulté en mai 2008]. Accès : <http://www.accelrys.com/products/topkat/index.html>.

[US EPA] U.S. Environmental Protection Agency. 2002. PBT Profiler Methodology [Internet]. Washington (DC) : U.S. EPA, Office of Pollution Prevention and Toxics. Accès : <http://www.pbtprofiler.net/methodology.asp>.

[WSKOWWIN] Water Solubility for Organic Compounds Program for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.41. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm.

Zeroual, Y, Kim, BS, Kim, CS, Blaghen, M, Lee, KM. 2006. Biosorption of bromophenol blue from aqueous solutions by *Rhizopus stolonifer* biomass. Water, Air, Soil Poll. 177: 135-146.

Annexe 1 – Sommaire de rigueur d'études

Évaluation de données expérimentales selon la méthode de Kollig (Kollig, 1998)

Question	Pondération	Réponse	Note
Référence : Franco, I., Leita, L., Vischetti, C., de Nobili, M. 1999. Adsorption of five model organic compounds on a peat at different stages of drying. <i>J. Soil Contamination</i> 8(4):423-440.			
Substance d'essai : Bleu de tétrabromophénol (n° CAS 115-39-9)			
Propriétés physiques et chimiques mesurées : pK _a , K _{oe} , K _{co}			
Pourriez-vous répéter l'expérience avec l'information disponible?	5	Seulement en partie, d'après les renseignements contenus dans l'article. L'un des auteurs de l'étude a été contacté par un représentant d'Environnement Canada et a fourni des éclaircissements sur la méthodologie.	3
Un objectif clair est-il énoncé?	1	Oui	1
La qualité de l'eau est-elle caractérisée ou précisée (distillée ou désionisée)?	2	Oui, eau distillée	2
Les résultats sont-ils présentés de façon détaillée, claire et compréhensible?	3	Passable	1,5
Les données proviennent-elles d'une source primaire plutôt que d'un article cité?	3	Oui, source primaire	3
La substance a-t-elle été testée à des concentrations inférieures à sa limite de solubilité dans l'eau?	5	Oui	5
Y avait-il absence de particules?	2	Non mentionné	0
A-t-on fait un essai avec une substance de référence ayant une constante connue?	3	Non, mais une comparaison effectuée par un évaluateur d'Environnement Canada entre les données mesurées dans cette étude et d'autres données publiées sur les mêmes substances a montré que les valeurs citées dans cette étude sont du même ordre de grandeur que celles provenant d'autres sources. Voir le tableau ci-dessous, dans la section « Autres commentaires ».	1,5
D'autres processus intervenant dans le devenir ont-ils été pris en considération?	5	L'hydrolyse et la photolyse n'ont pas été prises en compte. Cependant, ces processus sont peu susceptibles d'avoir une	5

		incidence sur le devenir du bleu de tétrabromophénol en solution.	
A-t-on fait un essai témoin (à blanc)?	3	Oui, pour l'expérience de mise à l'équilibre (K_{co}); s.o. pour la détermination du pK_a et du K_{oe} .	3
La température a-t-elle été maintenue constante?	5	Oui, pour l'expérience de mise à l'équilibre (K_{co}); T^o non mentionnée pour la détermination du pK_a et du K_{oe} .	3
L'expérience a-t-elle eu lieu à une température proche de la température ambiante (15 à 30 °C)?	3	Oui (25 °C) pour le K_{co} ; T^o non mentionnée pour la détermination du pK_a et du K_{oe} .	2
La pureté de la substance est-elle précisée (> 98 %)?	3	Non	0
L'identité de la substance a-t-elle été attestée?	3	En partie (le nom chimique, la masse moléculaire et le maximum d'absorption fournis correspondent à la substance portant le n° CAS 115-39-9, mais pas la structure chimique); le n° CAS des substances d'essai n'a pas été fourni. L'un des auteurs de l'étude a été contacté et a indiqué que le bleu de tétrabromophénol sous forme de sel (n° CAS 62625-28-9) avait été utilisé. Environnement Canada considère que la forme dissociée (ionique) de cette dernière est équivalente à la forme dissociée de la substance portant le n° CAS 115-39-9.	2
La source de la substance est-elle indiquée?	1	Non	0
Résultats :	$pK_a = 4,0$ K_{oe} (forme ionique) = 0,00085 K_{co} (pour une série d'échantillons de tourbe – % CO corrigé par l'évaluateur d'Environnement Canada) : Forme ionique = 0,0012 à 0,0095		
Note globale :	33/47 ou 70 %		
Code de fiabilité d'EC :	2		
Catégorie de fiabilité (élevée, satisfaisante, faible) :	Satisfaisante		
Note	Évaluation indépendante par trois évaluateurs d'Environnement Canada (mai 2008)		

Autres commentaires (de la part des évaluateurs d'Environnement Canada)

- Le sorbant utilisé dans cette expérience de mise à l'équilibre était de la sphaigne plutôt qu'un sol. Étant donné que les caractéristiques d'adsorption-désorption sont habituellement utiles pour évaluer le comportement d'une substance dans les sols, il aurait été idéal d'employer des échantillons de sol dans le cadre de cette expérience. En effet, on peut s'attendre à ce que la capacité de sorption de la sphaigne soit beaucoup plus élevée que celle des sols en raison de la teneur élevée de cette matière en carbone organique. Cependant, comme l'adsorption a pu être décrite à l'aide des isothermes de Freundlich (tel que l'indiquent les valeurs $1/n$ dans le tableau 3) et compte tenu du fait que la teneur en CO de chaque échantillon a été fournie, l'évaluateur a pu calculer les valeurs de K_{co} en fonction du K_f mesuré par les auteurs.
- Le fait que les valeurs de K_{co} pour le bleu de tétrabromophénol étaient très faibles, même avec de la sphaigne sèche (capacité de sorption très élevée) indique que l'hydrophobicité du bleu de tétrabromophénol est très faible.
- Pour l'expérience de mise à l'équilibre, les substances d'essai auraient dû être dissoutes dans du $CaCl_2$ 0,01 M plutôt que dans de l'eau distillée dans le but d'améliorer la centrifugation et de réduire le plus possible les échanges cationiques (Ligne directrice 106 de l'OCDE, 2000).
- Le ratio optimal sorbant/soluté a été déterminé lors d'expériences préliminaires.
- Le pH de la phase aqueuse avant et/ou après l'adsorption n'a pas été précisé. Ce facteur a une grande incidence sur l'adsorption dans le cas des substances ionisables. On a communiqué avec l'un des auteurs de l'étude pour clarifier cet aspect. Les précisions obtenues sont les suivantes : les expériences de mise à l'équilibre ont été menées dans des suspensions de sphaigne dans l'eau dont le pH correspondait à celui imposé par l'effet tampon des groupements fonctionnels de la sphaigne (pH = 4,5), comme cela se produit effectivement sur le terrain lorsque des xénobiotiques sont présents à faible concentration et que le pH est imposé par le sol. Pour s'assurer que le pH ne variait pas, on a dissous les substances dans de l'eau distillée, et le pH de la solution a été rajusté en fonction de celui d'une suspension de sphaigne dans l'eau exempte de substances. Par conséquent, l'isotherme d'adsorption reflète une situation où la substance était en grande partie ionisée.
- Bien que les auteurs disent avoir mesuré la solubilité dans l'eau des substances d'essai, ils ne semblent pas l'avoir fait pour le bleu de tétrabromophénol car ils citent la valeur établie par O'Neil (2001) pour cette propriété (tableau 2).
- Les auteurs n'ont pas indiqué comment ils avaient réussi à mesurer un K_{oe} à la fois pour les formes non ionique et ionique du bleu de tétrabromophénol (par exemple par utilisation d'un tampon). En outre, ils n'ont pas précisé le pH de la phase aqueuse durant la prise de mesures. Selon la Ligne directrice 107 de l'OCDE, intitulée *Coefficient de partage (n-octanol/eau) : méthode par agitation en flacon* : « La dissociation ou l'association des molécules dissoutes entraîne des déviations par rapport à la loi de partage (Ligne directrice 107 de l'OCDE, 1995). Ces déviations se manifestent par le fait que le coefficient de partage devient dépendant de la concentration. Les substances ionisables ne doivent être mesurées que sous leur forme non ionique (acide libre ou base libre), obtenue grâce à un

tampon approprié dont le pH a été ajusté à au moins une unité en dessous (acide libre) ou au-dessus (base libre) du pK. » On a communiqué avec l'un des auteurs de l'étude pour clarifier cette question d'ordre méthodologique. Les précisions obtenues sont les suivantes : le K_{oe} de la forme non ionique du bleu de tétrabromophénol a été déterminé dans une solution d'eau non tamponnée acidifiée à un pH de 1 à 1,5 à l'aide de 0,020 mL de HCl concentré, et le K_{oe} de la forme ionique a été déterminé dans une solution alcalinisée à l'aide d'une quantité semblable de NaOH 0,5 M. L'auteur reconnaît que cette méthode n'est pas habituelle. Elle estime cependant que les valeurs de K_{oe} mesurées dans des solutions tamponnées pourraient être la cause d'erreurs en raison de la formation possible de paires d'ions, d'associations intermoléculaires à force ionique élevée, etc. Elle croit également que le comportement dans l'environnement de substances comme le bleu de tétrabromophénol, que l'on s'attend à trouver sous forme ionisée en milieu naturel, ne peut être prédit en fonction du K_{oe} de la molécule non ionisée.

- La méthode de spectroscopie UV-visible semble appropriée pour mesurer la concentration des substances à l'étude ici compte tenu de leur maximum d'absorption et de leur structure chimique (nombreuses doubles liaisons).
- Comme les auteurs n'ont pas réalisé d'essais avec des substances de référence ayant une constante connue, l'évaluateur d'Environnement Canada a vérifié les données publiées afin de valider (ou d'invalidier) les résultats mesurés dans le cadre de l'étude. Cette recherche a permis de trouver des données expérimentales pour le bleu de tétrabromophénol et pour d'autres substances faisant l'objet de l'étude. Selon ces données, les valeurs de solubilité dans l'eau, de pK_a et de K_{oe} établies dans le cadre de l'étude sont du même ordre de grandeur que celles provenant d'autres sources (voir le tableau ci-dessous). Il n'existe aucune donnée publiée permettant de valider les valeurs de K_{co} mesurées, mais on trouve suffisamment de précisions d'ordre méthodologique dans l'article et dans les réponses fournies par l'auteur pour pouvoir considérer comme fiable la valeur établie pour la forme ionique du bleu de tétrabromophénol. De plus, même si on ne fournit pas de valeur de K_{co} réelle, un article publié par Zeroual *et al.* en 2006 indique que le bleu de tétrabromophénol ne s'adsorbe pas sur la matière organique (biomasse fongique) à un pH de 6, c'est-à-dire lorsqu'il se trouve sous forme ionique.

	Solubilité dans l'eau (mg/L à 25 °C)	pK_a	K_{oe}
Orangé d'acridine (n° CAS 494-38-2)	873 (présente étude) comparativement à 700 (PhysProp, 2006)	-	-
Acide 3,5-dinitrobenzoïque (n° CAS 99-34-3)	986 (présente étude) comparativement à 1 350 (PhysProp, 2006)	3,4 (présente étude) comparativement à 2,82 (PhysProp, 2006)	11,22 (présente étude) comparativement à 35,48 (PhysProp, 2006)
Bleu de tétrabromophénol (n° CAS 115-39-9)	-	4,0 (présente étude) comparativement à 4,1 (Kulichenko <i>et al.</i> , 2001) comparativement à 4,0 (O'Neil, 2001)	-