

Profil de substance pour le Défi aux intervenants
Diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-
tétraméthyltétraméthylène
(DMHBP)
N° CAS 78-63-7

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, le potentiel de bioaccumulation et la toxicité intrinsèque pour les organismes aquatiques (PBTi), 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, 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

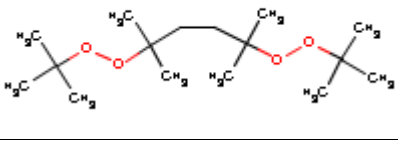
résultats, il existe actuellement des données suffisantes permettant de croire que ces substances rencontrent les critères de l'article 64 de la LCPE (1999).

À ce titre, les ministres ont lancé un défi à l'industrie et à d'autres intervenants intéressés 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 au sujet du diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-tétraméthyltétraméthylène parce qu'on a constaté que cette substance était persistante, bioaccumulable et intrinsèquement toxique pour les organismes aquatiques et qu'on croyait qu'elle était 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 DMHBP qui sont dérivées du nom anglais de la substance dans l'inventaire, soit 2,5-Dimethylhexane-2,5-di-tert-butylperoxide.

Numéro de registre CAS (NCI)	78-63-7
Noms de l'inventaire	<i>Peroxide, (1,1,4,4-tetramethyl-1,4-butanediyl)bis[(1,1-dimethylethyl); di-tert-butyl 1,1,4,4-tetramethyltetramethylene diperoxide; 2,5-Dimethyl-2,5-di (t-butylperoxy) hexane; 2,5-Dimethylhexane-2,5-di-tert-butylperoxide</i>
Autres noms	<i>(1,1,4,4-Tetramethyltetramethylene)bis(tert-butyl peroxide); 2,5-Bis(tert-butyldioxy)-2,5-dimethylhexane; 2,5-Bis(tert-butylperoxy)-2,5-dimethylhexane; Interlox DHBP, DHBP 451C/G; Kayahexa AD, AD 40, AD 40C; Lupercos 101X45, 101XL; Luperox 101, 101XL, 101XL45; Lupersol 101, 101XL, L 101; Perhexa 2.5B, 2.5B40, 25B, 25B40; TrigonoX 101, 101-40D, 101-40MD-GR, 101-50, 101E10, 101E5, XQ8; Varox 50, DBPH, DBPH 50, Liquide</i>
Groupe chimique	<i>Produits chimiques organiques définis</i>
Sous-groupe chimique	<i>Peroxyde de dialkyle</i>
Formule chimique	$C_{16}H_{34}O_4$
Structure chimique	
SMILES	<chem>O(OC(C)(C)C)C(CCC(OOC(C)(C)C)(C)C)(C)C</chem>
Masse moléculaire	290,45 g/mole

Au Canada, aucune fabrication de DMHBP 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. Dix 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 produits chimiques communs, la fabrication de produits en caoutchouc (à l'inclusion possible de pneus, de durites et d'autres produits en caoutchouc), la fabrication de résines, de caoutchouc synthétique et de filaments et fibres synthétiques artificiels, ainsi que la vente en gros et la distribution de produits chimiques et de produits analogues (sauf agricoles). Le DMHBP peut être utilisé dans le traitement des polymères comme initiateur de la réticulation des polyoléfines. 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 aux intervenants ayant trait au
diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-
tétraméthyltétraméthylène
(DMHBP)
N° CAS 78-63-7

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 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 DMHBP 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 DMHBP 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 10 000 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
- 76 produits chimiques organiques, industriels

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 DMHBP 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 aux intervenants concernant le
diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-
tétraméthyltétraméthylène
(DMHBP)
N° CAS 78-63-7

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, 2001). Cette enquête a permis de recueillir des données sur la fabrication et l'importation de la substance au Canada.

Propriétés physiques et chimiques

Le tableau 1 présente les propriétés physicochimiques expérimentales et modélisées du DMHBP qui se rapportent à son devenir dans l'environnement.

Tableau 1. Propriétés physiques et chimiques du DMHBP

Propriété	Type	Valeur	Température (°C)	Référence
Point d'ébullition (PE)	Expérimental	42 °C		Encyclopédie Kirk-Othmer, 2001
Point d'ébullition (PE)	Modélisé	279,61 °C		MPBPWIN v1.41
Point de fusion (PF)	Expérimental	8 °C		Encyclopédie Kirk-Othmer, 2001
Point de fusion	Modélisé	64,91 °C		MPBPWIN v1.41
Logarithme du coefficient de partage octanol-eau (log K _{oe})	Modélisé	6,55	25	Kowwin v.1.67
Logarithme du coefficient de partage au carbone organique (log K _{co})	Modélisé	5,21		PCKOCWIN v1.66
Pression de vapeur (PV)	Expérimental	< 0,01 kPa	20	Fisher Scientific MSDS, 2005
Pression de vapeur (PV)	Modélisé	0,56 Pa		MPBPWIN v1.41
Pression de vapeur (PV)	Modélisé	0,00422 mm Hg		MPBPWIN v1.41
Constante de la loi d'Henry (CLH)	Modélisé	0,002575 at m-m ³ /mole	25	HenryWin v3.10
Solubilité dans l'eau (SE)	Modélisé	0,035 mg/L	25	WSKOWWIN v1.41

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 DMHBP. Ce contrat a permis de déterminer que des initiateurs du type des peroxydes organiques n'avaient pas été fabriqués au Canada en 2000 et que, la même année, 300 000 kg de peroxydes de dialkyle avaient servi à la fabrication de résines de polymères 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 le DMHBP n'a pas été fabriqué au Canada en 2005 en quantité égale ou supérieure au seuil de déclaration de 100 kg.

Au total, dix entreprises ont signalé qu'elles importaient cette substance, trois d'entre elles ayant déclaré en avoir importé entre 100 et 1 000 kg par année, les sept autres ayant déclaré en avoir importé entre 1 001 et 100 000 kg par année. Les entreprises

importatrices ont déclaré exercer comme activité commerciale la fabrication de produits en plastique, la fabrication de produits chimiques communs, la fabrication de produits en caoutchouc (à l'inclusion possible de pneus, de durites et d'autres produits en caoutchouc), la fabrication de résines, de caoutchouc synthétique et de filaments et fibres synthétiques artificiels, ainsi que la vente en gros et la distribution de produits chimiques et de produits analogues (sauf agricoles). En outre, six entreprises canadiennes et une entreprise américaine ont déclaré détenir des intérêts dans la substance en question.

Ailleurs, le DMHBP a été identifié comme substance chimique à haut volume de production (HVP) par les États-Unis selon le règlement de mise à jour de l'inventaire avec une utilisation entre 455 et 4545 tonnes de 1990 à 2002 (sous l'égide : Sponsor Society of the Plastics Industry Inc. (SPI) Organic Peroxide Producers Safety Division (OPPSD) 2001). Le DMHBP a aussi été identifié par l'OCDE substance chimique à haut volume de production (HVP). Il est aussi identifié comme substance chimique à faible volume de production en UE, ce qui signifie que sa production sur ce territoire serait de l'ordre de 10 tonnes par année. La base de données des pays nordiques sur les substances dans des préparations révèle qu'en Suède, l'utilisation totale du DMHBP s'est chiffrée à trois tonnes en 2004 (base de données SPIN).

Utilisations

Le DMHBP est un peroxyde de dialkyle qui peut être utilisé dans le traitement des polymères comme initiateur de la réticulation des polyoléfines et il est utilisé dans la dégradation du polypropylène. Les liaisons C-C permettent d'obtenir des articles en caoutchouc présentant une résistance maximale à la chaleur et à l'oxygène et à la compression rémanente. 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 (Arkema). Le DMHBP peut aussi être employé comme agent de vulcanisation ou être produit comme intermédiaire chimique.

Rejets, devenir et présence dans l'environnement

Rejets

Le DMHBP 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 $\log K_{oe}$ et de $\log K_{co}$ montrent que cette substance répartira 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 environnementaux (l'air, l'eau et le sol), elle se distribuerait 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 V3.12)

Milieu(x) où la substance est rejetée :	Fraction de la substance se distribuant dans chaque milieu (%)			
	dans l'air	dans l'eau	dans le sol	dans les sédiments
Air (100 %)	52,8	0,583	13,9	32,7
Eau (100 %)	0,0535	1,75	0,0141	98,2
Sol (100 %)	0,00144	0,00272	99,8	0,152
Air, eau et sol (33,3 % dans chacun)	0,197	0,94	46,1	52,8

La pression de vapeur de 0,56 Pa et la constante de la Loi de Henry de $2,6 \times 10^{-3} \text{ atm} \cdot \text{m}^3/\text{mole}$ indiquent que le DMHBP est volatil. Par conséquent, s'il est rejeté uniquement dans l'air, il devrait rester dans ce milieu. Cependant, ses atomes d'oxygène étant faiblement retenus l'un à l'autre, cette substance est fortement sujette à la photolyse, alors que le K_{co} élevé lui confère une grande affinité pour les particules et l'amène à passer en partie dans le sol et les sédiments (~45 %).

S'il était rejeté à l'eau, le DMHBP serait probablement fortement adsorbé sur les solides en suspension et les sédiments en raison des valeurs très élevées du K_{co} . D'après la valeur calculée de la constante de la Loi de Henry, cette substance pourrait se volatiliser à partir des eaux de surface, mais il est prédit que cette substance, lorsque rejetée dans l'eau, se retrouvera principalement dans les sédiments.

D'après une estimation du $\log K_{co}$ d'environ 5, le DMHBP devrait être très fortement adsorbé dans le sol (c.-à-d. qu'il devrait être immobilisé) si rejeté dans ce milieu. De plus, on s'attend à ce que le DMHBP persiste dans le sol (tableau 3). La pression de vapeur et la constante de la Loi de Henry nous apprennent qu'il peut se produire une volatilisation à partir de la surface de sols secs ou humides. Cependant, à cause de sa très forte adsorptivité sur les particules du sol, le degré de volatilisation ne devrait pas être prononcé. S'il était rejeté dans le sol, le DMHBP 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 DMHBP semble y être relativement persistant, principalement dans l'eau, le sol et les sédiments. Il n'existe pas de données expérimentales sur sa persistance dans l'air, mais il devrait s'oxyder lentement, la demi-vie prédite associée à l'oxydation atmosphérique étant de 2,377 jours (EPIWIN v3.12). Il ne devrait pas réagir avec O₃ ou NO₃. Cependant, à cause de la faiblesse des liaisons entre les atomes d'oxygène, pratiquement tous les peroxydes organiques sont sensibles à la chaleur et à la photolyse. Le peroxyde de di-*tert*-butyle est structurellement similaire au DMHBP à hauteur de la liaison peroxyde et il absorbe la lumière ultraviolette jusqu'à 340 nm. Il a été démontré qu'il produisait par photolyse des radicaux tert-butoxy- à de faibles températures (HSDB, 2006). Il est donc prévu que la photolyse sera le plus important processus de dégradation du DMHBP dans l'atmosphère, donc que cette substance sera rapidement éliminée dans l'air.

Tableau 3a. Données modélisées sur la persistance du DMHBP

Milieu	Processus du devenir	Paramètre	Valeur	Modèle
Air	Oxydation atm.	Demi-vie (jours)	2,377	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	0,0388	BIOWIN v4.02 MITI Non-linear
Eau/sol	Biodégradation	Probabilité	0	TOPKAT

Tableau 3b. Données empiriques sur la persistance du DMHBP

Milieu	Processus du devenir	Paramètre	Valeur	Modèle
Eau	Biodégradation	% biodégradation	4 %	Base de données NITE

Les données empiriques sur la biodégradation (base de données NITE) montrent que, lors d'un essai de biodégradation simple mesurée par analyse CG, elle se chiffre à 4 % en 28 jours (tableau 3b). Cela signifie que la demi-vie dans l'eau et dans le sol est supérieure à 182 jours (6 mois).

Pour calculer la dégradation dans l'eau et dans le sol, 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 de ces résultats, les données calculés pour la biodégradation indiquent que le DMHBP peut être jugé persistant dans l'eau et dans le sol. À l'examen des données expérimentales et des données modélisées, la demi-vie du DMHBP 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 DMHBP serait donc supérieure à 728 jours.

D'après les prédictions des modèles présentés dans le tableau 3c, le potentiel de transport à grande distance (PTGD) du DMHBP à partir de son point de rejet dans l'air est estimé comme étant 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 3c indiquent que le DMHBP a un faible potentiel et qu'il devrait essentiellement demeurer près de ses sources d'émission.

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

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

Les données empiriques et modélisées (tableaux 3a et b) montrent que le DMHBP satisfait aux critères de la persistance (demi-vie 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 expérimentales et modélisées de $\log K_{oc}$ pour le DMHBP indiquent que dans l'environnement, cette substance pourrait être bioaccumulable (tableaux 4a et b).

Des valeurs du FBC obtenues expérimentalement chez le poisson varient entre 723 et 5 330 (base de données NITE, METI). Cela indique que le DMHBP peut se bioconcentrer dans l'environnement. Les essais sur la bioconcentration ont donné une plage étendue de FBC, au-dessus comme au-dessous de 5 000 L/kg à la concentration de la plus faible exposition de 4 µg/L. Les essais de bioaccumulation réalisés par le ministère japonais de l'Économie, du Commerce et de l'Industrie (appelé ici le METI) ont été évalués en fonction de la catégorisation, et on a jugé qu'ils étaient acceptables.

Le modèle modifié GOBAS BAF pour le niveau trophique moyen a produit un FBA de 1 778 279 L/kg (tableau 4b). Les trois autres modèles FBC confirment par le poids de la preuve le potentiel de bioconcentration de cette substance. Des valeurs similaires pour les FBC et les FBA ont été prédites dans le cas d'une substance présentant une structure similaire (le diperoxyde de di-*tert*-butyle et de 1,1,4,4-tétraméthylbut-2-yne-1,4-ylène– N° CAS 1068-27-5).

Tableau 4a. Données empiriques sur la bioaccumulation

Organisme pour essai	Concentration d'essai	Paramètre	Valeur en poids humide	Référence
Poisson	40 µg/L	FBC	1 410-4 160 L/kg	Base de données NITE
Poisson	4 µg/L	FBC	723-5 330 L/kg	Base de données NITE

Tableau 4b. Données modélisées sur la bioaccumulation

Organisme pour essai	Paramètre	Valeur en poids humide	Référence
Poisson	FBA	1 778 279 L/kg	<i>Gobas BAF T2MTL (Arnot et Gobas, 2003)</i>
Poisson	FBC	40 271 L/kg	<i>Gobas BCF T2LTL (Arnot et Gobas, 2003)</i>
Poisson	FBC	66 069 L/kg	<i>OASIS</i>
Poisson	FBC	22 233 L/kg	<i>BCFWIN v2.15</i>

Les valeurs modélisées de la bioaccumulation ne tiennent pas compte du potentiel de métabolisation de la substance. Les valeurs expérimentales du FBC confirment que les modèles donnent des prédictions prudentes et qu'en fait, le métabolisme du DMHBP peut freiner sa bioaccumulation, mais pas toujours jusqu'à un point situé sous la valeur du critère de bioaccumulation.

Le poids de la preuve indique que le DMHBP satisfait au 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 modélisée et expérimentale selon laquelle cette substance est nocive pour les organismes aquatiques à des concentrations relativement faibles (p. ex., CL50 aigüe < 1 mg/L) [tableaux 5a et b]. Un éventail de prédictions concernant la toxicité aquatique a été obtenu au moyen des divers modèles QSAR pris en considération. 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 modélisées de la toxicité aquatique

Organisme pour essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
Poisson	Tox. aiguë	CL50	2,76	PNN
Poisson	Tox. aiguë	CL50	0,042	ECOSAR
Poisson	Tox. aiguë	CL50	0,000424	ECOSAR Neutral Organic SAR

Tableau 5b Données empiriques de la toxicité aquatique

Organisme pour essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/L)	Référence
<i>Oryzias latipes</i>	Tox. aiguë	CL50 (96 h)	4,5	Base de données NITE

Il existe une bonne corrélation entre les données d'une étude sur la toxicité aiguë du DMHBP pour *Oryzias latipes* (tableau 5b) et les données modélisées (tableau 5a). Le modèle donne des valeurs un peu plus prudentes. L'étude a déterminé une CL50 de 96 h de 4,5 mg/L (base de données NITE) alors que le modèle a prédit une CL50 aiguë de 2,76 mg/L (PNN). Cette corrélation nous conforte dans l'utilisation de données modélisées pour le DMHBP et pour d'autres peroxydes de dialkyle. Les résultats de la modélisation pour les effets aigus suggèrent qu'à de faibles concentrations, le poisson est exposé à subir une forte toxicité chronique.

Ces résultats indiquent que la substance est hautement nocive pour les organismes aquatiques (i.e. CL/CE50 aigu <1.0 mg/L)

B – Dans d'autres milieux

Tableau 6 Données empiriques sur d'autres formes de toxicité

Organisme pour essai	Type d'essai	Paramètre	Valeur (mg/kg)	Référence
Rat	Tox. orale	DL50	3 200-32 000	ChemID Plus, 2006 and 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, 2006b). Les substances persistantes séjournent longtemps dans l'environnement après leur rejet, 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 passent 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 assez élevées de peroxydes de dialkyle importées au Canada et les rejets possibles lors du rinçage des contenants indiquent que le DMHBP est susceptible de pénétrer l'environnement canadien. Une fois rejeté dans l'environnement, il ira se loger dans les sédiments ou les sols, parce qu'il est hydrophobe, 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. En outre, des prévisions indiquaient qu'il exercerait une forte toxicité chronique pour le poisson. Cette information porte à croire que le DMHBP peut causer des effets écologiques néfastes au Canada.

Incertitudes

On manque de données et de renseignements sur les concentrations de DMHBP dans l'environnement canadien. Et pourtant, la quantité assez élevée de peroxydes de dialkyle importée au Canada en 2000 et celle importée et déclarée pour 2005 recèlent un potentiel de rejets dans l'environnement canadien.

On juge que la preuve d'un fort potentiel de persistance et de bioaccumulation est solide, du fait que tant les données empiriques que les estimations des modèles indiquent que le DMHBP satisfait aux 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, confirmés par les résultats d'essais de toxicité sur des organismes pélagiques, prouvent de manière convaincante que le DMHBP 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 DMHBP.

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 la répartition de la substance 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 DMHBP 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 DMHBP 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) 2003. TaPL3 v. 3.00 model. Publié en septembre 2003. Trent University, Peterborough, Ontario. www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel

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>

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. 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.

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

Environnement 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>

Fisher Scientific International Material Safety Data Sheet. 2,5-Dimethyl-2,5-di(tert-butylperoxy)hexane. 10/13/2005. <http://www.msdsolnline.com>

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).

HENRYWIN 2000. Version 1.90. 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. Droits d'auteur 2001 par 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 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

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).

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>