

**Évaluation préalable pour le Défi concernant**  
**Acétate de [*p*-(diméthylamino)phényl]bis[4-(éthylamino)-3-  
méthylphényl]méthylum**

**Numéro de registre du Chemical Abstracts Service**  
**72102-55-7**

**Environnement Canada**  
**Santé Canada**

**Juillet 2010**

## Sommaire

En application de l'article 74 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* [LCPE (1999)], les ministres de l'Environnement et de la Santé ont effectué une évaluation préalable de l'acétate de [*p*-(diméthylamino)phényl]bis[4-(éthylamino)-3-méthylphényl]méthylum (MAPBAP acétate), dont le numéro de registre du Chemical Abstracts Service est 72102-55-7. 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 MAPBAP acétate pour la santé humaine n'a pas été jugée hautement prioritaire à la lumière des résultats fournis par les outils simples de détermination du risque d'exposition et du risque pour la santé élaborés par Santé Canada aux fins de la catégorisation des substances de la *Liste intérieure*. Par conséquent, la présente évaluation est axée sur les renseignements utiles à l'évaluation des risques pour l'environnement.

Le MAPBAP acétate est une substance organique qui est utilisée principalement comme colorant cationique dans la production de produits de papier au Canada et ailleurs dans le monde. Cette substance n'est pas produite de façon naturelle dans l'environnement. De 10 000 à 100 000 kg de MAPBAP acétate ont été importés au Canada en 2006.

Les profils d'utilisation déclarés et certaines hypothèses permettent de croire que la plus grande partie de la substance aboutit dans les eaux usées ou les sites d'enfouissement, ou est recyclée. D'après les propriétés chimiques et physiques du MAPBAP acétate et son comportement de répartition, il pourrait être présent dans l'eau, les sédiments et le sol. Par contre, elle ne devrait pas se trouver en grande quantité dans l'air.

D'après ses propriétés physiques et chimiques, le MAPBAP acétate ne devrait pas se dégrader rapidement dans l'environnement. Il est persistant dans l'eau, le sol et les sédiments. Le MAPBAP acétate répond donc aux critères de persistance énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*, mais ne répond pas à ceux pour le potentiel de bioaccumulation. La conclusion selon laquelle le MAPBAP acétate présente un faible potentiel de bioaccumulation se fonde sur un résultat déduit à partir d'analogues en laboratoire, ainsi que sur des données modélisées d'après un  $\log K_{oc}$  déduit à partir d'analogues en laboratoire. En outre, les données de toxicité en milieu aquatique, tant modélisées que déduites à partir d'analogues, indiquent que cette substance pourrait représenter un risque élevé pour les organismes aquatiques.

Bien qu'aucun rejet de MAPBAP acétate n'ait été déclaré dans le cadre d'une enquête menée en application de l'article 71 de la LCPE (1999), cette substance devrait être libérée dans l'environnement en raison de son utilisation actuelle comme colorant pour papier. Les concentrations de MAPBAP acétate dans les effluents récepteurs d'eaux de surfaces provenant de 10 sites industriels ont été estimées. Ces concentrations ont été

déterminées, pour tous les sites considérés, comme excédants les niveaux ayant le potentiel d'être nocifs pour les organismes aquatiques.

On s'attend à ce que le risque d'exposition de la population générale au MAPBAP acétate présent dans les milieux naturels soit négligeable. L'exposition à cette substance par l'intermédiaire des produits de consommation (colorant pour papier journal) devrait aussi être négligeable pour l'utilisation prévue de ces produits (exposition négligeable par voie cutanée pendant la lecture) et faible pour les événements fortuits, notamment lorsque de jeunes enfants portent ces produits à leur bouche.

Étant donné que l'exposition de l'ensemble de la population canadienne au MAPBAP devrait être faible ou négligeable en raison de son utilisation comme colorant pour papier, le risque que présente cette substance pour la santé humaine est considéré comme faible.

Aucune donnée empirique sur la toxicité n'a été trouvée pour le MAPBAP acétate. Les résultats liés aux prévisions des relations quantitatives structure-activité pour la cancérogénicité et la génotoxicité étaient partagés. Les données déduites à partir d'analogues laissent entendre un potentiel de cancérogénicité, de génotoxicité et de toxicité sur le plan du développement.

Après examen des données disponibles sur son potentiel d'être nocif pour la santé humaine, il est conclu que le MAPBAP acétate n'est pas une substance qui pénètre dans l'environnement en quantité, à une concentration ou dans des conditions qui constituent ou peuvent constituer un danger au Canada pour la vie ou la santé humaine.

Après examen des données disponibles sur son potentiel d'être nocif pour l'environnement (p.e.. les données modélisées et déduites à partir d'analogues en ce qui a trait à la persistance et à la toxicité aquatique, et la caractérisation du risque pour les organismes aquatiques), il est conclu que le MAPBAP acétate pénètre dans l'environnement en une quantité, à une concentration ou dans des conditions qui ont ou peuvent avoir un effet nocif immédiat ou à long terme sur l'environnement ou sa diversité biologique.

D'après les renseignements disponibles, il est conclu que l'acétate de [*p*-(diméthylamino)phényl]bis[4-(éthylamino)-3-méthylphényl]méthylum satisfait à au moins un des critères de l'article 64 de la LCPE (1999).

L'Acétate de [*p*-(diméthylamino)phényl]bis[4-(éthylamino)-3-méthylphényl]méthylum rencontre les critères de sa persistance mais ne rencontrent pas les critères de la bioaccumulation tel que définis dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation*.

Des activités de recherche et de surveillance viendront, le cas échéant, appuyer la vérification des hypothèses formulées au cours de l'évaluation préalable et, le cas échéant, l'efficacité des possibles mesures de contrôle définies à l'étape de la gestion des risques.

## Introduction

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

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

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

Le 9 décembre 2006, les ministres ont donc publié un avis d'intention dans la Partie I de la *Gazette du Canada* (Canada, 2006a) dans lequel ils priaient l'industrie et les autres 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 priorité élevée à l'évaluation des risques pour l'environnement du MAPBAP acétate, car cette substance a été jugée persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques et il semble qu'elle est commercialisée au Canada. Le volet du Défi portant sur cette substance a été publié dans la *Gazette du Canada* le 31 janvier 2009 (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 sur les utilisations de la substance ont été reçus en réponse au Défi.

Même si l'évaluation des risques que présente l'acétate de [*p*-(diméthylamino)phényl]bis[4-(éthylamino)-3-méthylphényl]méthylum pour l'environnement a été jugée hautement prioritaire, cette substance ne répond pas aux critères de la catégorisation pour le PFRE ou le REI ni aux critères définissant un grave risque pour la santé humaine, compte tenu du classement attribué par d'autres organismes nationaux ou internationaux quant à sa cancérogénicité, à sa génotoxicité ou à sa toxicité

sur le plan du développement ou de la reproduction. La présente évaluation est donc axée principalement sur les renseignements utiles à l'évaluation des risques écologiques.

Les évaluations préalables mettent l'accent sur les renseignements jugés essentiels pour déterminer si une substance répond aux critères de l'article 64 de la LCPE (1999). Les évaluations préalables examinent des renseignements scientifiques et tirent des conclusions fondées sur la méthode du poids de la preuve et le principe de prudence<sup>1</sup>.

La présente évaluation préalable prend en considération les renseignements sur les propriétés chimiques, les dangers, les utilisations de la substance en question et l'exposition à celle-ci, y compris l'information supplémentaire fournie dans le cadre du Défi. Les données pertinentes pour l'évaluation préalable de cette substance ont été relevées dans des publications originales, des rapports de synthèse et d'évaluation, des rapports de recherche de parties intéressées et d'autres recherches documentaires menées récemment, jusqu'en avril 2010 pour les sections traitant des aspects écologiques. L'évaluation préalable n'est pas un examen exhaustif ou critique de toutes les données disponibles. Il s'agit plutôt d'un sommaire des renseignements essentiels qui appuient la conclusion proposée.

La présente évaluation préalable a été préparée par le personnel du Programme des substances existantes de Santé Canada et d'Environnement Canada et elle intègre les résultats d'autres programmes exécutés par ces ministères. Les parties de la présente évaluation préalable qui portent sur la santé humaine et l'écologie ont fait l'objet d'une étude consignée par des pairs ou d'une consultation de ces derniers. De plus, une version provisoire de la présente évaluation préalable a fait l'objet d'une consultation publique de 60 jours. Bien que les 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 méthodes utilisées dans les évaluations préalables du Défi ont été examinées par un Groupe consultatif du Défi indépendant.

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

---

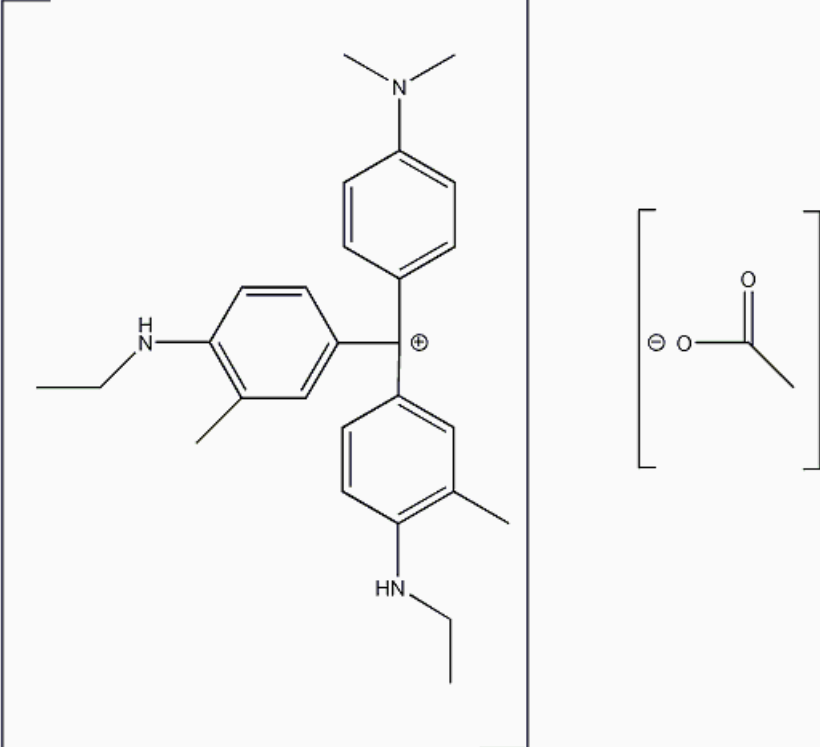
<sup>1</sup> La détermination de la conformité à l'un ou plusieurs des critères énoncés à l'article 64 est basée sur une évaluation des risques potentiels pour l'environnement et/ou la santé humaine associés aux expositions dans l'environnement en général. Pour les humains, cela inclut, sans toutefois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

## Identité de la substance

Aux fins du présent document, la substance est appelée MAPBAP acétate, appellation tirée du nom dans la Liste intérieure des substances (LIS). Le MAPBAP acétate appartient à une classe de teintures, les triarylméthanés cationiques. Cette classe peut être subdivisée en deux autres classes : celle dans laquelle la charge du cation est localisée (la partie des triarylméthanés), et celle où elle est délocalisée. Le MAPBAP acétate fait partie de la deuxième sous-catégorie (Hunger, 2003), ce qui veut dire que la liaison qui relie les composantes cationiques et anioniques de la structure est au moins partiellement covalente.

**Tableau 1. Identité de la substance – MAPBAP acétate**

<b>Numéro de registre du Chemical Abstracts Service (n° CAS)</b>	<b>72102-55-7</b>
<b>Nom dans la LIS</b>	<b>Acétate de [p-(diméthylamino)phényl]bis[4-(éthylamino)-3-méthylphényl]méthylum</b>
<b>Noms relevés dans les National Chemical Inventories (NCI)<sup>1</sup></b>	<i>Methylium, [4-(dimethylamino)phenyl]bis[4-(ethylamino)-3-methylphenyl]-, acetate (1:1) (TSCA)</i> <i>Methylium, [4-(dimethylamino)phenyl]bis[4-(ethylamino)-3-methylphenyl]-, acetate (AICS, PICCS, ASIA-PAC, NZIoC)</i>
<b>Autres noms</b>	<i>[4-(Dimethylamino)phenyl]bis[4-(ethylamino)-3-methylphenyl]methylium acetate</i>
<b>Groupe chimique (groupe de la LIS)</b>	Produits chimiques organiques définis
<b>Principale classe chimique ou utilisation</b>	Anilines, triphénylméthanés cationiques
<b>Principale sous-classe chimique</b>	Amines aromatiques secondaires, amines secondaires, amines tertiaires, amines aromatiques tertiaires, amines aliphatiques
<b>Formule chimique</b>	$C_{27}H_{34}N_3.C_2H_3O_2$

<p><b>Structure chimique</b> <sup>2</sup></p>	
<p><b>SMILES</b><sup>3</sup></p>	<p><chem>CN(c2ccc(cc2)C[(OC(=O)C)](c3cc(c(cc3)NCC)C)c1cc(c(cc1)NCC)C)C</chem></p>
<p>Masse moléculaire (g/mol)</p>	<p>459,64</p>

<sup>1</sup> National Chemical Inventories (NCI), 2006 : AICS (inventaire des substances chimiques de l'Australie); ASIA-PAC (listes des substances de l'Asie-Pacifique); PICCS (inventaire des produits et substances chimiques des Philippines); NZIoC (inventaire des substances chimiques de la Nouvelle-Zélande) et TSCA (inventaire des substances chimiques visées par la *Toxic Substances Control Act*).

<sup>2</sup> Cette substance est un sel organique composé d'une carbocation et d'un anion acétate.

<sup>3</sup> SMILES signifie « Simplified Molecular Line Input Entry System ». Cette notation SMILES a été utilisée pour produire des prévisions. Il s'agit de la forme neutre de la molécule et elle indique une liaison covalente entre la carbocation et l'anion acétate. Habituellement, c'est la manière dont EPIWIN les affiche. On n'a pas totalement déterminé les futurs effets de cette notation SMILES sur les prévisions. La partie acétate de la notation SMILES est placée entre crochets ici pour attirer l'attention sur le fait que la molécule est au moins partiellement ionique.

### Propriétés physiques et chimiques

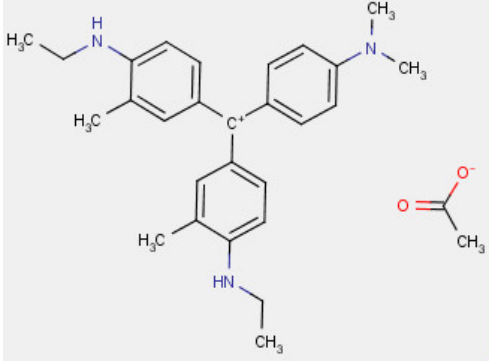
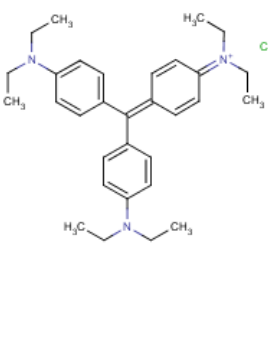
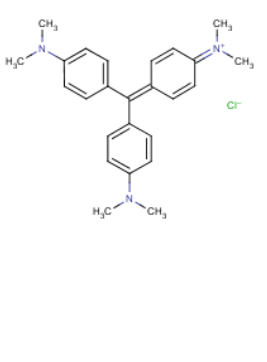
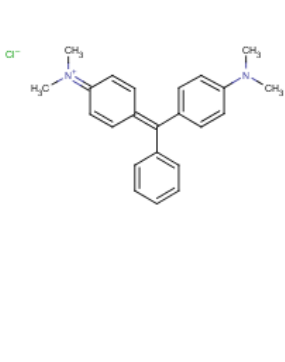
Aucune donnée expérimentale n'est disponible pour le MAPBAP acétate. Lors de l'atelier sur les modèles de relations quantitatives structure-activité (RQSA), parrainé par Environnement Canada en 1999 (Environnement Canada, 2000), des experts en modélisation ont reconnu qu'il était « difficile de modéliser » de nombreuses classes structurales de pigments et de teintures avec le modèle RQSA. Certaines propriétés physiques et chimiques d'un grand nombre de classes structurales de teintures et de pigments se prêtent mal aux prévisions modélisées. Dans de telles circonstances, une méthode avec données déduites à partir d'analogues est prise en considération; elle utilise des analogues proches afin de déterminer les propriétés physiques et chimiques approximatives du MAPBAP acétate. Une recherche dans la base de données ChemIDPlus (2009) a donné plusieurs analogues qui conviennent et qui sont décrits au tableau 2. Des données expérimentales pour ces analogues, lorsqu'elles étaient disponibles, ont été utilisées comme valeurs extrapolées (déduites à partir d'analogues) pour le MAPBAP acétate ou comme valeurs justificatives pour le poids de la preuve.

On a découvert un nombre limité de données déduites à partir des analogues sélectionnés et, dès lors, les valeurs prévues sont également utilisées pour le MAPBAP acétate et les incertitudes des prévisions sont notées.

Le tableau 3 ci-dessous présente les propriétés physiques et chimiques prévues du MAPBAP acétate qui se rapportent à son devenir dans l'environnement. Des données analogues sont disponibles pour l'hydrosolubilité. L'hydrosolubilité du violet d'éthyle (n° CAS 2390-59-2) est de 9000 mg/L (Green, 1990). Les données indiquent que les acétates de triphénylméthane sont plus solubles dans l'eau que les chlorures (Pfenninger et Bruttel, 1985), ce qui montre que l'hydrosolubilité du MAPBAP acétate est élevée.



Tableau 2 MAPBAP acétate et ses analogues structuraux

<p>Acétate de [<i>p</i>-(diméthylamino)phényl] bis[4-(éthylamino)-3- méthylphényl]méthylum</p> <p>MAPBAP acétate (n° CAS 72102-55-7)</p>	<p><b>Analogue 1</b> — Chlorure de (4-{bis[4- (diéthylamino)phényl méthylène} cyclohexa-2,5- dién-1- ylidène)diéthylammonium</p> <p>Violet d'éthyle (n° CAS 2390-59-2)</p>	<p><b>Analogue 2</b> Chlorure de [4-[4,4'- bis(diméthylamino) benzhydrylidène] cyclohexa-2,5-dién-1- ylidène]diméthylammonium</p> <p>Violet de gentiane (n° CAS 548-62-9)</p>	<p><b>Analogue 3</b> Chlorure de [4-[<math>\alpha</math>-[4- (diméthylamino)phényl]benzylidène] cyclohexa-2,5-dién-1- ylidène]diméthylammonium</p> <p>Vert malachite (n° CAS 569-64-2)</p>
			
<p><u>Analyse comparative :</u></p> <p>Les différences entre les structures chimiques du MAPBAP acétate (i) et les analogues 1, 2 et 3 sont les suivantes :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• le nombre et la position des groupes méthyles ou éthyles;</li> <li>• les contreanions: l'acétate pour le MAPBAP acétate et le chlorure (Cl-) pour les analogues.</li> </ul> <p>Pour toutes les substances, la charge du cation est délocalisée. Des hybrides de résonance peuvent se produire; ceux-ci touchent la position du contreanion (l'acétate pour (i) et le chlorure pour les analogues).</p>			

**Tableau 3. Propriétés physiques et chimiques de la forme neutre du MAPBAP acétate et de ses analogues**

Propriété	Substance	Type	Valeur <sup>1</sup>	Température (°C)	Référence
Point de fusion (°C)	MAPBAP acétate	Modélisé	236,73	-	MPBPWIN, 2008
Point d'ébullition (°C)	MAPBAP acétate	Modélisé	551,67	-	MPBPWIN, 2008
Pression de vapeur (Pa)	MAPBAP acétate	Modélisé	9,13 x 10 <sup>-10</sup> (6,85 x 10 <sup>-12</sup> mmHg)	25	EPIWIN, 2004
Constante de la loi de Henry (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	MAPBAP acétate	Modélisé	1,92 x 10 <sup>-10</sup> (1,895 x 10 <sup>-15</sup> atm·m <sup>3</sup> /mol)	25	HENRYWIN, 2008
Log K <sub>oe</sub> (coefficient de partage octanol-eau) (sans dimension)	Analogue  (C.I. Basic Violet 3 n° CAS 548-62-9)	Expérimental	0,51	-	Tsai <i>et al.</i> , 1991
K <sub>co</sub> (coefficient de partage carbone organique-eau) (sans dimension)	MAPBAP acétate	Modélisé	10,26 <sup>2</sup>	-	PCKOCWIN, 2008
Hydrosolubilité <sup>3</sup> (mg/L)	Analogue  (n° CAS 2390-59-2)	Expérimental	9000	-	Green, 1990

Propriété	Substance	Type	Valeur <sup>1</sup>	Température (°C)	Référence
	MAPBAP acétate	Modélisé	475 <sup>2</sup>	25	WSKOWWIN, 2008

<sup>1</sup> Les valeurs et les unités entre parenthèses représentent les valeurs originales signalées par les auteurs ou estimées à l'aide des modèles.

<sup>2</sup> Cette valeur a été modélisée à l'aide du log  $K_{oc}$  de 0,51 de l'analogue expérimental comme intrant.

<sup>3</sup> L'importateur du MAPBAP acétate a indiqué qu'il est complètement soluble à des pH environnementaux (p. ex., pH 7).

## Sources

Le MAPBAP acétate n'est pas produit naturellement dans l'environnement.

D'après les renseignements recueillis en réponse aux avis publiés en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999), le MAPBAP acétate n'a pas été fabriqué au Canada dans des quantités respectant le seuil de déclaration de 100 kg (Canada, 2006b; Environnement Canada, 2009a) au cours des années civiles 2005 et 2006. Pour l'année civile 2005, moins de quatre sociétés canadiennes ont déclaré avoir importé au total entre 1 001 et 100 000 kg/année de MAPBAP acétate (soit la substance seule, soit comme composante d'un mélange, d'un produit ou d'un produit manufacturé).

Pour l'année civile 2006, moins de quatre sociétés canadiennes ont déclaré avoir importé entre 10 000 et 100 000 kg/année de MAPBAP acétate (soit la substance seule, soit comme composante d'un mélange, d'un produit ou d'un produit manufacturé) (Environnement Canada, 2009a). Moins de vingt entreprises ont déclaré qu'elles utilisaient du MAPBAP acétate et ont été identifiées par des importateurs comme des clients utilisant la substance; la quantité totale était comprise entre 10 000 et 100 000 kg en 2006 (Environnement Canada, 2009a).

Pendant l'année civile 1986, on a déclaré la fabrication, l'importation ou la commercialisation au Canada d'environ 100 000 kg de MAPBAP acétate (Environnement Canada, 1988). Moins de quatre entreprises ont déclaré avoir utilisé du MAPBAP acétate pendant les années civiles 1984 à 1986.

Les produits contenant du MAPBAP acétate peuvent entrer dans le pays même s'ils n'ont pas été recensés en tant que tels dans l'enquête menée en vertu de l'article 71, en raison de leur importation involontaire dans les articles manufacturés ou de leurs quantités inférieures au seuil de déclaration de 100 kg établi pour l'enquête. Les renseignements disponibles ne sont pas suffisants actuellement pour déterminer une estimation quantitative de l'importance de cette source.

## Utilisations

Le colorant pour papier est l'utilisation principale déclarée dans les réponses aux avis publiés en application de l'article 71 de la LCPE (1999) pour les années civiles 2005 et 2006 (Canada, 2006b; Environnement Canada, 2009a). Une autre utilisation du MAPBAP acétate, déclarée dans le cadre d'une enquête menée en vertu de l'article 71 pour 2006, a été incluse dans les renseignements commerciaux confidentiels (RCC).

Les utilisations suivantes déclarées dans les données de sélection de la Liste intérieure des substances (LIS) étaient les suivantes : « Coloration –

pigment/colorant/teinture/encre » et « Composant de formulation » (Environnement Canada, 1988).

## Rejets dans l'environnement

Les réponses à un avis publié en application de l'article 71 de la LCPE (1999) n'ont indiqué aucun rejet de MAPBAP acétate dans l'environnement pendant l'année civile 2006 (Environnement Canada, 2009a). Le MAPBAP acétate n'est pas une substance déclarable dans l'Inventaire national des rejets de polluants (INRP, 2008) ou le *Toxics Release Inventory* (TRI, 2007) des États-Unis; par conséquent, aucune donnée relative aux rejets n'était disponible à partir de ces sources.

Les pertes de MAPBAP acétate par différentes voies pendant son cycle de vie sont estimées en fonction des données issues d'enquêtes réglementaires, des industries, ainsi qu'en fonction des données publiées par différents organismes. Les pertes sont regroupées en sept types : (1) déversements dans les eaux usées; (2) émissions atmosphériques; (3) pertes dans les terres; (4) transformation chimique; (5) élimination sur les sites d'enfouissement; (6) élimination par recyclage; et (7) élimination par incinération. Des pertes peuvent se produire à une ou plusieurs étapes du cycle de vie de la substance; celles-ci comprennent la fabrication, l'utilisation industrielle, l'utilisation commerciale et par les consommateurs, ainsi que l'élimination. Pour aider à estimer ces pertes, une feuille de calcul (outil de débit massique) a été utilisée; elle intègre toutes les données et hypothèses requises pour l'estimation (Environnement Canada, 2009). À moins de disposer de données précises sur le taux ou le potentiel de rejet de cette substance provenant des sites d'enfouissement, des opérations de recyclage et des incinérateurs, l'outil de débit massique ne permet pas de quantifier les rejets dans l'environnement à partir de ces méthodes d'élimination des déchets.

Dans le contexte de l'estimation facilitée par l'outil de débit massique, les déversements dans les eaux usées concernent les déversements des eaux usées brutes non traitées, qu'il s'agisse du traitement des eaux usées industrielles sur place ou du traitement des eaux usées municipales hors site. Les pertes par transformation chimique se rapportent aux modifications de l'identité de la substance qui ont lieu au cours des étapes de fabrication, d'utilisation industrielle ou d'utilisation commerciale et par les consommateurs, mais elles excluent celles qui ont lieu pendant les opérations de gestion des déchets telles que l'incinération et le traitement des eaux usées.

Les pertes estimées pour le MAPBAP acétate au cours de son cycle de vie sont présentées au tableau 4 (Environnement Canada, 2009b). Compte tenu de son utilisation comme colorant pour papier, environ 8 % de la quantité totale de la substance dans le commerce au Canada devrait être rejetée dans les eaux usées. En général, les eaux usées constituent une source courante de rejets dans l'eau et le sol (p. ex. l'épandage de biosolides) par les usines de traitement des eaux usées.

**Tableau 4. Bilan massique du MAPBAP acétate provenant d'étapes différentes du cycle de vie dans un scénario de la pire éventualité réaliste**

Type de perte	Proportion (%)			
	Fabrication	Utilisation à des fins industrielles	Utilisation commerciale et par les consommateurs	Total
Eaux usées	0	7,72	0	7,72
Sur les surfaces pavées et non pavées	0	0	0	
Émissions atmosphériques	0	0	0	
Transformation chimique	0	0	0	
Incinération	0	0	1,36	1,36
Site d'enfouissement	0	0	43,82	43,82
Recyclage	0	0	47,10	47,10
<b>Total</b>	0	7,72	92,28	100

Le MAPBAP acétate devrait également être rejeté dans l'environnement par des voies autres que les eaux usées, notamment la mise en décharge de biosolides provenant d'usines de pâte à papier. Le MAPBAP acétate éliminé dans un site d'enfouissement y persistera en grande partie, en raison de sa pression de vapeur faible.

Le MAPBAP acétate devrait être utilisé dans certains articles manufacturés et produits de consommation, notamment le papier coloré. Bien que l'on ne possède aucun renseignement sur les quantités d'articles manufacturés et de produits de consommation contenant du MAPBAP acétate qui sont importées au Canada, on prévoit que les pertes dans les eaux usées (résultant principalement de l'utilisation industrielle) ne diffèrent pas énormément des quantités estimées ici. Cependant, les quantités confiées à la gestion des déchets pourraient être plus élevées si l'importation de ces articles entrait en ligne de compte. Les renseignements disponibles ne sont pas suffisants actuellement pour déterminer une estimation quantitative de ces pertes.

### Devenir dans l'environnement

En fonction de ses utilisations et des résultats de l'outil de débit massique présentés au tableau 4, le MAPBAP acétate est rejeté dans l'eau pendant les phases de traitement et d'utilisation, mais il pourrait se répartir dans les sédiments. Il peut aussi demeurer dans le sol en conséquence de l'épandage de boues activées.

En raison de son hydrosolubilité élevée, d'après les données déduites à partir d'analogues (voir le tableau 3 ci-dessus), le MAPBAP acétate, une fois rejeté dans l'eau, aura tendance au début à se répartir dans ce milieu, où il s'ionisera, et sera dissocié, à des pH environnementaux. La dissociation de la molécule de MAPBAP acétate va produire une carbocation réactive (MAPBAP), de sorte que le MAPBAP acétate rejeté dans l'eau pourrait réagir avec les matières anioniques et organiques dissoutes et particulières disponibles ou s'y lier, y compris l'acide humique présent dans l'eau. La Environmental Protection Agency des États-Unis (USEPA) (2002) émet la recommandation suivante pour l'essai de nouvelles teintures cationiques : « ...deux essais de toxicité aiguë pour le poisson sont recommandés avec des quantités connues d'acide humique ajoutées à l'eau de dilution. Ces essais sont nécessaires pour mesurer les effets atténuants du carbone organique dissous (COD) sur la toxicité de la teinture cationique. » (USEPA, 2002).

Le MAPBAP acétate pourrait pénétrer dans le sol par des biosolides provenant d'usines de pâte à papier, qui pourraient servir à l'enrichissement du sol. La volatilisation à partir des surfaces de sol sèches ou humides est un processus peu important dans le devenir du MAPBAP acétate, car la pression de vapeur de cette substance est faible (voir le tableau 2). S'il est rejeté dans le sol, le MAPBAP acétate pourrait être mobile en fonction de la faible valeur modélisée de  $K_{co}$  (en utilisant le  $\log K_{oe}$  modélisé déduit à partir d'analogues comme intrant). Toutefois, comme dans la situation de l'eau de surface, le MAPBAP acétate cationique dissocié pourrait se lier à la matière anionique dans le sol et, par conséquent, avoir tendance à demeurer dans ce milieu.

Le MAPBAP acétate est un solide à température ambiante et d'après sa pression de vapeur et la constante de la loi de Henry, il n'est pas rejeté dans l'air.

## Persistence et potentiel de bioaccumulation

### Persistence dans l'environnement

Aucune donnée expérimentale sur la dégradation biologique du MAPBAP acétate n'a été trouvée. Il n'existe pas d'analogues pertinents avec des données expérimentales pour la dégradation, si bien qu'une méthode du poids de la preuve reposant sur des RQSA (Environnement Canada, 2007) a été utilisée avec les modèles de dégradation indiqués dans le tableau 5 ci-après. Les modèles pour la persistance utilisent une structure chimique comme base de leurs prévisions. La spéciation chimique (ionique *par rapport* à sa forme neutre) est moins pertinente pour les prévisions relatives à la biodégradation que pour les prévisions liées à la bioaccumulation et à la toxicité.

Les modèles BIOWIN ont été utilisés pour estimer la persistance de la substance dans l'eau, et ces prévisions ont été extrapolées dans le sol et les sédiments, où le MAPBAP devrait se répartir dans une certaine mesure.

**Tableau 5. Données modélisées sur la dégradation du MAPBAP acétate**

Processus du devenir	Modèle et détails du modèle	Prévisions	Demi-vie extrapolée (jours ou heures)
<b>AIR</b>			
Oxydation atmosphérique	AOPWIN, 2000	$t_{1/2} = 0,048$ jour	< 2
Réaction avec l'ozone	AOPWIN, 2000	s.o. <sup>1</sup>	N/D
<b>EAU</b>			
Hydrolyse	HYDROWIN, 2008	$t_{1/2} = 1\,059$ jours (pH 7) $t_{1/2} = 106$ jours (pH 8)	N/D
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2008 Sous-modèle 3 : enquête d'expert (biodégradation ultime)	1,44 <sup>2</sup> « se biodégrade lentement »	> 182 <sup>4</sup>
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2008 Sous-modèle 4 : enquête d'expert (biodégradation primaire)	2,62 <sup>2</sup> « peut se biodégrader rapidement »	< 182 <sup>4</sup>
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2008 Sous-modèle 5 : MITI probabilité linéaire	-0,38 <sup>3</sup> « se biodégrade très lentement »	> 182 <sup>4</sup>
Biodégradation (aérobie)	BIOWIN, 2008 Sous-modèle 6 : MITI, probabilité non linéaire	0,0002 <sup>3</sup> « se biodégrade très lentement »	> 182 <sup>4</sup>
Biodégradation (aérobie)	CPOP, 2008 % DBO (demande biochimique en oxygène)	« ne se biodégrade pas immédiatement »	> 182 <sup>4</sup>
Biodégradation (aérobie)	Boîte à outils de l'OCDE, 2009a	% DBO = 0,19 « se biodégrade très lentement »	> 182

<sup>1</sup> Le modèle ne précise pas d'estimation pour ce type de structure.

<sup>2</sup> Le résultat s'exprime par une valeur numérique de 0 à 5.

<sup>3</sup> Le résultat s'exprime par un taux de probabilité.

<sup>4</sup> Les prévisions en matière de demi-vie concernant les modèles BIOWIN et CATABOL sont déterminées en fonction d'Environnement Canada, 2009.

Les fragments structuraux de la carbocation du MAPBAP acétate sont représentés dans les ensembles de fragments modélisés et les prévisions concordent avec les attentes relatives au potentiel de bioaccumulation de cette structure triphényle. Cependant, certains doutes subsistent, car les substances chimiques ayant une structure générale semblable à celle du MAPBAP acétate ne sont pas contenues dans leurs ensembles d'étalonnage.

Dans l'air, une valeur de demi-vie de l'oxydation atmosphérique prévue de 0,048 jour (voir le tableau 5 ci-dessus) démontre que le MAPBAP acétate va s'oxyder rapidement. Cette substance ne devrait pas réagir avec d'autres espèces photo-oxydantes dans l'atmosphère, notamment le O<sub>3</sub>, et elle ne devrait pas se dégrader par photolyse directe. Par conséquent, des réactions avec des radicaux hydroxyyles devraient donc constituer le plus important processus régissant son devenir dans l'atmosphère. Sa demi-vie de



0,02 jour, résultant des réactions avec ces radicaux, permet d'affirmer que le MAPBAP acétate n'est pas persistant dans l'air.

Une demi-vie prévue par hydrolyse dans l'eau de 1 059 jours au pH 7 (voir le tableau 5) démontre que ce produit chimique sera hydrolysé lentement. D'autres processus régissant son devenir dans l'eau, notamment la biodégradation, doivent être pris en considération pour déterminer le niveau global de persistance dans ce milieu.

Les résultats des trois modèles de biodégradation ultime BOWIN (sous-modèles BOWIN 3,5 et 6) indiquent que la biodégradation est lente et que la demi-vie dans l'eau serait supérieure à 182 jours. Bien que le résultat du sous-modèle BOWIN 4 indique que la biodégradation primaire pourrait être plus rapide et que la demi-vie de la transformation primaire dans l'eau serait inférieure à 182 jours, l'identité des produits de dégradation est inconnue. En outre, les prévisions en matière de dégradation ultime issues du modèle canadien de POP et de la boîte à outils de l'OCDE indiquent un taux de biodégradation très lent.

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 (consulter le site Web des 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 MAPBAP acétate, il n'y a aucune raison de penser que sa biodégradation sera différente de la biodégradation des teintures décrite généralement (ETAD, 1995).

Compte tenu de l'ensemble des résultats des modèles et de la structure de la molécule du MAPBAP acétate (triphénylméthane), la demi-vie de la biodégradation ultime du MAPBAP acétate est supérieure à 182 jours dans l'eau.

D'après un ratio d'extrapolation 1:1:4 de la demi-vie de biodégradation dans l'eau, le sol et les sédiments (Boethling *et al.*, 1995), la demi-vie de biodégradation ultime dans le sol est également supérieure à 182 jours, alors que celle dans les sédiments est supérieure à 365 jours. Cela indique que le MAPBAP acétate ne devrait pas être persistant dans le sol et les sédiments.

D'après les renseignements présentés ci-dessus, le MAPBAP acétate répond aux critères de la persistance dans l'eau, le sol et les sédiments (demi-vie dans le sol et l'eau  $\geq 182$  jours et demi-vie dans les sédiments  $\geq 365$  jours), mais il ne répond pas à ceux de l'air (demi-vie dans l'air  $\geq 2$  jours) tels qu'ils sont énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

### Potentiel de bioaccumulation

On ne dispose pas de données empiriques sur la bioaccumulation du MAPBAP acétate. Néanmoins, on dispose de données empiriques sur la bioaccumulation du vert malachite (n° CAS 569-64-2), un analogue du MAPBAP acétate. Ces données sont présentées dans le tableau 6a ci-après.

**Tableau 6a. Données empiriques sur la bioaccumulation du vert malachite (analogue du MAPBAP acétate)**

Organisme d'essai	Paramètre	Valeur (poids humide en L/kg)	Référence
Poisson	FBC	36 – 91	NITE, 2002

Étant donné qu'on n'a découvert aucune donnée expérimentale sur le facteur de bioaccumulation (FBA) et qu'on a trouvé un seul résultat expérimental sur le facteur de bioconcentration (FBC) pour les analogues du MAPBAP acétate, une méthode prédictive a été appliquée au moyen des modèles de FBA et de FBC disponibles, comme l'indique le tableau 6b ci-dessous. Selon le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000), une substance est bioaccumulable si ses facteurs de bioaccumulation et de bioconcentration sont supérieurs ou égaux à 5000. 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 ~4,0 (Arnot et Gobas, 2003). La modélisation cinétique du bilan massique constitue en principe la méthode de prévision la plus fiable pour déterminer le potentiel de bioaccumulation, car elle permet une correction du métabolisme dans la mesure où le log  $K_{oe}$  de la substance se trouve dans le domaine du log  $K_{oe}$  du modèle.

Le modèle de bioaccumulation du bilan massique BCFBAFWIN a été exécuté pour le MAPBAP acétate. Des données déduites à partir d'analogues pour le log  $K_{oe}$  (0,51) ont été utilisées pour les intrants du modèle. Le MAPBAP acétate présente une hydrosolubilité élevée (d'après les données déduites à partir d'analogues) et est probablement complètement dissocié à des pH environnementaux. La modélisation du FBA prend en considération un réseau alimentaire qui comprend les invertébrés benthiques (Arnot et Gobas, 2003). Le FBA prévu est de 1,015 L/kg (voir le tableau 6b ci-dessous).

**Tableau 6b. Prévisions du FBA et du FBC pour le MAPBAP acétate obtenues à l'aide du modèle cinétique Arnot-Gobas et en tenant compte du métabolisme**

Organisme d'essai	Paramètre	Valeur (poids humide en L/kg)	Référence
Poisson	FBA	1,015	Niveau trophique moyen du FBA de Gobas (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	FBC	1,015	Niveau trophique moyen du FBA de Gobas (Arnot et Gobas, 2003)

**Tableau 6c. Données modélisées supplémentaires sur la bioaccumulation qui tiennent compte du métabolisme**

Organisme d'essai	Paramètre	Valeur (poids humide en L/kg)	Référence
Poisson	FBC	65	CPOP, 2008

D'après les résultats d'études avec différentes teintures, on considère en général que les teintures ioniques ont un très faible potentiel de bioaccumulation (ETAD, 1995).

Compte tenu des preuves disponibles, le MAPBAP acétate ne répond pas aux critères de la bioaccumulation (FBA ou FBC  $\geq 5\ 000$ ) 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

Aucune donnée empirique sur la toxicité n'est disponible pour le MAPBAP acétate; dès lors, les données des analogues chimiques sont utilisées. Selon les preuves expérimentales disponibles (tableau 7a), le MAPBAP acétate nuirait aux organismes aquatiques à des concentrations relativement faibles (la  $CL_{50}$  aiguë est  $< 1$  mg/L).

**Tableau 7a. Données empiriques sur la toxicité aquatique des analogues du MAPBAP acétate**

N° CAS (nom commun)	Organisme d'essai	Type d'essai	Durée (en heures)	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
548-62-9 (Basic Violet 3)	<i>Oryzias latipes</i> (poisson Medaka)	Aigu	48	CL <sub>50</sub> <sup>1</sup>	0,1	Tonogai <i>et al.</i> , 1982
(569-64-2) Vert malachite	<i>Pseudokirchnerie lla subcapitata</i> (algues vertes)	Chronique	72	Activité enzymatique	10	Ericson, 1977
	<i>Palaemonetes kadiakensis</i> (bouquet Mississippi)	Aigu	96	CL <sub>50</sub> <sup>1</sup>	1,9	Bills <i>et al.</i> , 1977
	<i>Lepomis macrochirus</i> (crapet arlequin)	Aigu	24	CL <sub>50</sub> <sup>1</sup>	0,151	Bills <i>et al.</i> , 1977
	<i>Oncorhynchus mykiss</i> (truite arc-en-ciel)	Aigu	24	CL <sub>50</sub> <sup>1</sup>	0,332	Van Heerden <i>et al.</i> , 1995

<sup>1</sup>CL<sub>50</sub> – La concentration létale médiane ou nominale (CL<sub>50</sub>) est la concentration d'une substance qu'on estime létale pour 50 % des organismes d'essai.

L'étude la plus fiable concernant la toxicité aquatique aiguë d'un analogue semblable au MAPBAP acétate (le vert Malachite, n° CAS 569-64-2) est l'étude empirique sur la truite arc-en-ciel (tableau 7a) avec une CL<sub>50</sub> de 0,332 mg/L en 24 heures (Van Heerden *et al.*, 1995). Ce résultat indique que le MAPBAP acétate est susceptible d'être dangereux pour les organismes aquatiques à des concentrations relativement faibles (c.-à-d., CL/CE<sub>50</sub> égales ou inférieures à 1 mg/L). Cette conclusion est appuyée par des études empiriques portant sur la toxicité aiguë d'autres analogues structuraux du MAPBAP acétate.

Un sommaire rigoureux d'études (SRE) de l'étude sur la truite arc-en-ciel peut être consulté à l'annexe 2. Aucune des deux valeurs inférieures (les valeurs de CL<sub>50</sub> de 0,1 mg/L pour le medaka exposé au Basic Violet 3 (Tonogai *et al.*, 1982) et 0,151 mg/L pour le crapet arlequin exposé au vert Malachite (Bills *et al.*, 1977)) n'a été utilisée. On ne dispose pas de suffisamment de renseignements de l'étude sur le crapet arlequin pour effectuer un sommaire rigoureux d'études. L'étude sur le medaka offrirait une faible fiabilité, selon un SRE.

Étant donné qu'aucune donnée empirique sur l'écotoxicité n'est disponible pour le MAPBAP acétate, la toxicité aquatique a aussi été évaluée grâce à des modèles RQSA.

**Tableau 8. Données modélisées pour la toxicité aquatique de la forme neutre du MAPBAP acétate**

Organisme	Type	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
-----------	------	-----------	---------------	-----------

d'essai	d'essai			
Poisson	Aigu (96 heures)	CL <sub>50</sub> <sup>1</sup>	0,082	ECOSAR, 2004 <sup>4</sup>
Daphnie	Aigu (48 heures)	CL <sub>50</sub> <sup>1</sup>	0,061	ECOSAR, 2004 <sup>4</sup>
Algues vertes	Aigu (96 heures)	CE <sub>50</sub> <sup>2</sup>	0,608	ECOSAR, 2004 <sup>4</sup>
Daphnie	Aigu (48 heures)	CE <sub>50</sub> <sup>2</sup>	0,00095	TOPKAT, 2004

<sup>1</sup>CL<sub>50</sub> – Concentration d'une substance qu'on estime létale pour 50 % des organismes d'essai.

<sup>2</sup>CE<sub>50</sub> – Concentration d'une substance qu'on estime susceptible de causer un effet subléthal toxique chez 50 % des organismes d'essai

<sup>3</sup> Catégorie spéciale d'ECOSAR pour l'exécution du modèle : teintures cationiques délocalisées (triphénylméthane)

La USEPA a mis au point une liste de catégories chimiques appelée « TSCA New Chemicals Program (NCP) Chemical Categories ». L'une des catégories est celle des teintures cationiques. Le MAPBAP acétate est une teinture chimique. L'EPA indique que les teintures cationiques sont des substances solubles dans l'eau qui sont toxiques pour les poissons, les daphnies et les algues (USEPA, 2002). Néanmoins, il est à noter que les préoccupations de l'EPA en matière d'écotoxicité des teintures cationiques sont fondées sur les prévisions de modèles RQSA pour les teintures cationiques délocalisées.

Les données modélisées concernant la toxicité aquatique correspondent assez bien aux données sur les analogues et appuient la conclusion selon laquelle le MAPBAP acétate est potentiellement très dangereux pour les organismes aquatiques (toxicité aiguë CL/CE<sub>50</sub> égale ou supérieure à 1,0 mg/L).

## B – Dans d'autres milieux naturels

Étant donné que le MAPBAP acétate pourrait se répartir dans les sédiments et pourrait peut-être pénétrer dans le sol à partir de boues activées utilisées en général pour fertiliser les sols ou à partir de l'élimination de produits qui se dégradent et rejettent ces colorants, il est préférable d'obtenir des données de toxicité à l'égard des organismes vivant dans les sédiments et le sol. Néanmoins, on n'a trouvé aucune étude acceptable concernant les effets de cette substance sur l'environnement dans d'autres milieux que l'eau. Néanmoins, on n'a trouvé aucune étude acceptable concernant les effets de cette substance sur l'environnement dans d'autres milieux que l'eau. En outre, la méthode fondée sur le partage de l'équilibre (Di Toro *et al.*, 1991) est destinée aux substances non ioniques. En conséquence, les données sur les effets ne peuvent pas être estimées de façon fiable pour les organismes endogés.

### Évaluation de l'exposition de l'environnement

Aucune donnée sur les concentrations de cette substance dans l'eau au Canada n'a été retracée.

### Rejets industriels

Une analyse de l'exposition pour chaque site a été réalisée pour le milieu aquatique; le MAPBAP acétate était utilisé sur 11 sites au total comme teinture dans la production de produits de papier. La quantité de cette substance utilisée sur chaque site était comprise entre 1 000 et 10 000 kg/an (Environnement Canada, 2009a). Le taux de fixation de la substance est un paramètre important pour ce qui est d'estimer son exposition dans les eaux réceptrices. Il peut augmenter avec l'utilisation d'un fixatif de colorant et augmenter davantage par la réutilisation d'une eau de procédé. Par conséquent, deux scénarios ont servi : un scénario de la pire éventualité qui suppose qu'on n'utilise aucun fixatif et une faible réutilisation de l'eau dans une usine; et un scénario de réussite qui suppose l'utilisation d'un fixatif et une forte réutilisation de l'eau. Les taux de fixation simples (80 % dans le cas du scénario de la pire éventualité et 90 % dans le cas de réussite, respectivement) proviennent du document Emission Scenario Document(ESD) de l'OCDE sur les usines de pâtes et papiers non intégrées (OCDE, 2006). Le degré de réutilisation de l'eau, qui provient également du ESD, varie entre 65 % dans le pire cas et 85 % dans le meilleur cas. Après avoir tenu compte de l'influence de la réutilisation de l'eau sur le taux de fixation global et des résidus des conteneurs à 0,3 % que l'on prévoit pour le nettoyage sur place (OCDE, 2009b), la fraction maximale perdue suite aux procédés de production dans les eaux usées avant un traitement à été évaluée à 8,3 %. Les eaux usées contenant du MAPBAP acétate ont ensuite été traitées par des systèmes de traitement des eaux usées secondaire sur place ou hors site, avec un taux d'élimination prévu par le modèle de l'ordre de 3,4 % (ASTreat 1.0). Les effluents de ces systèmes de traitement ont ensuite été rejetés dans des rivières, des lacs ou des eaux côtières et un facteur de dilution allant jusqu'à 10 a été utilisé pour obtenir les concentrations environnementales estimées (CEE) à partir des concentrations des effluents. Les estimations des CEE pour les 11 sites industriels allaient de 0,00575 mg/L à 0,0543 mg/L (Environnement Canada, 2009c). Ces valeurs des CEE représentent le niveau d'exposition dans les eaux réceptrices près du point de rejet de l'usine de traitement des eaux usées sur chaque site.

### *Caractérisation des risques écologiques*

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 prudent du quotient de risque ainsi que des renseignements sur la persistance, la bioaccumulation, la toxicité, les sources et le devenir de la substance dans l'environnement.

Le MAPBAP acétate devrait être persistant dans l'eau, le sol et les sédiments, mais pas dans l'air. Il devrait également présenter un faible potentiel de bioaccumulation. Les volumes d'importation de cette substance au Canada et les renseignements relatifs à ses utilisations indiquent un risque de rejets dans l'environnement au Canada. Une fois rejeté dans l'environnement, le MAPBAP acétate pourrait se retrouver dans l'eau, le sol ou les sédiments, en fonction du milieu où il serait rejeté. D'après des données déduites à partir

d'analogues, le MAPBAP acétate présenterait un potentiel de toxicité élevée 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. Les estimations des CEE pour les 10 sites industriels allaient de 0,00575 mg/L à 0,0543 mg/L (Environnement Canada, 2009c).

La valeur de toxicité critique (VTC) pour la présente évaluation, fondée sur les données déduites à partir d'analogues expérimentaux, est la  $CL_{50}$  expérimentale de 0,332 mg/L pour la truite arc-en-ciel. Pour calculer la CESE, on divise cette valeur par un facteur d'évaluation de 100 (10 pour tenir compte de la variabilité inter et intraspécifique de la sensibilité, et 10 pour estimer une concentration sans effet à long terme provenant d'une  $CL_{50}$  à court terme) de façon à obtenir une valeur de 0,003 mg/L. Le quotient de risque qui en résulte (CEE/CESE) dans le cas du scénario de la pire éventualité variait entre 1,5 et 18,1. Même dans le cas du scénario de réussite, 8 QR sur 10 étaient supérieurs à 1 (1,2 à 3,6).

Ces renseignements révèlent que le MAPBAP acétate pourrait causer des effets écologiques nocifs au Canada.

Comme il a été mentionné précédemment, lorsque le MAPBAP acétate 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. On n'a découvert aucune donnée de surveillance environnementale ou de toxicité propre aux organismes vivant dans les sédiments, alors un quotient de risque basé sur l'exposition dans l'eau interstitielle des sédiments peut être calculé en fonction des valeurs de la CEE et de la CESE du milieu aquatique présentées ci-dessus et utilisées pour la caractérisation des risques liés aux sédiments. Dans le calcul, les sédiments benthiques et leur eau interstitielle sont censés être en équilibre avec l'eau sus-jacente, et les organismes benthiques et pélagiques sont censés montrer des sensibilités similaires à la substance. Par conséquent, la CEE et la CESE pour l'eau interstitielle des sédiments sont jugées identiques pour le milieu aquatique. Cette approche d'équilibre donnera donc lieu à des quotients de risque pour le milieu sédimentaire qui seront identiques à ceux du milieu aquatique.

### **Incertitudes dans l'évaluation des risques pour l'environnement**

Il n'y a aucune donnée expérimentale pour le MAPBAP acétate. Il n'y a aucune donnée pertinente déduite à partir d'analogues en matière de persistance. Ces lacunes ont nécessité l'utilisation de prévisions modélisées pour la persistance. En outre, des doutes subsistent quant aux prévisions modélisées pour les propriétés physicochimiques, la

persistance et le potentiel de bioaccumulation, car il n'y a aucune teinture de triarylméthane dans les ensembles d'étalonnage pour ces modèles.

Des données déduites à partir d'analogues ont été utilisées pour certaines propriétés physicochimiques (hydrosolubilité,  $\log K_{oc}$ ), le potentiel de bioaccumulation et la toxicité aquatique. Il subsiste des incertitudes au sujet des données utilisées sur la toxicité aquatique expérimentale déduites à partir d'analogues parce que le COD pourrait atténuer la toxicité, ce que ne mentionne pas l'étude.

Il existe des incertitudes en raison du manque de renseignements (p. ex. des données de surveillance) sur les concentrations environnementales du MAPBAP acétate au Canada ou ailleurs.

Il existe des incertitudes associées au scénario de l'exposition, en particulier en ce qui concerne le taux de fixation de MAPBAP acétate et le rejet qui s'ensuit de MAPBAP acétate dans les eaux usées. Il y a un doute quant à la quantité de MAPBAP acétate qui est éliminée dans les boues des usines de traitement des eaux usées parce qu'on a utilisé des modèles pour prévoir la quantité et qu'ils ne tiennent pas compte de la répartition attribuable à l'attraction électrostatique. Il subsiste des incertitudes au sujet des conditions dans des usines précises de pâte à papier qui influeraient sur la quantité de MAPBAP acétate rejetée dans les eaux usées, en particulier, le degré d'encadrement (le recyclage de l'eau vive) et à savoir si des fixatifs ont été utilisés de sorte que la modélisation de l'exposition comportait certaines hypothèses prudentes.

Bien que l'on ne possède aucun renseignement sur la quantité des importations de produits de consommation contenant du MAPBAP acétate, on prévoit qu'en raison de la nature diffuse des rejets, les concentrations de cette substance dans les différents milieux naturels ne seraient pas sensiblement différentes. On reconnaît également que les rejets potentiels à partir de sites d'élimination des déchets sont possibles et qu'ils contribueraient à une concentration générale dans l'environnement. Néanmoins, les renseignements disponibles ne sont pas suffisants actuellement pour déterminer une estimation quantitative de ces rejets.

## **Potentiel d'effets nocifs sur la santé humaine**

### **Évaluation de l'exposition**

#### *Milieu naturel*

Aucune donnée n'a été déterminée pour le MAPBAP acétate dans les milieux naturels, quel que soit l'endroit. Faute de données sur les rejets issues d'inventaires accessibles au public et étant donné que dans les réponses à un avis publié en application de l'article 71 de la LCPE (1999), aucun rejet n'a été déclaré, à titre d'approche prudente, les



concentrations environnementales ont été estimées à l'aide des pourcentages des pertes prévus par l'outil de débit massique par Environnement Canada (voir le tableau 4) (Environnement Canada, 2009c). Les pourcentages ont été appliqués à la quantité totale de MPBAP acétate commercialisé au Canada en 2006.

La quantité totale commercialisée a été prudemment estimée à une quantité allant jusqu'à 100 000 kg (Environnement Canada, 2009a). Les pertes correspondantes dans l'eau et le sol sont considérées être des surestimations.

Les pertes estimées ont été utilisées dans ChemCAN, un modèle d'exposition environnementale propre au Canada, afin d'estimer les concentrations dans différents milieux naturels (ChemCAN, 2003). Ce modèle diffère des modèles aux sources ponctuelles utilisés dans la section de l'évaluation écologique du document, qui fournissent des estimations de l'exposition à proximité des points de rejets, dans le sens où il s'agit d'un modèle régional de fugacité de niveau III en champ lointain qui est utilisé pour estimer les concentrations moyennes dans différents milieux, dans le but d'informer les estimations relatives à l'exposition humaine. Les concentrations environnementales estimées sont présentées à l'annexe 3 et elles ont été utilisées comme substituts pour les données mesurées afin d'obtenir les estimations de l'absorption. La concentration estimative dans l'air ambiant a été utilisée comme substitut pour les données relatives à l'air intérieur. De plus, la concentration estimative dans l'eau de surface a été utilisée comme substitut pour les données relatives à l'eau potable. Les estimations de l'absorption pour chaque milieu, en plus de l'absorption totale pour chaque groupe d'âge, sont présentées à l'annexe 4. On estime que le sol est la source prédominante d'exposition environnementale; il produit une absorption quotidienne maximale totale de 0,039 µg/kg p.c. par jour pour les nourrissons âgés entre 0 et 6 mois nourris avec des préparations lactées.

#### *Produits de consommation*

Le MAPBAP acétate est utilisé comme colorant basique pour certaines catégories de papier tels que les papiers journaux. Dans les réponses à un avis publié en application de l'article 71 de la LCPE (1999) le MAPBAP acétate a été utilisé en 2006 au Canada pour colorer le papier journal à une concentration allant de 0,06 à 0,12 % par poids dans le papier (Environnement Canada, 2009a). À la différence des encres, les teintures sont contenues dans la matrice du papier et elles devraient montrer une migration négligeable dans un scénario d'exposition par voie cutanée. Néanmoins, il est bien connu que les tout-petits âgés de 0,5 à 4 ans ingèrent du papier pendant leur comportement d'absorption orale, ce qui entraîne une exposition orale potentielle. L'environnement extrêmement acide de l'estomac (pH ≈ 2) peut détériorer la résistance du colorant de manière inconnue; dès lors, le rejet et la disponibilité du colorant pour l'absorption dans le tractus gastro-intestinal ont été prudemment estimés à 100 % lors de la modélisation de l'exposition potentielle découlant de cette éventualité. Un scénario d'ingestion de papier a produit une absorption aiguë orale estimée à 0,067 mg/kg p.c. par événement et il est présenté à l'annexe 5.

Aux États-Unis, le MAPBAP acétate est autorisé comme ingrédient inerte dans les produits antiparasitaires à des fins non alimentaires par la USEPA (USEPA, 2009). Cependant, le MAPBAP acétate n'est actuellement pas enregistré comme un produit de formulation ou un ingrédient actif dans les produits antiparasitaires au Canada; dès lors, cette application n'est pas considérée comme une source d'exposition pour les Canadiens (courriel de l'Agence de réglementation de la lutte antiparasitaire de Santé Canada adressé au Bureau de l'évaluation des risques de Santé Canada en 2009; source non citée).

### Évaluation des effets sur la santé

Aucune donnée empirique sur la toxicité n'a été trouvée pour le MAPBAP acétate. Les sources de renseignements liés aux risques pour la santé pris en considération comprenaient un examen des études internationales disponibles, des évaluations ou des classifications, un examen des données empiriques lorsqu'elles étaient disponibles et l'utilisation de modèles de prévision appropriés. Les résultats des modèles de prévision ont également été pris en considération au moyen de cinq modèles de RQSA différents, à savoir TOPKAT (2004), CASETOX (2008), Toxtree (2009), DEREK 2008 et Model Applier (2009).

Grâce à la structure moléculaire représentative du MAPBAP [avec le fragment d'acide acétique (acétate) attaché à l'atome de carbone (attaché aux trois noyaux aromatiques)], nous avons obtenu les résultats suivants. Des prévisions positives ont été obtenues sur cinq paramètres de génotoxicité différents et seul l'un de ceux-ci (c'est-à-dire le micronoyau) est corroboré par plus d'un modèle (CASETOX et Toxtree). Le modèle Benigni-Bossa dans le modèle Toxtree prévoit également un mutagène *Salmonella typhimurium*, souche TA100, avec activation métabolique. De même, les modèles de cancer chez les rats femelles des modèles CASETOX et Model Applier ont émis des prévisions positives. Le modèle de cancer chez les rats mâles de CASETOX ainsi que les deux modèles liés aux souris (mâles et femelles) de Model Applier ont émis des prévisions positives. La présence d'une alerte structurale indiquant la cancérogénicité génotoxique est un autre élément de renseignement justificatif qui a été obtenu à partir du modèle Benigni-Rossa dans Toxtree. En appliquant le modèle OncoLogic à une structure presque semblable contenant un groupe hydroxyl au lieu du groupe acétate, on obtient une prévision positive en matière de cancérogénicité. Cette prévision est fondée sur la présence de groupes remplacés par de l'azote sur les noyaux aromatiques.

Il est important de noter que le modèle de micronoyau de Toxtree est un filtre à grain grossier pour l'évaluation préliminaire de mutagènes *in vivo* potentiels et que le modèle OncoLogic n'utilise pas la structure identique aux fins de prévision. De même, les modèles d'Ames de CASETOX et Model Applier prévoient des résultats négatifs, tandis que TOPKAT et DEREK ne donnent aucune information. Cependant, dans le cas des modèles de cancer, nous disposons d'au moins trois modèles (CASETOX, Model Applier et Toxtree) qui classent cette substance chimique comme cancérogène potentiel. Les modèles CASETOX, Model Applier et Toxtree sont fondés sur des méthodologies uniques pour la réalisation de prévisions, et comme ils aspirent à un résultat semblable, ils ont plus de poids.

Par conséquent, les prévisions des résultats ont été mélangées pour la cancérogénicité (6 positives et 4 négatives), la génotoxicité (6 positives et 7 négatives), ainsi que la toxicité pour le développement (2 positives, 18 négatives et 10 sans résultat) et la reproduction (1 positive et 12 sans résultat).

Des analogues structuraux potentiels du MAPBAP acétate destinés à la déduction par analogie pour l'obtention de renseignements sur la toxicité pour la santé humaine ont été déterminés à l'aide de Leadscope (Leadscope, 2008) et de ChemID, ainsi que grâce à un jugement professionnel. Lorsque la structure principale distribuera la charge positive à travers la molécule par des structures de résonance, le contre-ion acétate va probablement faire l'objet d'échanges avec d'autres ions ou substrats lors de l'utilisation du colorant. Dès lors, la portion de l'intérêt d'un point de vue toxicologique pour la santé humaine serait la molécule mère elle-même. D'autres substances de triarylamine, qui disposent de données empiriques, comprennent le violet de gentiane (n° CAS 548-62-9), le vert malachite (n° CAS 569-64-2), le C.I. Basic Violet 4 (n° CAS 2390-59-2) et la leucobase du vert malachite (n° CAS 129-73-7), comme l'indique l'annexe 7.

L'Union européenne a classé le violet de gentiane dans la catégorie 2 pour la cancérogénicité (ECB, 2002), d'après la cancérogénicité chez les animaux de laboratoire. Une étude a signalé une génotoxicité *in vitro* négative pour les mutations dans le cadre d'une épreuve de mutation inverse chez plusieurs souches de *S. typhimurium* après une exposition à du violet d'aniline à des concentrations variant entre 5 – 1 000 µg/plaque (NICNAS, 1999). L'Union européenne a classé le vert malachite dans la catégorie 3 de la toxicité pour la reproduction (ECB, 2003) en fonction de la toxicité sur le développement chez des animaux de laboratoire. De plus, le NTP des États-Unis (2005) a fait état de preuves ambiguës de cancérogénicité chez des rats femelles et de résultats négatifs pour la génotoxicité à partir d'un test du micronoyau *in vivo* et d'un test sur le *S. typhimurium in vitro* (NTP, 1997 et 1994).

Lors d'un test du micronoyau *in vitro* effectué sur le C.I Basic Violet 4, on a obtenu des données négatives en matière de génotoxicité pour les mutations et pour les aberrations chromosomiques dans des cellules ovariennes de hamsters chinois (NICNAS, 1999); la substance s'est également avérée majoritairement négative lors d'essais *in vitro* effectués sur des cellules de *S. typhimurium* et de lymphomes de souris (CCRIS, 2009). La leucobase du vert malachite a révélé certaines preuves de cancérogénicité chez des souris femelles et des données positives en matière de génotoxicité *in vivo* (NTP, 1996 et 2005).

Les données obtenues à partir des modèles de RQSA ainsi que d'analogues potentiels laissent penser que certains risques pourraient être associés à la substance en matière de toxicité cancérogène ou pour le développement.

Le niveau de confiance à l'égard de la base de données toxicologiques est réputé faible en raison du manque de données disponibles pour le MAPBAP acétate.

## Caractérisation du risque pour la santé humaine

On s'attend à ce que l'exposition potentielle de la population générale au MAPBAP acétate présent dans les milieux naturels soit négligeable. L'exposition au MAPBAP acétate par l'entremise des produits de consommation (colorant pour papier journal) devrait être négligeable pour l'utilisation prévue de ces produits (exposition négligeable par voie cutanée pendant la lecture) et faible pour les événements fortuits, notamment lorsque de jeunes enfants portent ces produits à leur bouche.

Comme l'exposition de l'ensemble de la population canadienne à cette substance devrait être faible ou négligeable en raison de son utilisation comme colorant pour papier, le risque pour la santé humaine est considéré comme faible.

Aucune donnée empirique sur la toxicité n'a été trouvée pour le MAPBAP acétate. Les résultats liés aux prévisions des relations quantitatives structure-activité (RQSA) pour la cancérogénicité et la génotoxicité étaient partagés. Les données déduites à partir d'analogues laissent entendre également un potentiel de cancérogénicité, de génotoxicité et de toxicité sur le plan du développement.

## Incertitudes de l'évaluation des risques pour la santé humaine

La confiance à l'égard des estimations de l'exposition environnementale est modérée. Aucune donnée documentaire n'a été relevée pour les concentrations dans les milieux naturels. Cependant, comme aucun rejet n'a été déclaré en réponse à un avis publié en application de l'article 71 de la LCPE (1999), conjointement avec l'utilisation prudente des quantités des pertes prévues par l'outil de débit massique pour représenter les estimations du scénario de rejet de la pire éventualité, il est peu probable que les valeurs des absorptions soient des sous-estimations. La confiance à l'égard des estimations relatives à l'exposition des produits de consommation est modérée. Bien que l'on considère que les produits finaux utilisés actuellement au Canada sont pris en charge de manière exhaustive dans les réponses à un avis publié en application de l'article 71 de la LCPE (1999), la quantité de papier ingérée par un tout-petit par la bouche était une estimation prudente.

En raison du manque de données disponibles pour le MAPBAP acétate, la confiance à l'égard de la base de données toxicologiques est très faible.

## Conclusion

Selon le rapport d'évaluation préalable, le MAPBAP acétate pénètre ou peut pénétrer dans l'environnement en une quantité, à une concentration ou dans des conditions qui ont ou peuvent avoir, immédiatement ou à long terme, un effet nocif sur l'environnement ou sur sa diversité biologique. De plus, le MAPBAP acétate satisfait aux critères de persistance énoncés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Canada, 2000).

Après examen des données disponibles, il est conclu que le MAPBAP acétate n'est pas une substance qui pénètre dans l'environnement en une quantité, à des concentrations ou dans des conditions qui constituent ou peuvent constituer un danger pour la vie ou la santé humaine au Canada.

Toutefois, étant donné les propriétés dangereuses potentielles, on craint que des utilisations nouvelles non décelées ni évaluées en vertu de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement* (1999) fassent en sorte qu'elles répondent aux critères énoncés à l'article 64 de la *Loi*. Il est donc recommandé que la substance susmentionnée soient assujettie aux dispositions relatives à une nouvelle activité au titre du paragraphe 81(3) de la *Loi*. Ainsi, toute nouvelle activité de fabrication, d'importation ou d'utilisation de la substance en une quantité supérieure à 100 kg par année serait déclarée et les risques qu'elles présentent pour la santé humaine et l'environnement seraient évalués, conformément à l'article 83 de la *Loi*, avant d'envisager d'introduire la substance au Canada.

Par conséquent, il est conclu que le MAPBAP acétate satisfait à au moins un des critères énoncés à l'article 64 de la LCPE (1999).

Des activités de recherche et de surveillance viendront, le cas échéant, appuyer la vérification des hypothèses formulées au cours de l'évaluation préalable et, le cas échéant, l'efficacité des possibles mesures de contrôle définies à l'étape de la gestion des risques.

## Références

ADME. 2009. Accès : <http://pharma-algorithms.com/webboxes/>

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

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

[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](http://www.hc-sc.gc.ca/cps-spc/pubs/pest/_decisions/reg2007-04/index-fra.php)

[ASTreat] Activated Sludge Treatment. Computer model for sewage treatment plant removal predictions [CD-ROM]. 2006. Version 1.0. Cincinnati (OH) : Procter & Gamble. Disponible auprès de P&G, C.P. 538707, Cincinnati (OH), 45253-8707, États-Unis.

Baughman, G.L., Weber, E.J. 1991. Estimation of water solubility and octanol/water partition coefficient of hydrophobic dyes. part i. relationship between solubility and partition coefficient. *Dyes Pigm.* 16:261-71.

[[BESC] Bureau européen de substances chimiques. 2002. Summary Record: Commission Working Group on the Classification and Labelling of Dangerous Substances. Rencontre au Bureau Européen des Substances Chimiques à Ispra, du 16 au 18 janvier 2002. Direction générale du CCR de la Commission Européenne, Centre commun de recherche, Institute for Health and Consumer Protection, Bureau Européen des Substances Chimiques, ECBI/15/02 – Rev. 3. Accès : <http://apps.kemi.se/hclass/DocumentDownload.aspx?DocId=922706>

BESC] Bureau européen de substances chimiques. 2003. Summary Record: Commission Working Group on the Classification and Labelling of Dangerous Substances. Rencontre au Bureau Européen des Substances Chimiques à Ispra, du 15 au 17 janvier 2003. Direction générale du CCR de la Commission Européenne, Centre commun de recherche, Institute for Health and Consumer Protection, Bureau Européen des Substances Chimiques, ECBI/30/03 – Rev. 3. Accès : <http://apps.kemi.se/hclass/DocumentDownload.aspx?DocId=923632>

Bills, T.D., Marking, L.L., Chandler, Jr. J.H. 1977. Malachite green: its toxicity to aquatic organisms, persistence, and removal with activated carbon. Investigations in Fish Control. Washington (DC) : U.S. Dept. of the Interior, Fish and Wildlife Service. 6p. [cité dans ECOTOX].

[BIOWIN] Biodegradation Probability Program for Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 4.10. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : [www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm](http://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) = Canadian Environmental Protection Act, 1999, Lois du Canada = Statutes of Canada, ch. 33, Loi sanctionnée le 14 septembre 1999. Ottawa : Imprimeur de la Reine. Disponible dans la *Gazette du Canada*. Partie III, vol. 22 n° 3. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partIII/1999/g3-02203.pdf> (consulté le 3 août 2007).

Canada. 2000. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement : 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, ministère de la Santé. 2006b. *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis concernant certaines substances considérées comme priorité pour suivi*, *Gazette du Canada*. Partie I, vol. 140, n° 9, p. 435-459. Accès : <http://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 deuxième divulgation d'information technique concernant les substances identifiées dans le Défi*, *Gazette du Canada*. Partie I, vol. 141, n° 19, p. 1182-1186. Accès : <http://canadagazette.gc.ca/partI/2007/20070512/pdf/g1-14119.pdf>

Canada. Ministère de la Santé nationale et du Bien-être social. 1990. *L'allaitement maternel au Canada : pratiques et tendances*. Ottawa (Ont.) N° de catalogue H39-199/1990F; ISBN 0-662-18397-5). 9 p. [cité dans Santé Canada, 1998].

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

[CCRIS] Chemical Carcinogen Research Information System. 2009. Mutagenicity studies for C.I basic violet 4. Accès : <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/r?db+ccris:@term+@rn+2390-59-2>

ChemCAN [Level III fugacity model of 24 regions of Canada]. 2003. Version 6.00. Peterborough (Ont.) : Trent University, Canadian Centre for Environmental Modelling and Chemistry. [consulté le 6 octobre 2009]. Accès : <http://www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel/models/CC600.html>

ChemIDPlus. 2009. Outil de recherche de la base de données NLM ChemIDplus par appellation chimique, numéro de registre CAS, formule moléculaire, code de classification, code de localisation, structure ou Sous-structure. Accès : <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/>

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

[DEREK] Deducing Estimation from Existing Knowledge [module de prévision sur CD ROM]. 2008. Version 10.0.2. Cambridge (MA) : Harvard University, LHASA Group. [consulté le 31 mai 2010]. Accès : <http://lhasa.harvard.edu/?page=toxicology.htm> [réserve de consultation]

Di Toro, D.M. *et al.* 1991. Technical Basis for Establishing Sediment Quality Criteria for Nonionic Organic Chemicals using Equilibrium Partitioning. in *Environmental Toxicology and Chemistry*, Vol 10. p. 1541-1583.

[ECOSAR] Ecological Structural Activity Relationships [en ligne]. 2008. Version 1.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : [www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm](http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm)

[ECOTOX] ECOTOXicology database [base de données sur Internet]. 2006. Version 4. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Research and Development; National Health and Environmental Effects Research Laboratory, Mid-Continent Ecology Division. [consultée le 27 novembre 2009]. Accès : <http://cfpub.epa.gov/ecotox>

Environnement Canada. 1988. Données de la Liste intérieure des substances (LIS) 1984-1986, recueillies en vertu du paragraphe 25(1) de la LCPE, 1988, et conformément au guide de déclaration à la Liste intérieure des substances [guide], Ministre des Approvisionnements et Services, n° de cat. DSS En40-364/1998E. Préparé par la Division des substances nouvelles d'Environnement Canada.

Environnement Canada, Division de l'évaluation des produits chimiques. 2000. Environmental Categorization for Persistence Bioaccumulation and Inherent Toxicity of Substances on the Domestic Substances List Using QSARs. Rapport final. Environnement Canada.

Environnement Canada. 2007. Guidance for conducting ecological assessments under CEPA 1999, Science resource technical series, Technical guidance module: The Industrial Generic Exposure Tool - Aquatic (IGETA). Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des substances existantes. Document de travail préliminaire disponible sur demande.

Environnement Canada. 2009a. Données sur les substances du lot 8 recueillies en vertu de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999) : Avis concernant certaines substances identifiées dans le huitième lot du Défi*. Données préparées par le Programme des substances existantes d'Environnement Canada.

Environnement Canada. 2009b. Assumptions, Limitations and Uncertainties of the Mass Flow Tool for MAPBAP acetate CAS 72102-55-7, CAS RN 4474-24-2. Gatineau (Qc) : Division des substances existantes, Environnement Canada. Document de travail interne disponible sur demande.

Environnement Canada. 2010a. Site-specific exposure calculation report: CAS RN 72102-55-7. Le 31 mai 2010. Rapport inédit. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques.

Environnement Canada. 2010b. Site Specific Analysis report: CAS RN 72102-55-7. Le 24 mai 2010. Rapport inédit. Gatineau (Qc) : Environnement Canada, Division des évaluations écologiques. Disponible sur demande.

[EPIWIN] Estimation Programs Interface for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2004. Version 3.12. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 19 novembre 2009]. Accès : [www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm](http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm)

Ericson, J.W. 1977. Applicability of ATP Measurements for the Determination of Dye Toxicity in Short Term Algal Assays. Proc. Bi-Annual ATP Methodol. Symp., p. 415-439. San Diego (CA) : SAI Technol.Co. [cité dans ECOTOX].

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. Rapport préparé par les affiliés canadiens de l'ETAD. Juillet 1995. Rapport 7/21/95

Green, F.J. 1990. The Sigma-Aldrich handbook of stains, dyes and indicators. Milwaukee (WI) : Aldrich Chemical Company, Inc.



[HENRYWIN] Henry's Law Constant Program for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 3.10. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 19 novembre 2009]. Accès : [www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm](http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm)

Hunger, K. (éd.) 2003. Industrial Dyes: Chemistry, Properties, Applications. Weinheim (Allemagne) : Wiley-VCH.

[HYDROWIN] Hydrolysis Rates Program for Microsoft Windows [modèle d'évaluation]. 2008. Version 2.00. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : [epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm](http://epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm)

[INRP] Inventaire national des rejets de polluants [base de données sur Internet]. 2008. Gatineau (Qc) : Environnement Canada. [consultée le 6 octobre 2009]. Accès : <http://www.ec.gc.ca/inrp-npri/default.asp?lang=Fr&n=4A577BB9-1>

[KOWWIN] Octanol-Water Partition Coefficient Program for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.67. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 19 nov. 2009]. Accès : [www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm](http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm)

Leadscope Inc. 2008. Leadscope Enterprise version 2.4. (2008) : A cheminformatics and data mining application. Accès : [www.leadscope.com](http://www.leadscope.com).

Mackay, D. 1991. Multimedia environmental models. The fugacity approach. Boca Raton (FL) : Lewis Publishers, CRC Press.

Ministère de la Santé nationale et du Bien-être social. 1990. L'allaitement maternel au Canada : pratiques et tendances. N° de catalogue H39-199/1990F; ISBN 0-662-18397-5. Ottawa (Ont.) : Ministère de la Santé nationale et du Bien-être social. 9 p. [cité dans Santé Canada, 1998].

Model Applier [module de prévision] 2009. Columbus (OH) : Leadscope Inc. [consulté le 30 septembre 2009]. Accès : [http://www.leadscope.com/all\\_products.php](http://www.leadscope.com/all_products.php) [réserve de consultation].

[MPBPWIN] Melting Point Boiling Point Program for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.41. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 19 novembre 2009]. Accès : [www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm](http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm)

[NCI] National Chemical Inventories [base de données sur CD-ROM]. 2006. Issue 1. Columbus (OH) : American Chemical Society, Chemical Abstracts Service. Accès : <http://www.cas.org/products/cd/nci/require.html>

[NICNAS] National Industrial Chemicals Notification and Assessment Scheme 1999. Full Public Report. Component of Basazol Violet 46 L. File No: NA/538. Accès : <http://www.nicnas.gov.au/publications/car/new/na/nafullr/na0500fr/na538fr.pdf>

[NITE] National Institute of Technology and Evaluation (Institut national de technologie et d'évaluation). 2002. Japon. Biodegradation and Bioconcentration of Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law. Accès : [http://www.safe.nite.go.jp/data/hazkizon/pk\\_e\\_kizon\\_data\\_result.home\\_data](http://www.safe.nite.go.jp/data/hazkizon/pk_e_kizon_data_result.home_data)

[NPA] Newsprint Producers Association. 2007. Newsprint Producers Association: Who we are [en ligne]. [consulté le 14 octobre 2009]. Accès : [http://www.pppc.org/en/2\\_0/2\\_2.html](http://www.pppc.org/en/2_0/2_2.html)

- [NTP] National Toxicology Program 1994. Rapport d'étude numéro A90714. Accès : [http://ntp-apps.niehs.nih.gov/ntp\\_tox/index.cfm?fuseaction=salmonella.salmonellaData&endpointlist=SA&study%5Fno=A90714&cas%5Fno=569%2D64%2D2&activetab=summary](http://ntp-apps.niehs.nih.gov/ntp_tox/index.cfm?fuseaction=salmonella.salmonellaData&endpointlist=SA&study%5Fno=A90714&cas%5Fno=569%2D64%2D2&activetab=summary)
- [NTP] National Toxicology Program 1997. Rapport d'étude numéro A82983. Date du début du rapport, le 16 janvier 1997. Accès : [http://ntp-apps.niehs.nih.gov/ntp\\_tox/index.cfm?fuseaction=micronucleus.micronucleusData&cas\\_no=569%2D64%2D2&endpointlist=MN](http://ntp-apps.niehs.nih.gov/ntp_tox/index.cfm?fuseaction=micronucleus.micronucleusData&cas_no=569%2D64%2D2&endpointlist=MN)
- [NTP] National Toxicology Program 2005. Toxicology and Carcinogenesis Studies of Malachite Green Chloride and Leucomalachite Green (CAS Nos. 569-64-2 and 129-73-7) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice (Feed Studies). Rapport d'étude numéro C93029. Février 2005.
- [OCDE] Organisation de coopération et de développement économiques. 2006. Emission Scenario Document on non-integrated paper mills [en ligne]. Paris (France) : Direction de l'environnement de l'OCDE, Division environnement, santé et sécurité. ENV/JM/MONO(2006)8, JT00200408 [consulté en juin 2009]. Accès : [http://www.olis.oecd.org/olis/2006doc.nsf/LinkTo/NT00000D02/\\$FILE/JT00200408.PDF](http://www.olis.oecd.org/olis/2006doc.nsf/LinkTo/NT00000D02/$FILE/JT00200408.PDF)
- [OCDE] Organization of coopération et de développement économiques. 2009a. (Q)SAR Application Toolbox. Version 1.1. Accès : [http://www.oecd.org/document/54/0,3343,en\\_2649\\_34379\\_42923638\\_1\\_1\\_1\\_1,00.html](http://www.oecd.org/document/54/0,3343,en_2649_34379_42923638_1_1_1_1,00.html)
- [OCDE] Organization of coopération et de développement économiques. 2009b. Emission Scenario Document on Adhesive Formulation [en ligne]. Paris (France) : Direction de l'environnement de l'OCDE, Division environnement, santé et sécurité. ENV/JM/MONO (2009)3, JT03263583. [consulté en décembre 2009]. Accès : [http://www.olis.oecd.org/olis/2009doc.nsf/linkto/ENV-JM-MONO\(2009\)3](http://www.olis.oecd.org/olis/2009doc.nsf/linkto/ENV-JM-MONO(2009)3)
- OncoLogic. Version 6.0. 2005. An expert system for prediction of the carcinogenic potential of chemicals. USEPA (2005).
- Pagga, U., Brown, D. 1986. The degradation of dyestuffs: Part II behaviour of dyestuffs in aerobic biodegradation tests. *Chemosphere* 15(4):478-491.
- [PCKOCWIN] Organic Carbon Partition Coefficient Program for Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.66. Washington (DC) : U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. [consulté le 19 novembre 2009]. Accès : [www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm](http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm)
- Pfenninger, H., Bruttel, B. 1985. Process for converting sparingly soluble inorganic salts of cationic dyes and brighteners into more soluble salts of organic acids. United States Patent 4559144. Accès : <http://www.freepatentsonline.com/4559144.html>
- STP Model [modèle sur l'élimination des usines de traitement des eaux usées]. 2001. Version 1.5. Peterborough (Ont.) : Trent University, Canadian Environmental Modelling Centre. [consulté le 23 septembre 2009]. Accès : <http://www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel/models/VBSTP.html>
- Syracuse Environmental Research Associates, Inc. 1997. Use and Assessment of Marker Dyes Used with Herbicides. Fayetteville (NY).
- Santé Canada. 1998. Exposure factors for assessing total daily intake of priority substances by the general population of Canada. Rapport inédit. Ottawa (Ont.) : Santé Canada, Direction de l'hygiène du milieu.
- Tonogai, Y., Ogawa, S., Ito, Y., Iwaida, M. 1982. Actual survey on TLm (median tolerance limit) values of environmental pollutants, especially on amines, nitriles, aromatic nitrogen compounds and artificial dyes. *J. Toxicol. Sci.* 7:193-203

- [TOPKAT] Toxicity Prediction Program [en ligne]. 2004. Version 6.2. San Diego (CA) : Accelrys Software Inc. Accès : <http://www.accelrys.com/products/topkat/index.html>
- Toxtree Version 1.60. 2009. Tool to estimate toxic hazard by applying decision tree approach. Réalisé par Ideaconsult Ltd, Bulgarie.
- [TRI] Toxics Release Inventory [base de données sur Internet]. 2007. TRI Explorer 4.8. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency. [consulté le 6 octobre 2009]. Accès : <http://www.epa.gov/triexplorer/>
- Tsai, R.S., El Tayar, N., Testa, B. 1991. Toroidal coil centrifugal partition chromatography, a method for measuring partition coefficients. *J. Chromatogr.* 538:119-123. [cité dans Syracuse Environmental Research Associates, Inc., 1997].
- [USEPA] United States Environmental Protection Agency. 2002. TSCA New Chemicals Program (NCP) Chemical Categories. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/newchems/pubs/cat02.htm>
- [USEPA] United States Environmental Protection Agency. 2009. Inert ingredients permitted for use in nonfood use pesticide products [en ligne]. [mis à jour le 27 janvier 2009]. [consulté le 6 octobre 2009]. Washington (DC) : United States Environmental Protection Agency, Office of Prevention Pesticides and Toxic Substances. Accès : [http://www.epa.gov/opprd001/inerts/inert\\_nonfooduse.pdf](http://www.epa.gov/opprd001/inerts/inert_nonfooduse.pdf)
- USEPA. 2002. TSCA New Chemicals Program (NCP) Chemical Categories. Accès : <http://www.epa.gov/oppt/newchems/pubs/cat02.htm>
- [US ITC] United States International Trade Commission. 2004. Washington, DC 20436 (USA). MEMORANDUM ON PROPOSED TARIFF LEGISLATION of the 108th Congress. 27 août 2004. Accès : [http://hotdocs.usitc.gov/tata/hts/other/rel\\_doc/bill\\_reports/hr-4540.pdf](http://hotdocs.usitc.gov/tata/hts/other/rel_doc/bill_reports/hr-4540.pdf)
- Van Heerden, E., Van Vuren, J.H.J., Steyn, G.J. 1995. LC50 Determination for Malachite Green and Formalin on Rainbow Trout (*Oncorhynchus mykiss*). *Juveniles Water S.A.* 21(1):87-94. [cité dans ECOTOX].
- [WSKOWWIN] Water Solubility for Organic Compounds Program for Microsoft Windows [modèle d'estimation]. 2000. Version 1.41. Washington (DC) : US Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics; Syracuse (NY) : Syracuse Research Corporation. Accès : [www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm](http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm)

## Annexe 1. Tableau sommaire des intrants des modèles de PBT

	Propriétés physico-chimiques et devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Profils de persistance, bioaccumulation et toxicité	Écotoxicité
Paramètres d'entrée des modèles	EPISuite (tous les modèles, notamment AOPWIN, KOCWIN, BAFBCF, BIOWIN et ECOSAR)	STP (1) ASTreat (2) SimpleTreat (3) (différents intrants requis selon le modèle)	EQC (différents intrants requis selon qu'il s'agit de la substance chimique de type I ou II)	TaPL3 (différents intrants requis selon qu'il s'agit de la substance chimique de type I ou II)	Outil de l'OCDE pour les POP	Modèle d'Arnot et Gobas pour le modèle	Modèle de FBAm du loup de Gobas <i>et al.</i>	Modèle de POP canadien (incluant : Catabol, modèle de facteurs d'atténuation du FBC, modèle de toxicité OASIS)	Artificial Intelligence Expert System (AIES)/ TOPKAT/ ASTER	
Code SMILES	<chem>CN(c2ccc(c2)C(OC(=O)C))(c3cc(c(cc3)NCC)C)c1cc(c(cc1)NCC)C</chem>							x	x	
Masse moléculaire (g/mol)		460 (1, 2, 3)	s.o.	s.o.	x					
Point de fusion (°C)	*									
Point d'ébullition (°C)	*									
Température (°C)			s.o.	s.o.						
Masse volumique (kg/m <sup>3</sup> )		1,3504 (2)								
Pression de vapeur (Pa)	*	9,1E-10 (1, 3)								
Constante de la loi de Henry (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	*	1,9E-10 (1) 7,9E-14(3)								
Log K <sub>oe</sub> (coefficient de partage air-eau; sans dimension)			s.o.	s.o.	x					
Log K <sub>ow</sub> (coefficient de partage octanol-eau, sans dimension)	0,51	0,51 (1)			x	x	s.o.			
K <sub>ow</sub> (coefficient de partage octanol-eau, sans dimension)		x (2, 3)								
Log K <sub>oc</sub> (coefficient de partage carbone organique/eau – L/kg)										
Solubilité dans l'eau (mg/L)	9000	9000 (1, 3)		s.o.						

	Propriétés physico-chimiques et devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Profils de persistance, bioaccumulation et toxicité	Écotoxicité
<b>Paramètres d'entrée des modèles</b>	EPISuite (tous les modèles, notamment AOPWIN, KOCWIN, BAFBCF, BIOWIN et ECOSAR)	STP (1) ASTreat (2) SimpleTreat (3) (différents intrants requis selon le modèle)	EQC (différents intrants requis selon qu'il s'agit de la substance chimique de type I ou II)	TaPL3 (différents intrants requis selon qu'il s'agit de la substance chimique de type I ou II)	Outil de l'OCDE pour les POP	Modèle d'Arnot et Gobas pour le modèle	Modèle de FBAm du loup de Gobas et al.	Modèle de POP canadien (incluant : Catabol, modèle de facteurs d'atténuation du FBC, modèle de toxicité OASIS)	Artificial Intelligence Expert System (AIES)/ TOPKAT/ ASTER
Log $K_{oa}$ (coefficient de partage octanol-air, sans dimension)							s.o.		
Coefficient de partage sol-eau (L/kg)			s.o.	s.o.					
Coefficient de partage sédiments-eau (L/kg) <sup>1</sup>			s.o.	s.o.					
Coefficient de partage particules en suspension-eau (L/kg) <sup>1</sup>		x (2)	s.o.	s.o.					
Coefficient de partage poisson-eau (L/kg) <sup>2</sup>			s.o.	s.o.					
Coefficient de partage aérosol-eau; sans dimension <sup>3</sup>			s.o.	s.o.					
Coefficient de partage végétation-eau; sans dimension <sup>1</sup>				s.o.					
Enthalpie ( $K_{oe}$ )				s.o.					
Enthalpie ( $K_{ae}$ )				s.o.					
Demi-vie dans l'air (jours)			s.o.	s.o.	x				
Demi-vie dans l'eau (jours)			s.o.	s.o.	x				
Demi-vie dans les sédiments (jours)			s.o.	s.o.					
Demi-vie dans le sol (jours)			s.o.	s.o.	x				
Demi-vie dans la végétation (jours) <sup>4</sup>				s.o.					
Constante cinétique de métabolisme (1/jour)						*	s.o.		
Constante cinétique de biodégradation (jour 1 ou heure 1) – préciser		0,0130; 0,31 (3, 1/h) (2, 1/jour)							

	Propriétés physico-chimiques et devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Devenir	Profils de persistance, bioaccumulation et toxicité	Écotoxicité
<b>Paramètres d'entrée des modèles</b>	EPISuite (tous les modèles, notamment AOPWIN, KOCWIN, BAFBCF, BIOWIN et ECOSAR)	STP (1) ASTreat (2) SimpleTreat (3) (différents intrants requis selon le modèle)	EQC (différents intrants requis selon qu'il s'agit de la substance chimique de type I ou II)	TaPL3 (différents intrants requis selon qu'il s'agit de la substance chimique de type I ou II)	Outil de l'OCDE pour les POP	Modèle d'Arnot et Gobas pour le modèle	Modèle de FBAm du loup de Gobas et al.	Modèle de POP canadien (incluant : Catabol, modèle de facteurs d'atténuation du FBC, modèle de toxicité OASIS)	Artificial Intelligence Expert System (AIES)/ TOPKAT/ ASTER
Demi-vie de biodégradation en clarificateur primaire ( $t_{1/2-p}$ ; h)		533,08 (1)							
Demi-vie de biodégradation en bassin d'aération ( $t_{1/2-s}$ ; h)		53,31 (1)							
Demi-vie de biodégradation en bassin de décantation ( $t_{1/2-s}$ ; h)		53,31 (1)							

## Annexe 2 : Sommaire de rigueur d'études

Sommaires de rigueur d'études : toxicité intrinsèque pour les organismes aquatiques				
Non	Point	Pondération	Oui/non	Précisions
1	Référence : Van Heerden, E., Van Vuren, J.H.J, Steyn, et G.J. 1995. LC50 Determination for Malachite Green and Formalin on Rainbow Trout ( <i>Oncorhynchus mykiss</i> ). <i>Juveniles Water S.A.</i> 21(1):87-94. [cité dans ECOTOX].			
2	<b>Identité de la substance : n° CAS 569-64-2</b>	s. o.		
3	Identité de la substance : nom des produits chimiques : <b>vert malachite (analogue de MAPBAP acétate (lot 8, n° CAS 72102-55-7))</b>	s. o.		
4	Composition chimique de la substance	2	Non	
5	Pureté chimique	1	Non	
6	Indication de la persistance/stabilité de la substance en milieu aqueux?	1	Non	
Méthode				
7	Référence	1	Oui	Voir ci-dessous
8	Méthode normalisée (OCDE, UE, nationale, ou autre)?	3	Oui	Franson MAH. 1989. Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater. AWWA.
9	Justification de la méthode ou du protocole non normalisé employé, le cas échéant	2		
10	BPL (bonnes pratiques de laboratoire)	3	Non	
Organisme d'essai				
11	Identité de l'organisme : nom	s. o.	Oui	<i>Truite arc-en-ciel (O. Mykiss)</i>
12	Indication du nom latin ou des deux noms (latin et commun)?	1	Oui	Comme ci-dessus
13	Âge ou stade biologique de l'organisme d'essai	1	Oui	Juvéniles :
14	Longueur et/ou poids	1	Oui	Masse moyenne de 0,3755 g (plage 0,233 – 0,531)
15	Sexe	1	Non	
16	Nombre d'organismes par répétition	1	Oui	10 poissons
17	Charge en organismes	1	Oui	
18	Type de nourriture et périodes d'alimentation au cours de la période d'acclimatation	1	Oui	Aucun aliment pendant la période d'acclimatation
Conception et conditions des essais				
19	Type d'essai (toxicité aiguë ou chronique)	s. o.	Oui	Aiguë
20	Type d'expérience (en laboratoire ou sur le terrain)	s. o.	Oui	Laboratoire
21	Voies d'exposition (nourriture, eau, les deux)	s. o.	Oui	Eau
22	Durée de l'exposition	s. o.	Oui	96 h
23	Témoins négatifs ou positifs (préciser)	1	Non	
24	Nombre de répétitions (y compris les témoins)	1	Oui	20 poissons au total
25	Des concentrations nominales sont-elles indiquées?	1	Non	

26	Des concentrations mesurées sont-elles indiquées?	3	Non	On ne sait pas si les concentrations sont mesurées ou nominales.
27	Type de nourriture et périodes d'alimentation durant les essais à long terme	1	Oui	Aucun aliment
28	Les concentrations ont-elles été mesurées périodiquement (spécialement dans les essais de toxicité chronique)?	1		
29	Les conditions du milieu d'exposition pertinentes pour la substance sont-elles indiquées? (p. ex. : pour la toxicité des métaux – pH, COD/COT, dureté de l'eau, température)	3	Oui	pH = 6,95; conductivité = 16.4 mS/m; alcalinité totale = 52 mg/L CaCO <sub>3</sub>
30	Photopériode et intensité de l'éclairage	1	Oui	24 heures (12:12, DL)
31	Préparation de solutions mères et de solutions d'essai	1		
32	Un agent émulsionnant ou stabilisant a-t-il été employé si la substance était peu soluble ou instable?	1		
33	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, sa concentration est-elle indiquée?	1		
34	Si un agent émulsionnant ou stabilisant a été employé, des données sont-elles fournies sur son écotoxicité?	1		
35	Les intervalles des contrôles (y compris les observations et les paramètres de la qualité de l'eau) sont-ils indiqués?	1		
36	Méthodes statistiques utilisées	1	Oui	
<b>Renseignements d'intérêt pour la qualité des données</b>				
37	Le paramètre déterminé est-il directement attribuable à la toxicité de la substance, non à l'état de santé des organismes (p. ex., lorsque la mortalité des témoins est > 10 %) ou à des facteurs physiques (p. ex., « effet d'ombrage »)?	s. o.		
38	L'organisme d'essai convient-il à l'environnement au Canada?	3	Oui	
39	Les conditions d'essai (pH, température, OD, etc.) sont-elles typiques pour l'organisme d'essai?	1	Oui	
40	Le type et la conception du système (statique, semi-statique, dynamique; ouvert ou fermé; etc.) correspondent-ils aux propriétés de la substance et à la nature ou aux habitudes de l'organisme?	2	Oui	Renouvellement continu
41	Le pH de l'eau d'essai était-il dans la plage des valeurs typiques de l'environnement au Canada (6 à 9)?	1	Oui	
42	La température de l'eau d'essai était-elle dans la plage des valeurs typiques de l'environnement au Canada (5 à 27 °C)?	1	Oui	10 ± 1 °C
43	La valeur de la toxicité était-elle inférieure à celle de la solubilité de la substance dans l'eau?	3	Oui	
<b>Résultats</b>				
44	Valeurs de la toxicité (fournir paramètres et valeurs)	s. o.	s. o.	
45	Autres paramètres indiqués – p. ex., FBC/FBA, CMEO/CSEO (préciser)?	s. o.		



46	Autres effets nocifs indiqués (p. ex., cancérogénicité, mutagénicité)?	s. o.		
47	<b>Note : ... % %</b>			<b>67.5</b>
48	<b>Code de fiabilité d'EC :</b>			<b>2</b>
49	<b>Catégorie de fiabilité (élevée, satisfaisante, faible) :</b>			<b>Confiance satisfaisante</b>
50	<b>Remarques</b>			

### Annexe 3 : Estimation des concentrations du MAPBAP acétate dans les milieux naturels à l'aide du modèle ChemCAN, version 6.00 (ChemCAN, 2003).<sup>1,2</sup>

Milieu <sup>3</sup>	Concentration estimée
Air ambiant <sup>4</sup>	$5,14 \times 10^{-4}$ ng/m <sup>3</sup>
Eau de surface <sup>5</sup>	364 ng/L
Sol <sup>6</sup>	0,158 ng/g de solides
Sédiments <sup>6</sup>	0,0321 ng/g de solides

<sup>1</sup>Aux fins de modélisation, les valeurs du log K<sub>oc</sub> et de l'hydrosolubilité de l'analogue (n° CAS 48-62-9) ont été utilisées.

<sup>2</sup>Les concentrations ont été estimées pour la région du sud de l'Ontario.

<sup>3</sup>Les concentrations du débit entrant par défaut, soit 2 ng/m<sup>3</sup> dans l'air et 3 ng/L dans l'eau ont été précisées par ChemCAN.

<sup>4</sup>La demi-vie de dégradation dans l'air a été estimée à 0,02 jour (AOPWIN, 2000).

<sup>5</sup>La demi-vie de dégradation dans l'eau a été estimée à 1059 jours (HYDROWIN, 2000).

<sup>6</sup>Les processus de dégradation dans le sol et les sédiments ont été jugés négligeables.

### Annexe 4. Estimations des absorptions journalières totales et propres aux milieux de MAPBAP acétate pour différents groupes d'âge

Voie d'exposition	Absorption estimée (µg/kg p.c. par jour) de MAPBAP acétate par différents groupes d'âge							
	0 à 0,5 an <sup>1,2,3</sup>			0,5 à 4 ans <sup>4</sup>	5 à 11 ans <sup>5</sup>	12 à 19 ans <sup>6</sup>	20 à 59 ans <sup>7</sup>	60 ans et plus <sup>8</sup>
	Nourris au lait maternel	Nourris au lait maternisé	Sans lait maternisé					
Air <sup>9</sup>	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001
Eau potable <sup>10</sup>	S. O.	0,039	<0,015	<0,016	<0,013	<0,007	<0,008	<0,008
Aliments et boissons <sup>11</sup>	N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	N/D
Sol <sup>12</sup>	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001
Absorption totale	<0,001	0,039	0,015	0,016	0,013	0,007	0,008	0,008
Absorption maximale totale à partir de toutes les voies d'exposition : ~0,01 µg/kg p.c. par jour								

<sup>1</sup> Aucune donnée n'a été déterminée pour les concentration de MAPBAP acétate dans le lait maternel.

<sup>2</sup> On présume que le nourrisson pèse 7,5 kg, respire 2,1 m<sup>3</sup> d'air par jour, boit 0,8 L d'eau par jour (lait maternisé) ou 0,3 L d'eau par jour (lait non maternisé) et ingère 30 mg de sol par jour (Santé Canada, 1998).

<sup>3</sup> Dans le cas des enfants uniquement nourris au lait maternisé, l'absorption par l'eau correspond à l'absorption par la nourriture. La concentration de MAPBAP acétate dans l'eau potable utilisée pour reconstituer le lait maternisé était basée sur une estimation de la concentration dans l'eau de surface de 364 ng/L fournie par le modèle ChemCAN, version 6.00. En ce qui concerne les enfants non nourris au lait maternisé, 50 % d'entre eux ont commencé à manger des aliments solides à 4 mois et 90 % ont commencé à 6 mois (Santé Canada, 1990).

- <sup>4</sup> En supposant que l'enfant pèse 15,5 kg, qu'il respire 9,3 m<sup>3</sup> d'air par jour, qu'il boive 0,7 L d'eau par jour et qu'il ingère 100 mg de sol par jour (Santé Canada, 1998).
- <sup>5</sup> En supposant que l'enfant pèse 31 kg, qu'il respire 14,5 m<sup>3</sup> d'air par jour, qu'il boive 1,1 L d'eau par jour et qu'il ingère 65 mg de sol par jour (Santé Canada, 1998).
- <sup>6</sup> En supposant que le jeune pèse 59,4 kg, qu'il respire 15,8 m<sup>3</sup> d'air par jour, qu'il boive 1,2 L d'eau par jour et qu'il ingère 30 mg de sol par jour (Santé Canada, 1998).
- <sup>7</sup> En supposant que la personne pèse 70,9 kg, qu'elle respire 16,2 m<sup>3</sup> d'air par jour, qu'elle boive 1,5 L d'eau par jour et qu'elle ingère 30 mg de sol par jour (Santé Canada, 1998).
- <sup>8</sup> En supposant que la personne pèse 72,0 kg, qu'elle respire 14,3 m<sup>3</sup> par jour, qu'elle boive 1,6 L d'eau par jour et qu'elle ingère 30 mg de sol par jour (Santé Canada, 1998).
- <sup>9</sup> La concentration de MAPBAP acétate dans l'air ambiant et l'air intérieur était basée sur une concentration estimative dans l'air ambiant de  $5,14 \times 10^{-4}$  ng/m<sup>3</sup> fournie par le modèle ChemCAN, version 6.00.
- <sup>10</sup> La concentration de MAPBAP acétate dans l'eau potable était basée sur une estimation de la concentration dans l'eau de surface de 364 ng/L fournie par le modèle ChemCAN, version 6.00.
- <sup>11</sup> On n'a défini aucune donnée à partir de laquelle l'exposition par les aliments pouvait être estimée.
- <sup>12</sup> La concentration de MAPBAP acétate dans le sol était basée sur une estimation de la concentration dans le sol de 0,158 ng/L de solides fournie par le modèle ChemCAN, version 6.00.

### Annexe 5 : Exposition estimative de l'ingestion de papier à usages multiples par un tout-petit âgé entre 0,5 et 4 ans

Hypothèses	Estimations de l'exposition
<p>On a décelé du MAPBAP acétate dans le papier journal, un type de papier défini comme pesant entre 40 g/m<sup>2</sup> et 57 g/m<sup>2</sup> (PAN, 2007) et utilisé pour l'impression de journaux et certains produits de consommation, notamment des blocs de dessin pour les étudiants. On a émis une hypothèse selon laquelle le MAPBAP acétate peut être utilisé dans certaines tablettes à croquis de format commercial (8,5 × 11 pouces) destinées aux enfants. Comme les tout-petits âgés de 0,5 à 4 ans montrent des comportements d'absorption par la bouche, une exposition par ingestion a été estimée.</p> <p>Le poids de base maximal du papier journal en pouces carrés :  <math>(57 \text{ g/m}^2) \times (0,00064516 \text{ m}^2/1 \text{ po}^2) = 0,037 \text{ g/po}^2</math></p> <p>Le poids maximal d'une feuille de papier à dessin (format commercial) :  <math>(8,5 \text{ po} \times 11 \text{ po})(0,037 \text{ g/po}^2) = 3,46 \text{ g}</math></p> <p>On a estimé très prudemment que ¼ de la totalité du MAPBAP acétate dans une feuille de papier à dessin était ingéré (0,87 g de papier).</p> <p>La concentration maximale de MAPBAP acétate dans le papier déclarée dans les réponses à un avis publié en application de l'article 71 de la LCPE (1999) était de 0,12 % par poids (Environnement Canada, 2009a).</p> <p>La fraction d'absorption orale a prudemment été estimée à 1.</p> <p><b>Absorption orale estimée :</b>  Absorption = <math>[\text{Concentration du MAPBAP acétate dans le papier} \times \text{poids du papier ingéré}]</math>  (poids corporel du tout-petit)  Pour les tout-petits de 0,5 à 4 ans<sup>1</sup>  Absorption = <math>[(1,2 \text{ mg/g}) \times (0,87 \text{ g})] / 15,5 \text{ kg} = 0,67 \text{ mg/kg} &lt; \text{p.c.}</math></p>	<p>Absorption orale pendant l'événement :  0,067 mg/kg p.c.</p>

<sup>1</sup>On estime le poids des tout-petits (0,5 à 4 ans) à 15,5 kg (Santé Canada, 1998).

**Annexe 6 : Sommaire des résultats des modèles R(Q)SA  
PRÉVISIONS DES MODÈLES R(Q)SA SUR LA TOXICITÉ POUR LA CANCÉROGÉNÉCITÉ**

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

\* Celle-ci est faiblement positive (30 unités et 81 % de probabilité)

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

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

## Évaluation préalable du Défi

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

#### Model Applier

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

#### Multicase Casetox

Souris	Rat	Lapin	Homme
HD	p	HD	HD

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

#### Model Applier

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

#### Multicase Casetox

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

MA – Model Applier;

CT – Multicase Casetox;

TK – Topkat;

TT – Toxtree;

BB – Benigni-Bossa rule;

HD – hors domaine;

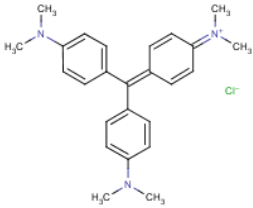
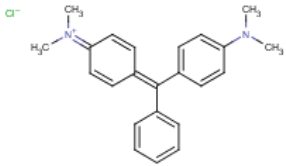
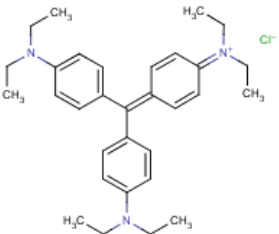
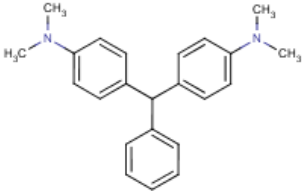
« - » – aucun modèle disponible dans la suite RQSA

AR – aucun résultat

P – positif

N - négatif

### Annexe 7 : Analogues du MAPBAP acétate pris en considération dans la partie de l'évaluation relative à la santé humaine

Nom/n° CAS	Structure	Données/classifications
Violet de gentiane 548-62-9		<p>Catégorie 2 pour la cancérogénicité de l'Union européenne (ECB, 2002) basée sur les preuves chez les animaux de laboratoire</p> <p><b>Genotoxicité</b> Mutation réversible <i>In-vitro</i> Négatif au <i>S.typhimurium</i> TA98, TA100, TA1535, TA1537 avec et sans activation (NICNAS)</p>
Vert malachite 569-64-2		<p>Catégorie 3 concernant la toxicité pour la reproduction de l'Union européenne (ECB, 2003)</p> <p><b>Carcinogénicité</b> Preuves ambiguës de cancer chez les rats femelles (NTP, 2005) Génotoxicité : Mutation de gène <i>in vitro</i> : négatif chez le <i>S.typhimurium</i>, souches TA97, TA98, TA100, TA102, TA104, TA1535, avec et sans activation (NTP, 1994) abérration chromosomique. <i>In vivo</i> : négative chez les souris au micronoyau de la moelle osseuse et sang périphérique (NTP1997)</p>
C.I Basic Violet 4 2390-59-2		<p>Génotoxicité Mutation de gène <i>in vitro</i> Négative chez le <i>S.typhimurium</i>, souches TA98, TA100, TA1535, TA1537, avec et sans activation (NICNAS, 1999):</p> <p>Négative dans les cellules ovariennes V79 de hamsters chinois, avec et sans activation (NICNAS, 1999) :</p> <p>Négative chez le <i>S.typhimurium</i>, souches TA98, TA100, TA1537, TA1538, avec et sans activation; TA1535 sans activation (CCRIS, 1999) Positive dans la souche TA1535 avec activation (CCRIS, 2009)</p> <p>Négative dans les lymphomes de souris L5178Y avec et sans activation (CCRIS, 2009)</p> <p>Aberration chromosomique: Négatif chez les cellules ovariennes V79 du Hamster Chinois avec ou sans l'activation S9 (NICNAS 1999).</p>
Leucobase du vert malachite 129-73-7		<p>Cancérogénicité : Certaines preuves de cancérogénicité chez les rats femelles (NTP, 2005)</p> <p>Génotoxicité: Aberration chromosomique <i>in vivo</i> Positive dans le test du micronoyau sur des souris (NTP, 1996)</p>