

Ébauche d'évaluation préalable pour le Défi concernant le

**3',6'-Bis(diethylamino)spiro[isobenzofurane-1(3*H*),9'-
[9*H*]xanthene]-3-one
(Solvent Red 49)**

**Numéro de registre du Chemical Abstracts Service
509-34-2**

**Environnement Canada
Santé Canada**

Mars 2010

Sommaire

En application de l'article 74 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* [LCPE (1999)], les ministres de l'Environnement et de la Santé ont effectué une évaluation préalable du 3',6'-bis(diéthylamino)spiro[isobenzofurane-1(3*H*),9'-[9*H*]xanthène]-3-one (Solvent Red 49), dont le numéro de registre du Chemical Abstracts Service est 509-34-2. Une priorité élevée a été accordée à l'évaluation préalable de cette substance inscrite au Défi, car elle répond aux critères environnementaux de la catégorisation relatifs à la persistance, au potentiel de bioaccumulation et à la toxicité intrinsèque pour les organismes non humains et elle semble être commercialisée au Canada.

L'évaluation des risques que présente le Solvent Red 49 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 visant les substances de la *Liste intérieure*. La présente évaluation est donc axée principalement sur les renseignements utiles à l'évaluation des risques pour l'environnement.

En 2006, aucune entreprise n'a déclaré avoir importé ou fabriqué cette substance dans des quantités supérieures au seuil de déclaration de 100 kg/an. De plus, aucune entreprise n'a déclaré l'avoir utilisé dans des quantités supérieures au seuil de déclaration de 1 000 kg/an au cours de la même année. Cependant, cinq entreprises ont manifesté un intérêt pour le Solvent Red 49.

Comme aucune déclaration n'a été reçue en 2006 concernant l'utilisation, l'importation ou la fabrication du Solvent Red 49 au Canada en quantité égale ou supérieure aux seuils de déclaration précisés dans l'avis publié en application de l'article 71 de la LCPE (1999), les rejets de cette substance dans l'environnement au Canada devraient être très faibles. De manière prudente, on a supposé que 100 kg par année étaient utilisés dans des scénarios d'utilisation par les industries et les consommateurs.

Le Solvent Red 49 présente des valeurs modélisées élevées d'hydrosolubilité et un faible coefficient de partage octanol-eau. Il est présent dans l'environnement principalement sous forme de zwitterion (c.-à-d. présence de charges positives et négatives) non volatil, il est relativement stable du point de vue chimique et aurait tendance à se répartir dans les sédiments, s'il est rejeté dans les eaux de surface, et à s'adsorber sur les sols s'il est rejeté sur la terre. Ce comportement est principalement régi par les interactions électrostatiques.

D'après ses propriétés physiques et chimiques, le Solvent Red 49 devrait être persistant dans l'eau, le sol et les sédiments. Néanmoins, de nouvelles données expérimentales relatives à sa solubilité dans l'octanol et l'eau et des données empiriques sur la bioaccumulation d'un analogue chimique laissent entendre que ce colorant a un faible potentiel de bioaccumulation dans les tissus adipeux des organismes. Il répond donc aux critères de la persistance prévus dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*, mais il ne répond pas à ceux de la bioaccumulation en vertu de ce

règlement. En outre, de nouvelles données expérimentales sur la toxicité d'un analogue chimique, ainsi que de nouvelles prévisions sur la toxicité qui tiennent compte des estimations révisées du potentiel de bioaccumulation, semblent indiquer que la substance ne devrait présenter qu'un potentiel modéré de toxicité pour les organismes aquatiques.

Aux fins de la présente évaluation préalable, on a envisagé deux scénarios d'exposition très prudents aussi bien pour l'utilisation par les industries que pour celle par les consommateurs, entraînant des rejets du Solvent Red 49 dans le milieu aquatique. La concentration environnementale estimée la plus élevée dans l'eau, pour le scénario d'utilisation industrielle, était plus de deux fois inférieure à la concentration estimée sans effet calculée pour le biote aquatique sensible.

Bien qu'il soit reconnu que le Solvent Red 49 présente un risque pour la santé humaine, aucune déclaration n'a été reçue concernant l'utilisation, l'importation ou la fabrication de cette substance au Canada en quantité égale ou supérieure aux seuils de déclaration précisés dans l'avis publié en application de l'article 71 de la LCPE (1999). La probabilité d'exposition de la population générale est donc faible et, par conséquent, le risque pour la santé humaine est également considéré comme faible. Il est donc proposé de conclure que le Solvent Red 49 est une substance qui ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité, à une concentration ou dans des conditions qui constituent un danger au Canada pour la vie ou la santé humaines.

Selon ces renseignements, il est proposé de conclure que le Solvent Red 49 ne pénètre pas 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, ni à mettre en danger l'environnement essentiel pour la vie. Le Solvent Red 49 répond aux critères de la persistance prévus dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*, mais il ne répond pas à ceux de la bioaccumulation en vertu de ce règlement.

D'après les renseignements disponibles, il est proposé de conclure que le Solvent Red 49 ne répond à aucun des critères de l'article 64 de la LCPE (1999).

Puisque cette substance est inscrite sur la *Liste intérieure*, son importation et sa fabrication au Canada ne requièrent pas de déclaration en application du paragraphe 81(1). Étant donné les propriétés dangereuses de cette substance, on craint que des activités nouvelles non recensées ni évaluées fassent en sorte qu'elle réponde aux critères de l'article 64 de la LCPE (1999). Par conséquent, il est recommandé de modifier la *Liste intérieure* par application du paragraphe 87(3) de la Loi afin d'indiquer que le paragraphe 81(3) s'applique à cette substance. Ainsi, toute nouvelle activité (fabrication, importation ou utilisation) relative à cette dernière devra être déclarée et faire l'objet d'une évaluation des risques pour l'environnement et la santé humaine. De plus, des activités de recherche et de surveillance viendront, le cas échéant, appuyer la vérification des hypothèses utilisées au cours de cette évaluation préalable.

Introduction

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

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

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

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

On a décidé d'accorder une attention hautement prioritaire à l'évaluation des risques pour l'environnement du 3',6'-Bis(diéthylamino)spiro[isobenzofurane-1(3*H*),9'-[9*H*]xanthène]-3-one, car cette substance a été jugée persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques et il semble qu'elle soit commercialisée au Canada. Le volet du Défi portant sur cette substance a été publié dans la *Gazette du Canada* le 14 mars 2009 (Canada, 2009). En même temps a été publié le profil de cette substance, qui présentait l'information technique (obtenue avant décembre 2005) sur laquelle a reposé sa catégorisation. Des renseignements sur les utilisations de la substance ont été reçus en réponse au Défi.

Même si l'évaluation des risques que présente le 3',6'-bis(diéthylamino)spiro[isobenzofurane-1(3*H*),9'-[9*H*]xanthène]-3-one pour l'environnement est jugée hautement prioritaire, cette substance ne répond pas aux critères pour le PFRE ou le REI. 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 jugés essentiels pour déterminer si une substance répond aux critères de toxicité des substances chimiques au sens de l'article 64 de la Loi¹. 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 ébauche d'évaluation préalable prend en considération les renseignements sur les propriétés chimiques, les dangers, les utilisations de la substance en question et l'exposition à celle-ci, y compris l'information supplémentaire fournie dans le cadre du Défi. Les données pertinentes pour l'évaluation préalable de cette substance sont tirées de publications originales, de rapports de synthèse et d'évaluation, de rapports de recherche de parties intéressées et d'autres documents consultés au cours de recherches documentaires menées récemment, jusqu'en décembre 2009 (sections du document concernant la santé humaine et les aspects écologiques). Les études les plus importantes ont fait l'objet d'une évaluation critique. Il est possible que les résultats de modélisation aient servi à formuler des conclusions.

Lorsqu'ils étaient disponibles et pertinents, les renseignements présentés dans l'évaluation des dangers provenant d'autres instances ont également été pris en compte. La présente ébauche d'évaluation préalable ne constitue pas un examen exhaustif ou critique de toutes les données disponibles. Il s'agit plutôt d'un sommaire des renseignements essentiels qui appuient la conclusion proposée.

La présente ébauche d'évaluation préalable a été préparée par le personnel du Programmes des substances existantes de Santé Canada et d'Environnement Canada et elle intègre les résultats d'autres programmes exécutés par ces ministères. La partie de la présente évaluation qui porte sur l'écologie a fait l'objet d'une étude consignée par des pairs ou d'une consultation de ces derniers.

Les renseignements et considérations critiques sur lesquels sont fondées l'ébauche d'évaluation sont récapitulés dans ci-dessous.

¹ La détermination du fait qu'un ou plusieurs des critères de la section 64 sont remplis est basée sur une évaluation des risques potentiels pour l'environnement et/ou la santé humaine associés aux expositions dans l'environnement en général. Pour les humains, cela inclut, sans toutefois s'y limiter, les expositions par l'air ambiant et intérieur, l'eau potable, les produits alimentaires et l'utilisation de produits de consommation. Une conclusion établie en vertu de la LCPE (1999) sur les substances dans les lots 1 à 12 du Plan de gestion des produits chimiques n'est pas pertinente à une évaluation, qu'elle n'empêche pas non plus, par rapport aux critères de risque définis dans le Règlement sur les produits contrôlés, qui fait partie d'un cadre réglementaire pour le Système d'information sur les matières dangereuses au travail (SIMDUT) pour les produits destinés à être utilisés au travail.

Identité de la substance

Nom de la substance

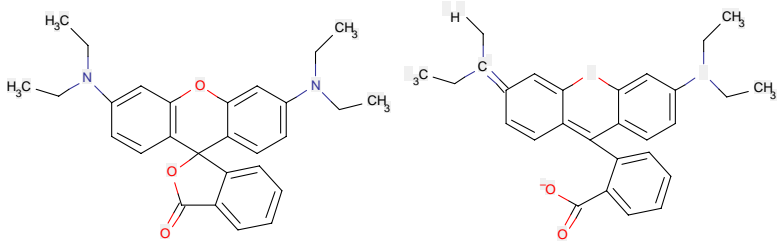
Aux fins du présent document, la substance est appelée Solvent Red 49, appellation tirée du nom utilisé dans l'inventaire des substances chimiques existantes et nouvelles du Japon (ENCS) et dans l'inventaire des produits et substances chimiques des Philippines (PICCS).

Le Solvent Red 49 est défini par le Colour Index (CII, 2002-2009) comme étant une combinaison de plusieurs numéros de registre CAS, notamment le n° CAS 509-34-2. Cependant, dans le cadre du présent rapport et de l'évaluation de cette substance, le nom commun « Solvent Red 49 » renvoie exclusivement au n° CAS 509-34-2.

Le Solvent Red 49 est une base libre qui devrait exister sous deux formes tautomères en solution, soit la forme lactonique et la forme quinonoïde, et la forme quinonoïde devrait être prédominante à des pH environnementaux.

Tableau 1. Identité de la substance – Solvent Red 49

Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS)	509-34-2
Nom dans la LIS	3',6'-Bis(diethylamino)spiro[isobenzofurane-1(3H),9'-[9H]xanthene]-3-one
Noms relevés dans les National Chemical Inventories (NCI)¹	<i>Spiro[isobenzofuran-1(3H),9'-[9H]xanthen]-3-one, 3',6'-bis(diethylamino)-</i> (TSCA, PICCS, ASIA-PAC, AICS, NZIoC) <i>3',6'-bis(diethylamino)spiro[isobenzofuran-1(3H),9'-[9H]xanthene]-3-one</i> (EINECS) <i>Solvent Red 49</i> (ENCS, PICCS) <i>C.I. solvent red 049</i> (ECL) <i>SPIRO[ISOBENZOFURAN-1(3H),9'-[9H]XANTHEN]-3-ONE</i> <i>3'-6'-BIS(DIETHYLAMINO)-</i> (PICCS) <i>RHODAMINE B BASE</i> (PICCS) <i>C.I. SOLVENT RED 49, (SPIRO[ISOBENZOFURANYL(3H), 9'-[9H]XANTHEN]-3-ONE, 3',6'-BIS(DIETHYLAMINO)-)</i> (PICCS) <i>SPIRO[ISOBENZOFURANYL(3H),9'-[9H]XANTHEN]-3-ONE, 3',6'-BIS(DIETHYLAMINO)-</i> (PICCS)
Autres noms	<i>3',6'-Bis(diéthylamino)-3-oxospiro[isobenzofuran-1(3H),9'-[9H]xanthène]; Aizen Rhodamine B Base, Aizen SOT Pink I Baso Red 546; Baso Red NB 546, Certiquial Rhodamine; Eljon Magenta Toner; Fast Oil Pink B, Fluoran, 3',6'-bis(diethylamino)-</i> <i>Lacquer Pink S; Neptune Red Base 543; Neptune Red Base NB 543LD, NSC 43944; Oil Pink 312; Oil Pink 330; Orient Oil Pink</i>

	<i>312; Orient Pink 312; Rhodamine B Base Extra; Rhodamine B Extra Base; Rhodamine B lactone; Rhodamine Base B; Rhodamine Base B Extra; Rhodamine Base FB; Rhodamine S (Russian); lactone; Rhodamine S lactone, Waxoline Rhodamine B; Waxoline Rhodamine BS</i>
Groupe chimique (Groupe de la LIS)	Produits chimiques organiques définis
Principale classe chimique ou utilisation	Teintures
Principale sous-classe chimique	Pigments de xanthène
Formule chimique	C ₂₈ H ₃₀ N ₂ O ₃
Structure chimique	 <p>The image shows two chemical structures of Rhodamine B. The left structure is the lactone form, featuring a central xanthene ring system with a lactone ring fused to one of the benzene rings. It has two diethylamino groups (-N(CH₂CH₃)₂) attached to the other two benzene rings. The right structure is the quinonoid form, where the central carbon of the xanthene ring is double-bonded to one of the oxygen atoms, and the lactone ring is open, resulting in a quinonoid structure. It also features two diethylamino groups.</p> <p>Tautomère lactonique</p> <p>Tautomère quinonoïde</p>
SMILES²	<chem>C12(c3c(Oc4c1ccc(c4)N(CC)CC)cc(N(CC)CC)cc3)c1c(ccc1)C(O2)=O</chem> (tautomère lactonique) ³
SMILES²	<chem>c12O\C3=C\C(=N(CC)CC)\C=C/C3=C(\c3c(C(=O)O)cccc3)/c1ccc(N(CC)CC)c2</chem> (tautomère quinonoïde protoné) ⁴
Masse moléculaire	442,56 g/mol

¹ National Chemical Inventories (NCI). 2007 : AICS (inventaire des substances chimiques de l'Australie); ASIA-PAC (listes des substances de l'Asie-Pacifique); ECL (liste des substances chimiques existantes de la Corée); EINECS (inventaire européen des substances chimiques commerciales existantes); ENCS (inventaire des substances chimiques existantes et nouvelles du Japon); NZIoC (inventaire des substances chimiques de la Nouvelle-Zélande); PICCS (inventaire des produits et substances chimiques des Philippines); et TSCA (inventaire des substances chimiques visées par la *Toxic Substances Control Act*).

² Simplified Molecular Input Line Entry System

³ La forme lactonique de la substance a été utilisée pour la modélisation de l'hydrosolubilité, car il s'agirait de la forme la plus représentative du Solvent Red 49 à l'état solide avant d'être solubilisée au contact de l'eau.

⁴ Comme la forme ionisée de cette substance ne pouvait être utilisée dans la plupart des modèles utilisés dans cette évaluation, cette notation SMILES correspond à la forme protonée du tautomère quinonoïde (zwitterion) qui a une masse moléculaire de 443,56 g/mol.

Propriétés physiques et chimiques

Les tautomères sont des formes isomériques d'une substance, généralement formées par la délocalisation d'électrons et la mobilité d'un atome ou d'un groupe d'atomes, qui se produisent normalement à l'état liquide ou dans une solution, mais non à l'état solide. Dans le cas du Solvent Red 49, cela se produit de façon réversible, par l'ouverture de la lactone ou du groupe ester cyclique adjacent au groupe phényle et la délocalisation des électrons π dans le groupe xanthène créant des charges positives et négatives (zwitterion) qui forment des groupes d'ammonium et carboxylique, respectivement (Arbeloa et Ojeda, 1981). À un pH entre 6 et 9, la forme quinonoïde soluble devrait être la forme prédominante.

Étant donné la nature ionisable du Solvent Red 49 et sa structure semblable à celle de la rhodamine B (n° CAS 81-88-9) [sel de chlorhydrate du Solvent Red 49], ce sel est un composé analogue approprié de cette substance (des justifications supplémentaires sur la pertinence de cet analogue sont fournies à la section sur le devenir dans l'environnement). Le tableau 2 présente les données physiques et chimiques (valeurs expérimentales et modélisées) du Solvent Red 49 et de son analogue sel de chlorhydrate qui se rapportent à son devenir dans l'environnement. Les structures chimiques du Solvent Red 49 et de la rhodamine B sont illustrées au tableau 3. Les études clés à partir desquelles des données expérimentales sur certaines de ces propriétés ont été recensées dans les publications évaluées par les paires et ont fait l'objet d'un examen critique afin d'en assurer la validité.

Les modèles basés sur les relations quantitatives structure-activité (RQSA) ont servi à produire des données pour déterminer quelques propriétés physiques et chimiques du Solvent Red 49. Ces modèles sont principalement fondés sur des méthodes d'addition de fragments; autrement dit, ils s'appuient sur la structure d'un produit chimique donné. Comme ces modèles n'acceptent que la forme protonée d'un produit chimique comme entrée (sous forme SMILES), la plupart des valeurs modélisées indiquées dans le tableau 2 concernent la forme protonée du tautomère quinonoïde du Solvent Red 49, telle qu'elle est présentée au tableau 1. La valeur modélisée du $\log K_{oe}$ pour le Solvent Red 49 de 1,93 a été déterminée par le modèle KOWWIN (2000) au moyen de la méthode d'ajustement de la valeur expérimentale, d'après une valeur empirique du $\log K_{oe}$ de 2,28 pour le sel rhodamine B (Benoit-Guyod *et al.*, 1979). De plus, l'hydrosolubilité modélisée du Solvent Red 49 a été estimée à l'aide d'une méthode d'ajustement de la valeur expérimentale semblable, cependant, dans ce cas, la structure lactonique a été jugée plus pertinente au processus de devenir, tel qu'il est indiqué au tableau 1. Cette méthode sert à estimer un paramètre (c.-à-d. $\log K_{oe}$ ou hydrosolubilité) pour une substance chimique donnée (dans ce cas, la rhodamine B) en comparant sa structure à celle d'un composé analogue pour laquelle on dispose d'une valeur empirique du paramètre en question. La valeur empirique du paramètre pour cet analogue est ajustée en fonction de l'effet des différences structurales sur le paramètre lorsqu'on compare les deux substances chimiques. Enfin, la valeur du $\log K_{co}$ a été modélisée à l'aide de la méthode de régression fondée sur le $\log D_{oe}$ du modèle PCKOCWIN (2000). Ces ajustements permettent de corriger largement les modèles relativement aux caractéristiques

d'ionisation du Solvent Red 49, qui pourraient ne pas avoir été prises en compte adéquatement.

Tableau 2. Propriétés physiques et chimiques du Solvent Red 49 et de son sel de chlorhydrate

Propriété	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
Point de fusion (°C)				
Solvent Red 49	Expérimental	160		Standarcom, 2009
Rhodamine B	Expérimental	165		Rankin, 2009
Point d'ébullition (°C)				
Solvent Red 49	Modélisé	729,11 ¹		MPBPWIN, 2000
Rhodamine B	Expérimental	Dissolution		FS, 2008
Masse volumique (kg/m³)				
Rhodamine B	Expérimental	0,79		FS, 2009
Diamètre transversal (nm)				
Solvent Red 49	Modélisé	1,6-1,8		CPOP, 2008
Pression de vapeur (Pa)				
Solvent Red 49	Modélisé	1,52 x 10 ⁻¹³ (1,14 x 10 ⁻¹⁵ mm Hg)	25	MPBPWIN, 2000
Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mol)				
Solvent Red 49	Modélisé	1,90 x 10 ⁻¹⁴ (1,88 x 10 ⁻¹⁹ atm·m ³ /mol)	25	HENRYWIN, 2000
Log K_{oe} (coefficient de partage octanol-eau) [sans dimension]				

Propriété	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
Solvent Red 49	Modélisé	1,93 ²		KOWWIN, 2000
Rhodamine B	Expérimental	2,28		Benoit-Guyod <i>et al.</i> , 1979
Log K_{co} (coefficient de partage carbone organique-eau) [sans dimension]				
Solvent Red 49	Modélisé	1,21 ³		PCKOCWIN, 2000
Solubilité dans l'eau (mg/L)				
Solvent Red 49	Modélisé	11 000 ^{4,5}	25	WATERNT, 2002
Rhodamine B	Expérimental	20 000		Kasnavia <i>et al.</i> , 1999
pKa (constante de dissociation) (sans dimension)				
Rhodamine B	Expérimental	3,1 ⁶	20	Arbeloa et Ojeda, 1981
	Expérimental	3,22 ⁶	20-25	Mchedlov-Petrosyan et Kukhtik, 1994

¹La substance se décompose avant d'atteindre cette température.

²Méthode de l'ajustement des valeurs expérimentales utilisée avec la rhodamine B et la valeur du log K_{oe} de 2,28.

³D'après la valeur estimée du log K_{oe} de 1,93.

⁴La valeur de l'hydrosolubilité a été modélisée à l'aide de la structure lactonique (SMILES), étant donné qu'il s'agit de la forme à l'état solide avant d'être dissoute dans une solution.

⁵Méthode de l'ajustement des valeurs expérimentales utilisée avec la rhodamine B et la valeur d'hydrosolubilité de 20 000 mg/L.

⁶Protonation du groupe carboxylate du zwitterion.

Tableau 3. Tautomères du Solvent Red 49 et analogue du sel

N° CAS	Nom commun (masse moléculaire en g/mol)	Nom dans la LIS	Structure chimique
509-34-2	Solvent Red 49 (442,56) (lactone)	3',6'-Bis(diéthylamino)spiro[isobenzofurane-1(3H),9'-[9H]xanthène]-3-one	
3375-25-5	Solvent Red 49 (442,56) (quinonoïde)	s. o.	
81-88-9	Rhodamine B (479,02)	Chlorure de 9-(2-carboxyphényl)-3,6-bis(diéthylamino)xanthylium	

Source

Le Solvent Red 49 n'est pas présent naturellement dans l'environnement.

Une enquête menée auprès de l'industrie conformément à l'article 71 de la LCPE (1999) a permis de recueillir des renseignements récents (Environnement Canada, 2009). Cette enquête demandait que soient fournies des données sur la fabrication, l'importation et l'utilisation du Solvent Red 49 au Canada pour l'année civile 2006. Dans le contexte de l'enquête susmentionnée, les entreprises qui n'étaient pas tenues de fournir des données selon les critères établis, mais qui avaient un intérêt commercial se rapportant à la substance en question, ont été invitées à s'identifier en tant que parties intéressées.

En 2006, aucune entreprise n'a déclaré avoir importé ou fabriqué cette substance dans des quantités supérieures au seuil de déclaration de 100 kg/an. Aucune entreprise n'a déclaré avoir utilisé cette substance dans des quantités supérieures au seuil de déclaration de

1 000 kg/an en 2006. Cependant, cinq entreprises ont manifesté un intérêt pour le Solvent Red 49.

Lors de l'élaboration de la Liste intérieure des substances (LIS), entre 1 000 et 10 000 kg ont été déclarés pour les activités de fabrication, d'importation et de commercialisation de Solvent Red 49 en 1986. Le nombre de déclarants pour les années civiles 1984 à 1986 était de sept.

Le Solvent Red 49 a été reconnu comme substance chimique produite en faible quantité dans l'Union européenne (UE). Sa production au sein de l'Union européenne a été estimée à environ 10 tonnes par an (ESIS, 2007). Le volume de production annuel de Solvent Red 49 aux États-Unis se situait entre 4,5 et 225 tonnes en 1986, 1990, 1994 et 1998 (USEPA, 1986-2002). Le Solvent Red 49 a été utilisé en Suède entre 1999, au Danemark et en Norvège entre 2000 et 2005, ainsi qu'en Finlande entre 2001 et 2003 (SPIN, 2006).

Utilisations

Aucune entreprise n'a déclaré avoir fabriqué, importé ou utilisé la substance au Canada en 2006 en quantités supérieures au seuil de déclaration en réponse à l'avis émis en application de l'article 71 de la LCPE (1999) [Environnement Canada, 2009]. Une entreprise a toutefois déclaré que le Solvent Red 49 est utilisé dans les fluides caloporteurs à de très faibles concentrations.

Le Solvent Red 49 est utilisé au Canada comme un colorant dans certains colliers d'animaux à des concentrations allant de 0.018 to 0.03%. Ces produits ont été enregistrés pour la lutte contre les puces et les tiques chez les chiens et les chats et ne contiennent aucune utilisation dans les aliments (Communication personnelle de ARLA, 2007; 2010 de Santé Canada du Bureau de la gestion du risque – source non-citée).

Des codes d'utilisation de la LIS ont été indiqués pour le Solvent Red 49, soit :

- 13 – Colorant – pigment/teinture/encre
- 21 – Composant de formulation
- 44 – Solvant/transporteur
- 61 – Produits électriques ou électroniques
- 76 – Produits chimiques organiques : industriels
- 77 – Produits chimiques organiques : spécialité
- 84 – Produits photographiques et de photocopie
- 85 – Pigments, teintures et encre d'imprimerie
- 89 – Impression et reliure

Le Solvent Red 49 était également utilisé dans la fabrication d'engins de transport en Norvège et dans des produits et substances chimiques pour l'industrie de la peinture en Suède (SPIN, 2006).

Des preuves supplémentaires indiquent que le Solvent Red 49 pourrait être utilisé à l'échelle mondiale dans diverses applications, dont l'encre dans les stylos à bille, l'encre dans les cartouches pour ordinateur, les encres pour l'héliogravure et comme colorant pour les huiles, les graisses et les cires (CII, 2002-2009).

Au Canada, le Solvent Red 49 n'est pas présent sur la liste du *Règlement sur les aliments et les drogues* à l'alinéa C.01.040.2 (3)a) comme colorant qui peut être employé dans les drogues à usage interne et externe (Canada [1978]). Le Solvent Red 49 n'a pas été approuvé comme additif dans les aliments. La Direction des aliments n'a reçu ni soumissions pour son utilisation dans les matériaux d'emballage d'aliments ni pour formulation d'additifs indirects. (Communication personnelle en 2010 de la Direction des aliments de Santé Canada au Bureau des substances existantes)

Le Solvent Red 49 (no CAS 509-34-2) n'est pas présentement sur la liste des ingrédients pour cosmétique (Santé Canada 2009) et aucun produit contenant le Solvent Red 49 n'a été mentionné dans la base de données du Système de déclaration des cosmétiques (SDC 2009) sous ses noms communs "Solvent Red 49" ou "Solvent Red 49:1" (SDC 2009), tandis que la Rhodamine B (no CAS 81-88-9) est présentement sur la liste des ingrédients de cosmétique de Santé Canada comme Solvent Red 49:1 (CI 45170) et Violet basique10 (CI 45170:1) (Santé Canada, 2009).

En Europe, le Solvent Red 49 (NR CAS 509-34-2) ensemble avec la Rhodamine B base (RN CAS 81-88-9) et la Rhodamine B-stearate (NR CAS 6373-07-5) ne figurent pas sur la liste des agents de coloration autorisés pour les produits cosmétiques (Commission européenne 2009). Aux États unis, la Rhodamine B (comme D&C Red No.19) et la Rhodamine B stearate (comme D&C Red No.37) ne sont pas autorisées à être utilisées dans les drogues et cosmétiques (US FDA 1988; Lipman 1995).

Rejets dans l'environnement

Les rejets de Solvent Red 49 dans l'environnement pourraient découler de différentes pertes de la substance pendant sa fabrication, son utilisation industrielle ainsi que son utilisation commerciale et par les consommateurs. Les pertes peuvent être regroupées en sept types : (1) déversements dans les eaux usées; (2) émissions atmosphériques; (3) pertes sur des surfaces pavées ou non pavées; (4) transformation chimique; (5) élimination sur les sites d'enfouissement; (6) élimination par recyclage; et (7) élimination par incinération.

Toutefois, comme aucune déclaration n'a été reçue en 2006 concernant l'utilisation, l'importation ou la fabrication du Solvent Red 49 au Canada en quantité égale ou supérieure aux seuils de déclaration précisés dans les avis publiés (Environnement Canada, 2009) en vertu de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de*

l'environnement (1999), les rejets de cette substance dans l'environnement au Canada devraient être très faibles.

Le seuil de déclaration de 100 kg a été utilisé tout au long de la présente évaluation préalable afin de cerner la masse potentielle de cette substance utilisée au Canada, qui serait sous la quantité correspondant au seuil de déclaration.

Devenir dans l'environnement

La forme lactonique de Solvent Red 49 (voir le tableau 1) prédomine seulement à des pH inférieurs à 1, de sorte qu'à des pH pertinents du point de vue de l'environnement (entre 6 et 9), la forme quinonoïde serait celle qui prédomine (Arbeloa et Ojeda, 1981). En outre, à des pH pertinents du point de vue de l'environnement, la forme quinonoïde zwitterionique (c.-à-d. chargée à la fois négativement et positivement) est la plus importante, étant donné que le $\log pK_a$ du groupe carboxylique est de 3,1 à 3,2 (voir le tableau 2) et que la charge positive du groupe d'ammonium est π -stabilisée dans la forme quinonoïde (Wight, 2000). Par conséquent, la spéciation chimique du Solvent Red 49 dans le milieu aqueux à des pH pertinents du point de vue de l'environnement devrait être semblable à celle de l'analogue rhodamine B (voir le tableau 3; données sur l'analogue). En fait, à des concentrations et à des pH pertinents du point de vue de l'environnement, les deux formes devraient être essentiellement la même substance zwitterionique, bien que la rhodamine B ait un contre-ion chlore alors que le Solvent Red 49 attirerait sans doute un autre contre-ion chargé négativement présent dans l'environnement.

Les auteurs d'une étude portant sur certains colorants de type xanthène dans une usine municipale de traitement des eaux usées (Borgerding et Hites, 1994) ont indiqué que la répartition entre les phases solide et liquide pourrait dépendre des interactions ioniques entre les colorants et les solides ou de processus d'équilibre hydrophobe simples. Des examens de l'utilisation de la rhodamine B comme traceur hydraulique prudent ont montré que les colorants de type rhodamine, y compris la rhodamine B, et des substances connexes s'adsorbent aux sédiments organiques et inorganiques selon la présence et la charge des particules (Kasnavia *et al.*, 1999). Étant donné que la rhodamine B existe sous forme de zwitterion, l'adsorption sur des surfaces minérales chargées négativement (p. ex. argiles, silice) et positivement (p. ex. alumine) peut se produire. En fait, Smart et Laidlaw (1977) ont découvert que, sur huit colorants fluorescents différents utilisés dans le traçage de l'eau de surface, la rhodamine B présentait la plus forte sorption aux sédiments organiques et inorganiques. La sorption de la rhodamine B aux surfaces minérales inorganiques était si forte que la substance n'était pas considérée comme un choix approprié comme colorant traceur hydraulique dans l'environnement (Kasnavia *et al.*, 1999). Compte tenu de ces tendances pour la rhodamine B ainsi que de la faible valeur prévue d'hydrosolubilité pour le Solvent Red 49 (11 g/L) par rapport à celle mesurée pour la rhodamine B (20 g/L), on s'attend à ce que le Solvent Red 49, lorsqu'il est rejeté dans l'eau, se répartisse dans les sédiments et qu'une plus petite quantité reste dans la colonne d'eau.

Vu la forte hydrosolubilité modélisée du Solvent Red 49 (11 g/L) et sa tendance à former un zwitterion identique à celui de la rhodamine B en solution à un pH pertinent sur le plan environnemental, lorsqu'il est rejeté dans le sol, le Solvent Red 49 devrait demeurer en grande partie dans le sol et une certaine partie devrait se répartir dans l'eau interstitielle. Il ne devrait pas se répartir dans l'air de façon importante.

Persistence et potentiel de bioaccumulation

Persistence dans l'environnement

Aucune donnée de surveillance environnementale ayant trait à la présence de Solvent Red 49 dans l'environnement canadien (air, eau, sol et sédiments) n'a été relevée. D'après l'Ecological and Toxicological Association of Dyes and Organic Pigments Manufacturers (ETAD, 1995), les teintures, à part quelques exceptions, sont considérées comme essentiellement non biodégradables dans des conditions aérobies. Des évaluations répétées de la biodégradabilité immédiate et intrinsèque à l'aide d'essais acceptés (les Lignes directrices de l'OCDE pour les essais de produits chimiques) ont confirmé cette hypothèse (Pagga et Brown, 1986; ETAD, 1992). Étant donné la structure chimique du Solvent Red 49 (p. ex. amines tertiaires substituées et hétérocycliques), rien ne permet de penser que sa biodégradation serait différente de la biodégradation des teintures décrite généralement (ETAD, 1995).

Les seules données empiriques disponibles sur la biodégradation du Solvent Red 49 montraient une perte négligeable après une incubation de 4 semaines avec des boues activées (tableau 4a), ce qui laisse supposer que cette substance se biodégrade lentement.

Tableau 4a. Données empiriques sur la dégradation du Solvent Red 49 et de la rhodamine B

Milieu	Processus du devenir	Valeur pour la dégradation	Paramètre et unités de la dégradation	Référence
Solvent Red 49				
Eau	Biodégradation ¹	1 %	Dégradation en 4 semaines	NITE, 2002
Rhodamine B				
Eau	Photodégradation	61,6	demi-vie, heures	Yager et Yue, 1988
Eau	Photo-oxydation	30	demi-vie, jours	Buxton, 1988

¹Ligne directrice de l'OCDE n° 301 C, essai MITI modifié (I)

La rhodamine B absorbe la lumière du spectre UV à des longueurs d'onde supérieures à 290 nm (Arbeloa et Ojeda, 1981); elle a donc un potentiel de photolyse direct à la lumière du soleil. Dans une étude de photolyse dans laquelle on exposait des éprouvettes contenant des solutions de rhodamine B dissoute dans de l'eau distillée à la lumière du soleil à l'extérieur, la rhodamine B avait une demi-vie de photodégradation moyenne de 61,6 heures (Yager et Yue, 1988). Comme on estime que les formes dissoutes de rhodamine B et de Solvent Red 49 sont identiques, le Solvent Red 49 devrait se photolyser à la même vitesse lorsqu'il est exposé à la lumière du soleil.

En plus de la photolyse directe, la rhodamine B et le Solvent Red 49 pourraient subir une photo-oxydation dans l'eau naturelle exposée à la lumière du soleil. Leur structure contient des groupes fonctionnels (liaisons oléfiniques, amines aromatiques) qui sont sensibles aux photooxydants (radicaux hydroxyles et peroxydes) présents dans l'eau naturelle (Mill et Mabey, 1985). Une constante expérimentale de vitesse de réaction avec les radicaux hydroxyles dans l'eau pour la rhodamine B (Buxton *et al.*, 1988) correspond à une demi-vie d'environ 30 jours d'exposition au soleil.

Comme peu de données expérimentales sur la dégradation du Solvent Red 49 sont disponibles, une méthode du poids de la preuve reposant sur des relations quantitatives structure-activité (RQSA) (Environnement Canada, 2007) a aussi été utilisée avec les modèles de dégradation présentés au tableau 4b ci-après, en plus des valeurs sur la dégradation présentées au tableau 4a. Étant donné l'importance écologique du milieu aquatique, le fait que la plupart des modèles disponibles s'appliquent à l'eau et que le Solvent Red 49 devrait être libéré dans ce milieu, la biodégradation dans l'eau est la biodégradation qui a surtout été étudiée.

Dans l'air, une valeur de demi-vie de l'oxydation atmosphérique prévue inférieure à 2 jours en phase gazeuse pour le Solvent Red (voir le tableau 4b) démontre que cette substance est susceptible de s'oxyder rapidement, bien que l'atmosphère ne soit pas un milieu préoccupant important pour cette substance et que l'efficacité de ce processus d'élimination soit limitée par le fait que très peu de Solvent Red 49 est susceptible d'exister en phase gazeuse.

Le tableau 4b résume les résultats de la dégradation dans divers milieux naturels que prédisent les modèles RQSA disponibles.

Tableau 4b. Données modélisées sur la dégradation du Solvent Red 49

Processus du devenir	Modèle et fondement du modèle	Résultat et prévision du modèle	Demi-vie extrapolée (jours OU heures)
AIR			
Oxydation atmosphérique	AOPWIN, 2000 ¹	$t_{1/2} = 0,022$ jour	< 2
Réaction avec l'ozone	AOPWIN, 2000 ¹	$t_{1/2} = 0,002$ jour	< 2
Biodégradation primaire			
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 ¹ Sous-modèle 4 : enquête d'expert (résultats qualitatifs)	3,00 ² « se biodégrade relativement rapidement - en semaines »	< 182
Biodégradation ultime			
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 ¹ Sous-modèle 3 : enquête d'expert (résultats qualitatifs)	2,00 ² « se biodégrade lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 ¹ Sous-modèle 5 : Probabilité linéaire MITI	0,15 ³ « se biodégrade très lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2000 ¹ Sous-modèle 6 : probabilité non linéaire MITI	0,012 ³ « se biodégrade très lentement »	> 182
Biodégradation (aérobie)	CPOP, 2008 % DBO (demande biologique en oxygène)	100 % « se biodégrade rapidement »	< 182

¹ EPISuite (2007)

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

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

Contrairement aux résultats du modèle BIOWIN présentés au tableau 4b qui prévoient une biodégradation ultime lente, le modèle CPOP prévoit une biodégradation rapide pour le Solvent Red 49. Étant donné que la substance était hors du domaine d'applicabilité du modèle, ce dernier résultat n'est pas fiable. Toutefois, les valeurs modélisées à l'aide du modèle BIOWIN dans le tableau 4b sont jugées fiables, comme leurs ensembles d'étalonnage contiennent plusieurs substances chimiques ayant une structure comparable. On considère donc que le Solvent Red 49 se trouve dans le domaine d'applicabilité de ces modèles. Seule la valeur de biodégradation primaire du modèle BIOWIN (sous-modèle 4) indique que la substance se biodégrade rapidement, mais elle indique presque une biodégradation rapide ($\geq 3,0$) contrairement à une biodégradation lente ($< 3,0$), de sorte qu'on lui accorde moins d'importance qu'aux trois autres résultats de biodégradation ultime mentionnés précédemment.

Les résultats fiables des trois modèles de biodégradation ultime indiquent que la biodégradation serait lente ou très lente et que la demi-vie dans l'eau serait supérieure à 182 jours. Ces résultats correspondent à ceux obtenus dans le cadre de l'étude de biodégradation expérimentale ainsi qu'aux données sur la structure chimique qui indiquent la présence de caractéristiques structurales associées à des produits chimiques

qui ne sont pas facilement biodégradés (p. ex. amines tertiaires substituées et hétérocycliques). Bien que les données empiriques montrent que la dégradation photolytique et photo-oxydante du sel de chlorhydrate du Solvent Red 49, la rhodamine B, s'effectue relativement rapidement (demi-vie d'environ 30 jours ou moins), l'identité des produits de dégradation est inconnue. Ainsi, compte tenu de l'ensemble des résultats empiriques et des modèles ainsi que des caractéristiques structurales, il y a des preuves tangibles indiquant que la demi-vie de la biodégradation du Solvent Red 49 est supérieure à 182 jours dans l'eau.

D'après un ratio d'extrapolation de 1:1:4 pour une demi-vie de biodégradation dans l'eau, le sol et les sédiments (Boethling *et al.*, 1995) et une valeur de demi-vie pour la dégradation ultime supérieure à 182 jours dans l'eau, la demi-vie dans le sol est aussi supérieure à 182 jours et la demi-vie dans les sédiments est supérieure à 365 jours. Ceci indique que le Solvent Red 49 devrait être persistant dans le sol et les sédiments. Il convient de noter que les processus de dégradation par photolyse, qui peuvent être relativement rapides dans l'eau, devraient être inefficaces dans les sols de subsurface et les sédiments, où la lumière ne peut pénétrer.

D'après les données empiriques et modélisées (voir les tableaux 4a et 4b), le Solvent Red 49 répond aux critères de la persistance dans l'eau, le sol et les sédiments (demi-vies dans le sol et dans l'eau ≥ 182 jours et demi-vie dans les sédiments ≥ 365 jours) énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Potentiel de bioaccumulation

La valeur modélisée du log K_{oc} pour le Solvent Red 49 (1,93) et la valeur empirique du log D_{oc} pour l'analogue rhodamine B (2,28) [voir le tableau 2] indiquent que cette substance a un faible potentiel de bioaccumulation dans le biote. Cette théorie est confirmée par la faible valeur expérimentale du FBC chez les poissons et les moules pour la rhodamine B (tableau 5a).

Tableau 5a. Données empiriques sur la bioaccumulation de la rhodamine B

Organisme d'essai	Paramètre	Valeur (poids humide en L/kg)	Référence
Moule (<i>Mytilus sp.</i>)	FBC	22	Galassi et Canzonier, 1976
Poisson (carpe)	FBC	< 1,7	Chem. Inspect. Test Inst., 1992

Afin d'appuyer davantage le potentiel de bioaccumulation du Solvent Red 49, une méthode prédictive a été appliquée au moyen des modèles des facteurs de bioaccumulation (FBA) et de bioconcentration (FBC) disponibles, comme l'indique le tableau 5b ci-après. Selon le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000), une substance est bioaccumulable si ses facteurs de bioaccumulation et de

bioconcentration sont supérieurs et égaux à 5 000. Toutefois, le calcul des facteurs de bioaccumulation est la mesure préconisée pour évaluer le potentiel de bioaccumulation des substances. En effet, le facteur de bioconcentration ne prend pas en compte de manière adéquate le potentiel de bioaccumulation des substances par l'alimentation, lequel est un facteur majeur pour les substances dont le $\log K_{oe}$ est supérieur à $\sim 4,0$ (Arnot et Gobas, 2003). Des estimations du FBC et du FBA ont été produites à l'aide du modèle de bilan massique d'Arnot-Gobas pour le FBC et le FBA (Arnot et Gobas, 2003). L'atténuation de la bioaccumulation par la biotransformation à partir des intestins n'était pas un facteur pertinent à prendre en compte, car, comme la valeur estimée du $\log K_{oe}$ est faible pour le Solvent Red 49, l'absorption et l'expulsion sont principalement des fonctions du transfert entre les branchies et non liées à l'alimentation.

Tableau 5b. Données modélisées sur la bioaccumulation du Solvent Red 49

FBC (L/kg)	FBA (L/kg)	Référence
6,62	6,62	Niveau trophique moyen du FBA/FBC de Gobas (Arnot et Gobas, 2003)
3,16	s. o.	BCFWIN, 2000
6,92	s. o.	CPOP, 2008

¹D'après la valeur du $\log K_{oe}$ de 1,93 modélisée pour le Solvent Red 49.

On considère que les résultats modélisés du FBC (tableau 5b) à l'aide du modèle BCFWIN (2000) de 3,16 L/kg est la mesure la plus fiable du potentiel de bioaccumulation du Solvent Red 49, car l'ensemble d'étalonnage du modèle CPOP (2008) contient peu de produits chimiques ayant une structure comparable (seulement 30 % du domaine structural du modèle) à la substance, et l'ensemble d'étalonnage du modèle du FBA et du FBC de Gobas ne contient pas de composés ionisants. Les faibles valeurs estimées du FBA et du FBC indiquent toutefois que le Solvent Red 49 a un faible potentiel de bioaccumulation, ce qui est, en général, conforme aux données empiriques présentées au tableau 5a pour l'analogie rhodamine B.

Selon l'ETAD (1995), une masse moléculaire supérieure à 450 g/mol et un diamètre transversal supérieur à 1,05 nm indiquent une absence de bioaccumulation importante. D'après une étude récente menée par Dimitrov *et al.* (2002), Dimitrov *et al.* (2005) et le BBM (2008), la probabilité qu'une molécule traverse des membranes cellulaires à la suite d'une diffusion passive diminue de façon importante lorsque le diamètre transversal maximal (D_{max}) augmente. La probabilité qu'une diffusion passive se produise diminue de façon notable lorsque le diamètre transversal est supérieur à environ 1,5 nm et diminue de façon encore plus significative dans le cas des molécules ayant un diamètre transversal supérieur à 1,7 nm. Sakuratani *et al.* (2008) ont également étudié l'effet du diamètre transversal sur la diffusion passive à l'aide d'un ensemble d'essai comptant environ 1 200 substances chimiques nouvelles et existantes. Ils ont observé que les substances dont le potentiel de bioconcentration n'était pas très élevé avaient souvent un D_{max} supérieur à 2,0 nm ainsi qu'un diamètre effectif (D_{eff}) supérieur à 1,1 nm. Le diamètre transversal du Solvent Red 49 (et de ses conformères) est estimé entre 1,6 et 1,8 nm (CPOP, 2008), valeurs qui sont comparables à celles mentionnées ci-dessus et qui

semblent indiquer que le taux d'absorption de cette substance pourrait être plus lent que celui de substances plus petites et plus compactes, atténuant ainsi le potentiel global de bioconcentration.

Les preuves disponibles indiquent que le Solvent Red 49 devrait présenter un faible potentiel de bioaccumulation en partie en raison de ses propriétés physiques et chimiques (c.-à-d. faible lipophilie, masse moléculaire relativement élevée et diamètre transversal). Les valeurs de FBC et de FBA prévues (p. ex. FBC maximum = 3,16 L/kg) ainsi que les valeurs empiriques du FBC pour la rhodamine B (22 L/kg et < 1,7 L/kg) sont largement inférieures au critère de bioaccumulation (FBC ou FBA \geq 5 000) énoncé dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000) et correspondent à ce à quoi on pourrait s'attendre pour un produit chimique zwiterionique ayant une hydrosolubilité élevée. Par conséquent, selon ces critères, le Solvent Red 49 n'est pas considéré comme bioaccumulable.

Potentiel d'effets nocifs sur l'environnement

Évaluation des effets sur l'environnement

A – Dans le milieu aquatique

Les données empiriques sur la toxicité de la rhodamine B pour les organismes aquatiques sont présentées au tableau 6a.

Tableau 6a. Données empiriques sur la toxicité aquatique de la rhodamine B

Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
<i>Daphnie</i>	Toxicité aiguë (24 heures)	CE ₅₀ ¹	22	Rochat <i>et al.</i> , 1978
Truite arc-en-ciel	Toxicité aiguë (96 heures)	CL ₅₀ ²	217	Marking, 1969
Barbue de rivière	Toxicité aiguë (96 heures)	CL ₅₀ ²	526	Marking, 1969
Crapet arlequin	Toxicité aiguë (24 heures)	CL ₅₀ ²	86	Benoit-Guyod, 1979

¹ CE₅₀ – Concentration d'une substance qu'on estime susceptible de causer un effet chez 50 % des organismes d'essai.

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

³ Après une exposition de 48 heures, 50 % des daphnies ne pouvaient plus nager.

En se fondant sur des données de substitution sur la rhodamine B, le Solvent Red 49 devrait présenter une toxicité semblable, soit de faible à modérée, pour différents poissons et les *daphnies* (tableau 6a).

Faute de données empiriques sur le Solvent Red 49, des valeurs modélisées de l'écotoxicité ont également été générées et sont présentées au tableau 6b. Cette

modélisation se fonde sur la forme quinonoïde du Solvent Red 49 et un log K_{oe} de 1,93 (voir les tableaux 1 et 2).

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

Organisme d'essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
Poisson	Toxicité aiguë (96 heures)	CL ₅₀ ¹	912 ^{3,4}	ECOSAR, 2004
			1,31	AIEPS, 2003-2007
<i>Daphnie</i>	Toxicité aiguë (48 heures)	CE ₅₀ ²	495 ^{3,4}	ECOSAR, 2004
			16,9	AIEPS, 2003-2007
Algues	Toxicité aiguë (96 heures)	CE ₅₀ ²	174 ^{3,4}	ECOSAR, 2004
	Toxicité aiguë (72 heures)	CE ₅₀ ²	5,82	AIEPS, 2003-2007

¹ CE₅₀ – Concentration d'une substance qu'on estime susceptible de causer un effet chez 50 % des organismes d'essai.

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

³ Estimé à partir du log K_{oe} modélisé (1,93) à l'aide EPIsuite (2007) pour le Solvent Red 49.

⁴ Substance organique neutre RSA (toxicité de référence).

Les données modélisées indiquent que le Solvent Red 49 ne devrait pas avoir une toxicité aquatique aiguë élevée.

Le poids de la preuve concernant les données expérimentales et modélisées sur le Solvent Red 49 indique que cette substance est susceptible de présenter un potentiel faible à modéré de toxicité aiguë chez les organismes aquatiques.

B – Dans d'autres milieux naturels

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

Lorsque le Solvent Red 49 est rejeté dans un plan d'eau, il se répartit dans les matières particulaires en suspension et les sédiments benthiques, où les organismes vivant dans les sédiments seront exposés à la substance. Néanmoins, on ne dispose d'aucune donnée de surveillance environnementale ou de toxicité appropriée propre aux organismes vivant dans les sédiments pour cette substance.

Évaluation de l'exposition de l'environnement

On n'a relevé aucune donnée relative aux concentrations de cette substance dans l'eau au Canada; ainsi, ces concentrations ont été estimées sur la base des renseignements

disponibles, y compris les estimations relatives aux quantités de la substance, aux taux de rejet et à la taille des eaux réceptrices. Comme aucune déclaration n'a été reçue en 2006 concernant l'utilisation, l'importation ou la fabrication du Solvent Red 49 au Canada en quantité égale ou supérieure aux seuils de déclaration précisés dans les avis publiés (Environnement Canada, 2009) en vertu de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*, les rejets de cette substance dans l'environnement au Canada devraient être très faibles. De manière prudente, il a été jugé que 100 kg par année étaient utilisés dans des scénarios d'utilisation industrielle et par les consommateurs.

A – Rejets industriels

Étant donné que le Solvent Red 49 pourrait être utilisé dans un cadre industriel et qu'on prévoit des rejets de cette substance dans l'eau, le pire des scénarios de rejets industriels a été élaboré pour estimer la concentration de la substance dans l'eau à l'aide de l'outil générique d'estimation de l'exposition attribuable à des rejets industriels en milieu aquatique (IGETA) d'Environnement Canada (2008a). Le scénario est prudent, c'est-à-dire qu'il suppose que la quantité totale de la substance employée dans l'industrie canadienne n'est utilisée que par une seule installation industrielle sur un petit site hypothétique. Il suppose également que les pertes dans les égouts sont élevées et qu'elles représentent 5 % de la quantité totale provenant du nettoyage de contenants de produits chimiques et d'équipement de traitement. Le scénario présume également que les rejets se produisent 250 jours par an, habituellement pour les petites et moyennes installations, et qu'ils sont envoyés dans une usine de traitement des eaux usées avec un taux d'élimination de zéro pour la substance. Lorsque l'eau réceptrice d'une telle installation est mélangée à l'effluent de l'usine de traitement, son flux réel ou équivalent est généralement de 34 560 m³/jour. D'après les hypothèses susmentionnées, et si l'on suppose que la substance est utilisée à des fins industrielles dans une quantité totale de 100 kg/an, on obtient une concentration environnementale estimée (CEE) de 0,0006 mg/L (Environnement Canada, 2008b).

B – Rejets par les consommateurs

Le Solvent Red 49 est trouvé dans des produits de consommation (exemple : colorants dans certains colliers d'animaux à des concentrations allant de 0,018 to 0,03%), bien qu'aucun produit contenant une quantité égale ou supérieure au seuil de déclaration énoncé dans l'avis publié en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999) n'ait été relevé au Canada (Environnement Canada, 2009). Comme les produits de consommation peuvent être rejetés dans l'eau, Mega Flush, le modèle de tableur d'Environnement Canada qui sert à estimer les rejets à l'égout issus d'utilisations par les consommateurs, a été utilisé pour estimer la concentration possible de la substance dans différents cours d'eau récepteurs d'effluents issus des usines de traitement des eaux usées du Canada dans lesquelles ont été rejetés par les consommateurs des produits contenant cette substance

(Environnement Canada, 2008c). Cet outil est conçu de manière à fournir des estimations sur la base d'hypothèses prudentes en ce qui concerne la quantité de produit chimique utilisé et rejeté par les consommateurs.

Par défaut, on présume des taux d'élimination de 0 % dans les usines de traitement des eaux usées primaires et secondaires, des pertes de 100 % issues des différentes utilisations, une utilisation par les consommateurs sur une période de 365 jours par an, et un débit relativement faible à tous les sites (c.-à-d. les valeurs du dixième centile du débit annuel). Ces estimations ont été réalisées pour 1 000 sites de rejet environ dans tout le Canada, prenant donc en compte les usines de traitement des eaux usées les plus importantes du pays.

L'équation et les entrées utilisées pour calculer la CEE du Solvent Red 49 dans les eaux réceptrices sont décrites dans le rapport d'Environnement Canada (2008d). Dans le scénario qui a été retenu, on a présumé que les consommateurs utilisaient 100 kg/an de cette substance (selon le seuil de déclaration).

Sur la base de ce scénario, le modèle a calculé que la CEE dans les cours d'eau récepteurs variait de $2,7 \times 10^{-6}$ à $1,5 \times 10^{-4}$ 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 comprennent les résultats d'un calcul du quotient de risque prudent ainsi que des renseignements sur la persistance, la bioaccumulation, la toxicité, les sources et le devenir de la substance dans l'environnement.

Le Solvent Red 49 devrait être persistant dans l'eau, le sol et les sédiments et il devrait également avoir un faible potentiel de bioaccumulation dans les organismes aquatiques. L'absence de déclaration concernant l'utilisation, l'importation ou la fabrication du Solvent Red 49 au Canada en quantité supérieure à 100 kg/an indique un faible potentiel de rejets dans l'environnement au Canada. Une fois dans l'environnement, cette substance se retrouverait dans l'eau et dans les sédiments ou le sol. Il a été démontré qu'elle présentait un potentiel faible à modéré de toxicité pour les organismes aquatiques.

Une analyse du quotient de risque, intégrant des estimations prudentes de l'exposition aux renseignements liés à la substance, a été réalisée pour le milieu aquatique, afin de déterminer si la substance pourrait avoir des effets nocifs sur l'environnement au Canada. Le scénario industriel générique prudent décrit précédemment a donné la CEE la plus élevée de 0,0006 mg/L (Environnement Canada, 2008b).

La valeur empirique de toxicité aquatique la plus faible pour l'analogue rhodamine B (tableau 6a) est la CL_{50} après 24 h de 22 mg/L pour les *Daphnia sp.*, qui est considérée comme la valeur critique de toxicité (VCT) pour cette substance. Une concentration estimée sans effet (CESE) a été déterminée à partir de cette VCT, en divisant cette valeur par un facteur d'évaluation de 100 (10 pour tenir compte de la variabilité inter et intraspécifique de la sensibilité et 10 afin d'obtenir une valeur estimée de la concentration sans effet à long terme sur le terrain à partir d'une CL_{50} à court terme), pour générer une CESE de 0,22 mg/L. Le quotient de risque (CEE/CESE) se chiffre à 0,0027. Par conséquent, le Solvent Red 49 ne devrait pas avoir d'effets nocifs sur les organismes aquatiques.

Pour cette substance, un quotient de risque basé sur l'exposition dans les sédiments peut être calculé en fonction des valeurs de la concentration environnementale estimée (CEE) et de la concentration estimée sans effet (CESE) en milieu aquatique, puis être utilisé pour la caractérisation des risques liés aux sédiments. Dans le calcul, les sédiments benthiques et leur eau interstitielle sont censés être en équilibre avec l'eau sus-jacente, et les organismes benthiques et pélagiques sont censés montrer des sensibilités similaires à la substance. Par conséquent, la CEE et la CESE pour l'eau interstitielle sont jugées identiques à celles du milieu aquatique. Cette approche d'équilibre aboutirait à un quotient de risque (CEE/CESE) du milieu sédimentaire identique à celui du milieu aquatique.

Ces renseignements révèlent que le Solvent Red 49 n'a pas le potentiel de causer des effets écologiques nocifs au Canada.

Incertitudes dans l'évaluation des risques pour l'environnement

Étant donné que la substance est utilisée dans d'autres pays, il est possible qu'elle entre sur le marché canadien comme composant d'articles manufacturés ou de produits de consommation. Les renseignements disponibles ne sont pas suffisants actuellement pour calculer une estimation quantitative permettant de définir l'importance de cette source. Cependant, les renseignements obtenus dans le cadre de l'enquête menée en vertu de l'article 71 indiquent que le Solvent Red 49 est peut-être présent dans un certain nombre de ces produits au Canada. Les données disponibles ne sont pas suffisantes actuellement pour calculer une estimation quantitative de l'importance de cette source. Cependant, on prévoit que les quantités de Solvent Red 49 rejetées dans les égouts pourraient être considérablement plus importantes que celles qui sont estimées ici. Les renseignements disponibles ne sont pas suffisants actuellement pour déterminer une estimation quantitative de ces rejets. Le seuil de déclaration de 100 kg a toutefois été utilisé tout au long de la présente évaluation préalable afin de cerner la masse potentielle de cette substance utilisée au Canada, qui serait sous la quantité correspondant au seuil de déclaration.

La rhodamine B, un sel du Solvent Red 49 sous forme d'acide libre, a été utilisée comme analogue tout au long de cette évaluation. Toutefois, comme il s'agit d'un sel, ses propriétés physiques et chimiques devraient être légèrement différentes de celles de la substance, ce qui entraîne des incertitudes quant aux prévisions relatives au devenir, à la persistance, au potentiel de bioaccumulation et à la toxicité aquatique établies sur la base de ces propriétés.

Pour ce qui est de l'écotoxicité, le comportement de répartition prévu de ce produit chimique montre que les données disponibles sur les effets ne permettent pas d'évaluer comme il se doit l'importance du sol et des sédiments comme milieu d'exposition. En effet, les seules données sur les effets qui ont été trouvées s'appliquent principalement aux expositions aquatiques pélagiques, même si la colonne d'eau peut ne pas être le moyen le plus préoccupant d'après les estimations sur la répartition.

Les valeurs modélisées pour la pression de vapeur ($1,52 \times 10^{-13}$ Pa) et la constante de la loi de Henry ($1,90 \times 10^{-14}$ Pa m³/mol) utilisées dans cette évaluation peuvent se situer à l'extrémité inférieure de la plage de prévisions exactes. Ainsi, les valeurs estimées pour ces propriétés doivent être interprétées avec une certaine prudence. On accorde toutefois une confiance relativement élevée à la conclusion selon laquelle cette substance aurait une pression de vapeur et une constante de la loi de Henry très faibles en général, de sorte que les pertes attribuables à la volatilisation seraient négligeables.

Potentiel d'effets nocifs sur la santé humaine

Il est reconnu, principalement à la lumière des renseignements relatifs aux effets de la rhodamine B sur la santé, que le Solvent Red 49 présente un risque potentiel pour la santé humaine. D'après les données expérimentales sur la constante de dissociation acide de la rhodamine B (tableau 2), cette dernière est considérée, dans des conditions pertinentes du point de vue physiologique (pH entre 6 et 8), comme étant la forme quinonoïde du Solvent Red 49. Par conséquent, les données sur la toxicité de la rhodamine B sont jugées pertinentes pour le Solvent Red 49. La base de données toxicologiques pour la rhodamine B est résumée dans les évaluations réalisées par l'EFSA (EFSA, 2005), la US FDA (Lipman, 1995), le CIRC (CIRC, 1978) et le Federal Color Additive Scientific Review Panel des États-Unis (Hart *et al.*, 1986). Le FDA des États-Unis a conclu que la Rhodamine B (D&C Red No.19) est cancérigène pour les animaux par voie orale basé sur des études montrant une augmentation des incidences des tumeurs du foie chez les souris et des tumeurs thyroïdiennes chez les rats (Lipman 1995). Toutefois, Le FDA des États-Unis a aussi conclu qu'il n'y avait aucune preuve de cancérigénicité par la voie dermale basé sur des études portant sur des peintures à peau chez les souris (Lipman 1995). Tandis que la génotoxicité de la rhodamine B a été prouvée par des essais *in vivo* et *in vitro*, plusieurs des résultats n'ont pas été concluants à cause de la présence d'impuretés dans les échantillons tests (Hart et al. 1986, EFSA 2005). Les effets non cancérigènes, comme le changement du poids corporel et l'augmentation du poids de certains organes (par exemple : le foie, les reins, etc.), ont été déclarés à partir d'études faites sur la Rhodamine B. Le Solvent Red 49 pourrait démontrer le même potentiel de risque.

Il n'y a eu aucune déclaration reçue concernant l'utilisation, l'importation ou la fabrication du Solvent Red 49 au Canada en 2006 en quantité égale ou supérieure aux seuils de déclaration précisés dans les avis publiés (Environnement Canada, 2009) en vertu de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*, cette substance a seulement une utilisation limitée comme colorant dans certains colliers d'animaux enregistrés comme produits de lutte antiparasitaire à des concentrations allant de 0,018 to 0,03%. Par conséquent, la probabilité d'exposition de la population générale est faible et, par conséquent, le risque pour la santé humaine est également considéré comme faible. Par conséquent, il est conclu que le Solvent Red 49 est une substance qui ne pénètre pas dans l'environnement en quantité, à des concentrations ou dans des conditions qui constituent un risque pour la vie ou la santé humaine au Canada.

Conclusion

D'après les renseignements contenus dans ce rapport d'évaluation préalable, le Solvent Red 49 ne pénètre pas dans l'environnement en une quantité, à une concentration ou dans des conditions qui ont ou peuvent avoir un effet nuisible immédiat ou à long terme sur l'environnement ou sa diversité biologique, ou qui constituent ou peuvent constituer un danger pour l'environnement essentiel pour la vie.

Bien qu'il soit reconnu que le Solvent Red 49 présente un risque potentiel pour la santé humaine, les renseignements indiquent qu'il n'est pas fabriqué ni importé au Canada dans des quantités supérieures au seuil de déclaration, de sorte que le risque d'exposition au Canada est considéré comme faible. Ainsi, le risque pour la santé humaine est également considéré comme faible. Par conséquent, il est proposé que le Solvent Red 49 est une substance qui ne pénètre pas dans l'environnement en quantité, à des concentrations ou dans des conditions qui constituent un risque pour la vie ou la santé humaine au Canada.

D'après les renseignements disponibles, il est proposé que le Solvent Red 49 ne répond à aucun des critères énoncés à l'article 64 de la LCPE (1999). De plus, cette substance répond aux critères de la persistance, mais pas à ceux du potentiel de bioaccumulation énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Puisque cette substance est inscrite sur la *Liste intérieure des substances*, son importation et sa fabrication au Canada ne requièrent pas de déclaration aux termes du paragraphe 81(1). Étant donné les propriétés dangereuses de cette substance, on craint que des utilisations nouvelles non décelées ni évaluées ne fassent en sorte qu'elle réponde aux critères de l'article 64 de la *Loi*. Par conséquent, il est recommandé de modifier la *Liste intérieure des substances* en vertu du paragraphe 87(3) de la *Loi* afin d'indiquer que le paragraphe 81(3) s'applique à cette substance. Ainsi, toute fabrication, importation ou utilisation de cette dernière devra être déclarée et faire l'objet d'une évaluation des risques pour l'environnement et la santé humaine. De plus, des activités de recherche et de surveillance viendront, le cas échéant, appuyer la vérification des hypothèses formulées au cours de l'évaluation préalable.

Références

[AIES] Système expert d'intelligence artificielle. 2003-2007. Version 2.05. Ottawa (Ont.) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques, Division des substances nouvelles. Modèle élaboré par Stephen Niculescu. Disponible auprès de : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques, Section de l'évaluation des substances chimiques nouvelles.

[AOPWIN] Atmospheric Oxidation Program for Windows [modèle d'évaluation]. 2000. Version 1.91. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 10 décembre 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Arbeloa, I.L., Ojeda, P.R. 1981. Molecular forms of rhodamine B. *Chemical Physics Letters* (79):347-350.

[ARLA] Agence de réglementation de la lutte antiparasitaire. 2007. Note réglementaire REG 2007-04 : liste des produits de formulation de l'ARLA [en ligne]. Ottawa (Ont.) : Santé Canada, Agence de réglementation de la lutte antiparasitaire. Accès : http://www.hc-sc.gc.ca/cps-spc/pubs/pest/_decisions/reg2007-04/index-fra.php

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.

[BBM] Baseline Bioaccumulation Model. 2008. Modèle basé sur celui de Dimitrov *et al.*, 2005. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques. [consulté le 10 décembre 2009]. Disponible sur demande.

[BCFWIN] BioConcentration Factor Program for Windows [modèle d'évaluation]. 2000. Version 2.15. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 10 décembre 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Benoit-Guyod, J.L., Rochar, J., Alary, J., Andre, C., Taillandier, G. 1979. Correlations entre propriétés physicochimiques et ecotoxicité de traceurs fluorescents xantheniques. *Toxicological European Research* 11(5):241-246.

[BIOWIN] Biodegradation Probability Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 4.02. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Borgerding, A.J., Hites, R.A. 1994. Identification and measurement of food and cosmetic dyes in a municipal wastewater treatment plant. *Environmental Science and Technology* (28):1278-1284.

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.

Buxton, G.V., Greenstock, C.L., Helman, W.P., Ross, A.B. 1988. Critical review of rate constants for reactions of hydrated electrons, hydrogen atoms and hydroxyl radicals in aqueous solution. *J. Phys. Chem. Ref. Data* (17):513-882.

Canada. [1978]. *Règlement sur les aliments et drogues* C.R.C., c.870 as amended. Accès : <http://laws.justice.gc.ca/en/showtdm/cr/C.R.C.-c.870>

Canada. 1999. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)*. L.C., 1999, c. 33, *Canada Gazette*. Partie III., vol. 22, n° 3. Accès : <http://www.gazette.gc.ca/archives/p3/1999/g3-02203.pdf>

Canada. 2000. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*, C.P. 2000-348, le 29 mars 2000, DORS/2000-107. Accès : <http://www.gazette.gc.ca/archives/p2/2000/2000-03-29/pdf/g2-13407.pdf>

Canada. 2002. *Loi sur les produits antiparasitaires, 2002*. S.C., 2002, c. 28. *Canada Gazette*, Partie III, vol. 25, no. 3. Accès : <http://www.gazette.gc.ca/archives/p3/2003/g3-02503.pdf>

Canada. 2006. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis d'intention d'élaborer et de mettre en œuvre des mesures d'évaluation et de gestion des risques que certaines substances présentent pour la santé des Canadiens et leur environnement*, *Gazette du Canada*. Partie I, vol. 140, n° 49, p. 4109–4117. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/part1/2006/20061209/pdf/g1-14049.pdf>.

Canada, 2009. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis concernant certaines substances identifiées dans le neuvième lot du Défi*, *Gazette du Canada*. Partie I, vol. 143, n° 11, 14 mars 2009. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/rp-pr/p1/2009/2009-03-14/html/notice-avis-eng.html#d109>

Chem. Inspect. Test Inst. 1992. *Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan*. (ISBN 4-89074-101-1). Ministry of International Trade & Industry (MITI), Japon : Chemicals Inspection & Testing Institute. p. 5-32.

[CII] Color Index International [base de données sur Internet]. 2002-2009. 4th ed. Research Triangle Park (NC) : American Association of Textile Chemists and Colorists. [consultée le 10 décembre 2009]. Accès : <http://www.colour-index.org/>

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

Dimitrov, S.D., Dimitrova, N.C., Walker, J.D., Veith, G.D., Mekenyan, O.G. 2002. Predicting bioconcentration factors of highly hydrophobic chemicals. Effects of molecular size. *Pure Appl. Chem.* 74(10):1823-1830.

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. [consulté le 10 décembre 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[EFSA] Autorité européenne de sécurité des aliments. 2005. Avis du groupe scientifique sur les additifs alimentaires, les arômes, les auxiliaires technologiques et les matériaux en contact avec les aliments [AFC] sur l'évaluation de la toxicologie d'un certain nombre de colorants illégalement présents dans l'alimentation au sein de l'UE. Question n° EFSA-2005-082. Adopté : 5 août 2005 par procédure écrite. Accès : http://www.efsa.europa.eu/EFSA/efsa_locale-1178620753816_1178620764312.htm

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

Environnement Canada. 2008. *Guidance for conducting ecological assessments under CEPA, 1999: science resource technical series, technical guidance module: the Industrial Generic Exposure Tool – Aquatic*

(IGETA). Document de travail. Gatineau (Qc.) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

Environnement Canada. 2008b. Rapport IGETA : CAS RN 509-34-2, 2009-09-15. Rapport inédit. Gatineau (Qc.) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

Environnement Canada. 2008c. Guidance for conducting ecological assessments under CEPA, 1999: science resource technical series, technical guidance module: Mega Flush consumer release scenario. Document de travail préliminaire. Gatineau (Qc.) : Environnement Canada, Division des substances existantes.

Environnement Canada. 2009d. Mega Flush report: CAS RN 509-34-2, 2009-08-11. Version 2.11. Rapport inédit. Gatineau (Qc.) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques..

Environnement Canada. 2009. Données sur les substances du lot 9 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 neuvième lot du Défi. Données préparées par le Programme des substances existantes d'Environnement Canada.

[EPISuite] Estimation Programs Interface Suite for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2007. Version 4.0. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 10 décembre 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm

[ESIS] European Chemical Substances Information System [base de données sur Internet]. 2007 [date inconnue]. Version 5. Bureau Européen des Substances Chimiques (BESC). [consulté le 27 juin 2008] Accès : <http://ecb.jrc.it/esis>

[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. Affiliés canadiens, Dayan, J., Trebitz, H. 1995. Health and environmental information on dyes used in Canada. Rapport inédit présenté à Environnement Canada, Division des substances existantes. En page couverture : An overview to assist in the implementation of the New Substances Notification Regulations under the Canadian Environmental Protection Act.

[FS] 2008. Fiche signalétique : Rhodamine B. Sciencelab.com, Inc. 14025 Smith Rd. Houston, Texas 77396. Accès : http://www.sciencelab.com/xMSDS-Rhodamine_B_O-9924812. [consulté le 6 octobre 2009]

[FS]. 2009. Fiche signalétique : Rhodamine B, Sigma-Aldrich, 2149 Winston Park Drive, Oakville (Ont.), L6H 6J8, Canada. Accès : <http://www.sigmaaldrich.com/MSDS/MSDS/DisplayMSDSPage.do>. [consultée le 18 novembre 2009]

Galassi, S., Canzonier, W.J. 1976. Uptake and elimination of 'Rhodamine B' by mussels. *Igiene Moderna* (69):112-118.

Hart, R.W., Freni, S.C., Gaylor, D.W., Gillette, J.R., Lowry, L.K., Ward, J.M., Weisburger, E.K., Lepore, P., Turturro, A. 1986. Final Report of the Color Additive Scientific Review Panel. *Risk Analysis* 6(2):117-54.

[HENRYWIN] Henry's Law Constant Program for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2000. Version 3.10. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 10 décembre 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[HSDB] Hazardous Substances Data Bank. 2002. Rhodamine B. Accès : <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/f?/.temp/~TNkRgT:1> [consultée le 18 décembre 2009].

[IARC] International Agency for Research on Cancer Working Group on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans. 1978. Some Aromatic Amines and Related Nitro Compounds (Hair Dyes, Colouring Agents and Miscellaneous Industrial Chemicals). Vol. 16 (voir page 221). Accès : <http://monographs.iarc.fr/ENG/Monographs/vol16/volume16.pdf>

Kasnavia, T., Vu, D., Sabatini, D.A. 1999. Fluorescent dye and media properties affecting sorption and tracer selection. *Ground Water* (37):376-381.

[KOWWIN] Octanol-Water Partition Coefficient Program for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2000. Version 1.67. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 10 décembre 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Lipman, A.L. 1995. Safety of Xanthene Dyes According to the U.S. Food and Drug Administration. American Chemistry Society Symposium No. 616. ISBN 0841233349.

Marking, L.L. 1969. Toxicity of rhodamine B and fluorescein sodium to fish and their compatibility with antimycin A. *The Progressive Fish-Culturist*: 31:139-142.

Mchedlov-Petrossyan, N.O., Kukhtik, V.I. 1994 Ionization and tautomerism of fluorescein, rhodamine B, N,N-Diethylrhodol and related dyes in mixed and nonaqueous solvents. *Dyes and Pigments* (24):11-35.

Mill, T., Mabey, W. 1985. Photochemical transformations. In: Environmental Exposure from Chemicals. Volume 1. Neely, W.B., Blau, G.E. (éditeurs). Boca Raton, FL : CRC Press, p.209.

[MPBPWIN] Melting Point Boiling Point Program for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2000. Version 1.41. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 10 décembre 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

[NCI] National Chemical Inventories [base de données sur CD-ROM]. 2007. Issue 1. Columbus (OH) : American Chemical Society. [consultée le 11 décembre 2007]. Accès : <http://www.cas.org/products/cd/nci/index.html>
In text reference: (NCI 2007)

[NITE] National Institute of Technology and Evaluation [base de données sur Internet]. 2002. Comprehensive Information for CAS RN 509-34-2. Tokyo (Japon) : NITE. [consultée le 8 janvier 2010]. Accès : http://www.safe.nite.go.jp/english/Haz_start.html.

Pagga, U., Brown, D. 1986. The degradation of dyestuffs: Part II Behaviour of dyestuffs in aerobic biodegradation tests. *Chemosphere* 15(4):479-491.

[PCKOCWIN] Organic Carbon Partition Coefficient Program for Windows [modèle d'évaluation]. 2000. Version 1.66. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 10 décembre 2009]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

Rankin, D.W.H. 2009. CRC handbook of chemistry and physics, 89^e édition, sous la direction de David R. Lide. Taylor & Francis.

- Rochat, J., Demenge, P., Rerat, J.C. 1978. Toxicologic study of a fluorescent tracer: rhodamine B. *Toxicological European Research* (1):23-26.
- Sakuratani, Y., Noguchi, Y., Kobayashi, K., Yamada, J., Nishihara, T. 2008. Molecular size as a limiting characteristic for bioconcentration in fish. *J. Environ. Biol.* 29(1):89-92.
- [SDC] Système de déclaration des cosmétiques [base de données exclusive]. 2009. Disponible auprès de la Division des cosmétiques de santé Canada.
- Smart, P.L., Laidlaw, I.M.S. 1977. An evaluation of some fluorescent dyes for water tracing. *Water Resources Research* 13:15-33.
- [SPIN] Substances in Preparations in Nordic Countries [base de données en ligne]. 2006. Copenhague (Danemark) : Conseil des ministres des pays nordiques. [consultée jour mois année]. Accès : <http://195.215.251.229/Dotnetnuke/Home/tabid/58/Default.aspx>
- Standarcom. 2009. [consulté le 5 octobre 2009]. Accès : <http://www.standardcon.com/solventdyes/solventred49.htm>
- [TOPKAT] TOXicity Prediction by Komputer Assisted Technology [en ligne]. 2004. Version 6.2. San Diego (CA) : Accelrys Software Inc. [consulté le 10 décembre 2009]. Accès : <http://www.accelrys.com/products/topkat/index.html>
- [US FDA] US Food and Drug Administration. 1988. "Revocation of Regulations; D&C Orange No. 17 and D&C Red No. 19.", *Federal Register*. 53, 26768-26770. [cité dans Lipman, 1995].
- [WATERNT] Water Solubility Program [modèle d'évaluation]. 2002. Version 1.01. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté jour mois année]. Accès : www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm
- Wight, P. 2000. Xanthene Dyes. Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, John Wiley & Sons, Inc. Accès : <http://mrw.interscience.wiley.com/emrw/9780471238966/kirk/article/xantwigh.a01/current/pdf> [consulté le 14 déc. 2009].
- Yager, J.E., Yue, C.D. 1988. Evaluation of the xenon arc lamp as a light source for aquatic photodegradation studies: comparison with natural sunlight. *Environ. Toxicol. Chem.* (7):1003-11.

Annexe I – Tableau sommaire des intrants des modèles de la persistance, de la bioaccumulation et de la toxicité

	Propriétés physico-chimiques et devenir	Propriétés physico-chimiques et 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, excepté WATRNT)	Suite EPIWIN (WATRNT seulement)	Modèle d'Arnot et Gobas pour le FBC/FBA	Modèle de POP canadien (notamment le modèle Catabol, le modèle des facteurs d'atténuation du FBC, le modèle de toxicité OASIS)	Artificial Intelligence Expert System (AIES)/ TOPKAT/ ASTER
Code SMILES	<chem>c12O\C\3=C\C(=N(CC)CC)\C=C/C3=C(\c3c(C(=O)O)cccc3)/c1ccc(N(CC)CC)c2</chem>	<chem>C12(c3c(Oc4c1cc(c4)N(CC)CC)cc(N(CC)CC)cc3)c1c(ccc1)C(O2)=O</chem>	<chem>c12O\C\3=C\C(=N(CC)CC)\C=C/C3=C(\c3c(C(=O)O)cccc3)/c1ccc(N(CC)CC)c2</chem>	<chem>c12O\C\3=C\C(=N(CC)CC)\C=C/C3=C(\c3c(C(=O)O)cccc3)/c1ccc(N(CC)CC)c2</chem>	<chem>c12O\C\3=C\C(=N(CC)CC)\C=C/C3=C(\c3c(C(=O)O)cccc3)/c1ccc(N(CC)CC)c2</chem>
Masse moléculaire (g/mol)	443,57	442,56	443,57	443,57	443,57
Point de fusion (°C)	160		160		
Point d'ébullition (°C)					
Température des données (°C)					
Masse volumique (kg/m³)					
Pression de vapeur (Pa)					
Constante de la loi de Henry (Pa·m³/mol)					
Log K_{ae} (coefficient de partage air-eau; sans dimension)					
Log D_{oe} (coefficient de partage octanol-eau, sans dimension)	1,93 ¹ pour D _{co} , CL ₅₀		1,93 ¹	1,93 ¹	

Log D_{co} (coefficient de partage carbone organique/eau – L/kg)					
Solubilité dans l'eau (mg/L)					
Log K_{oa} (coefficient de partage octanol-air, sans dimension)					

¹Calculé au moyen de l'ajustement des valeurs expérimentales à l'aide de la structure de la rhodamine B et de la valeur empirique du log D_{oe} de 2,28.