

Profil de substance pour le Défi

1,1-di-tert-butylperoxy-3,3,5-triméthylcyclohexane

N° CAS 6731-36-8

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 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 d'exposition intermédiaire (REI) 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, et 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

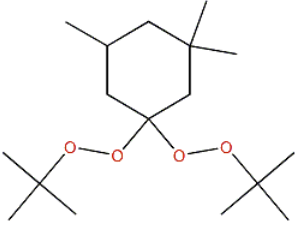
existe actuellement des données suffisantes permettant de croire que ces substances rencontrent les critères de l'article 64 de la LCPE (1999).

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, des renseignements précis pouvant servir à élaborer et 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 1,1-di-tert-butylperoxy-3,3,5-triméthylcyclohexane parce qu'on a constaté que cette substance est persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques et 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

Aux fins du présent rapport, cette substance sera appelée « TMCH », une appellation tirée du nom d'inventaire 1,1-di-tert-butylperoxy-3,3,5-triméthylcyclohexane

Numéro de registre CAS	6731-36-8
Noms d'inventaire	<u>Peroxide, (3,3,5-triméthylcyclohexylidene)bis[(1,1-diméthylethyl); di-tert-butyl 3,3,5-triméthylcyclohexylidene diperoxide; 1,1-bis(tert-butylidioxy)-3,3,5-triméthylcyclohexane; 1,1-di-tert-butylperoxy-3,3,5-triméthylcyclohexane</u>
Autres noms	<u>1,1-bis(tert-butylperoxy)-3,3,5-triméthylcyclohexane; 1,1-di(tert-butylperoxy)-3,3,5-triméthylcyclohexane; 3,3,5-triméthyl-1,1-bis(tert-butylperoxy)cyclohexane; Interlox TMCH 401C, Link-Cup TMCH, Luperco 231G, 231G40, 231XL, 231XLP; Luperox 231, 231-50, 231XL; Lupersol 230XL, 231, L 231; Perhexa 3M, 3M40, Sanperox CY 1.1; Trigonox 29, 29-40B-PD, 29/40, 29/40MB, 29A, 29B50, 29B75, 29B90, 29C75, Tx 29, 29B50, Varox 231XL</u>
Groupe chimique	Composés organiques définies
Sous-groupe chimique	<u>Diperoxycéta</u>
Formule chimique	C ₁₇ H ₃₄ O ₄
Structure chimique	
SMILES	O(OC(C)(C)C)C(OOC(C)(C)C)(CC(CC1(C)C)C)C1
Masse moléculaire	302.46 g/mole

Au Canada, aucune fabrication de TMCH 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. Six entreprises ont signalé qu'en 2005, elles importaient jusqu'à 100 000 kg par année pour des activités commerciales comme la fabrication de véhicules moteurs, la fabrication de produits en caoutchouc (pneus et durites), la fabrication de produits chimiques communs, la fabrication d'autres produits et préparations chimiques, ainsi que la vente en gros et la distribution de produits chimiques et de produits analogues (sauf agricoles). Le TMCH peut servir d'initiateur pour la polymérisation des monomères ainsi que pour le durcissement des résines de polyester insaturées et la réticulation des polymères 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.

L'information additionnelle est demandée dans les domaines suivants :

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'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 gestion 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 1,1-di-tert-butylperoxy-3,3,5-
triméthylcyclohexane (TMCH)
N° CAS 6731-36-8

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) 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 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 TMCH 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 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 TMCH 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

Quantité en commerce

La quantité déclarée comme étant manufacturée, importée ou en commerce au Canada pendant l'année civile 1986 était de 20 200 kg.

Nombre de déclarants

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

Codes d'utilisation et description

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

- 8 Catalyseur/accélérateur/initiateur/activateur
- 21 Composant pour formulation
- 37 Polymère, agent de réticulation
- 77 Produits chimiques organiques, spécialités
- 86 Matières plastiques
- 87 Résines plastiques et synthétiques
- 92 Produits en caoutchouc

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 risque 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 TMCH 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://www.hc-sc.gc.ca/ewh-semt/alt_formats/hecs-sesc/pdf/pubs/contaminants/existsub/exposure/greatest_potential_human_exposure-risque_exposition_humaine_e.pdf

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_e.pdf

Annexe II
Renseignements de nature écologique
à l'appui du Défi concernant le 1,1-di-tert-butylperoxy-3,3,5-
triméthylcyclohexane (TMCH)
N° CAS 6731-36-8

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, 2006). 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 propriétés physicochimiques expérimentales et modélisées du TMCH qui se rapportent au devenir de cette substance dans l'environnement.

Tableau 1. Propriétés physiques et chimiques du TMCH

Propriété	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
Point d'ébullition (PE)	Modélisé	306,87 °C		MPBPWIN v1.41
Point de fusion (PF)	Modélisé	86,3 °C		MPBPWIN v1.41
Point de fusion (PF)	Expérimental	-20 °C		Acros Organics MSDS, 2004
Logarithme du coefficient de partage octanol-eau (log K _{oe})	Modélisé	7,56	25	Kowwin v.1.67
Logarithme du coefficient de partage au carbone organique (log K _{co})	Modélisé	5,53		PCKOCWIN v.1.66
Pression de vapeur (PV)	Modélisé	0,09Pa		MPBPWIN v1.41
Pression de vapeur (PV)	Modélisé	0,000653 mm Hg		MPBPWIN v1.41
Constante de la loi d'Henry (CLH)	Modélisé	0,001507 atm-m ³ /mole	25	HenryWin v3.10
Solubilité dans l'eau (SE)	Modélisé	0,004118 mg/L	25	WSKOW v1.41

Fabrication, importation et utilisations

Fabrication et importation

Un contrat a été exécuté en 2002 par ChemInfo pour déterminer l'utilisation d'initiateurs dans la fabrication et la transformation des résines de polymère au Canada, incluant le TMCH. Le contrat a permis de déterminer que les initiateurs à base de peroxydes organiques n'étaient pas fabriqués au Canada en 2000 et que les peroxycétaux constituaient la plus petite classe de peroxydes organiques utilisés dans la fabrication des résines de polymère au Canada. Environ 100 000 kg de peroxycétaux et d'autres peroxydes organiques ont été utilisés dans la fabrication des résines de polymère au Canada en 2000.

Conformément à l'avis concernant certaines substances considérées comme prioritaires en vue d'en faire le suivi, publié en vertu de l'article 71 de la LCPE, les entreprises canadiennes qui avaient fabriqué ou importé (en 2005) plus de 100 kg d'une substance énumérée dans l'avis ont été obligées de fournir à Environnement Canada des données précises sur la substance. Les renseignements obtenus à la suite de cet avis d'enquête indiquent que, en 2005, le TMCH n'a pas été fabriqué en une quantité égale au seuil de déclaration de 100 kg.

En tout, six entreprises ont déclaré avoir importé cette substance : trois dans la plage de 100 à 1 000 kg/année et trois dans la plage de 1 001 à 100 000 kg/année. Les entreprises importatrices ont mentionné que leur secteur d'activité était le suivant : fabrication de véhicules à moteur, fabrication de produits en caoutchouc (pneus et durites), fabrication de produits chimiques communs, fabrication et préparation d'autres produits chimiques (pouvant comprendre l'imprimerie, les encres et les cartouches), et vente en gros/distribution des produits chimiques (non agricoles) et de produits apparentés. En outre, cinq entreprises canadiennes et une entreprise américaine ont déclaré avoir des intérêts dans la substance en question.

À l'étranger, l'utilisation déclarée de TMCH à l'Environmental Protection Agency des États-Unis en vertu de l'*Inventory Update Rule* était comprise entre 4,5 et 225 tonnes de 1990 à 1998, et elle a augmenté de 225 à 455 tonnes en 2002. Le TMCH est une substance chimique produite en faibles quantités par l'Union européenne, ce qui veut dire que sa production est de l'ordre de dix tonnes par année. D'après la base de données des pays nordiques sur les substances dans des préparations, le TMCH a été utilisé en Suède, en Norvège et au Danemark de 1999 à 2004 (base de données SPIN). Au Japon, on a constaté que 108 tonnes de TMCH ont été fabriquées ou importées en 2004. Les résultats de l'enquête menée en 2001 par leur ministère de l'Économie, du Commerce et de l'Industrie montrent que de 100 à 1 000 tonnes avaient alors été fabriquées ou importées (site Web du NITE).

Utilisations

Le TMCH peut servir d'initiateur pour la polymérisation des monomères ainsi que pour le durcissement des résines de polyester insaturées et la réticulation des polymères. Il peut agir comme un initiateur de la polymérisation des matières plastiques et il est utilisé dans la transformation du caoutchouc en vue de la production de joints d'étanchéité pour les fenêtres et les automobiles, de durites, et de semelles de chaussures. Il peut aussi servir au durcissement de certaines résines dans des applications allant des coques de navires et des piscines à des pièces de carrosserie (Arkema).

Rejets, devenir et présence dans l'environnement

Rejets

Le TMCH n'est pas produit naturellement dans l'environnement. Aucun rejet de source anthropique n'a été signalé. Cependant, dû à la nature potentiellement explosive des peroxydes quand ils sèchent, il est anticipé que les résidus provenant des matières résiduelles et des contenants sont communément rincés et évacués par les drains.

Devenir

Les valeurs élevées de $\log K_{oe}$ et de $\log K_{co}$ indiquent que cette substance se répartira probablement dans le sol et les sédiments. En fait, les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III montrent que si ce produit chimique est rejeté également dans les trois principaux milieux naturels (l'air, l'eau et le sol), il se répartira en grande partie dans le sol et les sédiments (tableau 2), où sa persistance a été indiquée (tableau 3).

Tableau 2. Résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (EPIWIN v3.04)

Milieu récepteur	% dans l'air	% dans l'eau	% dans le sol	% dans les sédiments
Air (100 %)	37,2	0,636	13,3	48,8
Eau (100 %)	0,00328	1,29	0,00117	98,7
Sol (100 %)	$5,79 \times 10^{-5}$	0,00242	99,8	0,186
Air, eau et sol (33,3 % chacun)	0,0973	0,773	39,8	59,3

La pression de vapeur du TMCH, qui est de 0,09 Pa, et la constante de la Loi de Henry, qui est de $1,5 \times 10^{-3}$ atm-m³/mole, indiquent que cette substance est relativement volatile. Si elle est rejetée seulement dans l'air, elle devrait donc demeurer dans ce milieu. Toutefois, la valeur élevée de K_{co} lui donne une grande affinité pour les particules, ce qui la fait s'adsorber sur ces dernières et se répartir dans le sol et les sédiments (~ 60 %).

S'il est rejeté dans l'eau, il est probable que le TMCH s'adsorbera fortement sur les solides en suspension et les sédiments en raison de la valeur extrêmement élevée de $\log K_{co}$. Malgré que la volatilisation à partir de la surface de l'eau peut survenir due à la

constante de la Loi d'Henry, il est prédit que s'il est rejeté dans l'eau, ce produit chimique sera réparti en grande partie dans les sédiments.

S'il est rejeté dans le sol, il est prévu que le TMCH aura une adsorptivité extrêmement élevée sur le sol (c.-à-d. qu'il sera immobile) en raison de la valeur calculée de $\log K_{co}$, soit ~ 5 , où il persistera probablement (tableau 4). La pression de vapeur et la constante de la Loi de Henry indiquent qu'une volatilisation peut se produire dans les surfaces du sol sèches et humides, mais comme l'adsorptivité de cette substance sur les particules de sol est extrêmement élevée, la volatilisation ne sera probablement pas importante. S'il est rejeté dans le sol, le TMCH demeurera donc dans ce milieu, comme le montrent les résultats de la modélisation de la fugacité de niveau III (tableau 2).

Présence dans l'environnement

Des données canadiennes de surveillance ayant trait à 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

Les modèles prédisent que le TMCH, une fois rejeté dans l'environnement, persistera dans l'eau, le sol et les sédiments. Il n'existe pas de données expérimentales sur la persistance dans l'air, mais il est probable que le TMCH sera rapidement oxydé en raison des réactions avec les radicaux hydroxyles (EPIWIN v3.12). Comme l'indique le tableau 3a, il n'est pas prévu que la substance réagira avec O_3 ou NO_3 . Outre la perte rapide prévue en raison de la réaction avec ces radicaux, presque tous les peroxydes organiques sont sensibles à la chaleur et à la photolyse à cause de leurs faibles liaisons oxygène-oxygène. Le di-tert-butylperoxyde a une structure semblable au TMCH autour de la liaison peroxyde. Il adsorbe la lumière jusqu'à 340 nm, et on sait qu'il subit une décomposition photochimique pour former des radicaux tert-butoxy à des basses températures (HSDB). Une évaluation des risques par la Division des substances nouvelles a aussi permis de constater que les peroxydes organiques subissaient probablement une décomposition photolytique dans l'atmosphère. Il est donc prévu que la décomposition photolytique sera le plus important processus de dégradation du TMCH dans l'atmosphère, occasionnant ainsi des pertes rapides à partir de l'air.

Tableau 3a. Données modélisées sur la persistance

Milieu	Processus du devenir	Paramètre pour la dégradation	Valeur pour la dégradation	Référence
Air	Oxydation atmosphérique	Demi-vie (jours)	1,232	AOPWIN v1.91
Air	Réaction avec l'ozone	Demi-vie (jours)	Non réactif	AOPWIN v1.91
Eau / sol	Biodégradation	Demi-vie (jours)	182	BIOWIN v4.02 (USM)
Eau / sol	Biodégradation	Probabilité	0,0207	BIOWIN v4.02 MITI Non-linear
Eau / sol	Biodégradation	Probabilité	0	TOPKAT

Tableau 3b. Données empiriques sur la persistance

Milieu	Processus du devenir	Paramètre pour la dégradation	Valeur pour la dégradation	Référence
Eau	Biodégradation immédiate	% de biodégradation	0-3 %	DES, 2006a
Eau	Biodégradation immédiate	% de biodégradation	12 %	Base de données NITE

Pour calculer la dégradation dans l'eau, le sol et les sédiments, une approche QSAR fondée sur le poids de la preuve (DSE, 2006b) a été utilisée à l'aide des modèles mentionnés dans le tableau 3a. À la lumière de ces résultats, la donnée calculée pour la biodégradation indique que le TMCH peut être considéré comme une substance persistante dans l'eau et le sol.

Les données empiriques appuient les prédictions des modèles selon lesquelles le TMCH persistera dans l'eau et le sol (tableau 3b). Si l'on tient compte des données empiriques et modélisées, les données montrent que la demi-vie dans l'eau et le sol devrait être 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 TMCH sera donc supérieure à 728 jours.

D'après les prédictions des modèles présentées dans le tableau 3c, le potentiel de transport à grande distance (PTGD) du TMCH à partir de son point de rejet dans l'air est faible. Le 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 choisi 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 du tableau 3c indiquent que le TMCH demeurera principalement dans les zones près des sources d'émission.

Tableau 3c. Distance de parcours caractéristique (DPC) du TMCH prédite par les modèles

Distance de parcours caractéristique	Référence
307 km	TaPL3 (CEMC, 2003)

Les données empiriques et modélisées (tableaux 3a et 3b) indiquent que la substance rencontre les critères de persistance (demi-vies dans le sol et l'eau ≥ 182 jours et dans les sédiments > 365 jours) spécifiés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* (Gouvernement du Canada, 2000).

Potentiel de bioaccumulation

Les valeurs modélisées de $\log K_{ow}$ et les données empiriques indiquent que le TMCH est bioaccumulable dans l'environnement (tableaux 4a et 4b).

Les valeurs pour la bioaccumulation et la bioconcentration modélisées à l'aide des QSAR (tableau 4a) correspondent aussi très bien aux résultats expérimentaux (tableau 4b). Le modèle modifié GOBAS BAF pour le niveau trophique moyen a produit un FBA de 189 819 L/kg, ce qui indique que le TMCH possède un potentiel de bioconcentration et de bioamplification dans l'environnement. Deux autres modèles FBC fournissent une preuve à l'appui du potentiel de bioconcentration de cette substance.

Tableau 4a. Valeurs prédites de la bioaccumulation du TMCH

Organisme pour essai	Paramètre	Valeur (en poids humide, L/kg)	Référence
Poisson	FBA	189 819	GOBAS BAF T2MTL (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	FBC	1 419	Gobas BCF T2LTL (Arnot et Gobas, 2003)
Poisson	FBC	25 119	OASIS
Poisson	FBC	10 965 L/kg	BCFWIN

Tableau 4b. Valeurs empiriques de la bioaccumulation

Organisme pour essai	Concentration pour essai (mg/L)	Paramètre	Valeur (en poids humide, L/kg)	Référence
<i>Cyprinus carpio</i> (carpe commune)	0,2	FBC	3 500-9 860	Base de données NITE
<i>Cyprinus carpio</i> (carpe commune)	0,02	FBC	4 960-13 200	Base de données NITE

Les résultats des études de huit semaines sur les FBC démontrent que les modèles sont prudents et que le métabolisme peut réduire la bioaccumulation du TMCH sans toutefois la rendre inférieure au critère de bioaccumulation.

Le poids de la preuve indique que la substance rencontre le critère de bioaccumulation (FBC, FBA $> 5 000$) 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 modélisée et expérimentale que 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, 2006b). Ces résultats montrent un fort potentiel de toxicité pour les organismes aquatiques (p. ex., CL/CE50 aiguë < 1,0 mg/L).

Tableau 5a. Données modélisées sur la toxicité aquatique

Organisme pour essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
Poisson	Aigu	CL50	0,4395	OASIS
Poisson	Aigu	CL50	2,73	PNN (AI Expert)
Poisson	Aigu	CL50	0,006	ECOSAR
Poisson	Aigu	CL50	0,00006	ECOSAR Neutral Organic SAR

Tableau 5b. Données empiriques sur la toxicité aquatique

Organisme pour essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
<i>Oryzias latipes</i> (medaka)	Aigu	CL50	> 500	Base de données NITE
<i>Daphnia magna</i> (puce d'eau)	Aigu	CE50	0,13	DES, 2006c

Des données expérimentales sur la toxicité aiguë du TMCH sont présentées dans le tableau 5b. D'après une étude du MITI, la CL50 après 48 heures pour *Oryzias latipes* était supérieure à 500 mg/L, bien que cette étude n'ait pas été examinée, et la CL50 était supérieure à la solubilité dans l'eau par plusieurs ordres de magnitude, ce qui remet en question la pertinence du test. D'après une étude confidentielle examinée pour sa robustesse, la CE50 après 48 heures pour *Daphnia magna* était de 0,13 mg/L. Un cosolvant a été ajouté pour accroître la solubilité de la substance. Le cosolvant a aussi été testé mais n'a pas été jugé toxique (ESD, 2006c).

Outre la toxicité observée du TMCH, il a été déterminé que les hydroperoxydes étaient des produits de l'hydrolyse des peroxycétales et qu'ils pouvaient être très toxiques pour le milieu aquatique (DSN, 2005).

Ces résultats montrent que la substance présente un risque élevé pour les organismes aquatiques (p. ex., CL/CE50 aiguë $\leq 1,0$ mg/L).

B – Dans d’autres milieux

Les résultats pour la toxicité du tableau 6 n’ont pas été évalués pour la robustesse.

Tableau 6. Données empiriques sur la toxicité dans d’autres milieux

Organisme pour essai	Type d’essai	Paramètre	Valeur (mg/kg)	Référence
Rat	Ingestion	DL50	12 918-13 000	ChemIC Plus, 2006 et Kirk-Othmer, 2001

Potentiel 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, 2006d). Les substances persistantes séjournent longtemps dans l’environnement après y avoir été rejetées, ce qui accroît l’ampleur et la durée potentielles 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 quantités relativement importantes de diperoxycétals importées au Canada montrent que le TMCH est susceptible de pénétrer l’environnement canadien. Une fois rejeté dans l’environnement, ce composé se répartira dans les sédiments ou le sol en raison de son hydrophobicité où il séjournera longtemps à cause de sa résistance à la dégradation. 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 TMCH peut causer des effets écologiques néfastes au Canada.

Incertitudes

Pour l'instant, il n'existe pas de renseignements ni de données sur les concentrations dans l'environnement canadien. Toutefois, la quantité relativement élevée de diperoxycétals importée au Canada en 2000 et la quantité déclarée qui a été importée en 2005 indiquent que le TMCH peut être rejeté dans l'environnement canadien.

Il existe une forte indication du potentiel élevé de persistance et de bioaccumulation du TMCH, car les valeurs modélisées et les données empiriques montrent que ce composé rencontre les critères spécifiés dans le *Règlement sur la persistance et la bioaccumulation* pris en vertu de la LCPE (1999) (Gouvernement du Canada, 2000). Une indication aussi convaincante que le TMCH peut être nocif pour les organismes à des niveaux d'exposition relativement faibles est fournie par les résultats de la modélisation QSAR et des essais de toxicité pour les organismes pélagiques.

Les données sur les effets n'ont pas trait à la toxicité dans le sol et les sédiments, dont on a jugé qu'ils étaient les principaux milieux préoccupants en raison des chiffres sur le partage. Les seules données qui ont été relevées sur les effets s'appliquent surtout aux expositions des organismes pélagiques en milieu aquatique, même si la colonne d'eau n'est 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 TMCH 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 ce composé sont calculés à l'aide de méthodes quantitatives de ce genre, ils sont très incertains et probablement sous-estimés (DSE, 2006d). 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

- Acros Organics N.V. Material Safety Data Sheet. 1,1-di-(tert-butylperoxy)-3,3,5-trimethylcyclohexane, 75% solution in aromatic free mineral spirit. 10/5/2004. <http://msdsonline.com>
- 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. Disponible B <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.
- CEPA 1999. Canadian Environmental Protection Act, 1999. 1999, c. 33. C-15.31. [Assented to September 14th, 1999]. <http://laws.justice.gc.ca/en/C-15.31/text.html> .
- ChemID Plus Lite. 2006. National Library of Medicine Specialized Information Services. <http://chem2.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/chemidlite.jsp>
- Cheminfo Services Inc. 2002. Use of Initiators in the Canadian Polymer Resin Manufacturing and Polymer Resin Processing Sectors.
- DSE (Division des substances existantes). 2006a. An evaluation of this confidential study named "6731368b_P_biodeg" can be found in the section: Robust Study Summaries from Industry Submissions on the CD entitled "CEPA DSL Categorization: Overview and Results". Publié périodiquement par la Division des substances existantes et aussi disponible sur demande.
- DSE (Division des substances existantes). 2006b. 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). 2006c. Une évaluation de cette étude confidentielle intitulée « 6731368_AT_EC50_I_Dapma » se trouve dans la section Robust Study Summaries from Industry Submissions du CD « CEPA DSL Categorization: Overview and Results ». Publié périodiquement par la Division des substances existantes et aussi disponible sur demande.

DSE (Division des substances existantes) 2006d. Issue paper on "Approach to Ecological Screening Assessments for Existing Substances that are both Persistence and Bioaccumulative". Environment Canada. Le document se trouve sur le CD intitulé « CEPA DSL Categorization: Overview and Results », publié périodiquement par la Division des substances existantes et aussi disponible sur demande.

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

Environment Canada. 2006. 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

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. <http://www.ec.gc.ca/CEPARRegistry/regulations/detailReg.cfm?intReg=35>.

HENRYWIN 2000. Version 3.10. U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

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

Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. Copyright 2001 by John Wiley & Sons, Inc.
<http://www.mrw.interscience.wiley.com/emrw/9780471238966/search/firstpage>

KOWWIN 2000. Version 1.67. U.S. Environmental Protection Agency.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>

MPBPWIN 2000. Version 1.41. U.S. Environmental Protection Agency.
Information available to <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. Disponible B 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.
www.oasis-lmc.org

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

Schering, M., MacLeod, M. et Wegmann, F. 2006. The OECD P_{OV} and LRTP Screening Tool, Version 2.0. A Manual for the OECD P_{OV} and LRTP Screening Tool 2.0 Distributed at OECD/UNEP Workshops on "Application of Multimedia Models for Identification of Persistent Organic Pollutants". www.sust-chem.ethz.ch/downloads/Tool2_0_Manual.pdf

SPIN on the Internet. Substances in Preparations in Nordic Countries. Disponible B <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>