

**Évaluation préalable pour le Défi concernant la
dianiline, produits de réaction avec le styrène et le
2,4,4-triméthylpentène)**

**Numéro de registre du Chemical Abstracts Service
68921-45-9**

**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 de la dianiline, produits de réaction avec le styrène et le 2,4,4-triméthylpentène (BNST), dont le numéro de registre du Chemical Abstracts Service est 68921-45-9. Une priorité élevée a été accordée à l'évaluation préalable de cette substance inscrite au Défi, car elle répondait 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 l'on croit qu'elle est commercialisée au Canada.

L'évaluation des risques que présente la BNST 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 des substances. Par conséquent, la présente évaluation est axée sur les renseignements utiles à l'évaluation des risques pour l'environnement.

La BNST est une substance organique qui n'est pas produite naturellement dans l'environnement. Entre 100 001 et 1 000 000 kg de BNST ont été importés au Canada en 2006, et entre 1 000 000 et 10 000 000 kg ont été fabriqués au cours de la même année. La quantité de BNST fabriquée et importée au Canada ainsi que les utilisations dispersives de cette substance indiquent que des quantités importantes pourraient être rejetées dans l'environnement canadien.

La majorité de la BNST fabriquée au Canada est exportée. Parmi les quantités importées et utilisées au Canada, on estime que 98,3 % sont chimiquement transformées, brûlées, incinérées ou réutilisées pendant leur utilisation et après leur élimination. D'après les estimations, de petites fractions sont rejetées pendant l'utilisation dans les égouts (0,9 %) et le sol (0,6 %). Un total de 0,2 % devrait se retrouver dans les lieux d'élimination des déchets. Environ 0,2 % devrait être rejetée dans les égouts pendant le nettoyage des réservoirs utilisés pour transporter les emballages d'additifs contenant de la BNST.

La BNST a une solubilité très faible dans l'eau et une faible volatilité. De plus, comme elle est hydrophobe, elle tend à se distribuer dans la phase particulaire et à passer dans les tissus adipeux (matières grasses) des organismes. Pour ces raisons, on devrait retrouver la BNST surtout dans le sol et les sédiments. Elle ne devrait pas être présente en quantités importantes dans d'autres milieux. Elle ne devrait pas non plus être transportée dans l'atmosphère sur de grandes distances.

D'après ses propriétés physiques et chimiques, la BNST ne devrait pas se dégrader rapidement dans l'environnement. Elle devrait donc être persistante dans l'eau, le sol et les sédiments. La BNST a également un potentiel de bioaccumulation dans les organismes et peut se bioamplifier dans les chaînes alimentaires trophiques. La BNST répond donc aux critères de la persistance et de la bioaccumulation prévus dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*. De plus, les estimations de la toxicité

aquatique aiguë semblent indiquer que la substance présente un risque modéré à fort pour les organismes aquatiques.

Étant donné qu'il est actuellement impossible de prévoir de façon fiable les risques à long terme associés aux substances persistantes et bioaccumulables, la pertinence des estimations de risques quantitatives s'en trouve restreinte. De plus, puisque les accumulations de ces substances peuvent être généralisées et difficiles à renverser, une intervention prudente face à l'incertitude est justifiée.

D'après les renseignements inclus dans la présente d'évaluation préalable, il est conclu que la BNST pénètre 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.

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, s'il y a lieu, appuyer la vérification des hypothèses formulées au cours de l'évaluation préalable et, le cas échéant, l'efficacité des mesures de contrôle possibles définies à l'étape de la gestion des risques.

Compte tenu des renseignements disponibles, la BNST remplit au moins un des critères prévu à l'article 64 de la LCPE (1999). La BNST est persistante et bioaccumulable au sens des règlements, que sa présence dans l'environnement soit due principalement à l'activité humaine et qu'elle n'est pas une substance inorganique d'origine naturelle ou un radionucléide d'origine naturelle.

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 elles 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 en vue d'une évaluation plus détaillée ou de recommander son inscription sur la Liste des substances toxiques de l'annexe 1 de la *Loi* et, s'il y a lieu, sa quasi-élimination.

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

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

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

Dans le cadre de la catégorisation de la Liste intérieure des substances, l'évaluation des risques que comporte la dianiline, produits de réaction avec le styrène et le 2,4,4-triméthylpentène pour l'environnement a été jugée, car cette substance est persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques, et semble être commercialisée au Canada. Le volet du Défi portant sur la dianiline, produits de réaction avec le styrène et le 2,4,4-triméthylpentène a été lancé le 17 novembre 2007 dans la *Gazette du Canada* 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. Le Défi a permis de recueillir des renseignements sur les utilisations, la composition et les dangers inhérents à la substance.

Même si l'évaluation des risques que présente la dianiline, produits de réaction avec le styrène et le 2,4,4-triméthylpentène 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 présente pas un grave risque pour la santé humaine, compte tenu du classement attribué par d'autres organismes nationaux ou internationaux quant à sa cancérogénicité, à sa génotoxicité ou à sa toxicité sur le plan du développement ou de la reproduction. La présente évaluation est donc axée principalement sur les renseignements présentant de l'intérêt pour l'évaluation des risques touchant l'environnement.

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

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

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

La présente évaluation préalable prend en considération les renseignements sur les propriétés chimiques de la substance, ses dangers, ses utilisations et l'exposition à celle-ci, y compris les données supplémentaires fournies 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'au 25 mars 2009. Les études importantes ont fait l'objet d'une évaluation critique et, en général, seuls les résultats des études de qualité ont été utilisés dans la formulation des conclusions, même si d'autres résultats d'études et de la modélisation peuvent avoir été pris en compte dans l'établissement du poids de la preuve. Lorsqu'ils étaient disponibles et pertinents, les renseignements contenus dans les évaluations des dangers effectuées par d'autres instances ont été pris en considération. 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 de ces ministères. Elle 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

La dianiline, produits de réaction avec le styrène et le 2,4,4-triméthylpentène (n° CAS 68921-45-9; BNST) fait partie des UVCB (substances de composition inconnue ou variable, produits de réactions complexes ou matières biologiques). La BNST est un produit de réaction de la diphénylamine substituée avec un mélange de styrène et d'isooctane (aussi appelé di-isobutylène) [Environnement Canada, 2009a]. Le produit de réaction est un mélange de diphénylamines (les variations du mélange viennent du type et de l'importance de la substitution des phényles), dont la nature dépend du rapport entre le styrène et le di-isobutylène utilisé durant la fabrication. La formation d'espèces monoalkylées est possible là où s'ajoute un styrène ou un di-isobutylène (Environnement Canada, 2009a).

Aux fins de la présente évaluation, l'examen de la BNST s'appuiera sur deux structures représentatives des UVCB. Comme la BNST n'est pas un composé chimique défini, elle peut être représentée par de nombreuses structures permettant d'étudier diverses propriétés du mélange et de trouver la meilleure caractérisation possible. Le tableau 1a contient des informations sur la BNST. Les tableaux 1b et 1c montrent les structures représentatives choisies. Les renseignements sur les sources, les utilisations et les rejets portent sur la BNST, car les données recueillies dans le cadre du Défi font référence au n° CAS 68921-45-9. Toutefois, l'étude des propriétés et des risques se fonde sur les structures représentatives sélectionnées.

La structure 1 fait partie des huit membres de la catégorie des diphénylamines substituées soumis par le Rubber and Plastic Additives (RAPA) Panel de l'American Chemistry Council pour l'examen préalable de l'Environmental Protection Agency des États-Unis caractérisant les dangers issus des substances chimiques produites en grande quantité (U.S. EPA, 2008). Cette structure (tableau 1b) constitue un profil très dangereux possible pour le mélange représentant le n° CAS 68921-45-9. Cependant, son pourcentage en poids dans le mélange qu'est le n° CAS 68921-45-9 est inconnu.

La structure 2 est la composante principale de l'UVCB dianiline, produits de réaction avec le 2,4,4-triméthylpentène (n° CAS 68411-46-1). Cette diphénylamine monosubstituée est analogue à la composante principale de la BNST. Cette structure représentative ne contient pas de styrène, ce qui augmenterait l'hydrophobie et potentiellement la bioaccumulation de la substance.

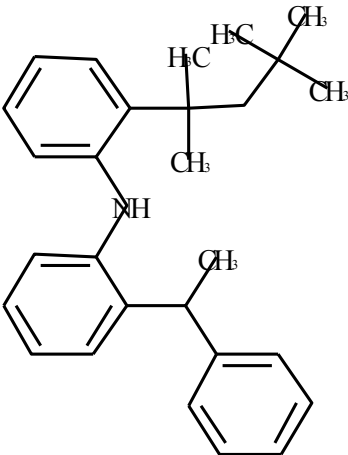
Tableau 1a. Identité de la substance – BNST

Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS)	68921-45-9
Nom dans la Liste intérieure des substances	Dianiline, produits de réaction avec le styrène et le 2,4,4-triméthylpentène

(LIS)	
Noms dans les National Chemical Inventories (NCI)¹	<i>Benzenamine, N-phenyl-, reaction products with styrene and 2,4,4-trimethylpentene (TSCA, ENCS, AICS, PICCS, ASIA-PAC, NZIoC)</i> <i>Dianiline, produits de réaction avec le styrène et le 2,4,4-triméthylpentène (EINECS)</i>
Autres noms	<i>Diphenylamine reaction product with styrene and diisobutylene</i> <i>Reaction product of N-phenylbenzenamine, ethenylbenzene, and diisobutylene</i> <i>Amines</i>
Groupe chimique	UVCB
Principale classe chimique ou utilisation	Diphénylamines

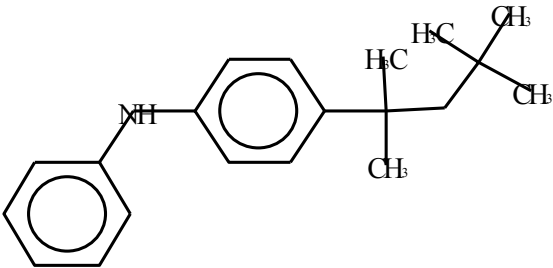
¹ National Chemical Inventories (NCI), 2006 : AICS (inventaire des substances chimiques de l'Australie); ASIA-PAC (listes des substances de l'Asie-Pacifique); EINECS (Inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes); ENCS (inventaire des substances chimiques existantes et nouvelles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

Tableau 1b. Identité de la substance pour la structure représentative 1

Formule chimique représentative	C ₂₈ H ₃₅ N
Structure chimique représentative utilisée dans les modèles d'estimation	
SMILES¹ utilisé dans les modèles d'estimation	<chem>CC(C1=CC=CC=C1NC2=CC=CC=C2C(C)(C)CC(C)(C)C3=CC=CC=C3</chem>
Masse moléculaire	385,60 g/mol

¹ Simplified Molecular Line Input Entry System

Tableau 1c. Identité de la substance pour la structure représentative 2

Formule chimique représentative	C ₂₀ H ₂₇ N
Structure chimique représentative utilisée dans les modèles d'estimation	
SMILES¹ utilisé dans le modèle d'estimation	CC(C)(CC(C)(C)C)C1=CC=C(NC2=CC=CC=C2)C=C1
Masse moléculaire	281,44

¹ Simplified Molecular Line Input Entry System

Propriétés physiques et chimiques

Aucune donnée expérimentale n'est disponible pour les deux structures choisies pour représenter la BNST.

Les tableaux 2a et 2b contiennent les propriétés physiques et chimiques modélisées des structures représentatives.

Tableau 2a. Propriétés physiques et chimiques de la structure 1

Propriété	Type	Valeur ¹	Température (°C)	Référence
-----------	------	---------------------	------------------	-----------

Propriété	Type	Valeur ¹	Température (°C)	Référence
Point de fusion (°C)	Modélisé	180,83		MPBPWIN, 2000
Point d'ébullition (°C)	Modélisé	462,34		MPBPWIN, 2000
Masse volumique (kg/m³)	Inconnu	1 010	15,6	R.T. Vanderbilt, 2007
Pression de vapeur (Pa)	Modélisé	$7,71 \times 10^{-7}$ ($5,78 \times 10^{-9}$ mm Hg)	25	MPBPWIN, 2000
Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mol)	Modélisé	$1,01 \times 10^{-1}$ ($9,869 \times 10^{-7}$)		HENRYWIN, 2000
Log K_{oe} (coefficient de partage octanol-eau) [sans dimension]	Modélisé	9,21		KOWWIN, 2000
Log K_{co} (coefficient de partage carbone organique-eau) [sans dimension]	Modélisé	5,97		PCKOCWIN, 2000
Solubilité dans l'eau (mg/L)	Modélisé	$5,11 \times 10^{-5}$	25	WSKOWWIN, 2000
pK_a (constante de dissociation acide) [sans dimension]	Modélisé	2,14		ACD/pK _a DB, 2005

¹ Les valeurs et les unités présentées entre parenthèses sont celles indiquées à l'origine par les auteurs ou celles estimées à l'aide des modèles.

Tableau 2b. Propriétés physiques et chimiques de la structure 2

Propriété	Type	Valeur ¹	Température (°C)	Référence
Point de fusion (°C)	Modélisé	120,09		MPBPWIN, 2000
Point d'ébullition (°C)	Modélisé	361,98		MPBPWIN, 2000
Masse volumique (kg/m³)	Inconnu	1 010 (1,01 g/mL)	15,6	R. T. Vanderbilt, 2007
Pression de vapeur (Pa)	Modélisé	$1,04 \times 10^{-3}$ ($7,8 \times 10^{-6}$ mm Hg)	25	MPBPWIN, 2000
Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mol)	Modélisé	$8,54 \times 10^{-1}$ ($8,42 \times 10^{-6}$ atm·m ³ /mol)		HENRYWIN, 2000
Log K_{oe} (coefficient de partage octanol-eau) [sans dimension]	Modélisé	7,05		KOWWIN, 2000
Log K_{co} (coefficient de partage carbone organique-eau) [sans dimension]	Modélisé	4,78		PCKOCWIN, 2000
Solubilité dans l'eau (mg/L)	Modélisé	0,014	25	WSKOWWIN, 2000

Propriété	Type	Valeur ¹	Température (°C)	Référence
pK_a (constante de dissociation acide) [sans dimension]	Modélisé	1,39		ACD/pK _a DB, 2005

¹ Les valeurs et les unités présentées entre parenthèses sont celles indiquées à l'origine par les auteurs ou celles estimées à l'aide des modèles.

Sources

Ni la BNST ni ses structures représentatives ne sont déclarées comme étant naturellement produites dans l'environnement.

Les renseignements fournis dans le cadre du Défi indiquent que moins de cinq entreprises en ont fabriqué entre 1 000 000 et 10 000 000 kg et que moins de cinq entreprises en ont importé entre 100 001 et 1 000 000 kg, au Canada, en 2006 (Environnement Canada, 2008a). Une entreprise a signalé une importation de 405 600 kg pour des produits chimiques divers et la fabrication de préparations. Un total de 12 entreprises ont montré un intérêt pour cette substance.

Selon les renseignements reçus, le secteur du pétrole et de la fabrication des produits chimiques est le principal secteur industriel qui utilise la BNST (Environnement Canada, 2008a)

Les quantités que les entreprises ont déclaré avoir fabriquées, importées ou commercialisées au Canada durant l'année civile 1986 se situaient entre 100 000 kg et 1 000 000 kg (Environnement Canada, 1986). Le nombre de déclarants pour les années civiles 1984 à 1986 était de moins de cinq.

Ailleurs, la BNST a été identifiée comme une substance chimique produite en grande quantité (HPV) d'après le HPV Challenge Program de l'Environmental Protection Agency des États-Unis (U.S. EPA). Selon les renseignements recueillis par l'U.S. EPA, les importations et les utilisations de la BNST aux États-Unis, en 1990, 1994 et 2002, totalisaient entre 450 000 kg et 45 000 000 kg par année (U.S. EPA, 2006). Selon la base de données des pays nordiques sur les substances dans les préparations (SPIN, 2006), ce produit chimique a été utilisé en Suède et au Danemark de 1999 à 2004.

Utilisations

Les renseignements fournis dans le cadre du Défi (Environnement Canada, 2008a) indiquent qu'au Canada la BNST sert d'agent lubrifiant ou d'additif au lubrifiant. Ces utilisations peuvent être dispersives.

Durant l'année civile 1986, alors qu'entre 100 000 et 1 000 000 kg de BNST étaient commercialisés au Canada, moins de cinq déclarants ont rapporté les utilisations

suivantes : antioxydant/inhibiteur de corrosion/inhibiteur de ternissement/entraîneur/agent anti-incrustant; agent lubrifiant/additif au lubrifiant/démoulant; produits chimiques organiques et industriels.

La BNST figure sur la liste des substances chimiques produites en grande quantité de l'Environmental Protection Agency des États-Unis. La Norvège, la Suède et le Danemark ont déclaré l'avoir utilisé de 1999 à 2005. La Norvège a aussi déclaré l'avoir utilisé comme lubrifiant et additif (SPIN, 2006).

Au final, la BNST sert principalement d'antioxydant dans les huiles à moteur d'automobile. On la retrouve aussi, marginalement, comme antioxydant dans les lubrifiants commerciaux ou industriels. Les antioxydants s'ajoutent aux huiles lubrifiantes pour les stabiliser et empêcher la polymérisation qui mène à la formation de résidus qui encrassent le moteur. Une étude technique commandée par Environnement Canada et rédigée par MTN Consulting Associates (Environnement Canada, 2009a) montre que la quantité de BNST présente dans les huiles à moteur d'automobile et dans les huiles lubrifiantes commerciales et industrielles varie de 0,20 à 0,25 %.

Rejets dans l'environnement

Outil de débit massique

Un outil basé sur le débit massique a été conçu pour estimer les rejets environnementaux potentiels de la substance à différentes étapes de son cycle de vie (Environnement Canada, 2008b). Les données empiriques sur les rejets de substances spécifiques dans l'environnement sont rares. On estime donc, pour chaque type d'utilisation connue de la substance, 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.

Les hypothèses et les paramètres d'entrée utilisés pour faire les estimations des rejets sont fondés sur des renseignements obtenus de diverses sources dont les réponses aux enquêtes menées conformément à la réglementation, les données de Statistique Canada, les sites Web des fabricants et, les bases de données et documents techniques. À cette fin, les facteurs d'émission sont particulièrement utiles; ils sont généralement exprimés comme la fraction d'une substance rejetée dans l'environnement, notamment durant sa fabrication, sa transformation et son utilisation associées aux procédés industriels. Ces données découlent notamment de documents sur des scénarios d'émission, souvent élaborés sous les auspices de l'OCDE, et d'hypothèses par défaut utilisées par différents organismes internationaux de réglementation des produits chimiques. Les renseignements fournis par des entreprises dans le cadre du Défi, pendant la période de commentaires du public, ont été intégrés à certaines hypothèses. Le degré d'incertitude associé à la masse de la substance en circulation et à la quantité rejetée dans l'environnement augmente généralement vers la fin du cycle de vie.

Tableau 3. Estimation des rejets et des pertes de BNST dans l'environnement, de sa transformation chimique et des quantités transférées aux lieux d'élimination, au moyen de l'outil de débit massique

Devenir	Proportion massique (%) ¹	Étape principale du cycle de vie ²
Rejets dans les milieux récepteurs :		
Sol/égouts ³	1,3	Utilisation par les entreprises et les consommateurs; élimination de lubrifiants usés
Air	0,0	Élimination de résidus de nettoyage de contenants
Égouts ³	0,2	
Transformation chimique, combustion ou incinération	98,3	Utilisation de produits commerciaux ou de consommation. La BNST est conçue pour être consommée pendant le processus de lubrification.
Élimination des déchets	0,2	Élimination de lubrifiants usés

¹ L'estimation des rejets dans l'environnement et de la distribution de la BNST se fonde sur les renseignements contenus dans les documents de l'OCDE portant sur les scénarios d'émissions. Les hypothèses que sous-tendent le calcul de ces estimations sont résumées dans Environnement Canada (2009b).

² Étapes applicables : production; formulation; utilisations industrielles; utilisation par les consommateurs; durée de vie utile de l'article/du produit; élimination des déchets.

³ Eaux usées avant toute forme de traitement.

Les résultats de l'outil de débit massique (Environnement Canada, 2009b) indiquent que la majorité de la BNST devrait subir une transformation chimique (98,3 %). Ce pourcentage comprend la combustion, la transformation chimique, l'incinération et la réutilisation de la BNST. La fraction transférée dans les lieux d'élimination des déchets est relativement petite (0,2 % pour les décharges). D'après des renseignements contenus en majorité dans les documents sur les scénarios d'émissions de l'OCDE concernant la transformation et les utilisations associées à ce type de substance, et d'après ceux issus de la période de commentaires du public (Environnement Canada, 2009b), on estime que 1,5 % de la BNST serait rejetée dans les égouts et dans le sol, totalisant plus de 7 000 kg par année. Cette perte de 1,5% se décompose en 1,0% attribuable aux fuites et aux déversements de BNST dus à son utilisation par les entreprises ou les consommateurs, en 0,3% résultant d'une élimination incorrecte et en 0,2% découlant du nettoyage des contenants servant au transport d'additifs aux lubrifiants.

On suppose que très peu de rejets résultent de la fabrication et du mélange de lubrifiants, puisque le traitement sur place des eaux usées élimine efficacement la BNST. À moins qu'on ne possède des données concernant expressément le taux réel ou potentiel des rejets provenant des décharges et des incinérateurs, l'outil de débit massique ne permet pas de quantifier les rejets à partir de ces sources.

Devenir dans l'environnement

D'après les propriétés physiques et chimiques des structures 1 et 2 (tableau 2a et 2b), les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (tableau 4a et 4b) semblent indiquer que ces substances demeureront principalement dans le sol ou les sédiments, selon le milieu de rejet.

Tableau 4a. Résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III pour la structure 1 (EQC, 2003)

	Fraction de la substance répartie dans chaque milieu (%)			
Rejet de la substance dans :	Air	Eau	Sol	Sédiments
- l'air (100 %)	1	0	80	19
- l'eau (100 %)	0	2	0	98
- le sol (100 %)	0	0	100	0

Tableau 4b. Résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III pour la structure 2 (EQC, 2003)

	Fraction de la substance répartie dans chaque milieu (%)			
Rejet de la substance dans :	Air	Eau	Sol	Sédiments
- l'air (100 %)	31	2	21	46
- l'eau (100 %)	0	4	0	96
- le sol (100 %)	0	1	100	0

Les constantes d'ionisation (pK_a) relativement faibles de 1,39 et 2,14 (tableau 2a et 2b) des deux structures indiquent une ionisation peu importante de ces bases. Dans les milieux aqueux aux pH normaux (6-9), ces substances seront traitées comme étant non ionisantes et présentes dans l'environnement sous leur forme neutre seulement.

Les structures 1 et 2 sont caractérisées par une solubilité dans l'eau négligeable ($5,11 \times 10^{-5}$ et $0,014$ mg/L, respectivement), une faible pression de vapeur ($7,71 \times 10^{-7}$ Pa et $0,001$ Pa), un $\log K_{co}$ élevé (5,97 et 4,78) et une faible constante de la loi de Henry ($1,01 \times 10^{-1}$ Pa·m³/mol et $8,54 \times 10^{-1}$ Pa·m³/mol). Donc, la répartition dans le sol et les sédiments est potentiellement importante, selon le milieu de rejet et les taux de répartition relatifs aux autres processus du devenir comme l'advection et la dégradation.

D'après la valeur estimée de leur $\log K_{co}$, si les structures 1 et 2 étaient rejetées dans le sol, leur adsorption sur place devrait être élevée (c.-à-d. qu'elles devraient être relativement immobiles). D'après leur constante estimée de la loi de Henry, ces substances ne se volatiliseront pas beaucoup à partir des surfaces de sol humides. En raison de leur pression de vapeur, elles ne devraient pas se volatiliser de façon importante à partir des surfaces de sol sèches. En conséquence, si ces deux substances, représentées par les structures 1 et 2, étaient rejetées dans le sol, elles se répartiraient seulement dans

ce milieu, comme le montrent les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (tableaux 4a et 4b).

Si les structures 1 et 2 étaient rejetées dans l'eau, elles devraient s'adsorber fortement sur les sédiments à cause de leur valeur élevée du $\log K_{oe}$ estimée à 9,21 et 7,05, leur valeur du $\log K_{oc}$ (5,97 et 4,78, respectivement) et leur faible solubilité dans l'eau. D'après la constante de la loi de Henry estimée des substances, seulement une faible volatilisation est prévue à partir des surfaces de l'eau. Par conséquent, si l'eau était le milieu récepteur, les deux substances devraient se répartir principalement dans les sédiments et, dans une moindre mesure, demeurer dans l'eau (tableaux 4a et b).

En cas de rejet dans l'air, la structure 1 ne demeurerait pas dans ce milieu (tableau 4a). Étant donné sa très faible pression de vapeur ($7,71 \times 10^{-7}$ Pa) et sa faible constante de la loi de Henry ($1,01 \times 10^{-1}$ Pa·m³/mol), la structure 1 est peu volatile. Conséquemment, si la structure 1 était rejetée seulement dans l'air, elle ne demeurerait pas dans ce milieu, mais elle se répartirait principalement dans le sol et les sédiments (environ 100 %; tableau 4a).

Des quantités modérées de la structure 2 devraient rester dans l'air (tableau 4b). D'après sa pression de vapeur modérée et sa faible constante de la loi de Henry ($8,54 \times 10^{-1}$ Pa·m³/mol), cette substance est semi-volatile. Si elle était rejetée uniquement dans l'air, des quantités modérées y demeureraient, mais le reste se répartirait dans le sol et les sédiments (67 %).

Persistance et potentiel de bioaccumulation

Persistance dans l'environnement

Aucune donnée expérimentale sur la dégradation des structures 1 et 2 n'a été trouvée. Les tableaux 5a et 5b résument les résultats des modèles de relations quantitatives structure-activité (RQSA) simulant la dégradation dans divers milieux naturels.

Tableau 5a. Données modélisées sur la dégradation de la structure 1

Processus du devenir	Modèle et fondement du modèle	Résultat	Demi-vie prévue (jours)
AIR			
Oxydation atmosphérique	AOPWIN, 2000	$t_{1/2} = 0,052$ jour	< 2
Réaction avec l'ozone	AOPWIN, 2000	s.o. ¹	s.o.
EAU			
Hydrolyse	HYDROWIN, 2000	s.o.	s.o.
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 3 : enquête d'expert (biodégradation ultime)	1,73	> 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 4 : enquête	2,8	> 182

	d'expert (biodégradation primaire)		
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 5 : MITI, probabilité linéaire	-0,308	> 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 6 : MITI, probabilité non linéaire	0,001	> 182
Biodégradation (aérobie)	TOPKAT, 2004 probabilité	s.o.	s.o.
Biodégradation (aérobie)	CATABOL, c2004-2008 DBO, % (demande biologique en oxygène)	0,7	> 182

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

Tableau 5b. Données modélisées sur la dégradation de la structure 2

Processus du devenir	Modèle et fondement du modèle	Résultat	Demi-vie prévue (jours)
AIR			
Oxydation atmosphérique	AOPWIN, 2000	$t_{1/2} = 0,053$ jour	< 2
Réaction avec l'ozone	AOPWIN, 2000	s.o. ¹	s.o.

EAU			
Hydrolyse	HYDROWIN, 2000	s.o.	s.o.
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 3 : enquête d'expert (biodégradation ultime)	2,04	> 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 4 : enquête d'expert (biodégradation primaire)	3,03	~ 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 5 : MITI, probabilité linéaire	-0,02	> 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 Sous-modèle 6 : MITI, probabilité non linéaire	0,01	> 182
Biodégradation (aérobie)	TOPKAT, 2004 probabilité	s.o.	s.o.
Biodégradation (aérobie)	CATABOL, c2004-2008 DBO, % (demande biologique en oxygène)	1,0	> 182

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

Les demi-vies prévues pour l'oxydation atmosphérique (0,052 et 0,053 jour; tableau 5a et 5b) des structures 1 et 2 montrent que ces substances sont portées à s'oxyder rapidement dans l'air. Il n'existe pas d'estimation de la demi-vie quant à la réaction de ces substances avec d'autres photooxydants atmosphériques comme l'ozone. Les réactions avec des radicaux hydroxyles devraient donc constituer le plus important processus régissant le devenir des structures 1 et 2 dans l'atmosphère. Leur demi-vie respective de 0,052 et 0,053 jour, résultant des réactions avec ces radicaux, permet de conclure que les structures 1 et 2 ne sont pas persistantes dans l'air.

Les structures 1 et 2 ne contiennent pas de groupes fonctionnels pouvant subir une hydrolyse.

Comme l'indique le tableau 5a, les trois modèles de dégradation ultime (BIOWIN 3, 5 et 6) suggèrent que les structures 1 et 2 ne se biodégradent pas rapidement. Les résultats issus de BIOWIN 4, pour un seuil de 3,0, laissent croire que la biodégradation primaire de la structure 2 se situe autour de 182 jours. Un autre modèle de dégradation ultime (CATABOL) prévoit que les structures 1 et 2 ne subissent pas, dans un délai de 28 jours, de minéralisation avec une probabilité ou un taux de biodégradation dont les valeurs sont comprises dans la plage caractéristique des produits chimiques très persistants. Le modèle CATABOL a prévu un taux de biodégradation de 0,7 % pour la structure 1 et de 1,0 % pour la structure 2, d'après l'essai de biodégradation immédiate OCDE 301 (demande biologique en oxygène [DBO] exprimée en pourcentage), ce qui laisse entendre que les substances sont probablement persistantes (Aronson et Howard, 1999) et que leur demi-vie dans l'eau est supérieure à 182 jours. Une estimation fiable à partir du modèle TOPKAT n'a pu être obtenue.

La diphénylamine (ou DPA; n° CAS 122-39-4) est un autre analogue relativement proche de la BNST. Les données expérimentales sur la diphénylamine (NITE, 2002) indiquent que cette substance a une biodégradation de 0 à 7 % (essai OCDE 301C), ce qui signifie qu'elle ne se biodégrade pas facilement. La BNST est probablement moins biodégradable que la diphénylamine, car sa molécule est plus grosse, plus hydrophobe et elle contient plus de groupes moléculaires dont la structure peut nuire à la biodégradation.

Les résultats de tous les modèles et les données empiriques sur des analogues convergent et montrent que les structures représentatives de la BNST ne subissent pas une dégradation rapide dans l'eau ou dans les boues d'épuration. La plupart des données d'analogues et des prévisions issues des modèles se trouvent au bas du spectre de la dégradation ultime (moins de 10 % en 28 jours) et légèrement plus haut pour la dégradation primaire. Ces résultats concordent avec les caractéristiques structurales d'autres produits chimiques jugés persistants (présence de groupes terminaux alkyle *tert*-butyle ramifiés, anneau de benzène avec plus de deux substituants non hydroxy et log K_{oe} élevé). Vu la quantité et la cohérence des résultats, preuve est faite que la demi-vie de biodégradation dans l'eau est supérieure à 182 jours.

En utilisant un ratio d'extrapolation de 1 : 1 : 4 pour la demi-vie associée à la biodégradation dans l'eau, le sol et les sédiments (Boethling *et al.*, 1995), on obtient aussi une demi-vie supérieure à 182 jours pour la biodégradation dans le sol, et supérieure à

365 jours dans les sédiments. Les structures 1 et 2 sont donc censées être persistantes dans le sol et les sédiments.

Le modèle de transport et de persistance de niveau III (TaPL3) (TaPL3, 2000) a permis d'estimer la distance de transport caractéristique (DTC), définie comme la distance maximale parcourue dans l'air par 63 % de la substance. Beyer *et al.* (2000) ont proposé de considérer le potentiel de transport atmosphérique à grande distance comme étant élevé si la DTC est supérieure à 2 000 km, modéré si elle est de 700 km à 2 000 km et faible si elle est inférieure à 700 km. Le potentiel de transport atmosphérique à grande distance est considéré comme faible d'après l'estimation de la DTC de 56,3 km pour la structure 1 et de 13,3 km pour la structure 2. Ainsi, bien que le comportement de répartition semble indiquer que les composantes de ce mélange au plus faible poids moléculaire pourraient rester dans l'atmosphère (p. ex. structure 2) à cause de taux de photodégradation censés être rapides, aucune de ces structures ne devrait être transportée dans l'atmosphère à une grande distance de ses sources d'émission.

Les données modélisées et celles des structures représentatives (tableaux 5a et 5b) montrent que le BNST, tel que représenté par les structures 1 et 2, répond aux critères de la persistance dans l'eau, le sol et les sédiments (demi-vie dans le sol et l'eau ≥ 182 jours et demi-vie dans les sédiments ≥ 365 jours) du *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000), mais non au critère pour l'air (demi-vie ≥ 2 jours) prévu dans ce règlement.

Potentiel de bioaccumulation

Selon le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000), l'évaluation du potentiel de bioaccumulation des substances doit préférablement s'appuyer sur des mesures du facteur de bioaccumulation (FBA). En effet, le facteur de bioconcentration (FBC) ne tient pas adéquatement compte du potentiel de bioaccumulation des substances par l'alimentation, qui domine pour les substances dont le $\log K_{oe}$ est supérieur à environ 4,0 (Arnot et Gobas, 2003). Les valeurs respectives modélisées du $\log K_{oe}$ pour les structures 1 et 2 (9,2 et 7,0) laissent supposer que ces produits chimiques, s'ils ne sont pas suffisamment métabolisés, ont un fort potentiel de bioaccumulation chez les organismes supérieurs, et ce, par voie alimentaire plutôt que par l'eau. Le $\log K_{oe}$ des deux structures est de l'ordre du coefficient qui s'explique par le FBA (Arnot et Gobas, 2006) et pour lequel les pires cas de bioaccumulation par voie alimentaire sont prévus ($\log K_{oe}$ de 7 à 9).

Faute de données expérimentales sur les FBA et les FBC pour les deux structures, la méthode prévisionnelle utilisée s'appuie sur des modèles de FBA et de FBC existants, comme l'indiquent les tableaux 6a et 6b.

La modélisation cinétique du bilan massique et le modèle de relations quantitatives structure-activité (RQSA; fragment structural) ont servi à estimer le potentiel de

bioaccumulation des structures 1 et 2. La méthode du bilan massique se fonde sur les principes fondamentaux du modèle mécaniste. En conséquence, un produit chimique doit se conformer au principe mécaniste du modèle, soit la diffusion passive. Les structures 1 et 2, des composés organiques neutres, répondent aux exigences et devraient pénétrer et s'accumuler dans les organismes en fonction de leur hydrophobie et de leur lipophilie. On peut donc prévoir la bioaccumulation à l'aide du $\log K_{oe}$. De plus, la structure représentative de la BNST ne contient pas de fragments structuraux hors du domaine d'applicabilité du modèle de bilan massique (p. ex. des groupes ionisants). Le poids moléculaire et le diamètre transversal maximal de ces structures ne sont pas censés être en dehors du domaine d'applicabilité du modèle ($< 1\ 000\text{ g/mol}$, $D_{\max} < 2,0\text{ nm}$). Toutefois, peu de produits chimiques ont fait l'objet d'analyses du potentiel de bioaccumulation pour des $\log K_{oe}$ supérieurs à 9 (Arnot et Gobas, 2006). La valeur estimée du $\log K_{oe}$ pour la structure 1 est de 9,2, ce qui augmente l'incertitude des prévisions pour cette structure, comparativement à la structure 1. Aux valeurs élevées de $\log K_{oe}$ (> 8), une faible efficacité d'assimilation peut limiter la diffusion passive des produits chimiques à partir des intestins d'un poisson vers ses tissus lipophiles (Kelly *et al.*, 2004). Le modèle de bilan massique ne peut intégrer les données sur l'efficacité d'assimilation alimentaire, car celles-ci ne sont pas disponibles pour les structures représentatives. Comme le potentiel de transformation métabolique est faible et que la taille des molécules ne limitera pas la diffusion passive, l'assimilation alimentaire demeurera vraisemblablement élevée et pourra être de l'ordre de la valeur par défaut du modèle, soit environ 50 à 60 %.

La méthode RQSA ayant trait aux modèles de bioaccumulation tient compte des caractéristiques liées à la bioaccumulation et à la biotransformation d'un produit chimique grâce à l'addition de fragments structuraux. Le domaine structural constitue le domaine principal de ces modèles. L'examen des structures 1 et 2 révèle qu'il n'y a vraisemblablement pas de fragments structuraux en dehors du domaine d'applicabilité du modèle de Dimitrov ou du modèle BCFWIN. C'est donc dire que ces deux produits chimiques seraient bien représentés dans les ensembles d'étalonnage et de fragments des modèles. Ces derniers ne prévoient que la bioconcentration à partir de la phase aqueuse, qui devrait être limitée. Pour les substances ayant un $\log K_{oe}$ élevé (> 8), les valeurs de FBC devraient sous-estimer la charge corporelle potentielle de BNST pour les raisons déjà mentionnées. Il subsiste probablement de l'incertitude entourant les prévisions du FBC à cause du $\log K_{oe}$ (9,2) estimé pour la structure 1; toutefois, les prévisions de faible potentiel de bioconcentration correspondent aux valeurs attendues pour des produits chimiques peu solubles dans l'eau.

Les tableaux 6a et 6b montrent les résultats de la modélisation de bioaccumulation, corrigée pour tenir compte d'un éventuel métabolisme. La constante cinétique du métabolisme a été calculée à l'aide de la méthode des fragments structuraux du modèle RQSA BCFBAF, v. 3.00 (voir EPIsuite, 2009), pour un poisson de 10 g.

Tableau 6a. Prévisions des FBA et FBC pour la structure 1, corrigées pour tenir compte de la vitesse de métabolisation

Organisme d'essai	Log K _{oe}	Vitesse de métabolisation (jour ⁻¹)	Paramètre	Valeur en poids humide (L/kg)	Référence
Poisson	9,2	s.o.	FBC	1 098	BCFWIN, 2000
Poisson	9,2	0,004	FBA	207 491	Modèle du FBA de Gobas – niveau trophique intermédiaire avec k _M de 0,004316 (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	9,2	0,004	FBC	197	Modèle du FBC de Gobas – niveau trophique intermédiaire avec k _M de 0,004316 (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	9,2	s.o.	FBC	40	Modèle de référence du FBC avec facteurs atténuants (Dimitrov <i>et al.</i> , 2005)

Tableau 6b. Prévisions des FBA et FBC des poissons pour la structure 2, corrigées pour tenir compte de la vitesse de métabolisation

Organisme d'essai	Log K _{oe}	Vitesse de métabolisation (jour ⁻¹)	Paramètre	Valeur en poids humide (L/kg)	Référence
Poisson	7,0	s.o.	FBC	1258 9	BCFWIN, 2000
Poisson	7,0	0,04	FBA	182 810	Modèle du FBA de Gobas – niveau trophique intermédiaire avec k _M de (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	7,0	0,04	FBC	2409	Modèle du FBC de Gobas – niveau trophique intermédiaire avec k _M de (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	7,0	0,04	FBC	1000	Modèle de référence du FBC avec facteurs atténuants (Dimitrov <i>et al.</i> , 2005)

Des vitesses de métabolisation de 0,004 (structure 1) et 0,04 (structure 2), qui équivalent à des demi-vies d'environ 17 à 173 jours, ont été utilisées à la place d'un potentiel métabolique par défaut de zéro. Étant donné les structures représentatives, ces vitesses sont raisonnables et équivaldraient à une biotransformation dans les poissons variant de modérée à très lente.

Les résultats du modèle de bilan massique pour la structure 1, pour un poisson de niveau trophique intermédiaire, donnent un FBC de 197 et un FBA de 207 491. Quant aux modèles RQSA, le modèle BCFWIN (dans EPIsuite, 2009) a produit un FBC de 1 098 et le modèle de FBC de Dimitrov, un FBC de 40. Le modèle de Dimitrov (Dimitrov *et al.*, 2005) tient compte des facteurs atténuant la bioaccumulation, incluant la biotransformation. L'analyse des voies de biotransformation issue de ce modèle suggère que les substances représentatives de la BNST pourraient être éliminées par *N*-glucuronidation, une réaction de phase II. L'estimation de la probabilité d'occurrence de cette biotransformation s'élève à seulement 22 % et tend à indiquer que la correction du modèle pour le métabolisme est incertaine. Le FBC, sans le métabolisme, est de 251, ce qui est du même ordre que les autres prévisions de ce paramètre. En conclusion, la valeur élevée prévue du log K_{oe} de la structure 1 indique que la biodisponibilité dans la colonne d'eau est limitée, ce qui mène à des valeurs prévues du

FBC très inférieures à 5 000. Néanmoins, le log K_{oe} élevé semble aussi indiquer qu'un apport notable par voie alimentaire est probablement la cause d'un FBA prévu de plus de 5 000.

Les résultats du modèle de bilan massique pour la structure 2, pour des niveaux trophiques intermédiaires, ont produit un FBC de 2 409 L/kg et un FBA de 182 810 L/kg. Quant aux résultats obtenus à l'aide de modèles RQSA, le BCFWIN a prévu un FBC de 12 589 L/kg de poids humide, mais ce modèle ne tient pas compte du potentiel de biotransformation et pourrait donc surestimer le FBC. Le modèle du FBC de Dimitrov prévoit un log FBC de 3,0 (FBC = 1 000) et incorpore le métabolisme. Le modèle suggère aussi que cette substance pourrait être éliminée par *N*-glucuronidation, une réaction de phase II. Toutefois, la probabilité de transformation par voie métabolique s'élève à seulement 22 % et laisse croire que la correction pour le métabolisme est incertaine dans ce modèle. Le log FBC sans métabolisme est de 3,9 (FBC = 7 943 L/kg de poids humide). Le log K_{oe} modérément élevé de la structure 2 ne limite pas complètement la biodisponibilité dans la colonne d'eau. En conséquence, les valeurs prévues du FBC demeurent sous les 5 000 quand on tient compte du potentiel de biotransformation. L'apport important par voie alimentaire indique que le FBA serait supérieur à 5 000, même si l'on considère la biotransformation.

Pour les substances ayant un log K_{oe} élevé, le FBA fait figure de paramètre essentiel pour l'évaluation de la bioaccumulation (p. ex. Gobas et Arnot, 2006). Les valeurs du FBA simulées qui incorporent des facteurs atténuants raisonnables, comme la biotransformation, sont supérieures à 5 000 et sont de l'ordre des valeurs des structures représentatives de la BNST. En conséquence, d'après les valeurs modélisées, les structures et les propriétés des substances représentatives, on dispose de suffisamment d'éléments démontrant que la BNST répond aux critères de la bioaccumulation (FBC ou FBA supérieur à 5 000) prévus 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

Les résultats expérimentaux sur la toxicité en milieu aquatique s'étendent de 0,36 mg/L à 920 mg/L pour plusieurs des analogues des structures 1 et 2 (tableaux 7a et 7b). Les résultats d'une étude de l'immobilisation de *Daphnia magna* pendant 48 heures ont été présentés durant la période de commentaires du public (Présentation d'étude, 2009a). Comme il s'agit d'une étude de fraction adaptée à l'eau, donc soumise à la loi de Raoult¹, les niveaux de charge expliquent en grande partie la solubilité dans l'eau et donc la biodisponibilité d'un mélange chimique. La loi de Raoult prévoit que la solubilité des composants individuels dépend de la fraction molaire et de la pression de vapeur de chaque constituant du mélange, qui à son tour dépend des niveaux de charge. La solubilité dans l'eau peut bien sûr influencer l'exposition dans un essai de toxicité en milieu aquatique. Toutefois, il est difficile de déterminer si les effets observés résultent de l'exposition à la fraction adaptée à l'eau et si celle-ci contient une microdispersion de constituants insolubles qui pourraient s'adsorber aux ouïes des organismes à respiration aquatique et causer des effets « indirects ». La présentation d'étude ne contenait pas suffisamment de détails pour faire la lumière sur ce sujet. Même si l'eau de surface naturelle riche en carbone organique en particules (COP) peut atténuer ce type d'effets indirects en fournissant une surface d'adsorption supplémentaire, il est difficile de déterminer l'atténuation de ces effets observés et quelle quantité de COP se trouve dans les eaux réceptrices canadiennes (c.-à-d. que de faibles niveaux de COP sont possibles). En conséquence, les effets observés rapportés d'après les concentrations mesurées dans l'eau (CE₅₀ et CE₁₀₀) de la BNST sont préférables, car ces concentrations peuvent être associées à une charge corporelle interne qui causerait une narcose cellulaire (effet narcotique), alors que les niveaux de charge ne s'y prêtent pas.

Les données présentées à l'U.S. EPA (2008) concernant la toxicité en milieu aquatique de la benzénamine comprenant des groupements styrène, *N*-phényl- (n° CAS 68442-68-2), laquelle est jugée comme analogue acceptable de la dianiline, produits de réaction avec le 2,4,4-triméthylpentène (n° CAS 68411-46-1; structure 2), indiquent que les effets se font sentir pour une solubilité dans l'eau de 0,41 mg/L et moins. Le promoteur (American Chemistry Council, Rubber and Plastic Additives [RAPA] Panel) signale une valeur de 920 mg/L (96 h CL₅₀) pour la substance portant le n° CAS 68442-68-2; toutefois, l'U.S. EPA ajoute que les résultats de cet essai sont difficiles à interpréter, car l'essai a été effectué au-dessus de la limite de solubilité de la substance dans l'eau.

Une série de prévisions de toxicité en milieu aquatique pour les structures 1 et 2 proviennent des modèles RQSA. La plupart des valeurs prévues sont inférieures au potentiel de solubilité aqueuse de la BNST (selon une étude de fraction adaptée à l'eau),

¹ Voir http://fr.wikipedia.org/wiki/Loi_de_Raoult.

mais certaines de ces prévisions ne sont pas fiables, car leur log K_{oe} se situe à l'extérieur du domaine d'applicabilité du modèle. La limite suggérée du log K_{oe} pour le modèle ECOSAR est d'environ 5,0 pour les prévisions de toxicité aiguë et d'environ 8,0 pour la toxicité chronique, ce qui signifie qu'il n'y pas de substances organiques neutres au-dessus de ces seuils dans l'ensemble d'étalonnage. De plus, les prévisions de toxicité chronique inférieures à 1,0 µg/L ne sont vraisemblablement pas fiables, car elles proviennent de corrélations avec des log K_{oe} et sont probablement en dehors des limites pratiques des méthodes d'analyse. En outre, l'ensemble d'étalonnage du modèle ECOSAR ne contient pas de valeur de toxicité aiguë inférieure à 1,0 µg/L pour les substances organiques neutres et pour la plupart des relations structure-activité de ces substances. C'est pourquoi seules les prévisions de toxicité chronique ont été retenues pour la structure 2. Le modèle RQSA OASIS de toxicité aiguë pour les poissons (tête-de-boule) a prévu, à partir de substances narcotiques base-surface, des valeurs à l'intérieur du domaine des structures; il semble donc plus fiable. Aucun résultat prévu pour la structure 1 n'a été retenu, puisque ses valeurs de toxicité aiguë et chronique tombent en dehors du domaine d'applicabilité pour tous les modèles.

Tableau 7a. Données empiriques sur la toxicité en milieu aquatique de la BNST et de ses analogues

Organisme d'essai	Substance d'essai	Type d'essai	Paramètre	Taux de charge (mg/L)	Valeur (mg/L)	Référence
<i>Daphnia magna</i>	Mélange d'analogues	Toxicité aiguë (48 h)	Immobilisation 0% 30% 100%	10 46 100	0,32 ¹ 0,63 ¹ 0,36 ¹	Présentation d' 2009a
Mysis effilée	68921-45-9	Toxicité aiguë (96 h)	CL ₅₀ ²	n/a	2,3	Présentation d' 2009b
Poisson zèbre	68442-68-2	Toxicité aiguë (96 h)	CL ₅₀	n/a	920	U.S. EPA, 2003
Poisson zèbre	68442-68-2	Toxicité aiguë (96 h)	CL ₅₀	n/a	≤ 0,41	U.S. EPA, 2003

¹Concentration moyenne mesurée

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

Tableau 7b. Données modélisées sur la toxicité en milieu aquatique de la structure 2

Organisme d'essai	Essai Durée	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
Algues	96 h ¹	CE ₅₀ ² et VCh ³	0,035-0,039	ECOSAR, 2004 (substances organiques neutres)
Daphnie	16 jours	VCh	0,002	ECOSAR, 2004 (substances organiques)

				neutres)
Poisson	30 jours	VCh	0,001	ECOSAR, 2004 (substances organiques neutres)
Poisson	96 h	CL ₅₀ ⁴	0,19 ± 0,13	(OASIS) Mekenyan <i>et al.</i> , 2005 (amine narcotique de référence)

¹ L'essai algal de 96 h peut être considéré comme un essai de toxicité chronique, puisqu'il englobe plusieurs générations.

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

³ VCh – Valeur de toxicité chronique.

⁴ CL₅₀ – Concentration d'une substance qu'on estime létale pour 50 % des organismes d'essai.

Les résultats empiriques des essais avec fraction adaptée à l'eau concordent généralement avec les prévisions des modèles. D'après cet ensemble restreint de données, les invertébrés semblent être les plus sensibles à la BNST. Les effets observés chez les invertébrés sont de l'ordre de 0,1 mg/L et moins et seraient les résultats de toxicité aiguë les plus fiables parmi ceux présentés dans les tableaux ci-dessus, si l'on tient compte des structures et des propriétés. Toutefois, les études existantes ne permettent pas de confirmer si des effets indirects affectent ces résultats. Les valeurs prévues de toxicité chronique chez les invertébrés sont de 100 à 200 fois plus faibles que les valeurs observées de toxicité aiguë, mais elles concordent avec la plage de valeurs déclarées concernant le rapport entre la toxicité aiguë et chronique associé à plusieurs substances narcotiques (voir Chapman, 1998). Les poissons semblent moins sensibles à la BNST que les invertébrés. Certains essais menés sur les poissons à des concentrations nominales ne sont pas en mesure de confirmer les niveaux réels d'exposition et sont difficilement comparables aux valeurs prévues ou à d'autres concentrations mesurées. La transition d'un effet aigu à un effet chronique n'est probablement pas aussi radicale que le laisse croire le rapport entre les deux types de toxicité, car seule la structure représentative de la toxicité chronique a pu être utilisée pour la modélisation. Il semble qu'une longue exposition à un mélange de BNST en conditions d'équilibre thermodynamique augmenterait la possibilité d'occurrence d'effets, causant ainsi des effets nocifs apparentés à ceux de la toxicité aiguë. Néanmoins, on dispose de suffisamment d'éléments démontrant qu'un rejet de BNST dans le milieu aquatique pourra grandement nuire à l'environnement par suite d'expositions de courte ou de longue durée.

B – Dans d'autres milieux

Aucune donnée expérimentale ou prévue avec effets sur les organismes vivant dans les sédiments ou le sol n'a été trouvée pour les structures 1 et 2 ou pour d'autres analogues.

C – Les prédateurs

La BNST est considérée comme étant persistante dans l'environnement. On lui estime une bioaccumulation notable et elle représente un potentiel de bioamplification

vraisemblablement non négligeable. Étant donné le taux relativement lent de biotransformation et le taux d'élimination global, la dilution trophique est peu probable et l'exposition des prédateurs terrestres et aquatiques (p. ex. le vison, le Balbuzard, le renard) par voie alimentaire à la BNST est non négligeable. La toxicité par dose orale chez les mammifères est d'importance pour des substances comme la BNST, car il existe un potentiel d'exposition par voie alimentaire pour les prédateurs.

L'U.S. EPA a reçu des données sur la toxicité aiguë par dose orale (DL_{50}) et sur la toxicité chronique et subchronique par doses orales répétées chez les rongeurs, et ce, pour la caractérisation préalable des dangers des diphénylaminés substitués, dans le cadre du High Production Volume Challenge Program (U.S. EPA, 2008). Un résumé des données reliées au n° CAS 68921-45-9 et à d'autres structures comparables figure dans ce rapport. Les données sur la toxicité aiguë, soit la DL_{50} (concentration médiane d'une substance toxique qu'on estime létale pour 50 % des organismes d'essai sur une période donnée), font généralement ressortir peu d'effets observés au niveau de la médiane (> 500 mg/kg poids corporel [p.c.]), mais ces résultats s'appliquent à la mortalité et non pas à des paramètres de moindre degré. Les données relatives à des doses orales répétées, qui témoignent davantage des effets chroniques subtils, montrent que des effets nocifs non adaptatifs (p. ex. la toxicité pour le développement et la reproduction) ont été observés chez les rongeurs exposés à cette catégorie de produits chimiques, présents à hauteur de 25 à 125 mg/kg p.c./j et à hauteur de 5 à 25 mg/kg p.c./j (changements biochimiques). Les études disponibles montrent que, chez les rongeurs, les femelles semblent plus sensibles que les mâles. Particulièrement pour le n° CAS 68921-45-9, le rapport de l'U.S. EPA révèle que la dégénérescence hépatique diffuse était présente dans tous les animaux et que sa gravité n'était pas liée au traitement. Les changements dégénératifs dans le foie consistaient en des œdèmes diffus et troubles, et en l'accumulation de lipides dans le cytoplasme des hépatocytes. La dose minimale avec effet nocif observé (DMENO) de l'étude a été fixée à environ 125 mg/kg p.c./j (d'après le retard de croissance des femelles et les effets sur le foie). Toutefois, comme il s'agissait de la plus faible concentration utilisée, aucune dose sans effet nocif observé (DSENO), et donc aucun seuil, n'a pu être déterminée (mais sous 125 mg/kg p.c./j).

Un seuil approximatif pour les effets nocifs non adaptatifs chez les mammifères sauvages peut être déduit de données nominales d'amine provenant des substances chimiques produites en grande quantité de l'U.S. EPA à l'aide d'une méthode fondée sur des analogues. Plusieurs études citées dans le rapport de l'U.S. EPA ont indiqué une DSENO de 25 mg/kg p.c./j et une DMENO de 125 mg/kg p.c./j, en s'appuyant sur la toxicité pour le développement et la reproduction, car ces paramètres sont plus fiables pour déterminer les effets nocifs non adaptatifs que les changements biochimiques. Il est possible d'estimer le début des effets nocifs à partir de la moyenne géométrique de ces valeurs (56,0 mg/kg p.c./j). Ce seuil doit être adapté selon le poids corporel des espèces sauvages pour estimer les effets chez ceux-ci (voir Sample *et al.*, 1996). Le poids corporel des rongeurs d'essai n'étant pas connu, on suppose un poids de référence de 0,35 kg, suivant les recommandations de Sample *et al.* (1996). Étant donné un poids corporel maximal de 1,1 kg pour un vison (un exemple d'espèce visée), le poids normalisé s'élève à environ 19,0 mg/kg p.c./j. Après l'application d'un facteur d'incertitude de 10, pour tenir compte des variations entre espèces et des conditions naturelles, le poids normalisé s'élève à

environ 2,0 mg/kg p.c./j pour les mammifères piscivores. Cette valeur de toxicité est considérée comme étant élevée pour les mammifères (< 10 mg/kg p.c./j).

En conséquence, on conclut à la forte probabilité d'effets nocifs sur l'environnement des prédateurs en ce qui a trait à l'ingestion de BNST (voie alimentaire).

Évaluation de l'exposition de l'environnement

Aucune donnée de surveillance de la présence de la BNST dans les milieux environnementaux (air, sol et sédiments) n'a été trouvée.

Caractérisation des risques pour l'environnement

L'existence d'éléments démontrant qu'une substance est fortement persistante et bioaccumulable au sens du *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* de la LCPE 1999 (Canada 2000), conjuguée avec la possibilité de rejet ou de formation dans l'environnement et le potentiel de toxicité pour des organismes, constitue une forte indication du fait que cette substance peut pénétrer dans l'environnement dans des conditions de nature à causer des effets nocifs à long terme sur l'environnement. Les substances persistantes demeurent longtemps dans l'environnement après y avoir été rejetées, ce qui accroît l'ampleur et la durée possibles de l'exposition. Les substances qui ont de longues demi-vies dans un milieu mobile (air et eau) et qui se répartissent dans ces milieux dans des proportions importantes ont le potentiel de causer une contamination étendue. Le rejet de faibles quantités de substances bioaccumulables peut donner lieu à des concentrations internes élevées chez les organismes exposés. Les substances fortement bioaccumulables et persistantes sont particulièrement préoccupantes, car elles peuvent faire l'objet d'une bioamplification dans les réseaux trophiques et ainsi entraîner des expositions internes très élevées, particulièrement chez les prédateurs des niveaux trophiques supérieurs.

Les quantités relativement importantes de BNST qui sont fabriquées et importées au Canada, ainsi que ses utilisations dispersives, révèlent un potentiel de rejet dans l'environnement au pays. En raison de sa résistance à la dégradation, la BNST demeurera dans l'eau, les sédiments et le sol pendant de longues périodes après y avoir été rejetée. La nature lipophile de la BNST laisse croire à sa bioaccumulation dans l'environnement et à sa bioamplification dans les chaînes trophiques. Les données sur l'écotoxicité indiquent que la BNST peut nuire aux organismes aquatiques à de faibles concentrations. De plus, les effets potentiellement nocifs sur l'environnement où vivent les prédateurs terrestres ayant ingéré de la BNST sont notables, car cette substance est jugée persistante et sa bioamplification n'est vraisemblablement pas négligeable. Tous ces renseignements indiquent que la BNST peut nuire à l'environnement au Canada.

Incertitudes dans l'évaluation des risques pour l'environnement

Il existe une incertitude quant aux risques que peut représenter la BNST à l'heure actuelle ou à l'avenir. Les estimations quantitatives des risques (quotients de risque et analyses probabilistes) constituent normalement d'importants éléments d'information pour évaluer

la possibilité qu'une substance a de causer des effets nocifs sur l'environnement. Cependant, lorsque les risques que comportent des substances persistantes et bioaccumulables, comme la BNST, sont estimés à l'aide de telles méthodes quantitatives, les résultats obtenus sont très incertains et les risques probablement sous-estimés. Étant donné qu'il est actuellement impossible de prévoir de façon fiable les risques à long terme associés aux substances persistantes et bioaccumulables, la pertinence des estimations quantitatives des risques s'en trouve restreinte. Comme l'accumulation de ces substances peut être répandue et difficilement réversible, il est justifié de réagir de façon prudente.

Toute la modélisation des propriétés physiques et chimiques d'une substance, ainsi que de ses caractéristiques P, B et Ti, s'appuie sur les structures chimiques. La substance étudiée ne peut être représentée par une structure chimique unique, car elle est classée UVCB. Les modèles comptent donc sur des « structures représentatives » qui permettent des estimations réalistes mais prudentes pour évaluer le devenir et les dangers de la BNST. Comme plusieurs structures représentatives peuvent être employées pour la même substance UVCB, il en découle des incertitudes liées à la structure de la BNST.

Les concentrations prévues, associées à la toxicité pour les organismes aquatiques, peuvent avoir une source supplémentaire d'incertitude lorsqu'elles dépassent la solubilité (expérimentale ou prévue) du produit chimique dans l'eau. Étant donné que les concentrations pour la toxicité et l'hydrosolubilité sont souvent incertaines, les valeurs de la toxicité qui dépassent les estimations de la solubilité peuvent dans certains cas être acceptées.

De plus, en ce qui concerne l'écotoxicité, le comportement de répartition prévu de ce produit chimique montre que les données disponibles sur les effets ne permettent pas d'évaluer comme il se doit l'importance du sol et des sédiments comme milieu d'exposition. Des données sur la toxicité sont disponibles pour les prédateurs terrestres ou aquatiques et sont représentées par des données sur la toxicité aiguë par voie orale provenant d'études sur les rongeurs. S'il existe certaines incertitudes entourant l'extrapolation de données sur la toxicité d'un mammifère prédateur dans la famille des mustélidés (c.-à-d. le vison) à partir de celles chez les rongeurs, il s'agit d'une pratique généralement bien admise pour l'évaluation de produits chimiques et aussi utilisée pour l'évaluation toxicologique chez l'humain. L'application d'un facteur d'incertitude de 10 pourrait rendre compte des incertitudes générales en matière d'écotoxicologie dans des conditions de laboratoire et des variations intraspécifiques et interspécifiques. De plus, la normalisation du poids corporel diminue la DMENO d'un facteur d'environ 3, qui peut être considéré en soi comme un facteur d'incertitude pour les différences entre les espèces.

La concentration estimée sans effet (CESE) ainsi obtenue pour la faune prédatrice repose sur des résultats expérimentaux comportant l'administration de doses répétées par voie orale et semblent refléter les effets potentiels dus à une exposition journalière prévue. Par conséquent, la CESE peut ne pas rendre compte des effets à très long terme pouvant découler de l'accumulation lente de la BNST dans les tissus de la faune prédatrice en fonction de la bioamplification.

Puisque les données disponibles sur la toxicité à doses répétées par voie orale chez les rongeurs comportent des valeurs hypothétiques (DSENO et DMENO) produites à partir de variations statistiques simples et des concentrations choisies pour les essais, certaines incertitudes existent quant au « réel » point de départ de la courbe dose-effet où les effets néfastes commencent à se manifester. De plus, certains résultats d'essai décrivent des effets à toutes les concentrations utilisées et éliminent le recours possible à des DSENO, ce qui ajoute à l'erreur expérimentale et diminue la rigueur des résultats des essais. Ainsi, seules les études mentionnant des DSENO et DMENO sans limites ont été utilisées. De même, au lieu d'une courbe dose-réponse, on utilise la moyenne géométrique de la DSENO et de la DMENO en tant que meilleure estimation du seuil d'effets.

Conclusion

À la lumière des renseignements présentés dans cette évaluation préalable, on en conclut que la BNST pénètre, ou peut pénétrer, dans l'environnement en une quantité, à une 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.

On conclut en outre que la BNST correspond à la définition d'une substance toxique conformément à l'alinéa 64(a) de la LCPE (1999). De plus, cette substance répond aux critères de la persistance et du potentiel de bioaccumulation prévus dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Références

- ACD/pK_aDB [module de prévision]. 2005. Version 9.04. Toronto (Ont.) : Advanced Chemistry Development. [consulté le 5 juin 2009]. Accès : http://www.acdlabs.com/products/phys_chem_lab/pka/. [accès restreint]
- [AOPWIN] Atmospheric Oxidation Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.91. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : <http://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., Gobas, F.A.P.C. 2006. A review of bioconcentration factor (BCF) and bioaccumulation factor (BAF) assessments for organic chemicals in fish. *Environ. Rev.* 14:257-297.
- Aronson, D., Howard, P.H. 1999. Evaluating potential POP/PBT compounds for environmental persistence. North Syracuse (NY) : Syracuse Research Corp., Environmental Science Centre. Report No.: SRC-TR-99-020.
- Aronson, D., Boethling, R., Howard, P., Stiteler, W. 2006. Estimating biodegradation half-lives for use in chemical screening. *Chemosphere* 63(11):1953-1960.
- [BCFWIN] BioConcentration Factor Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 2.15. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>
- Beyer, A., Mackay, D., Matthies, M., Wania, F., Webster, E. 2000. Assessing long-range transport potential of persistent organic pollutants. *Environ. Sci. Technol.* 34(4):699-703.
- [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 : <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>
- Boethling, R.S., Howard, P.H., Bauman, 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, ch. 33. *Gazette du Canada*, 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. Ministère de l'Environnement, ministère de la Santé. 2006. *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://www.gazette.gc.ca/archives/p1/2006/2006-03-04/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://www.gazette.gc.ca/archives/p1/2007/2007-11-17/pdf/g1-14146.pdf>

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

Chapman, P.M., Fairbrother, A., Brown, D. 1998. A critical evaluation of safety (uncertainty) factors for ecological risk assessment. *Environ. Toxicol. Chem.* 17(1):99-108

[CPOPs] Canadian POPs Model. 2008. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes; Bourgas (Bulgarie) : Prof. Assen Zlatarov University, Laboratory of Mathematical Chemistry. [modèle mis au point à partir des travaux de Mekenyan *et al.*, 2005]. Disponible sur demande.

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) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

Environnement Canada. 1986. Rapport sur la Liste intérieure des substances. Basé sur des données recueillies pour l'enquête sur la Liste intérieure des substances de 1984 à 1986. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances nouvelles. Disponible sur demande auprès de : Division des substances nouvelles, Environnement Canada. Ottawa, K1A 0H3.

Environnement Canada. 2004. Présenté au Programme des substances nouvelles d'Environnement Canada conformément au *Règlement sur les renseignements concernant les substances nouvelles*.

Environnement Canada. 2006. Approche pour les évaluations préalables des risques écologiques en vertu de l'alinéa 64(a) de la LCPE (1999) pour les substances existantes qui sont à la fois persistantes et bioaccumulables : Division des substances existantes [cédérom]. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes. Disponible sur demande.

Environnement Canada. 2008a. Environnement Canada. 2008b. 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 Défi, publié le 17 novembre 2007 dans l'Avis d'intention d'élaborer et de mettre en œuvre des mesures d'évaluation et de gestion des risques que certaines substances présentent pour la santé des Canadiens et leur environnement*. Préparées par : Environnement Canada, Santé Canada, Programme des substances existantes.

Environnement Canada. 2008b. Guidance for conducting ecological assessments under CEPA, 1999: science resource technical series, technical guidance module: Mass Flow Tool. Document de travail préliminaire. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division de l'évaluation écologique.

Environnement Canada. 2009a. Non-Confidential Summary of BNST: Use and Disposition in Lubricants. Rapport préparé par MTN Consulting Associates pour Environnement Canada, Division du pétrole, du gaz et de l'énergie de remplacement, Gatineau (Québec) K1A 0H3.

Environnement Canada. 2009b. Assumptions, limitations and uncertainties of the Mass Flow Tool for Benzenamine, *N*-phenyl-, reaction products with styrene and 2,4,4-trimethylpentene, CAS RN 68921-45-9. Document provisoire interne. Gatineau (Qc): Environnement Canada, Division de l'évaluation écologique.

[EPISuite] Estimation Programs Interface for Microsoft Windows [suite de modèles d'estimation]. 2009. Version 4.0. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and

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

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

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

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

Kelly, B.C., Gobas, F.A., McLachlan, M.S. 2004. Intestinal absorption and biomagnification of organic contaminants in fish, wildlife and humans. *Environ. Toxicol. Chem.* 23(10):2324-2336.

[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. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

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

Mekenyan, G., Dimitrov, S.D., Pavlov, T.S., Veith, G.D. 2005. POPs: A QSAR system for creating PBT profiles of chemicals and their chemicals and their metabolites. *SAR QSAR Environ Res* 16(1-2):103-133.

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

[NITE] National Institute of Technology and Evaluation. 2002. Japon. Sommaire des essais effectués par le ministère de l'Environnement du Japon. Biodegradation and Bioconcentration of Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law. Accès : http://www.safe.nite.go.jp/data/sougou/pkc_e_search_frm.html

[OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2004. Emission scenario document on lubricants and lubricant additives [en ligne]. Vienne (Autriche) : Direction de l'environnement de l'OCDE, Division de l'hygiène et de la sécurité de l'environnement. ENV/JM/EEA(2004)1, JT00166913 [consulté en mai 2008]. Accès : [http://www.oilis.oecd.org/oilis/2004doc.nsf/LinkTo/env-jm-mono\(2004\)8](http://www.oilis.oecd.org/oilis/2004doc.nsf/LinkTo/env-jm-mono(2004)8)

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

[PCKOCWIN] Organic Carbon Partition Coefficient Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.66. 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

Présentation d'étude. 2009a. Étude confidentielle inédite présentée à Environnement Canada, Division des substances existantes, dans le cadre du Défi du Plan de gestion des produits chimiques. Sommaire de rigueur d'étude, n° 13343Challenge001.

Présentation d'étude. 2009b. Étude présentée à l'U.S. EPA pour les diphénylamine substituées, date de publication des documents révisés sur les diphénylamine substituées : 24 octobre 2004. Sommaire de rigueur d'étude.

R.T. Vanderbilt Company, Inc. 2007. Material safety data sheet: VANLUBE® SL [en ligne]. Norwalk (CT) : R.T. Vanderbilt Company, Inc. Validé le 21 août 2007. [consulté en mai 2008]. Accès : <http://www.rtvanderbilt.com/documents/MSDS/CAN/51008.pdf>

Sample, B.E., Opresko, D.M. et Suter, G.W. II. Toxicological Benchmarks for Wildlife: 1996 Revision. Health Sciences Research Division, Oak Ridge Tennessee. Préparé sous contrat pour le U.S. Dept. of Energy. N° de contrat : DE-AC05-84OR21400.

[SPIN] Substances in Preparations in Nordic Countries [base de données en ligne]. 2006. Financé par le Conseil des ministres des pays nordiques, Groupe chimique. [consulté en décembre 2006]. Accès : <http://195.215.251.229/Dotnetnuke/Home/tabid/58/Default.aspx>

[TaPL3] Long Range Transport and Persistence Level III model [en ligne]. 2000. Version 2.10. Peterborough (Ont.) : Trent University, Canadian Centre for Environmental Modelling and Chemistry. Accès : <http://www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel/models/TaPL3.html>

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

[U.S. EPA] U.S. Environmental Protection Agency. 2008. Screening level hazard characterization for high production volume chemicals. Chemical Category name. Substituted Diphenylamines. Washington (DC) : U.S. EPA, Office of Pollution Prevention and Toxics, Risk Assessment Division, High Production Volume Chemicals Branch.

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

Annexe I - Sommaire de rigueur d'étude

Présentation d'étude, 2009a

Formulaire et instruction pour sommaires de rigueur d'étude : organismes aquatiques					
N°	Point	Pondération	Oui/Non	Précisions	Instructions
1	Référence : Acute toxicity of TK 12430 (IRGANOX L57) to Daphnia magna in a 48-hour immobilization test				Titre de l'étude, auteurs, pages et autres renseignements
2	Identité de la substance : n° CAS	s.o.	O		Numéro de registre du produit
3	Identité de la substance : nom(s) chimique(s)	s.o.	O		Au moins un nom chimique reconnu.
4	Composition chimique de la substance	2	N		Oui ou non. Composition chimique (composants principaux et impuretés). Particulièrement les polymères. « Sans objet » pour un produit chimique pur.
5	Pureté chimique	1	N		Oui ou non. La pureté chimique ou selon sa qualité chimique. Ne s'applique peut-être pas au CAS 128683-25-0 - pétales de poussière, élaboration
6	Indication de la persistance/stabilité de la substance en milieu aqueux?	1	O		Oui ou non. Renseignez l'instabilité de la substance, hydrolysable, photodégradable, facilement biodégradable
Méthode					
7	Référence	1	O		Oui ou non. Référence
8	Méthode normalisée (OCDE, UE, nationale ou autre)?	3	O		Oui ou non.
9	Justification de la méthode ou du protocole non normalisé utilisé, le cas échéant	2		s.o.	Oui ou non. Si « oui », méthode (et non pas un protocole). Sans objet pour un produit
10	BPL (bonnes pratiques de laboratoire)	3	O		Oui ou non. « Oui » - si l'étude a été faite après avoir été suivies. Si l'étude s'est faite sans BPL n'ont pas été
Organisme d'essai					
11	Identité de l'organisme : nom	s.o.	O		Noms (communs ou scientifiques)
12	Indication du nom latin ou des deux noms (latin et commun)?	1	O		Oui ou non.
13	Âge ou stade biologique de l'organisme d'essai	1	O		Oui ou non. Ne pas répéter (p. ex. point 15) fournir des renseignements sur l'organisme (p. ex. si l'organisme est d'une espèce particulière, estimer son stade biologique)
14	Longueur et/ou poids	1	N		Oui ou non. Peut être sans objet pour de très petits invertébrés

15	Sexe	1	N		Oui ou non. Sans objet (algues). Si le point s'applique ce dernier est très jeune : une boule ou une truite arc-en-ciel. directive n° 203 de l'OC.
16	Nombre d'organismes par répétition	1	O		Oui ou non. Préciser la durée de la répétition.
17	Charge en organismes	1	O		Oui ou non. Préciser la charge (g/L) (0,8 g/L)
18	Type de nourriture et périodes d'alimentation au cours de l'étape d'acclimatation	1	N		Oui ou non.
Conception et conditions des essais					
19	Type d'essai (toxicité aiguë ou chronique)	s.o.	O	Toxicité aiguë	Oui ou non. Préciser le type d'essai.
20	Type d'expérience (en laboratoire ou sur le terrain)	s.o.	O	Laboratoire	Oui ou non. Préciser le type d'expérience.
21	Voies d'exposition (nourriture, eau, les deux)	s.o.	O	Eau	Oui ou non. Préciser la voie d'exposition.
22	Durée de l'exposition	s.o.	O	48 heures	Oui ou non. Préciser la durée.
23	Témoins négatifs ou positifs (préciser)	1	O	Bichromate de potassium 1/an	Oui ou non. Préciser le témoin.
24	Nombre de répétitions (y compris les témoins)	1	O	Quatre	Oui ou non. Préciser le nombre de répétitions.
25	Des concentrations nominales sont-elles indiquées?	1	O	Quatre	Oui ou non. Préciser les concentrations nominales.
26	Des concentrations mesurées sont-elles indiquées?	3	O	Concentration analytique mesurée (fractions adaptées à l'eau)	Oui ou non. Peut rester sans objet si la substance est soluble dans l'eau (ex. pétrole brut). Toutefois, si la substance est insoluble, elle peut être présente dans la solution d'essai sous forme d'une phase organique dissoute qui peut être convertie en concentration mesurable. Si elles sont présentées, elles pourront être considérées comme étant pondérées = 3 points). « rechange fiables », on ne peut pas dire que c'est approprié, p. ex. un analyseur de détection, a servi aux mesures. La différence de niveaux de traitement devrait être prise en compte tenu des mesures de détection.
27	Type de nourriture et périodes d'alimentation durant les essais de longue durée	1	N		Oui ou non. Sans objet car les organismes ne meurent pas pendant les essais de longue durée.
28	Les concentrations ont-elles été mesurées périodiquement (particulièrement pendant les essais de toxicité chronique)?	1	O		Oui ou non. Si « oui » : préciser les fréquences ; au moins trois mesures ; en plus, deux mesures (dans les cas où les concentrations réelles sont élevées).
29	Les conditions du milieu d'exposition pertinentes pour la substance sont-elles indiquées (p. ex. pour la toxicité des métaux – pH, COD/COT, dureté de l'eau, température)	3	O		Oui ou non.
30	Photopériode et intensité de l'éclairage	1	O		Oui ou non.
31	Préparation de solutions mères et de solutions d'essai	1	O		Oui ou non.
32	Un agent émulsionnant ou stabilisant a-t-il été employé si la substance était peu soluble ou instable?	1	N		Oui ou non. Applicable aux substances solubles ou instables, p. ex. supérieure à la solubilité.
33	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, sa concentration est-elle précisée?	1	N		Oui ou non.

34	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, son écotoxicité est-elle précisée?	1	N		Oui ou non. Il est permis de conclure sur la toxicité issues d'essais
35	Les intervalles des contrôles (incluant les observations et les paramètres de qualité de l'eau) sont-ils présentés?	1	O		Oui ou non.
36	Méthodes statistiques utilisées	1	O		Oui ou non.
Renseignements d'intérêt pour la qualité des données					
37	Le paramètre déterminé est-il directement attribuable à la toxicité de la substance et non à l'état de santé des organismes (p. ex. mortalité des témoins > 10 %) ou à des facteurs physiques (p. ex. « effet d'ombrage »)?	s.o.	O		Oui ou non. Si « non », les préoccupations liées à la toxicité sont-elles « Commentaires » ci-dessous vraisemblablement au
38	L'organisme d'essai convient-il à l'environnement du Canada?	3	O		Oui ou non.
39	Les conditions d'essai (pH, température, OD, etc.) sont-elles typiques pour l'organisme d'essai?	1	O		Oui ou non.
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		Oui ou non. « Non » - si la substance chimique est volatile et que les récipients sont ouverts (non scellés)
41	Le pH de l'eau d'essai était-il de l'ordre des valeurs typiques de l'environnement au Canada (6 à 9)?	1	O	5,1-6,2	Oui ou non. Préciser la
42	La température de l'eau d'essai était-elle de l'ordre des valeurs typiques de l'environnement au Canada (5 à 27 °C)?	1	O		Oui ou non. Préciser la
43	La valeur de la toxicité était-elle inférieure à celle de la solubilité de la substance dans l'eau?	3	N		Oui ou non. Les résultats d'hydrosolubilité primaires indiquent la différence entre les valeurs de toxicité si celle-ci est inférieure, sinon, la différence est sans objet pour l'eau.
Résultats					
44	Valeurs de la toxicité (fournir paramètres et valeurs)	s.o.	O	48 h EC ₅₀ = 51 mg/L	Préciser le paramètre et la valeur (70 mg/L)
45	Autres paramètres indiqués – p. ex. FBC/FBA, CMEO/CSEO (préciser)?	s.o.	O	48 h CSEO = 10 mg/L	Oui ou non. Préciser le paramètre et la valeur pour 28 j, CSEO = 70 mg/L
46	Autres effets nocifs indiqués (p. ex. carcinogénicité, mutagénicité)?	s.o.	N		Oui ou non. Préciser d'
47	Note : ... % 72,3				
48	Code de fiabilité d'EC : 2				
49	Catégorie de fiabilité (élevée, satisfaisante, faible) : Confiance satisfaisante				
50	Commentaires				

Annexe I - Sommaire de rigueur d'étude

Présentation d'étude, 2009b

Formulaire et instruction pour sommaires de rigueur d'étude : organismes aquatiques					
N°	Point	Pondération	Oui/Non	Précisions	Instructions
1	Acute invertebrate 96-h toxicity. Springborn Laboratories, Inc. Rapport n° 89-11-3144 (10 janvier 1990)				Titre de l'étude, auteurs, pages et autres renseignements
2	Identité de la substance : n° CAS	s.o.	O		Numéro de registre du CAS
3	Identité de la substance : nom(s) chimique(s)	s.o.	O		Au moins un nom chimique reconnu.
4	Composition chimique de la substance	2	O		Oui ou non. Composition chimique (composants principaux et impuretés). Particulièrement pour les polymères. « Sans objet » si la substance est un produit chimique
5	Pureté chimique	1	O		Oui ou non. La pureté par pourcentage ou selon sa teneur en Réactif, etc.). Ne s'applique pas à UVCB (p. ex. n° CAS 121-75-5 - CAS 65996-72-7 - poussière, etc.).
6	Indication de la persistance/stabilité de la substance en milieu aqueux?	1	N		Oui ou non. Renseignements sur l'instabilité de la substance, hydrolysable, photodégradable, facilement biodégradable
Méthode					
7	Référence	1	O		Oui ou non. Référence
8	Méthode normalisée (OCDE, UE, nationale ou autre)?	3	O		Oui ou non.
9	Justification de la méthode ou du protocole non normalisé utilisé, le cas échéant	2	N		Oui ou non. Si « oui », fournir la méthode (et non pas une référence à la méthode). Sans objet (voir le point 8).
10	BPL (bonnes pratiques de laboratoire)	3	O		Oui ou non. « Oui » - si la méthode d'étude a été faite après avoir été suivies. Si l'étude s'est faite sans des BPL n'ont pas été suivies
Organisme d'essai					
11	Identité de l'organisme : nom	s.o.	O		Noms (communs ou scientifiques)
12	Indication du nom latin ou des deux noms (latin et commun)?	1	N		Oui ou non.
13	Âge ou stade biologique de l'organisme d'essai	1	N		Oui ou non. Ne pas répondre (p. ex. point 15) fournir les renseignements sur l'organisme (p. ex. si l'organisme est d'une espèce particulière, estimer son stade biologique)
14	Longueur et/ou poids	1	N		Oui ou non. Peut être sans objet pour les très petits invertébrés
15	Sexe	1	N		Oui ou non. Sans objet pour les algues. Si le point s'applique, ce dernier est très jeune (p. ex. de-boule ou une truite alevin) ou une truite alevin directive n° 203 de l'OCDE
16	Nombre d'organismes par répétition	1	N		Oui ou non. Préciser le nombre

					répétition.
17	Charge en organismes	1	N		Oui ou non. Préciser la concentration (0,8 g/L)
18	Type de nourriture et périodes d'alimentation au cours de l'étape d'acclimatation	1	N		Oui ou non.
Conception et conditions des essais					
19	Type d'essai (toxicité aiguë ou chronique)	s.o.	O	Toxicité aiguë	Oui ou non. Préciser le type d'essai
20	Type d'expérience (en laboratoire ou sur le terrain)	s.o.	O	Laboratoire	Oui ou non. Préciser le type d'expérience
21	Voies d'exposition (nourriture, eau, les deux)	s.o.	O	eau	Oui ou non. Préciser les voies d'exposition
22	Durée de l'exposition	s.o.	O	96 h	Oui ou non. Préciser la durée
23	Témoins négatifs ou positifs (préciser)	1	O	2 bassins témoins avec de l'eau de dilution, mais pas de substance d'essai	Oui ou non. Préciser les types de témoins
24	Nombre de répétitions (y compris les témoins)	1	N		Oui ou non. Préciser le nombre de répétitions
25	Des concentrations nominales sont-elles indiquées?	1	O	6	Oui ou non. Préciser le nombre de concentrations nominales.
26	Des concentrations mesurées sont-elles indiquées?	3	O		Oui ou non. Peut rester des substances comme les HAP (25-0 - pétrole brut). Tous les échantillons de rechange fiables, qui possèdent une substance dans la solution de carbone organique dissoute, théoriquement convertis en une substance) sont présents conditionnellement cons « mesurées » (c.-à-d. par Remarque : Par « mesurées » suppose qu'un instrument de COT à faible limite de détection. En d'autres mots, la COT entre le témoin et la substance statistiquement significatives réelles et des limites de détection.
27	Type de nourriture et périodes d'alimentation durant les essais de longue durée	1			Oui ou non. Sans objet pour les organismes ne survivant pendant les essais de courte durée.
28	Les concentrations ont-elles été mesurées périodiquement (particulièrement pendant les essais de toxicité chronique)?	1	O		Oui ou non. Si « oui » : au moins trois mesures; essai de deux mesures (dans les cas de concentrations réelles à
29	Les conditions du milieu d'exposition pertinentes pour la substance sont-elles indiquées? (p. ex. pour la toxicité des métaux – pH, COD/COT, dureté de l'eau, température)	3	N	Produits chimiques peu solubles, solubilité non indiquée	Oui ou non.
30	Photopériode et intensité de l'éclairement	1	N		Oui ou non.
31	Préparation de solutions mères et de solutions d'essai	1	O		Oui ou non.
32	Un agent émulsionnant ou stabilisant a-t-il été employé si la substance était peu soluble ou instable?	1	N		Oui ou non. Applicable seulement aux substances peu solubles ou instables, par rapport à la solubilité
33	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, sa concentration est-elle précisée?	1			Oui ou non.
34	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, son écotoxicité est-elle précisée?	1			Oui ou non. Il est permis de noter la toxicité issues d'essais s

35	Les intervalles des contrôles (incluant les observations et les paramètres de qualité de l'eau) sont-ils présentés?	1	O		Oui ou non.
36	Méthodes statistiques utilisées	1	O		Oui ou non.
Renseignements d'intérêt pour la qualité des données					
37	L'effet est-il directement attribuable à la toxicité de la substance et non à l'état de santé des organismes (p. ex. mortalité des témoins > 10 %) ou à des facteurs physiques (p. ex. « effet d'ombrage »)?	s.o.	N	Mortalité des témoins non fournie	Oui ou non. Si « non », les préoccupations liées « Commentaires » ci-dessous sont vraisemblablement au ré
38	L'organisme d'essai convient-il à l'environnement du Canada?	3	O		Oui ou non.
39	Les conditions d'essai (pH, température, OD, etc.) sont-elles typiques pour l'organisme d'essai?	1	N	Non fournies	Oui ou non.
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	Faible solubilité dans l'eau, solubilité non fournie	Oui ou non. « Non » - si chimique est volatil et qu sont ouverts (non scellés)
41	Le pH de l'eau d'essai était-il de l'ordre des valeurs typiques de l'environnement au Canada (6 à 9)?	1	N	Aucun pH	Oui ou non. Préciser la p
42	La température de l'eau d'essai était-elle de l'ordre des valeurs typiques de l'environnement au Canada (5 à 27 °C)?	1	N	Aucune température fournie	Oui ou non. Préciser la p
43	La valeur de la toxicité était-elle inférieure à celle de la solubilité de la substance dans l'eau?	3	N		Oui ou non. Les résultats d'hydrosolubilité priment la différence entre les va toxicité si celle-ci est inf sinon, la différence est j sans objet pour le protoc
Résultats					
44	Valeurs de la toxicité (fournir paramètres et valeurs)	s.o.	96 h CL ₅₀		Préciser le paramètre et 70 mg/L)
45	Autres paramètres indiqués – p. ex. FBC/FBA, CMEO/CSEO (préciser)?	s.o.			Oui ou non. Préciser le p pour 28 j, CSEO = 70 m
46	Autres effets nocifs indiqués (p. ex. carcinogénicité, mutagénicité)?	s.o.			Oui ou non. Préciser d'a
47	Note : ... %	52,2			
48	Code de fiabilité d'EC :	3			
49	Catégorie de fiabilité (élevée, satisfaisante, faible) :	Confiance faible			
50	Commentaires				

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	Devenir	Devenir	Profils de persistance, bioaccumulation et toxicité	Écotoxicité
Paramètres d'entrée des modèles	Suite EPIWIN (tous les modèles, notamment : AOPWIN, KOCWIN, BCFWIN, BIOWIN et ECOSAR)	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)	TaPL3 (différents intrants requis selon le type de substances – type I ou II)	Outil OECD POPs	Modèle d'Arnot et Gobas pour le FBC/FBA	Modèle Canadian POPs (incluant : CATABOL, modèle du FBC avec facteurs atténuants, modèle de toxicité OASIS)	Artificial Intelligence Expert System (AIES)/ TOPKAT/ ASTER
Code SMILES	Structure 1 : <chem>CC(C1=CC=C C=C1NC2=C C=CC=C2C(C)(C)CC(C)(C)C)C3=CC=CC=C3</chem> Structure 2 : <chem>CC(C)(CC(C)(C)C)C1=CC=C(NC2=CC=CC=C2)C=C1</chem>	Structure 1 : <chem>CC(C1=CC=C C=C1NC2=C C=CC=C2C(C)(C)CC(C)(C)C)C3=CC=CC=C3</chem> Structure 2 : <chem>CC(C)(CC(C)(C)C)C1=CC=C(NC2=CC=CC=C2)C=C1</chem>	Structure 1 : <chem>CC(C1=CC=C C=C1NC2=C C=CC=C2C(C)(C)CC(C)(C)C)C3=CC=CC=C3</chem> Structure 2 : <chem>CC(C)(CC(C)(C)C)C1=CC=C(NC2=CC=CC=C2)C=C1</chem>	Structure 1 : <chem>CC(C1=CC=CC=C1NC2=CC=CC=C2C(C)(C)CC(C)(C)C)C3=CC=CC=C3</chem> Structure 2 : <chem>CC(C)(CC(C)(C)C)C1=CC=C(NC2=CC=CC=C2)C=C1</chem>		Structure 1 : <chem>CC(C1=CC=C C=C1NC2=C C=CC=C2C(C)(C)CC(C)(C)C)C3=CC=CC=C3</chem> Structure 2 : <chem>CC(C)(CC(C)(C)C)C1=CC=C(NC2=CC=CC=C2)C=C1</chem>	Structure 1 : <chem>CC(C1=CC=CC=C1NC2=CC=C C=C2C(C)(C)C)C3=C C=CC=C3</chem> Structure 2 : <chem>CC(C)(CC(C)(C)C)C1=CC=C(NC2=CC=CC=C2)C=C1</chem>	Structure 1 : <chem>CC(C1=CC=CC=C1NC2=CC=CC=C2C(C)(C)C)C3=CC=C C=C3</chem> Structure 2 : <chem>CC(C)(CC(C)(C)C)C1=CC=C(NC2=CC=CC=C2)C=C1</chem>

								1
Poids moléculaire (g/mol)	Structure 1 : 385,6 Structure 2 : 281,44	Structure 1 : 385,6 Structure 2 : 281,44 (I)	Structure 1 : 385,6 g/mol Structure 2 : 281,44 (I)	Structure 1 : 385,6 g/mol Structure 2 : 281,44 (I)	x	Structure 1 : 385,6 g/mol Structure 2 : 281,44 (I)	Structure 1 : 385,6 g/mol Structure 2 : 281,44 (I)	Structure 1 : 385,6 g/mol Structure 2 : 281,44 (I)
Point de fusion (°C)	*Structure 1 : 180,83 Structure 2 : 120,09	*Structure 1 : 180,83 Structure 2 : 120,09	Structure 1 : 180,83 Structure 2 : 120,09 (I)	Structure 1 : 180,83 Structure 2 : 120,09 (I)				
Point d'ébullition (°C)	*Structure 1 : 462,34 Structure 2 : 361,98	Structure 1 : 462,34 Structure 2 : 361,98						
Température (°C)	Structure 1 : 25 Structure 2 : 25	Structure 1 : 20 Structure 2 : 20	Structure 1 : 20 Structure 2 : 20	Structure 1 : 20 Structure 2 : 20				
Masse volumique (kg/m³)	Structure 1 : Non disponible Structure 2 : 1010	x (2)						
Pression de vapeur (Pa)	*Structure 1 : $7,71 \times 10^{-7}$ Structure 2 : $1,04 \times 10^{-3}$	Structure 1 : $7,71 \times 10^{-7}$ Structure 2 : $1,04 \times 10^{-3}$ (1)	Structure 1 : $7,71 \times 10^{-7}$ Structure 2 : $1,4 \times 10^{-3}$ (I)	Structure 1 : $7,71 \times 10^{-7}$ Structure 2 : $1,4 \times 10^{-3}$ (I)				
Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mol)	*Structure 1 : $1,01 \times 10^{-1}$ Structure 2 : $8,54 \times 10^{-1}$	Structure 1 : $1,01 \times 10^{-1}$ Structure 2 : $8,54 \times 10^{-1}$						

		(3)						
Log K_{ae} (coefficient de partage air-eau) [sans dimension]	Structure 1 : $1,62 \times 10^9$ Structure 2 : $3,44 \times 10^{-4}$				x			
Log K_{oe} (coefficient de partage octanol- eau) [sans dimension]	*Structure 1 : 9,21 Structure 2 : 7,05	Structure 1 : 9,21 Structure 2 : 7,05 (I)	Structure 1 : 9,21 Structure 2 : 7,05 (I)	Structure 1 : 9,21 Structure 2 : 7,05 (I) (I)	x	Structure 1 : 9,21 Structure 2 : 7,05 (I) (I)	Structure 1 : 9,21 Structure 2 : 7,05 (I) (I)	
K_{oe} (coefficient de partage octanol- eau) [sans dimension]	Structure 1 : $1,6218 \times 10^9$ Structure 2 : $1,1220 \times 10^7$	Structure 1 : $1,6218 \times 10^9$ Structure 2 : $1,1220 \times 10^7$						
Log K_{co} (coefficient de partage carbone organique-eau – L/kg)	Structure 1 : 5,97 Structure 2 : 4,78							
Solubilité dans l'eau (mg/L)	*Structure 1 : $5,11 \times 10^{-5}$ Structure 2 : 0,014	Structure 1 : $5,11 \times 10^{-5}$ Structure 2 : 0,014 (I)	Structure 1 : $5,11 \times 10^{-5}$ Structure 2 : 0,014 (I)	Structure 1 : $5,11 \times 10^{-5}$ Structure 2 : 0,014 (I)				
Log K_{oa} (coefficient de partage octanol- air) [sans dimension]	Structure 1 : 13,6 Structure 2 : 10,52 = 1							
Coefficient de partage sol-eau (L/kg)¹			x (II)	x (II)				
Coefficient de			x (II)	x (II)				

partage sédiments-eau (L/kg)¹								
Coefficient de partage particules en suspension-eau (L/kg)¹		x (2)	x (II)	x (II)				
Coefficient de partage poisson- eau (L/kg)²			x (II)	x (II)				
Coefficient de partage aérosol- eau (sans dimension)³			x (II)	x (II)				
Coefficient de partage végétation-eau (sans dimension)¹				x (II)				
Enthalpie (K_{oe})				-20 ⁽³⁾				
Enthalpie (K_{ae})				55 ⁽³⁾				
Demi-vie dans l'air (jour)	Structure 1 : Structure 2 : 0,105		Structure 1 : 0,052 Structure 2 : 0,053 (I)	Structure 1 : 0,052 Structure 2 : 0,053 (I.)	x			
Demi-vie dans l'eau (jour)			Structure 1 : 360 Structure 2 : 120 (I)	Structure 1 : 360 Structure 2 : 120 (I)	x		CATABOL Structure 1 : > 182 Structure 2 : > 182	
Demi-vie dans les sédiments			Structure 1 : 1440	Structure 1 : 1440				

(jour)			Structure 2 : 480 (I)	Structure 2 : 480 (I)				
Demi-vie dans le sol (jour)			Structure 1 : 360 Structure 2 : 120 (I)	Structure 1 : 360 Structure 2 : 120 (I)	x			
Demi-vie dans la végétation (jour)⁴				x (I, II)				
Constante cinétique du métabolisme (jour⁻¹)						*Structure 1 : 0,004 Structure 2 : 0,04		
Constante cinétique de biodégradation (jour⁻¹) ou (heure⁻¹) – préciser		Structure 1 : 0,78 jour ⁻¹ Structure 2 : 0,67 jour ⁻¹						
Demi-vie de biodégradation en clarificateur primaire (t_{1/2-p}[h])		Structure 1 : Structure 2 : 248 (1)						
Demi-vie de biodégradation en bassin d'aération (t_{1/2-s}[h])		Structure 1 : Structure 2 : 24,8 (1)						
Demi-vie de biodégradation en bassin de décantation		Structure 1 : Structure 2 : 24,8 (1)						

(t _{1/2-s} [h])								
--------------------------	--	--	--	--	--	--	--	--

- ¹ d'après le log K_{co}
- ² d'après les données du FBC
- ³ valeur par défaut
- ⁴ d'après la demi-vie dans l'eau