

Profil de substance pour le Défi

Diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-tétraméthylbut-2-yne-1,4-ylène

N° CAS 1068-27-5

Introduction

La *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* [LCPE (1999)] exige que le ministre de la Santé et le ministre de l'Environnement aient catégorisé les quelque 23 000 substances figurant sur la Liste intérieure des substances (LIS) avant le 14 septembre 2006. Cette catégorisation consistait à déterminer les substances de la LIS qui sont persistantes (P) et/ou bioaccumulables (B) au sens du *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Gouvernement du Canada, 2000) et qui présentent une toxicité intrinsèque (Ti) pour les humains ou d'autres organismes, ou encore qui présentent, pour les individus au Canada, le plus fort risque d'exposition (PFRE).

Suite à ces étapes, la loi requiert que le ministre de la Santé et le ministre de l'Environnement procèdent à une évaluation préalable des substances qui rencontrent les critères de catégorisation. L'évaluation préalable comporte une évaluation scientifique de la substance fondée sur les données existantes pour une substance afin de déterminer si elles rencontrent les critères spécifiés à l'article 64 de la LCPE (1999). En se fondant sur les résultats de l'évaluation préalable, les ministres peuvent proposer de ne rien faire à l'égard de la substance, proposer que la substance soit ajoutée à la Liste des substances d'intérêt prioritaire (LSIP) en vue d'une évaluation plus détaillée, ou recommander que la substance soit ajoutée à la Liste des substances toxiques de l'Annexe 1 de la LCPE (1999) et, le cas échéant, sa quasi-élimination.

En se fondant sur l'information obtenue par le processus de catégorisation, les ministres ont jugé qu'une priorité élevée pour suivi devait être accordée à un certain nombre de substances, comme les suivantes :

- celles dont on sait qu'elles rencontrent tous les critères de catégorisation écologique, y compris la persistance (P), le potentiel de bioaccumulation (B) et la toxicité intrinsèque pour les organismes aquatiques (Ti), et qui sont commercialisées au Canada, ou
- celles dont on sait qu'elles rencontrent les critères de catégorisation pour le PFRE ou qui présentent un risque intermédiaire d'exposition (RIE) et qui ont été reconnues comme des substances posant un danger élevé pour la santé humaine, en se basant sur les preuves de cancérogénicité, de mutagénicité, d'effets toxiques sur le développement ou la reproduction.

En raison des préoccupations relatives à l'environnement ou à la santé humaine et liées à ces substances, conformément à la disposition du paragraphe 76.1 de la LCPE (1999) selon laquelle les ministres appliquent le principe de la prudence et une approche utilisant le poids de la preuve lorsqu'ils procèdent à une évaluation et en interprètent les résultats,

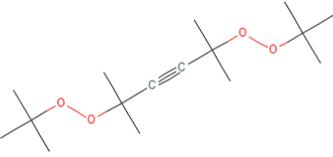
il existe actuellement des données suffisantes permettant de croire que ces substances rencontrent les critères de l'article 64 de la LCPE (1999).

À ce titre, les ministres ont lancé un défi à l'industrie et à d'autres parties intéressées en publiant le 9 décembre 2006 dans la Partie I de la *Gazette du Canada* une demande visant à présenter, dans les délais prescrits dans la section Défi du présent document, des renseignements précis pouvant servir à élaborer et à évaluer comparativement les meilleures pratiques de gestion des risques et de gérance des produits.

Une priorité élevée a été accordée à la prise de mesures relativement au diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-tétraméthylbut-2-yne-1,4-ylène parceque cette substance est persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques et qu'on croyait qu'elle est commercialisée au Canada. Les renseignements techniques concernant la santé humaine et l'environnement qui ont étayé les préoccupations liées à cette substance sont contenus dans les Annexes I et II respectivement.

Identité de la substance

Dans le présent rapport, la substance sera désignée par les lettres DMBP qui sont dérivées du nom anglais de la substance dans l'inventaire, soit 2,5-Dimethyl-2,5-di-*tert*-butylperoxyhexyne.

Numéro de registre CAS (NCI)	1068-27-5
Noms de l'inventaire	<i>Peroxide, (1,1,4,4-tetramethyl-2-butyne-1,4-diyl)bis[(1,1-dimethylethyl); di-tert-butyl 1,1,4,4-tetramethylbut-2-yn-1,4-ylene diperoxide; 2,5-Dimethyl-2,5-di (t-butylperoxyl)-hexyne-3; 2,5-Dimethyl-2,5-di-tert-butylperoxyhexyne</i>
Autres noms	<i>2,5-Bis(tert-butylperoxy)-2,5-dimethyl-3-hexyne; 2,5-Bis(tert-butylperoxy)-2,5-dimethylhexyne; 2,5-Dimethyl-2,5-bis(tert-butylldioxy)-3-hexyne; 2,5-Dimethyl-2,5-bis(tert-butylperoxy)-3-hexyne; Luperco 130XL; Luperox 130; Lupersol 130; Perhexyne 2.5B, 2.5B40, 25B, 25B40</i>
Groupe chimique	<i>Produits chimiques organiques définis</i>
Sous-groupe chimique	<i>Peroxyde de dialkyle</i>
Formule chimique	$C_{16}H_{30}O_4$
Structure chimique	
SMILES	<chem>O(OC(C)(C)C)C(C#CC(OOC(C)(C)C)(C)C)(C)C</chem>
Masse moléculaire	286,42 g/mole

Au Canada, aucune fabrication de DMBP en quantité égale au seuil de déclaration de 100 kg n'a été signalée à la suite d'un avis d'enquête publié conformément à l'article 71 de la LCPE pour l'année civile 2005. Trois entreprises ont signalé qu'en 2005, elles importaient jusqu'à 100 000 kg par année pour des activités commerciales comme la fabrication de produits en plastique, la fabrication de véhicules moteurs, ainsi que la vente en gros et la distribution de produits chimiques et de produits analogues (sauf agricoles). Le DMBP peut être utilisé dans le traitement des polymères comme initiateur de la réticulation des polyoléfinés. Il peut agir comme un initiateur de la polymérisation des plastiques et il est utilisé pour le traitement du caoutchouc servant de joint d'étanchéité des fenêtres et des automobiles, dans la fabrication des durites et des semelles de chaussures. On s'en sert aussi pour le durcissement de certaines résines dans des applications allant des coques de navire et des piscines à des pièces de carrosserie.

LE DÉFI

À la lumière de l'information contenue dans l'Annexe II du présent document, il est probable que l'évaluation préalable de cette substance conclura qu'elle satisfait à la définition de substance toxique telle qu'énoncée à l'article 64 de la LCPE (1999) parce qu'elle « peut pénétrer dans l'environnement en une quantité ou concentration ou dans des conditions de nature à avoir, immédiatement ou à long terme, un effet nocif sur l'environnement ou sur la diversité biologique ». Ensuite, il sera proposé que cette substance soit ajoutée à la Liste des substances toxiques de l'Annexe I de la Loi et qu'elle soit quasi-éliminée.

Les objectifs des activités subséquentes de gestion des risques seront d'éliminer le rejet de toute quantité mesurable d'une substance PBTi dans l'environnement. En l'absence de renseignements précis sur les pratiques existantes de manipulation de cette substance, les mesures proposées devraient être fondées sur des hypothèses réalistes du pire des cas. Pour l'instant, Environnement Canada envisage d'interdire par règlement la fabrication, l'utilisation, la vente, la mise en vente et l'importation de cette substance, exception faite des activités réglementées par la *Loi sur les produits antiparasitaires* et la *Loi sur les aliments et drogues*.

Invitation à présenter des renseignements sur les propriétés relatives à la persistance, au potentiel de bioaccumulation et à la toxicité intrinsèque de la substance

L'exercice de la catégorisation a permis d'obtenir, avant décembre 2005, des données expérimentales sur la toxicité aquatique d'une substance et sa capacité de persister ou d'être bioaccumulable dans l'environnement. Lorsqu'il n'existait pas de données expérimentales acceptables, des données de rapport quantitatif structure-activité (QSAR) ou des données sur les analogues ont été utilisées pour combler les lacunes expérimentales. Puisque cette substance est priorisée en vue des mesures à prendre à cause des résultats de la catégorisation relatifs à la persistance, au potentiel de bioaccumulation et à la toxicité intrinsèque et que des données expérimentales sont préférées, les parties intéressées sont invitées à fournir des données expérimentales utiles sur la persistance, la bioaccumulation et la toxicité intrinsèque pour les organismes aquatiques relativement à cette substance.

Les intéressés devraient fournir des données sur les paramètres pour lesquels il n'existe pas déjà de données expérimentales de qualité, comme l'indique l'information résumée à l'Annexe II du présent document. Comme les données fournies seront évaluées en fonction de leur intégrité et de leur robustesse, il est recommandé que les intéressés suivent les conseils pour les protocoles d'essai et les méthodes de rechange pour les

données d'essai, tel qu'indiqué à la section 8 des « Directives pour la déclaration et les essais de substances nouvelles : substances chimiques et polymères »¹.

Les réponses au Défi pour cette substance doivent parvenir à l'adresse susmentionnée au plus tard le 5 juin 2007.

Avis en vertu de l'article 71

L'information nécessaire afin d'améliorer le processus de décision relativement à l'évaluation et la gestion de risque de cette substance est collectée en vertu de l'article 71 de la LCPE (1999). Cet avis s'applique à toute personne ayant réalisé une déclaration conformément à l'Avis concernant certaines substances considérées comme priorités pour suivi en vertu de l'article 71 de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement*, publié dans la Gazette du Canada, partie I, le 4 mars 2006.

L'information de 2006 visée par ce nouvel avis touche, entre autres, à la quantité de la substance importée, fabriquée ou utilisée, au type d'utilisations de la substance et aux rejets de la substance dans l'environnement.

Il est possible d'obtenir une copie de l'avis et des directives sur la façon de se conformer à cet avis sur le Portail des substances chimiques du gouvernement du Canada (www.chemicalsubstanceschimiques.gc.ca), ou en communiquant avec la personne-ressource mentionnée ci-dessous.

Les réponses à l'avis en vertu de l'article 71 pour cette substance doivent parvenir à l'adresse susmentionnée au plus tard le 5 juin 2007.

Invitation à présenter de l'information sur les utilisations actuelles et les mesures antipollution existantes afin d'étayer la méthode de gestion des risques pour cette substance

Les ministres de la Santé et de l'Environnement invitent les répondants à présenter de l'information additionnelle jugée utile, notamment concernant la portée et la nature de la gestion et de la gérance des substances énumérées dans le Défi.

Les organisations qui pourraient être intéressées à soumettre de l'information additionnelle en réponse à cette invitation sont celles qui fabriquent, importent, exportent ou utilisent cette substance seule, dans un mélange ou dans un produit, y compris les articles manufacturés.

¹ « Directives pour la déclaration et les essais de substances nouvelles : substances chimiques et polymères (version de 2005) », Gouvernement du Canada, disponibles à l'adresse http://www.ec.gc.ca/substances/nsb/fra/cp_guidance_f.shtml.

L'information additionnelle est demandée dans les domaines suivants :

- l'importation, la fabrication et les quantités utilisées;
- les particularités de l'utilisation de la substance et du produit;
- les rejets dans l'environnement et la gestion des déversements;
- les mesures actuelles et potentielles de gestion des risques et de gérance des produits;
- les programmes législatifs ou réglementaires existants de contrôle et de gestion de la substance;
- l'information à l'appui d'une étude d'impact de la réglementation.

Il existe un questionnaire fournissant un modèle détaillé de la présentation de cette information. Des directives sur la façon de remplir ce questionnaire sont aussi disponibles. Les répondants sont invités à fournir l'information additionnelle qu'ils possèdent en sachant que certaines des questions peuvent ne pas être pertinentes pour une substance, une utilisation ou un secteur industriel en particulier.

Il est possible d'obtenir une copie du questionnaire et des directives à l'adresse du portail des substances chimiques du gouvernement du Canada (www.chemicalsubstanceschimiques.gc.ca) ou en communiquant avec la personne-ressource mentionnée ci-dessous.

Les réponses au Défi pour cette substance doivent parvenir à l'adresse susmentionnée au plus tard le 5 juin 2007.

Demande de document et soumission de l'information

Les documents ainsi que les instructions peuvent être obtenues via ces coordonnées. L'information donnant suite aux invitations susmentionnées doit être transmise à :

Coordonnateur des enquêtes sur la LIS
Place Vincent-Massey, 20^e étage
351, boul. Saint-Joseph
Gatineau (Québec) K1A 0H3
Tél. : 1-888-228-0530/819-956-9313
Télec. : 1-888-228-0530/819-953-4936
Courriel : DSL.surveyco@ec.gc.ca

Annexe I
Information concernant la santé humaine
à l'appui du Défi ayant trait au
diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-tétraméthylbut-2-yne-1,4-ylène
(DMBP)
N° CAS 1068-27-5

Introduction

Conformément à la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* [LCPE (1999)], Santé Canada a entrepris la catégorisation de toutes les substances figurant sur la Liste intérieure des substances (LIS) afin d'identifier celles qui représentent le plus fort risque d'exposition (PFRE) et les composés faisant partie d'un sous-ensemble de substances jugées persistantes (P) ou bioaccumulables (B) et qui sont aussi considérées « intrinsèquement toxiques » pour les humains.

Afin d'identifier efficacement les substances dont l'évaluation préalable est le plus fortement prioritaire, Santé Canada a mis au point et mis en application un outil simple de détermination du risque d'exposition (SimET) pour la LIS afin de déterminer les substances qui rencontrent les critères relatifs au PFRE, au risque d'exposition intermédiaire (REI) ou au faible risque d'exposition (FRE), ainsi qu'un outil simple de détermination du risque pour la santé (SimHaz) afin de déterminer les substances qui posent un danger élevé ou faible.

On croit que le DMBP rencontre les critères relatifs au FRE en vertu du SimET, mais qu'il ne rencontre pas les critères relatifs au risque élevé en vertu du SimHaz. Le présent document résume l'information actuellement disponible sur laquelle les résultats du SimET et du SimHaz sont fondés.

Information sur l'exposition reliée à la santé humaine pour la catégorisation des substances de la LIS

Tel qu'indiqué plus haut, le SimET a été mis au point et utilisé pour déterminer les substances de la LIS dont on juge qu'elles représentent le PFRE. Cet outil est fondé sur trois éléments de preuve : 1) la quantité commercialisée au Canada, 2) le nombre d'entreprises engagées dans des activités commerciales au Canada (c'est-à-dire le nombre de déclarants), et 3) l'examen par des experts du potentiel d'exposition humaine fondé sur divers codes d'utilisation. L'outil proposé a été publié à des fins de commentaires par le public en novembre 2003 et a aussi permis la désignation de substances présentant un RIE ou un FRE, fondés sur des critères pour la quantité et la nature de l'utilisation (Santé Canada, 2003).

Résultats de l'application du SimET

On a jugé que le DMBP présentait un FRE en tenant compte de l'information présentée ci-dessous concernant l'inscription sur la LIS.

Information contenant l'inscription sur la LIS en 1986

Quantité en commerce

La quantité déclarée comme étant manufacturée, importée ou en commerce au Canada pendant l'année civile 1986 était de 1 000 kg.

Nombre de déclarants

Le nombre de déclarants pour les années civiles 1984-1986 était inférieur à 4.

Codes d'utilisation et description

Les codes d'utilisation suivants de la LIS ont été relevés pour la substance :

37 Polymère – agent de réticulation

Information sur les dangers provenant de la catégorisation des substances de la LIS

Outil simple de détermination du risque pour la santé (SimHaz)

SimHaz est un outil qui a servi à identifier, parmi toutes les quelque 23 000 substances inscrites sur la LIS, celles dont on jugeait qu'elles présentaient un danger élevé ou faible pour la santé humaine en se fondant sur des critères formalisés du poids de la preuve, un examen par les pairs ou le consensus d'experts. Cet outil a été mis au point à la suite d'un long dépouillement des classifications des risques de Santé Canada et d'autres organismes et de la prise en compte de leur robustesse en fonction de l'existence de documents transparents pour le processus et les critères (Santé Canada, 2005).

Résultats de l'application du SimHaz

Le DMBP n'a pas été classé comme une substance présentant un danger par les organismes énumérés dans le SimHaz et ne rencontre donc pas les critères de danger élevé spécifiés dans cet outil.

Incertitudes

Le SimET et le SimHaz sont des outils robustes permettant d'identifier efficacement les substances de la LIS dont on juge qu'elles doivent faire l'objet d'un examen plus poussé pour des raisons prioritaires reliées à la santé humaine. Il est reconnu qu'ils ne comprennent pas un certain nombre d'éléments normalement pris en compte dans une évaluation des risques pour la santé humaine, comme une caractérisation détaillée de l'exposition et du risque, une comparaison des niveaux d'exposition avec les niveaux de danger, et une analyse détaillée des incertitudes.

Références

Santé Canada. 2003. Projet pour l'établissement des priorités concernant les substances existantes de la liste intérieure des substances dans le cadre de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement, 1999* : Plus fort risque d'exposition humaine. http://hc-sc.gc.ca/ewh-semt/pubs/contaminants/existsub/exposure/index_f.html

Santé Canada 2005. Cadre intégré proposé pour les éléments liés à la santé de la catégorisation des substances inscrites sur la liste intérieure des substances visées par la LCPE 1999. http://www.hc-sc.gc.ca/ewh-semt/alt_formats/hecs-sesc/pdf/contaminants/existsub/framework-int-cadre_f.pdf

Annexe II
Renseignements de nature écologique
à l'appui du Défi concernant le
diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-tétraméthylbut-2-yne-1,4-ylène
(DMBP)
N° CAS 1068-27-5

Introduction

Les renseignements contenus dans le présent document serviront à effectuer une évaluation préalable conformément à l'article 74 de la LCPE (1999). Les données pertinentes à l'évaluation écologique préalable ont été identifiées dans des publications originales, des rapports de synthèse ainsi que dans des bases de données commerciales et gouvernementales avant décembre 2005. Les propriétés et les caractéristiques peuvent aussi avoir été calculées à l'aide de modèles de relations quantitatives structure-activité (QSAR). En outre, une enquête auprès de l'industrie a été menée pour l'année 2005 au moyen d'un avis publié dans la *Gazette du Canada* conformément à l'article 71 de la LCPE (1999) (Environnement Canada, 2006a). Cette enquête a permis de recueillir des données sur la fabrication, l'importation, les utilisations et les rejets de la substance au Canada.

Propriétés physiques et chimiques

Le tableau 1 présente les données modélisées qui se rapportent au devenir dans l'environnement du DMBP.

Tableau 1. Propriétés physiques et chimiques

Propriété	Type	Valeur	Température (°C)	Source
Point d'ébullition (PE)	Modélisé	290,88 °C		MPBPWIN v1.41
Point de fusion (PF)	Modélisé	92,54 °C		MPBPWIN v1.41
Logarithme du coefficient de partage octanol-eau (log K _{ow})	Modélisé	5,84	25	Kowwin v.1.67
Logarithme du coefficient de partage au carbone organique (log K _{oc})	Modélisé	5,208	-	<u>PCKOCWIN v.1.66</u>
Pression de vapeur (PV)	Modélisé	0,168 Pa		MPBPWIN v1.41
Pression de vapeur (PV)	Modélisé	0,00126 mm Hg		MPBPWIN v1.41
Constante de la loi d'Henry (CLH)	Modélisé	0,0001607 atm-m ³ /mole	25	HenryWin v3.10
Solubilité dans l'eau (SE)	Modélisé	0,1518 mg/L	25	<u>WSKOWWIN v1.41</u>

Fabrication, importation et utilisations

Fabrication et importation

Cheminfo a obtenu un contrat en 2002 dont l'objet était de déterminer l'utilisation faite des initiateurs dans la fabrication et le traitement des résines de polymère au Canada, incluant le DMBP. Ce contrat a permis de déterminer que des initiateurs du type peroxydes organiques n'avaient pas été fabriqués au Canada en 2000 et que, la même année, environ 300 000 kg de peroxydes de dialkyle avaient servi à la fabrication de résines de polymère au Canada.

En vertu de l'avis aux termes de l'article 71 de la LCPE 1999, concernant certaines substances considérées comme prioritaires en vue d'en faire le suivi, les entreprises canadiennes qui ont fabriqué ou importé (en 2005) plus de 100 kg d'une substance mentionnée dans l'avis étaient tenues de présenter à Environnement Canada des données spécifiques sur la substance. Les renseignements collectés en vertu de l'avis indiquent que, en 2005, le DMBP n'a pas été fabriqué au Canada en quantité égale ou supérieure au seuil de déclaration de 100 kg.

Au total, trois entreprises ont signalé qu'elles importaient de cette substance, l'une d'elles ayant déclaré en avoir importé entre 100 et 1 000 kg par année, les deux autres ayant déclaré en avoir importé entre 1 100 et 100 000 kg par année. Les entreprises importatrices ont déclaré exercer comme activité commerciale la fabrication de produits

en plastique, la fabrication de véhicules automobiles et la vente en gros et la distribution de produits chimiques et de produits analogues (sauf agricoles). En outre, une entreprise canadienne et une entreprise américaine ont déclaré détenir des intérêts dans la substance en question.

Ailleurs, l'Environmental Protection Agency des É-U. a colligé des déclarations en vertu du règlement sur la mise à jour de l'Inventaire (Inventory Update Rule), selon lequel entre 4.5 et 225 tonnes de DMBP avaient été utilisées entre 1986 et 1998. C'est une substance chimique produite en petites quantités dans l'Union Européenne (UE), ce qui signifie que sa production sur ce territoire serait de l'ordre de 10 tonnes par année. Cependant, la base de données des pays nordiques sur les substances dans des préparations révèle qu'en Suède, l'utilisation totale du DMBP s'est chiffrée à 158 tonnes en 2002. Cette substance a été utilisée au Danemark et en Suède entre 1999 et 2004 (base de données SPIN).

Utilisations

Le DMBP est un peroxyde de dialkyle qui peut être utilisé dans le traitement des polymères comme initiateur de la réticulation des polyoléfines. Il peut agir comme initiateur de la polymérisation des plastiques et il est utilisé pour le traitement du caoutchouc servant de joint d'étanchéité des fenêtres et des automobiles, dans la fabrication des durites et des semelles de chaussures. On peut aussi s'en servir pour le durcissement de certaines résines dans des applications allant des coques de navire et des piscines à des pièces de carrosserie (Arkema).

Rejets, devenir et présence dans l'environnement

Rejets

Le DMBP n'est pas produit naturellement dans l'environnement. Des rejets de sources anthropiques n'ont pas été signalés. Cependant, étant donnée la nature potentiellement explosive des peroxydes quand ils sèchent, on anticipe que les surplus et les résidus des contenants sont communément rincés et rejetés vers les égouts.

Devenir

Les valeurs élevées de $\log K_{oc}$ et de $\log K_{co}$ montrent que cette substance se distribuera probablement dans le sol et les sédiments. En fait, les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III indiquent que si cette substance était rejetée en proportions égales dans les trois principaux milieux naturels (l'air, l'eau et le sol), elle se partagerait principalement entre le sol et les sédiments (tableau 2), où il apparaît qu'elle persisterait (voir le tableau 3).

Tableau 2. Résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (EPIWIN V3.04)

Milieu où la substance est rejetée :	Fraction de la substance passant dans chaque milieu (%)			
	dans l'air	dans l'eau	dans le sol	dans les sédiments
Air (100 %)	23,3	2,53	10,7	63,5
Eau (100 %)	0,0297	3,83	0,0137	96,1
Sol (100 %)	0,000156	0,00491	99,9	0,123
Air, eau et sol (33,3 % dans chacun)	0,0649	1,65	56,9	41,4

La pression de vapeur de 0,168 Pa et la constante de la Loi de Henry de $1,6 \times 10^{-4}$ atm·m³/mole indiquent que le DMPB est semi-volatil. Puisque le K_{co} élevé lui confère une grande affinité pour les particules, s'il est rejeté uniquement dans l'air, environ 20 % y demeurera alors que la majeure partie se fixera par sorption sur les particules et se distribuera dans le sol et les sédiments (environ 70 %).

S'il était rejeté dans l'eau, le DMBP serait probablement fortement adsorbé sur des matières en suspension et des sédiments, comme l'indiquent les valeurs très élevées du K_{co} . D'après la valeur calculée de la constante de la Loi de Henry, sa volatilisation à partir de la surface de plans d'eau ne devrait pas trop agir sur le devenir de cette substance. D'après le modèle de fugacité de niveau III, lorsqu'elle est rejetée dans l'eau, la substance se répartira principalement dans les sédiments.

D'après une estimation du log K_{co} d'environ 5, le DMBP devrait être très fortement adsorbé dans le sol (c.-à-d. qu'il devrait être immobilisé) et y persister (tableau 3). La pression de vapeur et la constante de la Loi de Henry nous apprennent que sa volatilisation à partir de la surface de sols secs ou humides n'agit pas beaucoup sur le devenir de cette substance. S'il était rejeté dans le sol, le DMBP demeurerait dans ce milieu naturel, comme le montrent les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (tableau 2).

Présence dans l'environnement

Des données de surveillance sur la présence de cette substance dans les milieux naturels (l'air, l'eau, le sol et les sédiments) n'ont pas encore été identifiées.

Évaluation de la Persistance, du potentiel de bioaccumulation et de la toxicité intrinsèque

Persistance dans l'environnement

La modélisation indique qu'une fois rejeté dans l'environnement, le DMBP semble y être relativement persistant, principalement dans l'eau, le sol et les sédiments, comme démontré au tableau 3a. Il n'existe pas de données expérimentales sur sa persistance dans

l'air, mais il devrait s'oxyder lentement en réagissant avec les radicaux d'ozone, et s'oxyder rapidement en réagissant avec les radicaux hydroxyles (EPIWIN v3.11). Il ne devrait pas réagir avec le NO₃. En plus de la perte rapide prévue par réaction avec les radicaux hydroxyles, pratiquement tous les peroxydes organiques sont sensibles à la chaleur et à la photolyse, à cause de la faiblesse du lien entre les atomes d'oxygène. Le peroxyde de di-*tert*-butyle est structurellement similaire au DMBP à hauteur du lien peroxyde et il absorbe la lumière ultraviolette jusqu'à 340 nm. Il a été montré qu'il produisait par photolyse des radicaux tert-butoxy à de faibles températures (HSDB, 2006). Il est prévu que la photolyse sera le plus important processus de décomposition du DMBP dans l'atmosphère, donc que cette substance sera rapidement éliminée dans l'air.

Tableau 3a. Données modélisées sur la persistance du DMBP

Milieu	Processus du devenir	Paramètre	Valeur	Référence
Air	Oxydation atm.	Demi-vie (jours)	0,373	AOPWIN v1.91
Air	Réaction avec l'ozone	Demi-vie (jours)	382	<u>AOPWIN v1.91</u>
Eau / sol	Biodégradation	Demi-vie (jours)	182	BIOWIN v4.02 (<u>USM</u>)
Eau / sol	Biodégradation	Probabilité	0,0188	BIOWIN v4.02 MITI Non-linear
Eau / sol	Biodégradation	Probabilité	1	TOPKAT

Pour calculer la dégradation dans l'eau, le sol et les sédiments, une approche QSAR fondée sur le poids de la preuve (DSE, 2006a) a été appliquée au moyen des modèles indiqués dans le tableau 3a. À la lumière des résultats présentés dans le tableau, les temps calculés pour la biodégradation indiquent que le DMBP peut être jugé persistant dans l'eau et le sol.

Des résultats similaires sur la persistance avaient été prévus dans le cas du diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-tétraméthyltétraméthylène (CAS 78-63-7) dont la structure est semblable à celle du DMBP. En plus de la prédiction de QSAR, il a été observé dans un essai de biodégradation de 28 jours du MITI que ce diperoxyde était persistant (base de données NITE). Le poids de la preuve indique donc que la demi-vie du DMBP dans l'eau et dans le sol est supérieure à 182 jours.

Pour extrapoler une demi-vie dans les sédiments, une méthode a été mise au point en utilisant les facteurs d'extrapolation de Boethling (BIOWIN v4.02) qui consiste à extrapoler la demi-vie dans les sédiments à partir de celle calculée pour l'eau ($f_{1/2 \text{ eau}} : f_{1/2 \text{ sédiments}} = 1:4$). Dans les sédiments, la demi-vie du DMBP serait donc supérieure à 728 jours.

D'après les prédictions des modèles présentées dans le tableau 3b, le potentiel de transport à grande distance (PTGD) du DMBP à partir de son point de rejet dans l'air est faible. Le modèle TaPL3 a servi à prédire la distance de parcours caractéristique (DPC), définie comme la distance maximale parcourue par 63 % de la substance, ou en d'autres termes, la distance que 37 % de la substance peut parcourir de plus. Beyer *et al.* (2000) ont proposé les DPC > 2 000 km pour représenter un PTGD élevé, les DPC de 700

à 2 000 km pour le potentiel modéré, et les DPC < 700 km pour le faible potentiel. Les résultats présentés dans le tableau 3b indiquent que le DMBP devrait rester proche de ses sources d'émission.

Tableau 3b. Distance de parcours caractéristique (DPC) du DMBP prédite par les modèles

Distance de parcours caractéristique	Modèle (référence)
94 km	TaPL3 (CEMC, 2003)

Les données modélisées (tableau 3a) montrent que le DMBP rencontre les critères de la persistance (demi-vie dans le sol et l'eau \geq à 182 jours et dans les sédiments \geq 365 jours) spécifiés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Gouvernement du Canada, 2000).

Potentiel de bioaccumulation

La valeur modélisée du log K_{oc} pour le DMBP indique que, dans l'environnement, cette substance pourrait être bioaccumulable (tableau 4). Les valeurs du FBC et du FBA obtenues expérimentalement et par modélisation indiquent aussi que la substance présentant une structure similaire (diperoxyde de di-tert-butyle et de 1,1,4,4-tétraméthyltétraméthylène - CAS 78-63-7) est bioaccumulable (base de données NITE).

Le modèle modifié GOBAS BAF pour le niveau trophique moyen a produit un FBA de 316 228 L/kg, ce qui veut dire que cette substance peut occasionner une bioconcentration et une bioamplification dans l'environnement. Trois modèles FBC fournissent aussi une preuve à l'appui du potentiel de bioconcentration de la substance.

Tableau 4. Bioaccumulation prévue

Organisme pour essai	Paramètre	Valeur en poids humide (L/kg)	Référence
Poisson	FBA	316 228	<i>Gobas BAF T2MTL (Arnot et Gobas, 2003)</i>
Poisson	FBC	25 119	<i>Gobas BCF T2LTL (Arnot et Gobas, 2003)</i>
Poisson	FBC	50 119	<i>OASIS</i>
Poisson	FBC	6 310	<i>BCFWIN v2.15</i>

Les valeurs modélisées de la bioaccumulation ne tiennent pas compte du potentiel de métabolisation de la substance. Cependant, les valeurs expérimentales du FBC, de l'ordre de 723 à 5 330 L/kg, obtenues avec le diperoxyde de di-tert-butyle et de 1,1,4,4-tétraméthyltétraméthylène indiquent que la bioaccumulation pourrait être légèrement freinée sous l'effet du métabolisme, mais pas toujours jusqu'à un point situé sous la valeur du critère de bioaccumulation.

Le poids de la preuve indique que le DMBP rencontre le critère de bioaccumulation (FBC, FBA \geq 5 000) spécifié dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Gouvernement du Canada, 2000).

Effets écologiques

A – Dans le milieu aquatique

Il existe une preuve empirique et modélisée selon laquelle cette substance est nocive pour les organismes aquatiques à des concentrations relativement faibles (p. ex., CL50 aiguë < 1 mg/L) [tableaux 5a et 5b]. Un éventail de prédictions concernant la toxicité aquatique a été obtenu au moyen des divers modèles QSAR utilisés. Le tableau 5a énumère les prédictions qui ont été jugées fiables et elles ont été utilisées dans l'approche QSAR fondée sur le poids de la preuve pour la toxicité aquatique (ESD, 2006a).

Tableau 5a Données de modélisation de la toxicité aquatique

Organisme pour essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L) (plage, le cas échéant)	Référence
Poisson	Tox. aiguë	CL50	0,3863	OASIS
Poisson	Tox. aiguë	CL50	2,88	PNN (AI expert)
Poisson	Tox. aiguë	CL50	0,174	ECOSAR
Poisson	Tox. aiguë	CL50	0,00174	ECOSAR Neutral Organic SAR

Table 5b Données empiriques de la toxicité aquatique

Organisme pour essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L) (concentration initiale)	Valeur (mg/L) (concentration finale)	Référence
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> (algue verte)	Tox. aiguë	CE50 (72 h)	6,17	Sous la limite de détection (0,081 mg/L)	Environnement Canada, 2006b
<i>Daphnia magna</i> (daphnie)	Tox. aiguë	CE50 (48 h)	> 5,31	0,375	Environnement Canada, 2006b

Deux études portant sur la toxicité aquatique ont montré que l'instabilité du DMBP dans l'eau donnait lieu à une importante perte de la substance au cours de la durée des essais. L'étude sur les effets de la substance sur l'algue verte dulcicole *Pseudokirchneriella subcapitata* a révélé une CE50 de 6,17 mg/L et une CSEO de 1,88 mg/L. Ces valeurs sont établies en fonction de la concentration mesurée au commencement des essais. Au bout de 72 h, les chercheurs ont observé que cette concentration était passée sous la limite de détection (0,081 mg/L). Dans le cadre d'un essai de toxicité de 48 h sur *Daphnia*, il a été impossible d'établir une CE50 d'immobilisation des sujets, faute d'avoir observé cet effet à aucune des concentrations appliquées. Cependant, d'autres effets, plus spécifiquement, le flottement des sujets d'expérience à la surface ont été observés à toutes les concentrations. La concentration la plus élevée était de 5,31 mg/L au commencement des essais; elle correspondait à une concentration mesurée au bout de 48 h de 0,375 mg/L (Environnement Canada, 2006b). Ces études montrent que le DMBP, et peut-être ses produits de décomposition, exerce une toxicité sublétales à de très faibles

concentrations dans le milieu aquatique. Ces résultats indiquent que cette substance est très dangereuse pour les organismes aquatiques (CL/CE aiguë < 1,0 mg/L).

B – Dans d’autres milieux

Il n’existe pas de données disponibles sur les effets dans d’autres milieux.

Possibilité de causer des effets écologiques néfastes

La preuve qu’une substance est fortement persistante et bioaccumulable au sens du *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* pris en vertu de la LCPE (1999) (Gouvernement du Canada, 2000), jointe à la preuve d’une activité commerciale, est une bonne indication de sa possibilité de pénétrer dans l’environnement dans des conditions pouvant avoir des effets écologiques nuisibles à long terme (DSE, 2006b). Une fois rejetées, les substances persistantes séjournent longtemps dans l’environnement, ce qui accroît l’ampleur et la durée potentielle de l’exposition. Les substances dont la demi-vie dans les milieux mobiles (l’air et l’eau) est longue et qui se répartissent dans ces milieux en proportions importantes peuvent causer une contamination généralisée. Les rejets de faibles quantités de substances bioaccumulables peuvent donner lieu à des concentrations internes élevées dans les organismes exposés. Les substances fortement bioaccumulables et persistantes sont particulièrement préoccupantes parce qu’elles peuvent produire une bioamplification dans la chaîne alimentaire, ce qui donne lieu à des expositions internes très élevées, notamment dans le cas des prédateurs du haut de la chaîne. La preuve qu’une substance est à la fois très persistante et bioaccumulable, lorsqu’elle est jointe à d’autres informations (comme la preuve de toxicité à des concentrations relativement faibles et la preuve des utilisations et des rejets), peut donc être suffisante pour indiquer que la substance est susceptible de causer des effets écologiques néfastes.

Les volumes assez élevés d’importation des peroxydes de dialkyle au Canada indiquent que le DMBP est susceptible de pénétrer l’environnement canadien. Une fois rejeté dans l’environnement, le DMBP ira se loger dans les sédiments ou les sols, parce qu’il est hydrophobe, où il séjournera longtemps à cause de sa stabilité. Comme il persiste dans l’environnement et qu’il est lipophile, il est probablement bioaccumulable et peut être bioamplifié dans les chaînes alimentaires trophiques. Il a aussi fait preuve d’une toxicité relativement élevée pour les organismes aquatiques. Cette information porte à croire que le DMBP peut causer des effets écologiques néfastes au Canada.

Incertitudes

On manque de données et de renseignements sur les concentrations de DMBP dans l’environnement canadien. Et pourtant, le volume assez élevé de peroxydes de dialkyle importé au Canada en 2000 et la quantité importée et déclarée pour 2005 révèlent un potentiel de rejets dans l’environnement canadien.

On juge que la preuve d'un fort potentiel de persistance et de bioaccumulation est solide, puisque tant les données empiriques que les estimations des modèles indiquent que le DMBP rencontre les critères stipulés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* de la LCPE (1999) (Gouvernement du Canada, 2000). De façon similaire, les résultats de la modélisation QSAR et les essais de toxicité sur des organismes pélagiques prouvent de manière convaincante que le DMBP peut nuire aux organismes en faibles concentrations d'exposition. Il faut toutefois être conscient du nombre limité d'études empiriques portant sur la persistance, la bioaccumulation et la toxicité du DMBP.

Les données sur les effets ne portent pas sur la toxicité dans les sols et les sédiments, qui sont les milieux les plus préoccupants au regard des estimations sur le partage entre les différents milieux. En fait, les seules données qui ont été relevées sur les effets s'appliquent surtout aux expositions des organismes pélagiques, même si la colonne d'eau n'est peut-être pas le milieu le plus préoccupant.

Dans certaines situations, les concentrations expérimentales ou prédites, associées à la toxicité inhérente pour les organismes aquatiques, peuvent être une source additionnelle d'incertitudes, i.e. lorsque ces concentrations excèdent la solubilité de la substance chimique dans l'eau (autant pour les données expérimentales que prédites). Étant donné que les concentrations pour la toxicité ainsi que pour la solubilité dans l'eau varient considérablement (jusqu'à plusieurs ordres de magnitude), il est généralement admis que ces incertitudes existent.

Il existe aussi une incertitude liée au fait de baser la conclusion générale, selon laquelle le DMBP peut causer des effets écologiques néfastes, seulement sur l'information concernant sa persistance, sa bioaccumulation, sa toxicité relative et son profil d'emploi. Les estimations typiquement quantitatives des risques (c.-à-d. les quotients de risque ou les analyses probabilistes) sont d'importants éléments de preuve lorsqu'il s'agit d'évaluer la possibilité qu'une substance puisse causer des effets environnementaux nocifs. Toutefois, lorsque les risques concernant les substances persistantes et bioaccumulables comme le DMBP sont calculés à l'aide de méthodes quantitatives de ce genre, ils sont très incertains et probablement sous-estimés (DSE, 2006b). Comme les risques à long terme associés aux substances persistantes et bioaccumulables ne peuvent pas pour l'instant être prédits de façon fiable, les estimations quantitatives des risques ont une pertinence limitée. En outre, étant donné que les accumulations de ces substances peuvent être généralisées et qu'elles sont difficiles à inverser, une attitude prudente face à l'incertitude (qui évite la sous-estimation des risques) est justifiée.

Références

AI Expert (Artificial Intelligence Expert System). 2005. v 1.25. Developer: Dr. Stefan P. Niculescu. Copyright © 2003-2005. Environment Canada.

AOPWIN. 2000. Version 1.91. U.S. Environmental Protection Agency.

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

- Arkema. Products in Everyday Life. (consulté le 14 décembre 2006)
http://www.terrainsdentente.arkemagroup.com/telechargement/Arkema_products_va_final.pdf
- Arnot, J.A. et 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.
- BCFWIN 2000. Version 2.15. U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>
- Beyer, A., Mackay, D., Matthies, M., Wania, F. et Webster, E. 2000. Assessing Long-Range Transport Potential of Persistent Organic Pollutants. *Environ. Sci. Technol.* 34 (4): 699-703.
- BIOWIN 2000. Version 4.02. U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>
- CEMC (Canadian Environmental Modelling Centre). 2002. Level III v. 2.70 model. Version de septembre 2003. Trent University, Peterborough, Ontario. <http://www.trentu.ca/cemc/models/EQC2.html> (téléchargé en mars 2004).
- CEMC (Canadian Environmental Modelling Centre). 2003. TaPL3 v. 3.00 model. Publié en septembre 2003. Trent University, Peterborough, Ontario. www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel
- Cheminfo Services Inc. 2002. Use of Initiators in the Canadian Polymer Resin Manufacturing and Polymer Resin Processing Sectors.
- DSE (Division des substances existantes) 2006a. Guidance Module on "Quantitative Structure-Activity Relationships (QSARs)". Guidance for Conducting Ecological Risk Assessments Under CEPA 1999: Science Resource Technical Series, Environnement Canada, Document interne disponible sur demande.
- DSE (Division des substances existantes) 2006b. Issue paper on "Approach to Ecological Screening Assessments for Existing Substances that are both Persistence and Bioaccumulative". Environnement Canada. Le document figure sur le CD intitulé « CEPA DSL Categorization: Overview and Results », qui est périodiquement publié par la Division des substances existantes, et il est aussi disponible sur demande.
- DSN (Direction des substances nouvelles). 2005. Draft Risk Assessment of New and Transitional Peroxy Substances. Environnement Canada.
- ECOSAR 2004. Version 0.99h. U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>
- Environnement Canada. 2001. Données colligées en vertu du paragraphe 71(1) de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* et conformément à l'avis intitulé « Avis concernant certaines substances inscrites sur la Liste intérieure des substances (LIS) » publié dans la *Gazette du Canada*, vol. 135, n° 46.
- Environnement Canada. 2003. Document d'orientation sur la catégorisation des substances organiques et inorganiques inscrites sur la Liste intérieure des substances du Canada. Direction des substances existantes, Environnement Canada, Gatineau, Canada, 124 p.
- Environnement Canada. 2004. Données colligées en vertu du paragraphe 71(1) de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999)* et conformément à l'avis intitulé « Avis concernant certaines substances inscrites sur la Liste intérieure des substances (LIS) » publié dans la *Gazette du Canada*, vol. 135, n° 46.

Environnement Canada. 2005. Draft Risk Assessment of New and Transitional Peroxy Substances. Direction des substances nouvelles, Environnement Canada, Gatineau, Canada, 26 p.

Environment Canada. 2006a. Data collected pursuant to subsection 71(1) of the Canadian Environmental Protection Act, 1999 and in accordance with the published notice "Notice with respect to Selected Substances identified as Priority for Action", Canada Gazette, Part 1, Vol. 140, No. 9

Environment Canada, 2006b. Information received under the New Substance Notification Regulations.

EPIWIN 2000. Version 3.12 U.S. Environmental Protection Agency.

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

Final Research Report. Effects of the Water Accommodated Fraction of 2,5-dimethyl-2,5-di(t-butylperoxy)hexyne-3 85% in white mineral oil on the growth of the freshwater green alga *Pseudokirchneriella subcapitata*. 23 juin 2004. (étude CBI)

Final Research Report. Acute Toxicity of the Water Accommodated Fraction of 2,5-dimethyl-2,5-di(tert-butylperoxy)-hexyne-3 in solvent to *Daphnia magna*. 4 décembre 2001. (étude CBI)

Gouvernement du Canada. 2000. *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (DORS/2000-107). *Gazette du Canada*, v. 134. Disponible à

<http://www.ec.gc.ca/CEPARRegistry/regulations/detailReg.cfm?intReg=35> (consulté en août 2006).

HSDB. 2006. Hazardous Substances Data Bank. <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/r?dbs+hsdb:@term+@rn+@rel+110-05-4>

HENRYWIN 2000. Version 1.90. U.S. Environmental Protection Agency.

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

KOWWIN 2000. Version 1.67. U.S. Environmental Protection Agency.

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

LCPE (1999). Loi canadienne sur la protection de l'environnement, 1999. 1999, c.33. C-15.31.[Sanctionnée le 14 septembre, 1999]. <http://laws.justice.gc.ca/fr/C-15.31/text.html>

MPBPWIN 2000. Version 1.41. U.S. Environmental Protection Agency.

Information disponible à <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

NITE (National Institute of Technology and Evaluation), Japon. 2002. Biodegradation and Bioconcentration of the Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law. http://www.safe.nite.go.jp/data/hazkizon/pk_e_kizon_data_result.home_data (consulté le 30 octobre 2006)

Oasis Forecast 2005. Version 1.20. Laboratory of Mathematical Chemistry. Bourgas, Bulgarie. Information disponible à

www.oasis-lmc.org

OCDE (Organisation de coopération et de développement économiques). 2003. Manual for Investigation of HPV Chemicals. Secrétariat de l'OCDE, Paris, France, avril. Disponible à

http://www.oecd.org/document/7/0,2340,en_2649_34379_1947463_1_1_1_1,00.html (consulté le 27 février 2004).

PCKOCWIN 2000. Version 1.66. U.S. Environmental Protection Agency.

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

Schering, M., M. MacLeod et F. Wegmann (2006), "The OECD POV and LRTP Screening Tool, Version 2.0," A manual for the OECD POV and LRTP Screening Tool 2.0 distributed at the OECD/UNEP Workshops on Application of Multimedia Models for Identification of Persistent Organic Pollutants.

SPIN on the Internet (Substances in Preparations in Nordic Countries). Disponible à <http://www.spin2000.net/spin.html> (consulté en août 2006).

Syracuse Research Corporation. 2003. Interactive PhysProp Database.
<http://www.syrres.com/esc/physdemo.htm>

Topkat 2004. Version 6.2. Accelrys, Inc.
<http://www.accelrys.com/products/topkat/index.html>

WSKOWWIN. 2000. Version 1.41. U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>