

Profil de substance pour le Défi Pyrocatechol (Catéchol) N° CAS 120-80-9

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 cette étape, 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 (Ti) pour les organismes aquatiques (PBTi), et qu'elles sont commercialisées au Canada;
- celles dont on sait qu'elles satisfont aux critères de catégorisation pour le PFRE ou qui présentent un risque d'exposition intermédiaire (REI) et qui ont été identifiées comme des substances posant un danger élevé pour la santé humaine, et ce, en se basant sur les preuves de cancérogénicité, de mutagénicité, d'effets toxiques sur le développement ou la reproduction.

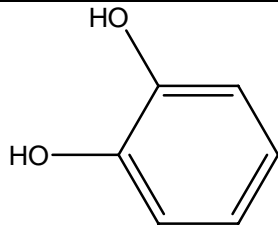
En raison des préoccupations relatives à l'environnement ou à la santé humaine, et liées à ces substances, conformément à la disposition du paragraphe 76.1 de la LCPE (1999) selon laquelle les ministres appliquent le principe de prudence et une approche utilisant le poids de la preuve lorsqu'ils procèdent 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, ci-dessous, 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 catéchol parce qu'on a constaté que cette substance présentait un fort risque d'exposition pour la population au Canada (FRE ou REI) et qu'elle constituait un grave danger pour la santé humaine. 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

Numéro de registre CAS	120-80-9
Nom d'inventaire	1,2-Benzenediol; Catechol; Pyrocatechin; Pyrocatechol, 1,2-benzènediol, catéchol, pyrocatéchol ;
Autres noms	1,2-Benzoldiol; 1,2-Dihydroxybenzene; 2-Hydroxyphenol; C.I. 76500; C.I. Oxidation Base 26; Durafur Developer C; Fouramine PCH; Fourrine 68; NSC 1573; o-Benzenediol; o-Dihydroxybenzene; o-Dioxybenzene; o-Hydroquinone; o-Hydroxyphenol; o-Phenylenediol; Oxyphenic acid; Pelagol Grey C; Phthalhydroquinone; Phthalic alcohol; Pyrocatechine; UN 2811 cétone de Michler ;
Groupe chimique	Produits chimiques organiques définis
Sous-groupe chimique	Phénols
Formule chimique	$C_6H_6O_2$
Structure chimique	
SMILES	<chem>Oc(c(O)ccc1)c1</chem>
Masse moléculaire	110,11 g/mole

Considérant l'information soumise par 10 compagnies ayant déclaré cette substances sur la LIS, environ 120 tonnes de catéchol étaient commercialisés en 1986 et ce pour différentes utilisations incluant la coloration (pigments, teintures, colorants, encre), les agents de refroidissement, les fragrances, parfums, désodorisants, aromatisants et les composants de formulation. D'autres usages potentiels du catéchol au Canada incluent le développement de photos, l'utilisation comme intermédiaire chimique pour antioxydants dans le caoutchouc et les huiles lubrifiantes ainsi qu'intermédiaire chimique pour l'inhibition de la polymérisation. La substance peut également être utilisée lors de la synthèse d'adhésifs et d'insecticides, dans l'électrodéposition et dans d'autres secteurs.

LE DÉFI

Selon les directives édictées à l'article 76.1 de la LCPE (1999), l'information obtenue lors de la catégorisation est suffisante pour conclure que cette substance rencontre les critères énoncés à l'article 64 de la Loi parce qu'elle « peut constituer un danger au Canada pour la vie ou la santé humaines ». Ainsi, les ministres sont prêts à recommander au Gouverneur en conseil que cette substance soit ajoutée à la Liste des substances toxiques de l'Annexe I de la Loi avec l'intention de développer de mesures de gestion de risque considérant les facteurs socio-économiques. Ces mesures seront sujettes à une révision en fonction de la nouvelle information scientifique apportée, y compris par les activités d'évaluation et de suivi.

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 qui, pendant l'année civile 2006, a fabriqué ou importé une quantité totale supérieure à 100 kilogrammes de cette substance seule, dans un mélange ou dans un produit, y compris les articles manufacturés.

L'information de 2006 visé par cet 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 additionnelle 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.

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
Pyrocatechol
(catéchol)
N° CAS 120-80-9

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) par Environnement Canada et qui sont aussi considérées « intrinsèquement toxiques » pour les humains.

Afin d'identifier relever 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 potentiel 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 catéchol satisfait aux critères relatifs au REI en vertu du SimET, et au PFRE en vertu du SimHaz. Le présent document résume l'information actuellement disponible sur laquelle les résultats du SimET et di 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 REI 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 catéchol présentait un REI en tenant compte de l'information présentée ci-dessous concernant l'inscription sur la LIS.

Information contenant l'inscription sur la LIS

Quantité en commerce

La quantité déclarée comme étant manufacturée, importée ou en commerce au Canada pendant l'année civile 1986 était de 123 000 kg.

Nombre de déclarants

Le nombre de déclarants pour les années civiles 1984-1986 était de 10.

Codes d'utilisation et description

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

5	Réactif analytique
13	Matières colorantes – pigments/colorants/teintures /encres
21	Composant de formulation
22	Fragrances/parfums/désodorisants/aromatisants
51	Fonction autre que celles spécifiées dans les codes 02 à 50
70	Cuir/tannage
77	Produits chimiques organiques, spécialités
84	Produits de photographie/reprographie
85	Pigments/teintures et encres d'imprimerie
98	Pour une utilisation dans une industrie autre que celles spécifiées dans les codes 51 à 97

Utilisations potentielles au Canada

L'information additionnelle suivante sur les utilisations potentielles du catéchol a été obtenue par dépouillement des documents scientifiques et techniques disponibles.

Le catéchol est préparé par le traitement du salicylaldéhyde au peroxyde d'hydrogène, ou encore par traitement de son éther monométhyle (guaiacol) au bromure d'hydrogène (O'Neil, 2001).

Le catéchol est trouvé à l'état naturel dans la couche tannique mycorhizienne du pin Douglas, ainsi que dans les feuilles et les branches du chêne et du saule. De plus, on a

décelé sa présence dans l'oignon, le sucre de la betterave crue, la pomme, et aussi dans le charbon (NLM, 2005).

Le catéchol est un révélateur photographique et un révélateur pour la teinture des fourrures (NLM, 2005) ; il est utilisé comme intermédiaire dans la préparation d'antioxydants pour le caoutchouc et les huiles lubrifiantes; il est employé dans les inhibiteurs de la polymérisation et dans des produits pharmaceutiques (US EPA, 2000). Il peut servir d'agent oxydant dans les colorants capillaires (Winter, 2005), mais il est présentement inscrit sur la liste critique de cosmétiques de Santé Canada; ce ministère interdit son utilisation dans les produits cosmétiques (Santé Canada, 2005a). Le catéchol peut aussi être utilisé comme réactif, dans la synthèse d'adhésifs, dans les insecticides et pour l'électroplacage, dans le papier pour télécopieur, dans les encres spéciales, comme antioxydant dans les parfums et les huiles essentielles, ainsi que comme réactif dans la teinture du cuir et de la fourrure (Ash et Ash, 2002). Cette substance a aussi été décelée dans la fumée du tabac (US EPA, 2000).

Information sur les dangers liés à la santé 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, 2005b).

Résultats de l'application du SimHaz

Compte tenu du classement selon son potentiel cancérigène qui lui est attribué par le Centre international de recherche sur le cancer (CIRC), on estime que le catéchol est une substance potentiellement très dangereuse.

Le CIRC a classé le catéchol parmi les substances du groupe 2B de cancérigénicité (cancérigènes possibles pour l'homme). Cette agence signale qu'il n'y a pas de données épidémiologiques disponibles concernant la cancérigénicité pour l'homme de cette substance, mais elle estime qu'il existe une preuve suffisante de sa cancérigénicité chez des animaux de laboratoire (CIRC, 1999).

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. Cependant, compte tenu des propriétés très dangereuses de ces substances et du fort risque d'exposition des humains à ces substances, il faut déterminer si on doit appliquer des mesures de prévention et de protection.

Références

Ash, M. et I. Ash. 2002. Handbook of Cosmetic and Personal Care Additives, 2^e édition. Endicott, New York. p. 1456.

CIRC. 1999. Centre International de Recherche sur le Cancer. Catechol. Volume 71, p. 433.
<http://monographs.iarc.fr/ENG/Monographs/vol71/volume71.pdf>

NLM, NIH Hazardous Substances Data Bank. 2005. Catechol. National Library of Medicine, National Institutes of Health. <http://toxnet.nlm.nih.gov/>

O'Neil, M.J. *et al.* (éd.). 2001. The Merck Index, 13th Edition. Merck & Co., Inc. New Jersey. p. 1432.

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/alt_formats/hecs-sesc/pdf/pubs/contaminants/existsub/exposure/greatest_potential_human_exposure-risque_exposition_humaine_f.pdf

Santé Canada. 2005a. Liste critique des ingrédients dont l'utilisation est restreinte ou interdite dans les cosmétiques. Site Web consulté le 26 octobre 2006. http://www.hc-sc.gc.ca/cps-spc/alt_formats/hecs-sesc/pdf/person/cosmet/hotlist-2005-liste_critique_f.pdf

Santé Canada. 2005b. 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

US EPA (Environmental Protection Agency). 2000. Catechol (Pyrocatechol) Hazard Summary. Site Web consulté le 26 octobre 2006. <http://www.epa.gov/ttnatw01/hlthef/pyrocate.html>

Winter, R. 2005. A consumer's dictionary of cosmetic ingredients: complete information about the harmful and desirable ingredients found in cosmetics and cosmeceuticals. Three Rivers Press, New York. p. 433.

Annexe II
Renseignements de nature écologique
à l'appui du Défi concernant le
le pyrocatéchol
(catéchol)
N° CAS 120-80-9

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).

Propriétés physiques et chimiques

Les tableaux 1a et 1b présentent les propriétés physicochimiques expérimentales et modélisées du catéchol qui se rapportent à son devenir dans l'environnement.

Tableau 1a. Propriétés physiques et chimiques expérimentales du catéchol

Propriété	Valeur/unités	Référence
Point d'ébullition (PE)	245 °C	Base de données SRC PHYSPROP 2003
Point de fusion (PF)	105 °C	Base de données SRC PHYSPROP 2003
Constante de la Loi de Henry (CLH)	$3,14 \times 10^{-9}$ atm-m ³ /mole	Base de données SRC PHYSPROP 2003
Constante de dissociation	9,45	Serjeant, E.P. & Dempsey, B. (1979)
Logarithme du coefficient de partage octanol-eau (log K _{oe})	0,88	Hansch <i>et al.</i> , 1995
Pression de vapeur (PV)	0,01 mm Hg	Boublik <i>et al.</i> , 1984
Solubilité dans l'eau (SE)	461 000 mg/L	Granger & Nelson, 1921

Tableau 1b. Propriétés physiques et chimiques modélisées du catéchol

Propriété	Valeur/unités	Référence
Point d'ébullition (PE)	229,69 °C	MPBPWIN v1.41
Point de fusion (PF)	45,73 °C	MPBPWIN v1.41
Constante de la Loi de Henry (CLH)	$8,099 \times 10^{-11}$ atm.m ³ /mole; $5,833 \times 10^{-11}$ atm.m ³ /mole	HenryWin v3.10
Logarithme du coefficient de partage au carbone organique (log K _{co})	2,65	PCKOCWIN v1.66
Logarithme du coefficient de partage octanol-eau (log K _{oe})	1,03	KOWWIN v1.67
Pression de vapeu (PV) _r	0,152 Pa; $1,14 \times 10^{-3}$ mm Hg	MPBPWIN v1.41
Solubilité dans l'eau (SE)	73 230 mg/L	WSKOWWIN v1.41

Fabrication, importation et utilisations

Référez-vous à l'annexe 1.

Rejets, devenir et présence dans l'environnement

Rejets

Référez-vous à l'annexe 1

Devenir

Milieu aquatique

Sa constante de dissociation mesurée en fonction de l'ionisation initiale étant de 9,45 (tableau 1a), le catéchol existera à l'état partiellement dissocié dans l'eau; donc, sa réactivité et son transport pourraient être modifiés par le pH. Dans les milieux aquatiques aux conditions environnementales pertinentes le pH à la surface des eaux varie entre 6 et 8, alors le catéchol sera principalement présent dans sa forme non-dissociée. S'il était rejeté dans l'eau, le catéchol serait probablement peu adsorbé sur les sédiments et la matière organique en suspension, comme l'indique la valeur estimée du log K_{co}, de 2,65 (tableau 1b). D'après la valeur déterminée expérimentalement ($3,1 \times 10^{-9}$ atm.m³/mole) et les valeurs estimées ($8,1 \times 10^{-11}$ et $5,8 \times 10^{-11}$ atm.m³/mole) de la constante de la Loi de Henry, la volatilisation à partir de l'eau de surface serait probablement trop faible pour avoir de l'importance sur le plan environnemental.. Par conséquent, s'il se produit des rejets de catéchol dans l'eau, celui-ci devrait surtout se distribuer dans l'eau, ce que tendent à démontrer les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (tableau 2).

Tableau 2. Résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (EPIWIN V3.12) du catéchol

Milieu récepteur	% dans l'air	% dans l'eau	% dans le sol	% dans les sédiments
Air (100 %)	0,18	22,5	77,3	0,04
Eau (100 %)	0,00	99,8	0,00	0,20
Sol (100 %)	0,00	18,6	81,4	0,04
Air, eau et sol (33,3 % chacun)	0,06	37,1	62,8	0,07

Milieu terrestre

Puisque la constante de dissociation du catéchol mesurée en fonction de l'ionisation initiale étant de 9,45 (tableau 1a), le catéchol existera à l'état partiellement dissocié dans les sols humides (pH 4-8) ; donc, il sera principalement présent dans sa forme non-dissociée. Le catéchol devrait être modérément adsorbé aux particules du sol, comme l'indique la valeur estimée du $\log K_{oc}$, soit 2,65 (tableau 1b); donc, il devrait être modérément mobile dans ce milieu naturel. D'après la valeur déterminée expérimentalement ($3,1 \times 10^{-9}$ atm.m³/mole) et les valeurs estimées ($8,1 \times 10^{-11}$ et $5,8 \times 10^{-11}$ atm.m³/mole) de la constante de la Loi de Henry, il devrait se produire très peu de volatilisation à partir de surfaces du sol humides. La valeur expérimentale et la valeur estimée de la pression de vapeur (0,01 mm Hg et $1,1 \times 10^{-3}$ mm Hg, respectivement – tableaux 1a et 1b) indiquent que le potentiel de volatilisation du catéchol à partir de surfaces du sol sèches est faible. Par conséquent, s'il se produit des rejets de catéchol sur des sols, celui-ci se répartira surtout dans les particules du sol, mais aussi en moindre quantité dans l'eau. C'est ce que tendent à démontrer les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (tableau 2).

Milieu atmosphérique

Si le catéchol est rejeté dans l'atmosphère, il devrait s'oxyder rapidement. Compte tenu de sa très grande solubilité dans l'eau, il peut aussi être éliminé de l'air par dépôt humide (tableaux 1a et 1b).

Présence dans l'environnement

Des données sur la présence du catéchol 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

Il a été déterminé expérimentalement que la constante cinétique de la réaction du catéchol avec les radicaux hydroxyles produits photochimiquement prend la valeur de $1,04 \times 10^{-10}$ $\text{cm}^3/\text{molécule}\cdot\text{sec.}$ à 25 °C (tableau 3a). Cela correspond à une demi-vie atmosphérique de 0,10 jour. La demi-vie estimée par EPIWIN de l'oxydation atmosphérique du catéchol est de l'ordre de 0,5 jour, si on applique une concentration atmosphérique moyenne des radicaux hydroxyles de $1,5 \times 10^6$ molécules/ cm^3 (tableau 3b). Par conséquent, le catéchol semble s'oxyder rapidement dans l'air. Il est probable qu'il ne réagit pas sensiblement, avec d'autres espèces photooxydantes dans l'air comme O_3 . Cependant, sa réaction en phase vapeur durant la nuit avec les radicaux des nitrates peut constituer un processus de dégradation (Hazardous Substances Data Bank).

Par conséquent, il est prévu que les réactions avec les radicaux hydroxyles constituent l'élément le plus important du devenir du catéchol dans l'atmosphère, alors que ses réactions avec les radicaux des nitrates peuvent constituer un autre processus de son élimination nocturne dans l'air.

Tableau 3a. Données expérimentales sur la persistance du catéchol

Milieu	Processus du devenir	Valeur pour la dégradation	Paramètre pour la dégradation/unités	Référence
Air	Photodégradation	$1,04 \times 10^{-10}$	constante cinétique, $\text{cm}^3/\text{molécule}\cdot\text{sec.}$	Atkinson, 1989
Air	Photodégradation	0,103	Demi-vie, jours	Atkinson, 1989
Eau	Biodégradation	83	Biodégradation, %	Chemicals Inspection and Testing Institute, 1992

Tableau 3b. Données modélisées sur la persistance du catéchol

Milieu	Processus du devenir	Valeur pour la dégradation	Paramètre pour la dégradation/unités	Référence
Air	Oxydation atm.	0,4606	Demi-vie, jours	AOPWIN v1.91
Air	Réaction avec l'ozone	Non réactif	Demi-vie, jours	AOPWIN v1.91
Eau/sols	Biodégradation	15	Demi-vie, jours	BIOWIN v4.02, Ultimate survey
Eau/sols	Biodégradation	0,691	Probabilité	BIOWIN v4.02, MITI Non-linear probability
Eau/sols	Biodégradation	0,546	Probabilité	BIOWIN v4.02, MITI Linear probability
Eau/sols	Biodégradation	0,998	Probabilité	Topkat v.6.1

Les données expérimentales de biodégradation (Chemicals Inspection and Testing Institute, 1992) montrent que, lors d'un essai de biodégradation simple, le catéchol dans

l'eau est biodégradé à raison de 83 % en 28 jours (tableau 3a). Cela signifie que sa demi-vie dans l'eau est inférieure à 182 jours (6 mois).

Pour calculer la dégradation dans l'eau, une approche QSAR par modélisation a été appliquée (tableau 3b). À la lumière de ces résultats, les temps estimés pour la biodégradation indiquent que le catéchol n'est pas persistant dans l'eau.

En utilisant les facteurs d'extrapolation de Boethling, d'essais du type échec/réussite à la demi-vie dans l'eau, le sol et les sédiments (Environnement Canada, 2003), on pourrait dire que le catéchol n'est pas persistant dans le sol et les sédiments.

Donc, les données empiriques et les données modélisées indiquent donc que le catéchol ne rencontre pas les critères de persistance (demi-vie égale ou supérieure à 182 jours dans le sol et dans l'eau, égale ou supérieure à 365 jours dans les sédiments et égale ou supérieure à 2 jours dans l'air) spécifiés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Gouvernement du Canada, 2000).

Potentiel de bioaccumulation

La valeur expérimentale et la valeur modélisée du log K_{oc} , de 0,88 et de 1,03 respectivement (tableaux 1a et 1b) indiquent que le catéchol n'a pas le potentiel de se bioaccumuler dans les tissus des organismes aquatiques.

Il n'existe pas de valeur expérimentale de Facteur de bioconcentration (FBC) pour cette substance. Le modèle modifié GOBAS BAF pour le niveau trophique moyen a produit des valeurs du Facteur de bioaccumulation (FBA) de 1 L/kg, ce qui indique que le catéchol ne peut être bioaccumulable dans les tissus du poisson. De plus, les trois modèles FBC confirment par le poids de la preuve (FBC = 1-19 L/kg, tableau 4) que le catéchol est peu sujet à être bioconcentré dans les tissus des organismes aquatiques.

Tableau 4. Données modélisées sur la bioaccumulation du catéchol

Organisme pour essai	Paramètres/unités	Valeur	Référence
Poisson	FBA (poids humide, L/kg)	1	Gobas BAF T2MTL (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	FBC (poids humide, L/kg)	1 - 19	OASIS; modifié GOBAS BCF 5% T2LTL (Arnot et Gobas, 2003); BCFWIN v2.15

Donc, les données modélisées indiquent que le catéchol ne rencontre pas les critères de bioaccumulation (FBC/FBA égaux ou supérieurs à 5 000) spécifiés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Gouvernement du Canada, 2000).

Effets écologiques

Dans le milieu aquatique

Les données écotoxicologiques expérimentales indiquent qu'à de faibles concentrations, le catéchol ne nuit pas aux organismes aquatiques de façon marquée (tableau 5a). Pour deux espèces de poissons, la CL50 aiguë varie à l'intérieur d'une gamme réduite de valeurs (3,5 à 10 mg/L). Les valeurs de la toxicité pour les plantes aquatiques sont un peu plus élevées (13 à 27,5 mg/L) alors que dans le cas des invertébrés (crevette), la CE50 est supérieure à 40 mg/L. En général, la toxicité prend des valeurs prédites (tableau 5b) assez conformes aux résultats expérimentaux.

Tableau 5a. Données expérimentales sur la toxicité aquatique du catéchol

Organisme pour essai	Paramètre	Type d'essai	Valeur (mg/L)	Référence n° (Base de données ECOTOX)
Poisson (<i>Pimephales promelas</i> , <i>Oncorhynchus mykiss</i>)	CL50	Tox. aiguë (2-4 jours)	3,5 – 10,0	569; 3217; 6573; 15031; 59196
Crevette grise de sable (<i>Crangon septemspinosa</i>)	CL50	Tox. aiguë (4 jours)	> 44	5810
Plantes aquatiques (<i>Elodea Canadensis</i> , <i>Lemna minor</i>)	CE50 (taux de croissance de la population)	Tox. aiguë (≤ 9-12 jours)	13,2 – 27,5	14483

Tableau 5b. Données modélisées sur la toxicité aquatique du 1,4-benzènediol

Organisme pour essai	Paramètre	Durée	Valeur de toxicité (mg/L)	Référence
Algue verte	CE50	Aiguë	395	ECOSAR v.0.99h
Daphnie	CE50	Aiguë	22	TOPKAT v6.2
Poisson	CL50	Aiguë	103	TOPKAT v6.2
Poisson	CL50	Aiguë	6,77	AI Expert
Poisson	CL50	Aiguë	152	ASTER
Poisson	CL50	Aiguë	1 773	OASIS Forecast
Poisson	CL50	Aiguë	64	ECOSAR v.0.99h
Poisson	CL50	Aiguë	6,7	ECOSAR v.0.99h (Neutral Org. SAR)

Dans d'autres milieux

Aucune étude des effets n'a été trouvée pour d'autres organismes (non-humains, non-aquatiques).

Potentiel de causer des effets écologiques néfastes

Si l'on en juge par les renseignements disponibles, le catéchol ne persiste pas dans l'environnement et il n'est pas bioaccumulable, selon les critères spécifiés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Gouvernement du Canada, 2000). Aucune information sur la concentration du catéchol dans l'environnement n'a encore été trouvée. Les données écotoxicologiques expérimentales et modélisées indiquent que le catéchol serait modérément à peu dangereux pour les organismes aquatiques qui y sont exposés dans l'eau. Aucune information sur les effets possibles sur d'autres milieux naturels n'a encore été trouvée.

Références

AI Expert (Artificial Intelligence Expert System). 2005. v 1.25. Créateur: Stefan P. Niculescu. Droits d'auteur © 2003-2005. Environnement Canada.

AOPWIN v1.91. 2000. U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

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.

ASTER. Assessment Tools for the Evaluation of Risk. U.S. Environmental Protection Agency. Environmental Research Laboratory, Duluth, MN. 1993.
http://www.epa.gov/med/Prods_Pubs/aster.htm

Atkinson, R. 1989. Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of the hydroxyl radical with organic compounds. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. Monograph No. 1, 246 p.

Base de données ECOTOX (<http://cfpub.epa.gov/ecotox/>)

Base de données SRC PHYSPROP. 2003. (<http://www.syrres.com/esc/physdemo.htm>)

BCFWIN 2000. Version 2.15. U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

BIOWIN 2000. Version 4.02. U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

Boublik, T., Fried, V., Hala, E. 1984. The Vapor Pressure of Pure Substances: Selected Values of the Temperature Dependence of the Vapor Pressures of Some Pure Substances in the Normal- and Low-Pressure Region, vol. 17. Elsevier, Amsterdam, Hollande.

Chemicals Inspection and Testing Institute. 1992. Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4-89074-101-1.

ECOSAR 2004. Version 0.99h. U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

Environnement Canada. 2003. Document d'orientation sur la catégorisation des substances organiques et inorganiques inscrites sur la Liste intérieure des substances du Canada. Direction des substances existantes, Environnement Canada, Gatineau, Canada, 124 p.

EPIWIN 2000. Version 3.12 U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

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/CEPARegistry/regulations/detailReg.cfm?intReg=35> (consulté en août 2006).

Granger, F. S. et Nelson, J. M.. 1921. Oxidation and reduction of hydroquinone and quinone from the standpoint of electromotive force measurements. *J. Am. Chem. Soc.*, 43(7): 1401 – 1415.

Hansch, C., Leo, A. et D. Hoekman. 1995. Exploring QSAR: Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. American Chemical Society, Washington, DC, USA.

Hazardous Substances Data Bank (HSDB) <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB> (consulté en décembre 2006).

HENRYWIN 2000. Version 3.10. 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. C15-31.[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>

Oasis Forecast 2004. Version 1.14. Laboratory of Mathematical Chemistry. University 'Prof. Assen Zlatarov' Bourgas, Bulgarie. Information disponible à <http://omega.btu/?section=software&swid=10>

PCKOCWIN 2000. Version 1.66. U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

Serjeant, E.P., Dempsey, B. 1979. Ionisation Constants of Organic Acids in Aqueous Solution. IUPAC Chemical Data Series 23. Pergamon, New York, NY, USA.

Topkat 2004. Version 6.1; 6.2. Accelrys, Inc.
<http://www.accelrys.com/products/topkat/index.html>

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