

Évaluation préalable pour le Défi concernant le

pourpre de bromocrésol

**Numéro de registre du Chemical Abstracts Service
115-40-2**

**Environnement Canada
Santé Canada**

Août 2009

Synopsis

En application de l'article 74 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* [LCPE (1999)], les ministres de l'Environnement et de la Santé ont effectué une évaluation préalable du pourpre de bromocrésol, dont le numéro de registre du Chemical Abstracts Service est 115-40-2. Une priorité élevée a été accordée à l'évaluation préalable de cette substance inscrite au Défi, car elle répondait initialement aux critères environnementaux de la catégorisation écologique relatifs à la persistance, au potentiel de bioaccumulation et à la toxicité intrinsèque pour les organismes non humains et l'on croit qu'elle est commercialisée au Canada.

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

Le pourpre de bromocrésol est une substance organique principalement utilisée comme réactif analytique dans les laboratoires. Cette substance n'était pas présente en quantités importantes sur le marché au Canada en 2006; ses rejets dans l'environnement au pays sont donc probablement très faibles. D'après les utilisations possibles de cette substance, celle-ci aboutira fort probablement dans les plans d'eau et les décharges si elle est rejetée dans l'environnement. Comme on s'attend à ce que le pourpre de bromocrésol soit soluble dans l'eau, et comme ce produit n'est pas volatil et n'a pas tendance à se lier aux particules (d'après les données sur un produit chimique analogue), il pourrait être présent dans les eaux de surface et, peut-être, dans les eaux souterraines, où il aboutirait par lessivage dans le sol.

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

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

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

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

Introduction

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

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

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

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

L'évaluation des risques que pose le pourpre de bromocrésol pour l'environnement a été jugée hautement prioritaire car cette substance est persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques et l'on croit qu'elle est commercialisée au Canada. Le volet du Défi portant sur le pourpre de bromocrésol a été lancé le 17 novembre 2007 au moyen d'un avis paru dans la *Gazette du Canada* (Canada, 2007). En même temps a été publié le profil de cette substance, qui présentait l'information technique (obtenue avant décembre 2005) sur laquelle a reposé sa catégorisation. Des renseignements portant sur la quantité de cette substance sur le marché ont été transmis en réponse au Défi.

Même si l'évaluation des risques que présente le pourpre de bromocrésol pour l'environnement a été jugée hautement prioritaire, cette substance ne répond pas aux critères de la catégorisation pour le PFRE ou le REI, et on estime qu'elle ne pose pas un grave danger pour la santé humaine, compte tenu du classement attribué par d'autres organismes nationaux ou internationaux quant à sa cancérogénicité, à sa génotoxicité ou à sa toxicité sur le plan du développement ou de la reproduction. La présente évaluation est donc axée principalement sur les renseignements d'intérêt pour l'évaluation des risques touchant l'environnement.

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

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

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

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

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

La présente évaluation préalable a été préparée par le personnel du Programme des substances existantes de Santé Canada et d'Environnement Canada et elle intègre les résultats d'autres programmes exécutés par ces ministères. Cette évaluation préalable a fait l'objet d'une consultation et d'une étude consignée par des pairs. Par ailleurs, une ébauche de cette évaluation a fait l'objet d'une période de commentaires du public de 60 jours. Bien que des commentaires externes aient été pris en considération, Santé Canada et Environnement Canada assument la responsabilité du contenu final et des résultats de l'évaluation préalable. Les principales données et considérations sur lesquelles repose la présente évaluation sont résumées ci-après.

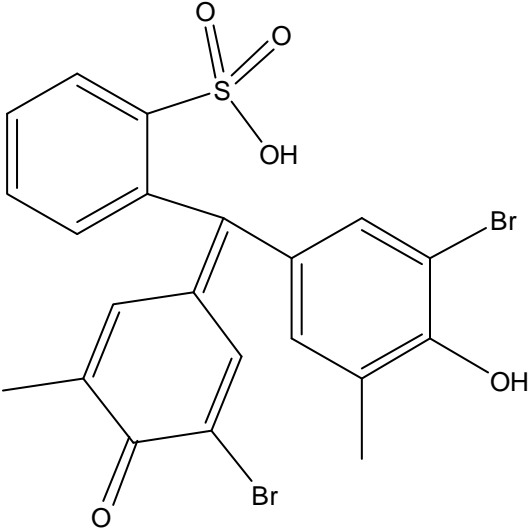
Identité de la substance

Nom de la substance

Aux fins du présent document, la substance dont il est question ici est appelée pourpre de bromocrésol.

Tableau 1. Identité de la substance – Pourpre de bromocrésol

| | |
|--|---|
| Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS) | 115-40-2 |
| Nom dans la liste intérieure des substances (LIS) | Pourpre de bromocrésol |
| Noms relevés dans les National Chemical Inventories (NCI)¹ | <i>5,5'-Dibromo-o-cresol sulfophthalein (ENCS)</i> <i>BROM CRESOL PURPLE (PICCS)</i> <i>bromocresol purple (EINECS, PICCS)</i> <i>Pourpre de bromocrésol (EINECS)</i> <i>Phenol, 4,4'-(1,1-dioxido-3H-2,1-benzoxathiol-3-ylidene)bis[2-bromo-6-methyl-</i> (TSCA, PICCS, ASIA-PAC, NZIoC) <i>Phenol, 4,4'-(3H-2,1-benzoxathiol-3-ylidene)bis[2-bromo-6-methyl-, S,S-dioxide (AICS)</i> |
| Autres noms | <i>o-Cresol, 4,4'-(3H-2,1-benzoxathiol-3-ylidene)bis[6-bromo-, S,S-dioxide; o-Toluenesulfonic acid, a,a-bis(5-bromo-4-hydroxy-m-tolyl)-a-hydroxy-, g-sultone; Benzenesulfonic acid, 2-[(5-bromo-4-hydroxy-3-methylphenyl)(3-bromo-5-methyl-4-oxo-2,5-cyclohexadien-1-ylidene)methyl]-; Dibromocresolsulfophthalein; NSC 374134</i> |
| Groupe chimique (Groupe de la LIS) | Produits chimiques organiques définis |
| Principale classe chimique ou utilisation | Colorants de triarylméthane |
| Principale sous-classe chimique | Bromophénolsulfophtaléines |
| Formule chimique | C ₂₁ H ₁₆ Br ₂ O ₅ S |

| | |
|---------------------------|--|
| Structure chimique |  |
| SMILES | <chem>OS(C1=CC=CC=C1/C2=CC(C)=C(O)C(Br)=C2)=C(C=C3C)/C=C(Br)C3=O)(=O)=O</chem> |
| Masse moléculaire | 540,23 g/mol |

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

La structure du pourpre de bromocrésol est souvent représentée avec un cycle benzoxathiole fermé. Cependant, une fois dans l'eau, ce cycle s'hydrolyse pour former un groupe sulfonate ionique. Étant donné que la forme hydrolysée est plus pertinente sur le plan environnemental, le SMILES pour cette forme a été intégré comme donnée d'entrée aux divers modèles utilisés dans cette évaluation.

Propriétés physiques et chimiques

Le tableau 2 présente les valeurs expérimentales et modélisées des propriétés physiques et chimiques du pourpre de bromocrésol qui se rapportent à son devenir dans l'environnement. Vu le peu de données expérimentales sur cette substance, on a dû effectuer des recherches pour trouver quelques analogues de structure étroitement apparentés. Le seul analogue sur lequel des données expérimentales existaient est le bleu de tétrabromophénol (n° CAS 115-39-9), substance également évaluée dans le cadre du Défi. Les renseignements sur la dénomination chimique du bleu de bromophénol sont fournis au tableau 3.

La validité des études importantes utilisées comme sources de données expérimentales sur certaines propriétés physiques et chimiques du pourpre de bromocrésol et de l'analogue bleu de tétrabromophénol a fait l'objet d'un examen critique. Ces examens (Sommaire de rigueur d'études) se trouvent à l'annexe 1. On a trouvé des études pertinentes lors de recherches documentaires menées récemment.

On privilégie, lorsqu'il en existe, les données expérimentales sur des analogues plutôt que les données modélisées sur la substance évaluée, surtout si les modèles ne produisent pas des résultats exacts. Vu le peu de données expérimentales sur le pourpre de bromocrésol et le bleu de tétrabromophénol (son analogue), on a eu recours à des modèles de relations quantitatives structure-activité (RQSA) pour générer des données sur les propriétés physiques et chimiques du pourpre de bromocrésol. Ces modèles (à l'exception de WSKOWWIN, 2000) sont principalement fondés sur des méthodes d'addition de fragments; autrement dit, ils s'appuient sur la structure d'un produit chimique donné. Seules les formes neutres d'un produit chimique peuvent être fournies comme données d'entrée à ces modèles (forme SMILES); par conséquent, les valeurs modélisées figurant au tableau 2 concernent la forme neutre du pourpre de bromocrésol.

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

| Propriété | Type | Valeur | Température (°C) | Références |
|------------------------------------|-----------------------|---|------------------|--------------------------|
| État physique | Expérimental | Cristaux violets à jaune pâle | n.d. | MSDS, 2006; O'Neil, 2001 |
| Point de décomposition (°C) | Expérimental | 241,5 | | PhysProp, 2006 |
| | | 241 à 242 | | O'Neil, 2001 |
| | Modélisé | 284,12 | | MPBPWIN, 2000 |
| Point d'ébullition (°C) | Modélisé | 653,12 | | MPBPWIN, 2000 |
| Pression de vapeur (Pa) | Modélisé ¹ | $6,31 \times 10^{-16}$ ($4,73 \times 10^{-18}$ mm Hg) | 25 | MPBPWIN, 2000 |

| | | | | |
|--|--|---|------|--|
| Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mol) | Modélisé | 1,18 x 10 ⁻¹⁴ (1,17 x 10 ⁻¹⁹ atm·m ³ /mol) | 25 | HENRYWIN, 2000 |
| Log K_{oe} (coefficient de partage octanol-eau) (sans dimension) | Modélisé | 2,73 | | KOWWIN, 2000 |
| | Analogue ² (forme ionique) | -3,07 | 25 | Franco <i>et al.</i> , 1999 |
| Log K_{co} (coefficient de partage carbone organique-eau – L/kg) (sans dimension) | Modélisé | 2,798 | | KOCWIN, 2000 Méthode (K _{oe}) |
| | Analogue ²⁻³ (forme ionique) | -2,91 à -2,02 | 25 | Franco <i>et al.</i> , 1999 |
| Solubilité dans l'eau (mg/L) | Expérimental | Quasi insoluble | n.d. | O'Neil, 2001 |
| | Analogue ² | 4 000 | n.d. | O'Neil, 2001 |
| | Modélisé ¹⁻⁴ | 1 000 000 | 25 | WSKOWWIN, 2000 |
| Solubilité dans d'autres solvants (g/L) | Expérimental | Soluble dans l'alcool et les alcalis dilués | n.d. | O'Neil, 2001 |
| pK_a (constante de dissociation acide) (sans dimension) | Expérimental | 6,49 | 25 | Yao et Byrne, 2001 |
| | | 6,40 | n.d. | Kulichenko <i>et al.</i> , 2001 |
| | | 6,3 | n.d. | O'Neil, 2001 |
| | Modélisé pK _{a1} pK _{a2} | 8,14 -0,90 ⁵ | | ACD, 2005 |

n.d. : non disponible.

¹ En fournissant au modèle les données expérimentales recensées sur le point de décomposition.

² Données expérimentales sur l'analogue de structure bleu de tétrabromophénol (n° CAS 115-39-9).

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

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

⁵ Une valeur négative indique une ionisation complète.

D'après les valeurs expérimentales de pK_a établies, plus de la moitié du pourpre de bromocrésol sera présent sous forme ionique à des pH supérieurs à 6,3 – 6,5. Compte tenu des pH enregistrés dans l'environnement (6 à 9), la plus grande partie (entre 50 % et 100 %) du pourpre de bromocrésol y sera présente sous forme ionique (forme anionique).

Ces valeurs expérimentales de pK_a concordent avec l'utilisation déclarée du pourpre de bromocrésol comme indicateur de pH (voir la section « Utilisations ») dans une gamme de pH de 5,2 à 6,8 (pH-meter.Info, 2005). L'ionisation du pourpre de bromocrésol n'est pas seulement due à la dissociation des groupes hydroxy, mais elle est également attribuable à l'hydrolyse du lien ester entre le carbone central et l'atome d'oxygène du cycle benzoxathiole. Cette réaction est suivie de la formation d'un groupement acide sulfonique qui devrait grandement accroître la solubilité de la substance dans l'eau. Les valeurs de pK_a pour le pourpre de bromocrésol ont été récemment définies sans toutefois être prises en compte au cours de la catégorisation.

En ce qui concerne la solubilité, on note un écart entre les données fournies au tableau 2 pour cette propriété. En effet, selon la conclusion qualitative de O'Neil (2001), la solubilité du pourpre de bromocrésol dans l'eau serait faible, tandis que la valeur modélisée, fondée sur des valeurs expérimentales pour le point de fusion et le $\log K_{oe}$ d'un analogue, indique une solubilité très élevée. O'Neil (2001) ne précise ce qu'il entend par « quasi insoluble » en termes de gamme de valeurs de solubilité. D'un point de vue écotoxicologique, une substance dont la solubilité dans l'eau n'est que de 1 mg/L peut être une source de préoccupation, tout dépendant de sa toxicité intrinsèque (Environnement Canada, 2003). D'après la valeur empirique de la solubilité d'un analogue de structure (4 000 mg/L; bleu de bromophénol) qui se trouve entièrement sous forme ionique aux pH observés dans l'environnement, et étant donné que le pourpre de bromocrésol sera surtout présent sous forme ionique dans l'environnement, on présume que cette substance est aussi très soluble dans l'eau. De plus, la comparaison des groupements fonctionnels du bleu de tétrabromophénol et du pourpre de bromocrésol laisse supposer que cette dernière substance pourrait être plus soluble que la première, puisque la solubilité augmente généralement à mesure que le nombre d'atomes de brome que compte une substance diminue. Il est possible que la valeur modélisée de la solubilité du pourpre de bromocrésol constitue une surestimation, puisqu'elle est fondée sur le $\log K_{oe}$ de la forme ionique de l'analogue bleu de bromophénol. Ce dernier devrait se trouver entièrement sous forme ionique aux pH enregistrés dans l'environnement (6 à 9), ce qui ne serait pas le cas pour le pourpre de bromocrésol.

En ce qui concerne les autres propriétés physiques et chimiques, les données expérimentales et les données sur l'analogue présentées au tableau 2 laissent supposer que le pourpre de bromocrésol est présent sous forme anionique aux pH enregistrés dans l'environnement, qu'il ne se bioaccumule pas dans les organismes, ne se lie pas aux particules et est très mobile dans le sol. On reconnaît toutefois que les valeurs de $\log K_{oe}$ et de $\log K_{co}$ de l'analogue peuvent sous-estimer la répartition du pourpre de bromocrésol puisque cette substance peut ne pas se trouver entièrement sous forme ionique, selon le pH dans l'environnement. La volatilité du pourpre de bromocrésol ne peut être évaluée car les valeurs modélisées de la pression de vapeur et de la constante de la loi de Henry ne sont probablement pas fiables (voir plus bas). Cependant, comme la substance est sous forme ionique aux pH enregistrés dans l'environnement, il est probable qu'elle soit faiblement volatile. L'incidence des propriétés physiques et chimiques de la substance sur le devenir de celle-ci dans l'environnement est traitée de manière plus approfondie plus loin dans le rapport.

Comme le montre le tableau 2, plusieurs modèles ne donnent pas de bons résultats pour ce qui est de l'estimation de certaines propriétés physiques et chimiques du pourpre de bromocrésol. Les valeurs modélisées du log K_{oe} et du log K_{co} , en particulier, diffèrent des valeurs expérimentales mesurées pour un analogue, et ce, par de nombreux ordres de grandeur. Cela est très probablement dû au fait que les structures chimiques des substances ionisables comme le pourpre de bromocrésol sont mal traduites par les ensembles d'étalonnage de certains des modèles utilisés. Comme les données modélisées ne sont pas fiables, les données sur l'analogue bleu de tétrabromophénol présentées dans le tableau 2 ont été utilisées au besoin dans le cadre de la présente évaluation.

Tableau 3. Identité du bleu de tétrabromophénol, analogue de structure du pourpre de bromocrésol

| | |
|--|--|
| Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS) | 115-39-9 |
| Nom dans la LIS | Bleu de tétrabromophénol |
| Principale classe chimique ou utilisation | Colorants de triarylméthane |
| Principale sous-classe chimique | Phénolsulfophtaléines |
| Formule chimique | $C_{19}H_{10}Br_4O_5S$ |
| Structure chimique | |
| SMILES | <chem>OS(C1=CC=CC=C1/C(C2=CC(Br)=C(O)C(Br)=C2)=C(C=C3Br)/C=C(Br)C3=O)(=O)=O</chem> |
| Masse moléculaire | 669,96 g/mol |

Sources

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

D'après les renseignements recueillis en réponse à un avis publié en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999), le pourpre de bromocrésol n'aurait pas été fabriqué, importé ou utilisé au Canada en quantité dépassant les seuils fixés (soit 100 kg pour la fabrication et l'importation et 1 000 kg pour l'utilisation) au cours de l'année civile 2006. Cependant, deux entreprises ont déclaré avoir utilisé cette substance en quantité inférieure au seuil de déclaration. Au total, huit entreprises canadiennes se sont désignées comme parties intéressées, c'est-à-dire comme ayant des intérêts commerciaux à l'égard de cette substance (Environnement Canada, 2007). Un avis semblable publié en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999) au cours de l'année civile 2005 a également révélé que le pourpre de bromocrésol n'avait pas été commercialisé en quantité atteignant le seuil de déclaration (soit 100 kg pour la fabrication et l'importation) pendant cette période. Cette année-là, cinq entreprises canadiennes se sont désignées comme parties intéressées (Canada, 2006b).

Selon les rapports, la quantité fabriquée, importée ou commercialisée au Canada au cours de l'année civile 1986 était de 500 kg. Le nombre de déclarants pour les années civiles 1984 à 1986 était inférieur à 4. Selon les renseignements recueillis en réponse aux avis publiés en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999), l'utilisation de cette substance a diminué au cours des 20 dernières années.

Utilisations

Aucun renseignement sur les utilisations n'a été transmis en réponse à l'avis émis en application de l'article 71 de la LCPE (1999) au cours de l'année civile 2006. Le dépouillement des sources publiées a permis de recenser les possibles utilisations suivantes pour le pourpre de bromocrésol : indicateur de pH (gamme de pH de 5,2 à 6,8) et réactif analytique dans les essais microbiologiques et biochimiques.

Rejets dans l'environnement

Comme aucune déclaration n'a été reçue en 2006 concernant l'utilisation, l'importation ou la fabrication de pourpre de bromocrésol au Canada en quantité égale ou supérieure aux seuils de déclaration précisés dans l'avis publié en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999) (Environnement Canada, 2007), les rejets de cette substance dans l'environnement au Canada devraient être très faibles.

Devenir dans l'environnement

Étant donné ses propriétés physiques et chimiques (tableau 2) et sa voie d'entrée possible dans l'environnement, on s'attend à trouver le pourpre de bromocrésol principalement dans l'eau de surface et éventuellement dans le sol et l'eau souterraine.

La constante de dissociation acide (pK_a) de 6,3 à 6,5 établie pour le pourpre de bromocrésol indique que la moitié de cette substance se dissociera à ces valeurs de pH. Aux pH ordinairement observés dans les plans d'eau naturels (6 à 9), la plus grande partie (entre 50 % et 100 %) du pourpre de bromocrésol sera donc présente sous forme ionique en raison de deux réactions : 1) la déprotonation de chacun des deux groupements hydroxyles; ou 2) l'hydrolyse du lien ester entre le carbone central et l'atome d'oxygène dans le cycle benzoxathiole, qui laisse une charge négative nette sur l'atome d'oxygène. En conséquence, la répartition de cette substance chimique dans l'environnement sera prédite de manière plus exacte par les valeurs de $\log K_{oe}$ et de $\log K_{co}$ dont on dispose pour la forme ionique que par les valeurs relatives à la forme neutre (tableau 2; données sur l'analogue).

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

Si le pourpre de bromocrésol est utilisé comme papier indicateur de pH ou de toute autre manière entraînant la production de déchets solides, il aboutira dans les décharges. On présume que la dégradation dans ces endroits sera nulle ou faible et que le pourpre de bromocrésol sera vraisemblablement lessivé dans les couches de terrain ou entraîné par ruissellement, compte tenu de sa forte solubilité attendue dans l'eau et sa faible affinité pour les éléments constitutifs du sol, comme l'indique la très faible valeur de $\log K_{co}$ pour la forme ionique de l'analogue. La substance pourrait finir par atteindre les eaux souterraines et les eaux de surface locales, ou les deux. Dans ce cas aussi, le pourpre de bromocrésol ne se volatiliserait pas dans l'air à partir du sol, vu sa tendance à la dissociation ionique aux pH naturels. On ne s'attend pas à ce que cette substance soit rejetée directement dans l'air. L'hypothèse selon laquelle le pourpre de bromocrésol ne se dégradera pas dans l'eau et le sol se fonde sur l'évaluation de sa persistance dans ces milieux, comme il est expliqué ci-après.

Persistance et potentiel de bioaccumulation

Persistance dans l'environnement

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

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

En l'absence de données expérimentales, on a eu recours aux modèles prédictifs RQSA de dégradation cités au tableau 4, ci-dessous, pour évaluer la persistance du pourpre de bromocrésol. Compte tenu de l'importance écologique du milieu aquatique, du fait que la plupart des modèles s'appliquent à ce milieu, et du fait que l'on s'attend à ce que le pourpre de bromocrésol soit rejeté dans ce milieu et y demeure, on a principalement examiné la biodégradation dans l'eau. Bien que les modèles de dégradation soient fondés sur la structure des substances et ne traitent que la forme neutre du pourpre de bromocrésol, la plupart des valeurs modélisées (tableau 4) sont jugées fiables, car les ensembles d'étalonnage des modèles utilisés comportaient certaines substances chimiques de structure comparable à celle du pourpre de bromocrésol.

Tableau 4. Données modélisées sur la dégradation du pourpre de bromocrésol

| Processus du devenir | Modèle et fondement du modèle | Résultat | Interprétation | Demi-vie extrapolée (jours) | Référence ou source de l'extrapolation |
|----------------------------|--|--|--|-----------------------------|--|
| EAU | | | | | |
| Biodégradation (aérobie) | BIOWIN, 2000 Sous-modèle 1 : probabilité linéaire | 0,29 | Biodégradation lente dans l'eau | s.o. | s.o. |
| Biodégradation (aérobie) | BIOWIN, 2000 Sous-modèle 2 : probabilité non linéaire | 0,00 | Biodégradation lente dans l'eau | s.o. | s.o. |
| Biodégradation (aérobie) | BIOWIN, 2000 Sous-modèle 3 : enquête d'expert (biodégradation ultime) | 2,00 | Résiste à la biodégradation dans l'eau | 180 240 | U.S. EPA, 2002 Aronson <i>et al.</i> , 2006 |
| Biodégradation (aérobie) | BIOWIN, 2000 Sous-modèle 4 : enquête d'expert (biodégradation primaire) | 2,92 | La biodégradation primaire dans l'eau prend des semaines ou des mois | 37,5 | U.S. EPA, 2002 Aronson <i>et al.</i> , 2006 |
| Biodégradation (aérobie) | BIOWIN, 2000 Sous-modèle 5 : probabilité linéaire du MITI | -0,32 | Biodégradation lente dans l'eau | > 60 | Aronson <i>et al.</i> , 2006 |
| Biodégradation (aérobie) | BIOWIN, 2000 Sous-modèle 6 : probabilité non linéaire du MITI | 0,00 | Biodégradation lente dans l'eau | > 60 | Aronson <i>et al.</i> , 2006 |
| Biodégradation (anaérobie) | BIOWIN, 2000 Sous-modèle 7 : probabilité linéaire | -0,66 | Biodégradation lente | s.o. | s.o. |
| Biodégradation | BIOWIN, 2000 Conclusion générale | Non | Ne se biodégrade pas facilement dans l'eau | s.o. | s.o. |
| Biodégradation (aérobie) | TOPKAT, 2004 Probabilité (MITI 1) | Ne fait pas partie du domaine acceptable | s.o. | s.o. | s.o. |
| Biodégradation (aérobie) | CATABOL, 2004-2008 DBO*, % (OCDE 301C) | Ne fait pas partie du domaine acceptable | s.o. | s.o. | s.o. |

* DBO : demande biologique en oxygène

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

Les résultats présentés dans le tableau 4 montrent que, selon tous les modèles de probabilité (BIOWIN 1, 2, 5, 6 et 7), la biodégradation du pourpre de bromocrésol serait lente. En fait, la plupart des valeurs de probabilité sont inférieures à 0,3, valeur de démarcation proposée par Aronson *et al.* (2006) pour identifier les substances dont la demi-vie est supérieure à 60 jours (d'après les modèles de probabilité du MITI), et toutes les valeurs de probabilité sont inférieures à 0,5, valeur de démarcation proposée par les concepteurs de modèles pour définir une biodégradation lente. La demi-vie obtenue à l'aide du modèle d'enquête sur la biodégradation primaire (BIOWIN 4), qui est de l'ordre de « semaines ou mois », est réputée correspondre à la demi-vie d'environ 37,5 jours estimée par l'U.S. EPA (2002) et par Aronson *et al.* (2006). Le résultat obtenu à l'aide du modèle d'enquête sur la biodégradation ultime (BIOWIN 3), soit « résiste à la biodégradation », est réputé correspondre à la demi-vie d'environ 180 jours estimée par l'U.S. EPA (2002), et à la demi-vie de 240 jours estimée par Aronson *et al.* (2006). On s'attend aussi à ce que la substance se dégrade lentement en conditions anaérobies. La conclusion générale tirée de l'application du modèle BIOWIN est que la substance ne se biodégrade pas facilement. D'autres modèles de la dégradation ultime (CATABOL et TOPKAT) n'ont pas produit de résultat acceptable car la substance ne faisait pas partie de leurs domaines d'applicabilité respectifs.

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

En utilisant un ratio d'extrapolation de 1:1 (eau:sol) pour la demi-vie associée à la biodégradation (Boethling *et al.*, 1995), on obtient aussi une demi-vie > 182 jours pour la biodégradation dans le sol. Cela indique que le pourpre de bromocrésol devrait être persistant dans le sol.

Dans l'ensemble, les données empiriques sur les colorants provenant de l'ETAD (1992, 1995) de même que les données modélisées (tableau 4) montrent que le pourpre de bromocrésol répond aux critères de la persistance dans l'eau et le sol (demi-vies ≥ 182 jours) énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000). Cette substance ne devrait pas être présente dans l'air ou les sédiments.

Potentiel de bioaccumulation

Il n'existe pas de données expérimentales sur le facteur de bioaccumulation (FBA) ou le facteur de bioconcentration (FBC) du pourpre de bromocrésol ou d'un analogue de structure. Comme la valeur expérimentale du pK_a du pourpre de bromocrésol est de 6,3 à 6,5 (tableau 2), cette substance devrait être présente principalement sous forme ionique aux pH enregistrés dans l'environnement (6 à 9). La valeur expérimentale du $\log K_{oe}$ pour l'analogue bleu de tétrabromophénol sous forme ionique est de -3,07 (tableau 2), ce qui indique un faible potentiel de bioaccumulation. On reconnaît que la valeur de $\log K_{oe}$ de l'analogue peut entraîner une sous-estimation de la répartition du pourpre de bromocrésol puisque cette substance ne se trouve pas entièrement sous forme ionique à des pH de 6 à

7. On s'attend toutefois à ce que son $\log K_{oe}$ demeure faible. L'ionisation n'a pas été prise en compte pendant la catégorisation en regard du potentiel de bioaccumulation.

Comme on ne dispose pas de données expérimentales sur le FBA ou le FBC du pourpre de bromocrésol, on a plutôt employé une méthode prédictive fondée sur les modèles du FBA et du FBC dont on disposait, comme le montre le tableau 5 ci-dessous. La valeur expérimentale du $\log K_{oe}$ pour l'analogue bleu de tétrabromophénol sous forme ionique a été fournie comme donnée d'entrée aux modèles. Les valeurs modélisées de la bioaccumulation ne tiennent pas compte de la métabolisation possible de la substance; par conséquent, la bioaccumulation pourrait avoir été surestimée. Cependant, comme les facteurs de bioconcentration et de bioaccumulation prédits pour le pourpre de bromocrésol sont faibles, cela ne devrait pas avoir d'incidence sur les conclusions quant à la bioaccumulation.

Le modèle modifié du FBA de Gobas pour le niveau trophique intermédiaire prévoit un FBA inférieur à 1 L/kg chez les poissons, ce qui signifie que le pourpre de bromocrésol a un faible potentiel de bioconcentration et de bioamplification dans l'environnement. Encore une fois, cet énoncé se fonde sur le $\log K_{oe}$ de l'analogue, qui se trouve entièrement sous forme ionique aux pH enregistrés dans l'environnement. Même si le modèle produit une sous-estimation du potentiel de bioaccumulation du pourpre de bromocrésol lorsque celui-ci n'est pas entièrement dissocié (p. ex. à un pH de 6 à 7), on s'attend quand même à ce que le facteur de bioaccumulation soit faible.

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

Tableau 5. FBA et FBC prévus pour le pourpre de bromocrésol chez les poissons

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

D'après les données expérimentales sur le $\log K_{oe}$ de l'analogue bleu de bromophénol et les valeurs modélisées pour le pourpre de bromocrésol, on a conclu que ce dernier ne

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

Potentiel d'effets nocifs sur l'environnement

Évaluation des effets sur l'environnement

A – Dans le milieu aquatique

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

Aux pH enregistrés dans l'environnement (6 à 9), le pourpre de bromocrésol sera surtout présent sous sa forme ionique dans les écosystèmes aquatiques. Comme on s'attend à ce que le produit soit très soluble dans l'eau, les organismes aquatiques pourraient y être exposés. Cependant, comme on croit que le produit a peu d'affinité pour les lipides (voir le tableau 5), il ne devrait pas s'accumuler de manière importante dans les tissus des organismes exposés.

Il n'existe pas de données expérimentales acceptables sur la toxicité du pourpre de bromocrésol ou d'un analogue de structure en milieu aquatique. Des données modélisées ont donc été utilisées pour estimer cette toxicité potentielle (tableau 6). On a fourni au modèle ECOSAR les valeurs expérimentales de solubilité dans l'eau et de $\log K_{oe}$ (forme ionique) de l'analogue, telles qu'elles figurent au tableau 2. Il n'a pas été possible de soumettre ces valeurs aux autres modèles employés (OASIS Forecast et AIEPS) car seules les données sur la structure chimique sont acceptées comme données d'entrée par ces modèles. OASIS Forecast produit une valeur de K_{oe} d'après la structure qui lui est fournie (forme neutre), et l'utilise pour générer une estimation de la toxicité. AIEPS consiste, quant à lui, en un réseau neuronal probabiliste basé sur un modèle de prévision qui utilise des fragments structuraux et la présence ou l'absence d'atomes entre la substance modélisée et celles comprises dans l'ensemble d'étalonnage. Ce modèle calcule ensuite une prévision pour trois paramètres de toxicité aiguë (tête-de-boule, *Daphnia magna* et *Pseudokirchneriella subcapitata*).

Tableau 6. Données modélisées sur la toxicité pour les organismes aquatiques

| Organisme | Type d'essai | Paramètre | Valeur (mg/L) | Références |
|----------------|----------------------------|-------------|--|----------------------|
| Poissons | Toxicité aiguë (96 heures) | CL_{50}^1 | > limite de solubilité dans l'eau ³ | ECOSAR, 2004 |
| | | | 0,078 | OASIS Forecast, 2005 |
| <i>Daphnia</i> | Toxicité aiguë | CL_{50}^1 | 0,148 | AIEPS, 2003-2007 |

| | | | | |
|----------------|-------------------------------|-------------------------------|---|--------------|
| | (48 heures) | | | |
| <i>Daphnie</i> | Toxicité aiguë (48 heures) | CL ₅₀ ¹ | > limite de solubilité dans l'eau ³ | ECOSAR, 2004 |

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

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

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

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

Les résultats produits par le modèle OASIS Forecast indiquent que le pourpre de bromocrésol est très toxique (c'est-à-dire que sa CL₅₀ est inférieure ou égale à 1,0 mg/L), mais on estime que cette valeur n'est pas fiable. En effet, l'écart entre cette valeur et les prédictions du modèle ECOSAR est attribuable au fait que la valeur modélisée du log K_{oc} pour la molécule neutre est utilisée dans les calculs produits par OASIS Forecast. Comme on peut le voir au tableau 2, cette valeur n'est pas représentative du comportement de partage de la molécule sous forme ionique. En outre, la structure chimique du pourpre de bromocrésol n'est pas bien reflétée dans l'ensemble d'étalonnage utilisé par OASIS. De même, le modèle AIEPS n'a pas fourni de prévisions fiables au vu de l'indice de similitude qui indiquait que la majorité des substances chimiques dans l'ensemble d'étalonnage avait moins de 60 % de similitude avec le pourpre de bromocrésol.

Étant donné la grande persistance du pourpre de bromocrésol dans l'environnement (voir le tableau 4), une exposition chronique est probable. Toutefois, vu les effets toxiques aigus vraisemblablement faibles de la substance et son potentiel de bioaccumulation peu élevé, sa toxicité chronique en milieu aquatique devrait elle aussi être faible.

B – Dans d'autres milieux

On n'a trouvé aucune étude concernant les effets de cette substance sur l'environnement dans d'autres milieux que l'eau (par exemple dans les sédiments ou les sols). Il n'existe pas de modèle RQSA pouvant générer des données sur la toxicité dans ces autres milieux.

Évaluation de l'exposition de l'environnement

Il n'existe pas de données de surveillance environnementale pour cette substance. D'après les déclarations reçues en réponse à l'avis publié en vertu de l'article 71 de la LCPE (Environnement Canada, 2007), les rejets de pourpre de bromocrésol dans l'environnement au Canada sont présumés être très faibles. En conséquence, les concentrations de cette substance dans les milieux naturels devraient aussi être très faibles.

Même si le pourpre de bromocrésol ne répond pas aux critères relatifs au potentiel de bioaccumulation définis dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000), il peut être persistant dans l'environnement et, selon le degré d'exposition, pourrait avoir des effets nocifs sur l'environnement. Pour étudier cet aspect, on a procédé à une évaluation quantitative de l'exposition associée au rejet de cette substance dans les écosystèmes aquatiques.

On a estimé les concentrations dans l'environnement sur la base des renseignements disponibles, y compris les estimations relatives aux quantités de la substance, les taux de rejet possibles et les caractéristiques des éventuels plans d'eau récepteurs. L'outil d'exposition générique industriel – Milieu aquatique (Industrial Generic Exposure Tool – Aquatic, ou IGETA) d'Environnement Canada a servi à estimer la concentration de la substance dans un cours d'eau générique qui reçoit des effluents industriels (Environnement Canada, 2008a). Cet outil est fondé sur le pire des scénarios, c'est-à-dire le cas où la substance serait entièrement rejetée par une seule installation, à un point de déversement unique dans un cours d'eau. Le scénario générique visait à fournir des estimations de concentrations fondées sur des hypothèses prudentes quant à la quantité de substance traitée et rejetée, au nombre de jours de traitement, au taux d'élimination à la station d'épuration des eaux usées et à la taille du cours d'eau récepteur. Le scénario de rejets industriels modélisé par l'outil tient compte des données sur la charge obtenues de sources telles que des enquêtes industrielles, ainsi que des connaissances sur la distribution des rejets industriels au pays. L'outil calcule une concentration environnementale estimée (CEE) en présumant une dilution instantanée dans un cours d'eau récepteur de petite taille. L'équation et les données utilisées pour calculer la CEE dans le cours d'eau récepteur sont décrites dans Environnement Canada (2008b). Aucune déclaration d'utilisation de cette substance au Canada en quantité supérieure au seuil de déclaration (1 000 kg) n'a été reçue en réponse à un avis publié en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999) (Environnement Canada, 2007). Le seuil de déclaration de 100 kg s'appliquant à la fabrication et à l'importation a été utilisé comme estimation, suivant le pire des scénarios, de la quantité de pourpre de bromocrésol rejetée dans les égouts par une installation industrielle. Les autres paramètres clés étaient les suivants : 261 jours d'activité (jours ouvrables seulement, d'après les utilisations attendues), aucune élimination aux stations d'épuration des eaux usées (pire des scénarios) et débit de 0,65 m³/s dans le cours d'eau récepteur (15^e centile de la distribution des débits dans les cours d'eau au pays). La CEE ainsi obtenue est de 0,0064 mg/L.

Caractérisation des risques pour l'environnement

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

Une analyse du quotient de risque qui intègre des estimations prudentes de l'exposition à la substance et des données sur ses répercussions écologiques a été réalisée pour le milieu aquatique afin de déterminer si la substance peut avoir ou non des effets nocifs sur l'environnement. Pour cela, une valeur prudente de concentration estimée sans effet (CESE) a été obtenue en sélectionnant la valeur critique de la toxicité (VCT) la plus faible pour des organismes aquatiques donnés, à partir de résultats fiables du modèle ECOSAR. Dans ce cas-ci, on a prévu que la VTC serait supérieure à la limite de solubilité dans l'eau de 4 000 mg/L (voir le tableau 6). Cette valeur a été divisée par un facteur d'évaluation de 1 000 pour traduire les incertitudes associées à la variabilité interspécifique et intraspécifique de la sensibilité, à l'extrapolation de paramètres de toxicité aiguë et chronique et à l'utilisation de données de toxicité modélisées visant à décrire les conditions de terrain. La valeur de CESE obtenue était de 4 mg/L. La CEE calculée à l'aide de l'IGETA a ensuite été utilisée en combinaison avec la CESE pour calculer le quotient de risque (p. ex. $CEE/CESE = 0,0016$).

Étant donné que l'IGETA fournit une estimation prudente de l'exposition, et vu le facteur élevé d'évaluation employé pour estimer les seuils d'effet chronique (CESE), les résultats montrent que l'exposition locale attribuable à une source ponctuelle de rejets industriels de pourpre de bromocrésol en milieu aquatique présente un risque très faible pour l'environnement.

En résumé, les renseignements recueillis laissent supposer que le pourpre de bromocrésol n'aurait pas d'effets nocifs sur les milieux naturels s'il était rejeté dans l'environnement au Canada. Les données sur l'importation, la fabrication et l'utilisation du pourpre de bromocrésol au Canada impliquent de très faibles rejets de cette substance dans l'environnement. Selon les données recueillies pour les années civiles 1986, 2005 et 2006, l'utilisation de pourpre de bromocrésol n'est pas en hausse.

Si cette substance était rejetée dans l'environnement, elle se retrouverait principalement dans l'eau, et peut-être dans le sol. Elle serait persistante dans ces milieux, mais ne se bioaccumulerait pas dans les organismes. La toxicité aiguë du pourpre de bromocrésol est faible pour les organismes aquatiques. Une analyse du quotient de risque fondée sur le pire des scénarios industriels plausible a montré qu'aucun risque ne serait associé à l'exposition des organismes aquatiques au pourpre de bromocrésol. En raison de l'absence de données sur la toxicité pour les organismes terrestres, on n'a pu calculer les quotients de risque associés à ce milieu. On ne s'attend cependant pas à ce qu'il y ait

d'effets nocifs sur les organismes terrestres compte tenu des très faibles rejets prévus de cette substance.

Incertitudes dans l'évaluation des risques pour l'environnement

Il existe un nombre limité de données expérimentales sur les propriétés physiques et chimiques du pourpre de bromocrésol, et il n'existe aucune donnée expérimentale sur la dégradation, les facteurs de bioaccumulation ou l'écotoxicité de cette substance. Les lacunes dans les données expérimentales ont été comblées de manière satisfaisante par le recours aux données sur un analogue de structure (le bleu de tétrabromophénol) et par l'utilisation de modèles RQSA. Si des incertitudes sont associées à l'utilisation de ces modèles pour estimer les propriétés chimiques et biologiques, il demeure que les méthodes employées ont permis une interprétation significative des renseignements. Il faut par ailleurs noter que, en ce qui concerne l'écotoxicité, il n'existe pas de modèle RQSA permettant de générer des données sur la toxicité pour les organismes terrestres. On n'a donc pu effectuer d'analyse du quotient de risque associé à ce milieu.

Conclusion

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

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

Références

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

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

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

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

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

[BIOWIN] Biodegradation Probability Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 4.10. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

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

Canada. 1999. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*. L.C., 1999, chap. 33, partie 5, art. 77. *Gazette du Canada*, Partie III, vol. 22, n° 3. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partIII/1999/g3-02203.pdf>

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

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

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

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

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

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

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

Environnement Canada. 2003. *Document d'orientation sur la catégorisation des substances organiques et inorganiques inscrites sur la Liste intérieure des substances du Canada : Définition des substances qui sont persistantes, bioaccumulables et qui présentent une toxicité intrinsèque pour les organismes non humains.* Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes [publié en avril 2004 sur CD-ROM, intitulé Programme des substances existantes]. Disponible sur demande auprès de : Division des substances existantes, Environnement Canada, Ottawa, K1A 0H3.

Environnement Canada. 2007. Données sur les substances du lot 4 recueillies en vertu de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis concernant certaines substances identifiées dans le quatrième lot du Défi.* Préparé par : Environnement Canada, Programme des substances existantes.

Environnement Canada. 2008a. Guidance for conducting ecological assessments under CEPA 1999, Science Resource Technical Series, Technical Guidance Module: The Industrial Generic Exposure Tool – Aquatic (IGETA). Document de travail. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes.

Environnement Canada. 2008b. Industrial Generic Exposure Tool – Aquatic (IGETA) report (115-40-2 IGETA report 2008-05-29). Ébauche. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes.

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

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

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

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

[KOCWIN] Organic Carbon Partition Coefficient Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 2.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté en mai 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[KOWWIN] Octanol-Water Partition Coefficient Program for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.67. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution

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

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

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

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

[MSDS] Material Safety Data Sheet [Internet]. 2006. Solon (OH) : MP Biomedicals, LCC (Étas-Unis) Bromocresol purple, CAS RN 115-40-2. [consulté le 30 avril 2008]. Accès : <http://www.msdsonline.com>. Accès limité.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Yao, W., Byrne, R.H. 2001. Spectrophotometric determination of freshwater pH using bromocresol purple and phenol red. *Environ. Sci. Technol.* 35:1197-1201.

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

Annexe 1 – Sommaire de rigueur d'études

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

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

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

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

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

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

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

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

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

| Question | Pondération | Réponse | Note |
|--|-------------|---|------|
| Référence : Kulichenko, S.A., Fesenko, S.A., Fesenko, N.I. 2001. Color indicator system for acid-base titration in aqueous micellar solutions of the cationic surfactant tridecylpyridinium. <i>J. Anal. Chem.</i> 56(11):1002-1006. | | | |
| Substances d'essai : Bleu de tétrabromophénol (n° CAS 115-39-9), pourpre de bromocrésol (n° CAS 115-40-2) et Xylenol Blue (n° CAS 125-31-5) | | | |
| Propriété physique et chimique mesurée : pK _a | | | |
| Pourriez-vous répéter l'expérience avec l'information disponible? | 5 | Oui, mais on ne mentionne pas la façon dont les solutions d'indicateur ont été préparées. | 4 |
| Un objectif clair est-il énoncé? | 1 | Oui | 1 |
| La qualité de l'eau est-elle caractérisée ou précisée (distillée ou désionisée)? | 2 | Non | 0 |
| Les résultats sont-ils présentés de façon détaillée, claire et compréhensible? | 3 | Oui | 3 |
| Les données proviennent-elles d'une source primaire plutôt que d'un article cité? | 3 | Oui | 3 |
| La substance a-t-elle été testée à des concentrations inférieures à sa limite de solubilité dans l'eau? | 5 | On présume que oui | 3 |
| Y avait-il absence de particules? | 2 | Non mentionné | 0 |
| A-t-on fait un essai avec une substance de référence ayant une constante connue? | 3 | Non, mais une comparaison effectuée avec d'autres données publiées a confirmé que les valeurs mesurées semblent exactes (voir les commentaires ci-après). | 3 |
| D'autres processus intervenant dans le devenir ont-ils été pris en considération? | 5 | s.o. | s.o. |
| A-t-on fait un essai témoin (à blanc)? | 3 | s.o. | s.o. |
| La température a-t-elle été maintenue constante? | 5 | La température n'est pas mentionnée, mais ce facteur n'a pas une grande incidence sur le pK _a (Yao et Byrne, 2001). | s.o. |
| L'expérience a-t-elle eu lieu à une température proche de la température ambiante (15 à 30 °C)? | 3 | La température n'est pas mentionnée, mais ce facteur n'a pas une grande incidence sur le pK _a (Yao et Byrne, 2001). | s.o. |
| La pureté de la substance est-elle précisée (> 98 %)? | 3 | Oui (de qualité analytique) | 3 |
| L'identité de la substance a-t-elle été attestée? | 3 | Seul le nom commun des substances a été fourni, mais cela est jugé suffisant (voir les commentaires ci-après). | 3 |

| | | | |
|--|---|-----|---|
| La source de la substance est-elle indiquée? | 1 | Non | 0 |
| Résultats : | <p>pK_a du bleu de tétrabromophénol = 4,09 ± 0,03 pK_a du pourpre de bromocrésol = 6,40 ± 0,02 pK_a du Xylenol Blue = 9,33 ± 0,02</p> | | |
| Note globale : | 23/31 ou 74 % | | |
| Code de fiabilité d'EC : Catégorie de fiabilité (élevée, satisfaisante, faible) : | 2 Satisfaisante | | |
| Note | Évaluation par un évaluateur d'Environnement Canada (mai 2008) | | |

Autres commentaires (de la part de l'évaluateur d'Environnement Canada)

- Les auteurs ont mesuré le pK_a des substances d'essai dans des solutions aqueuses. Ils ont également mesuré ce qu'ils appellent le pK_{eff} pour les mêmes substances dans des solutions aqueuses micellaires contenant le surfactant ionique tridécylpyridinium. Ce sont les valeurs de pK_a établies pour les solutions aqueuses qui sont utilisées aux fins de l'évaluation des risques.
- Même si les n^{os} CAS n'ont pas été fournis, ce qui aurait permis de vérifier l'identité des substances d'essai, la consultation des NCI confirme qu'un seul n^o CAS est associé aux noms pourpre de bromocrésol et Xylenol Blue. Dans le cas du bleu de tétrabromophénol, un seul n^o CAS est associé à la forme non saline.
- Les valeurs de pK_a mesurées dans le cadre de la présente étude sont similaires à d'autres valeurs publiées pour les mêmes substances. Les valeurs énoncées dans la présente étude sont donc considérées comme fiables.

6,49 pour le pourpre de bromocrésol (Yao et Byrne, 2001)
comparativement à
6,40 (présente étude)

8,03 et 8,08 pour le rouge de phénol (Yao et Byrne, 2001; PhysProp, 2006)
comparativement à
8,00 (présente étude)

7,0 pour le bleu de bromothymol (O'Neil, 2001)
comparativement à
7,30 (présente étude)

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

| Question | Pondération | Réponse | Note |
|---|-------------|---|------|
| Référence : Yao, W., Byrne, R.H. 2001. Spectrophotometric determination of freshwater pH using bromocresol purple and phenol red. <i>Environ. Sci. Technol.</i> 35:1197-1201. | | | |
| Substances d'essai : Pourpre de bromocrésol (n° CAS 115-40-2) | | | |
| Propriété physique et chimique mesurée : pK _a | | | |
| Pourriez-vous répéter l'expérience avec l'information disponible? | 5 | En partie | 3 |
| Un objectif clair est-il énoncé? | 1 | Oui | 1 |
| La qualité de l'eau est-elle caractérisée ou précisée (distillée ou désionisée)? | 2 | Oui (désionisée) | 2 |
| Les résultats sont-ils présentés de façon détaillée, claire et compréhensible? | 3 | Article très technique. Emploi d'une notation inhabituelle (pK ₁ ^o au lieu de pK _a) | 1,5 |
| Les données proviennent-elles d'une source primaire plutôt que d'un article cité? | 3 | Oui | 3 |
| La substance a-t-elle été testée à des concentrations inférieures à sa limite de solubilité dans l'eau? | 5 | On présume que oui | 3 |
| Y avait-il absence de particules? | 2 | Non mentionné | 0 |
| A-t-on fait un essai avec une substance de référence ayant une constante connue? | 3 | Non, mais une comparaison effectuée avec d'autres données publiées a confirmé que les valeurs mesurées semblent exactes (voir les commentaires ci-après). | 3 |
| D'autres processus intervenant dans le devenir ont-ils été pris en considération? | 5 | s.o. | s.o. |
| A-t-on fait un essai témoin (à blanc)? | 3 | s.o. | s.o. |
| La température a-t-elle été maintenue constante? | 5 | Oui (sauf dans la partie de l'expérience où c'est en fait l'incidence de ce facteur qui est étudiée) | 5 |
| L'expérience a-t-elle eu lieu à une température proche de la température ambiante (15 à 30 °C)? | 3 | Oui (25 °C) | 3 |
| La pureté de la substance est-elle précisée (> 98 %)? | 3 | Non | 0 |
| L'identité de la substance a-t-elle été attestée? | 3 | Seul le nom commun des substances a été fourni, mais cela est jugé suffisant (voir les commentaires ci-après). La substance sous forme de sel a été | 2 |

| | | | |
|---|--|-----------|---|
| | | utilisée. | |
| La source de la substance est-elle indiquée? | 1 | Oui | 1 |
| Résultats : | pK _a du pourpre de bromocrésol = 6,49 | | |
| Note globale : | 27,5/39 ou 70 % | | |
| Code de fiabilité d'EC : | 2 | | |
| Catégorie de fiabilité (élevée, satisfaisante, faible) : | Satisfaisante | | |
| Note | Évaluation par un évaluateur d'Environnement Canada (mai 2008) | | |

Autres commentaires (de la part de l'évaluateur d'Environnement Canada)

- Même si les n^{os} CAS n'ont pas été fournis, ce qui aurait permis de vérifier l'identité des substances d'essai, la consultation des NCI confirme qu'un seul n^o CAS est associé aux noms pourpre de bromocrésol et rouge de phénol. Ces substances ont été utilisées sous forme de sels dans le cadre de l'expérience.
- Les valeurs de pK_a mesurées dans le cadre de la présente étude sont similaires à d'autres valeurs publiées pour les mêmes substances. Les valeurs énoncées dans la présente étude sont donc considérées comme fiables.

6,40 pour le pourpre de bromocrésol (Kulichenko *et al.*, 2001)
comparativement à
6,49 (présente étude)

8,00 et 8,08 pour le rouge de phénol (Kulichenko *et al.*, 2001; PhysProp, 2006)
comparativement à
8,03 (présente étude)