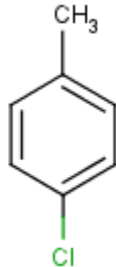


## 4-CHLOROTOLUENE – n° CAS : 106-43-4

### IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE

<b>Substance chimique</b>	4-Chlorotoluène
<b>Synonymes</b>	p-Chlorotoluène 1-Chloro-4-méthylbenzène 4-Chloro-1-méthyl-benzène p-Tolyl chloride PCT
<b>Numéro CAS</b>	106-43-4
<b>Formule moléculaire</b>	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> Cl
<b>Code SMILES</b>	c1(ccc(Cl)cc1)C
<b>Structure moléculaire</b>	

**EVALUATIONS EXISTANTES ET INFORMATIONS REGLEMENTAIRES**

<b>Evaluation existante</b>	UNEP (2006). OECD High Production Volume Chemicals Program, Screening Information Dataset for p-chlorotoluene / CAS n° 106-43-4.
<b>Phrases de risque et classification</b>	<i>Annexe I Directive 67/548/CEE (C.E., 1967)</i> Xn ; R20 N ; R51-53 <i>Annexe VI Règlement (CE) No 1272/2008 (C.E., 2008)</i> Acute Tox. 4 H332 Aquatic Chronic 2 H411
<b>Critères PBT / POP</b>	La substance ne remplit pas les critères PBT/vPvB <sup>1</sup> (C.E., 2006) ou POP <sup>2</sup> (PNUE, 2001).
<b>Effets endocriniens</b>	Le 4-chlorotoluène n'est pas cité dans la stratégie communautaire concernant les perturbateurs endocriniens (E.C., 2004) et dans le rapport d'étude de la DG ENV sur la mise à jour de la liste prioritaire des perturbateurs endocriniens à faible tonnage (Petersen <i>et al.</i> , 2007).
<b>Normes de qualité existantes</b>	<u>Union Européenne</u> <sup>3</sup> : norme de qualité (projet) pour la vie aquatique = 1 µg/L, <u>Allemagne</u> : norme de qualité pour les eaux prélevées destinées à la consommation = 1 µg/L (ETOX, 2007 <sup>4</sup> ), <u>IKSR/CIPR</u> <sup>5</sup> : objectif de qualité = 1 µg/L (fraction totale).
<b>Mesures de restriction</b>	-
<b>Substance(s) associée(s)</b>	Chlorotoluènes : 2-chlorotoluène (CAS n° : 95-49-8) (UNEP, 2004), 3-chlorotoluène (CAS n° : 108-41-8)

Dans le cadre des travaux de l'OCDE réalisés pour les substances produites à fort tonnage (programme HPVC), le 4-chlorotoluène a été évalué et le dossier SIDS<sup>6</sup> de la substance est disponible sur le site du Programme des Nations Unies pour l'Environnement (UNEP, 2006).

<sup>1</sup> Les PBT sont des substances persistantes, bioaccumulables et toxiques et les vPvB sont des substances très persistantes et très bioaccumulables. Les critères utilisés pour la classification des PBT sont ceux fixés par l'Annexe XIII du règlement n° 1907/2006 (REACH).

<sup>2</sup> Les Polluants Organiques Persistants (POP) sont des substances persistantes (aux dégradations biotiques et abiotiques), fortement liposolubles (et donc fortement bioaccumulables), et volatiles (et peuvent donc être transportées sur de longues distances et être retrouvée de façon ubiquitaire dans l'environnement). Les critères utilisés pour la classification POP sont ceux fixés par l'Annexe 5 de la Convention de Stockholm placée sous l'égide du PNUE (Programme des Nations Unies pour l'Environnement).

<sup>3</sup> Comité Scientifique consultatif pour l'examen de la Toxicité et de l'Écotoxicité des substances chimiques de la Commission Européenne.

<sup>4</sup> Les données issues de cette source (<http://webtox.uba.de/webETOX/index.do>) ne sont données qu'à titre indicatif ; elles n'ont donc pas fait l'objet d'une validation par l'INERIS.

<sup>5</sup> Commission internationale pour la protection du Rhin.

<sup>6</sup> SIDS : Screening Information Data Set. Les dossiers SIDS regroupent le minimum d'informations nécessaires à une évaluation initiale des dangers des substances chimiques existantes. Ces évaluations des dangers sont gérées par l'OCDE (Organisation de Coopération et de Développement Economiques) et font l'objet d'une évaluation collective par les états membres de l'OCDE au sein du SIAM (SIDS Initial Assessment Meeting).

La plupart des données présentées dans cette fiche sont issues de cette évaluation et n'ont donc pas fait l'objet d'une évaluation supplémentaire.

Par ailleurs, une évaluation des dangers réalisée sur un autre chlorotoluène, le 2-chlorotoluène, a également été réalisée par l'OCDE dans le cadre du programme HPV (UNEP, 2004).

## PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES

	Valeur	Source
Poids moléculaire [g/mol]	126.59	BUA, 1989
Hydrosolubilité [mg/L]	40 à 20°C	BUA, 1989
Pression de vapeur [Pa]	379 à 25°C	UNEP, 2006
Constante de Henry [Pa.m <sup>3</sup> /mol]	446.8 à 25°C (calculé) 980 à 20°C	UNEP, 2006 BUA, 1989
Log du coefficient de partage octanol-eau (log Kow)	3.33	UNEP, 2006
Coefficient de partage carbone organique-eau (Koc) [L/kg]	327-512 (mesuré)	UNEP, 2006
Constante de dissociation (pKa)	Pas d'information disponible.	

## COMPORTEMENT DANS L'ENVIRONNEMENT

### PERSISTANCE

		Source
<b>Hydrolyse</b>	L'électronégativité des atomes d'halogènes empêche d'éventuelles attaques nucléophiles par les ions hydroxydes. C'est pourquoi l'hydrolyse de ce composé n'est pas un phénomène important dans des conditions environnementales. On peut toutefois noter qu'en milieu industriel, dans des conditions extrêmes de pression et de température, une hydrolyse a déjà été observée.	BUA, 1989
<b>Photolyse</b>	Le 4-chlorotoluène n'absorbe que faiblement les rayons lumineux dans l'ultra-violet. Aucune photolyse directe n'est attendue en conditions environnementales.	UNEP, 2006
<b>Biodégradabilité</b>	Un test conduit avec un mélange des isomères « para » et « ortho » du chlorotoluène a montré que ces composés n'étaient pas biodégradables en condition aérobie. Au cours de ce test, la demande biologique en oxygène a été suivie après 5, 10 et 20 jours. Différentes concentrations de la substance test ont été étudiées (8, 24, 80 et 240 mg/L). Deux inoculum ont été testés : le premier étant un échantillon de boues activées provenant de STEP municipales et industrielles tandis que le second était une boue activée pré-adaptée. Aucune consommation d'oxygène n'a été mesurée lors des différents tests.	BUA, 1989

**DISTRIBUTION DANS L'ENVIRONNEMENT**

		Source
<b>Adsorption</b>	Les valeurs de Koc (327-512 L/kg) indiquent une adsorption modérée de la substance. <b>L'intervalle de valeurs (327-512 L/kg) est utilisé dans la détermination de la norme de qualité pour les sédiments.</b>	UNEP, 2006
<b>Volatilisation</b>	Au vu de ces résultats et de sa constante de Henry (980 Pa.m <sup>3</sup> /mol), le 4-chlorotoluène devra être considéré comme une substance volatile en solution aqueuse. Des précautions particulières seront donc à prendre lors des tests réalisés avec ce composé. Le temps de demi-vie du 4-chlorotoluène est estimé à 4 heures dans une rivière et à 5 jours dans un lac.	-  HSDB, 2002
<b>Bioaccumulation</b>	Un BCF de 73.13 a été calculé à partir du log Kow. Par ailleurs, des BCF compris entre 14-101.6 et 21.9-76.5 ont été observés expérimentalement sur <i>Cyprinus carpio</i> après 56 jours d'exposition à des concentrations de 0.3 et 0.03 mg/L respectivement. <b>La valeur maximale de 101.6 est utilisée dans la détermination des normes de qualité.</b>	Bayer Industry Services, 2004; MITI, 1992 Cité dans UNEP, 2006
<b>Transport</b>	Selon le modèle de fugacité de Mackay niveau I (US-EPA, 2000), on retrouve le 4-chlorotoluène préférentiellement dans l'air (99.67%) et dans l'eau (0.24%). Les valeurs d'entrée du modèle sont : solubilité dans l'eau 40 mg/L, pression de vapeur 379 Pa, log Kow égal à 3.33 et point de fusion à 7.5°C.	UNEP, 2006

**ECOTOXICITE ET TOXICITE****ORGANISMES AQUATIQUES**

Dans les tableaux ci-dessous, sont reportés pour chaque taxon uniquement les résultats des tests d'écotoxicité montrant la plus forte sensibilité à la substance. Toutes les données présentées ont été validées dans le cadre des travaux réalisés dans le programme HPVC de l'OCDE.

Ces résultats d'écotoxicité sont principalement exprimés sous forme de NOEC (*No Observed Effect Concentration*), concentration sans effet observé, d'EC<sub>10</sub> concentration produisant 10% d'effets et équivalente à la NOEC, ou de EC<sub>50</sub>, concentration produisant 50% d'effets. Les NOEC sont principalement rattachées à des tests chroniques, qui mesurent l'apparition d'effets sub-létaux à long terme, alors que les EC<sub>50</sub> sont plutôt utilisées pour caractériser les effets à court terme.

**ECOTOXICITE****ECOTOXICITE AQUATIQUE AIGUË**

			<b>Source</b>
<b>Algues &amp; plantes aquatiques</b>	<b>Eau douce</b>	> 0.96 mg/L <i>Scenedesmus subspicatus</i> , E <sub>r</sub> C <sub>50</sub> (72 h) (taux de croissance) Statique, concentrations mesurées	Bayer Industry Services, 2004 Cité dans UNEP, 2006
	<b>Milieu marin</b>	Pas d'information disponible.	
<b>Invertébrés</b>	<b>Eau douce</b>	1.6 mg/L <i>Ceriodaphnia dubia</i> , LC <sub>50</sub> (48 h) Statique, système clos, concentrations nominales	Rose <i>et al.</i> , 1998 Cité dans UNEP, 2006
	<b>Milieu marin</b>	Pas d'information disponible.	
	<b>Sédiment</b>	Pas d'information disponible.	
<b>Poissons</b>	<b>Eau douce</b>	5.2 mg/L <i>Oryzias latipes</i> , LC <sub>50</sub> (48 h) Renouvellement du milieu toutes les 8-16 h, concentrations nominales	MITI, 1992 Cité dans UNEP, 2006
	<b>Milieu marin</b>	Pas d'information disponible.	

**ECOTOXICITE AQUATIQUE CHRONIQUE**

			<b>Source</b>
<b>Algues &amp; plantes aquatiques</b>	<b>Eau douce</b>	0.43 mg/L <i>Scenedesmus subspicatus</i> , NOEC (72 h) (taux de croissance) Statique, concentrations mesurées	Bayer Industry Services, 2004 Cité dans UNEP, 2006
	<b>Milieu marin</b>	Pas d'information disponible.	
<b>Invertébrés</b>	<b>Eau douce</b>	0.32 mg/L <i>Daphnia magna</i> , NOEC (16 j) (taux de reproduction) Semi-statique, trois renouvellements du milieu par semaine, concentrations nominales	Hermens <i>et al.</i> , 1984 Cité dans UNEP, 2006
	<b>Milieu marin</b>	Pas d'information disponible.	
	<b>Sédiment</b>	Pas d'information disponible.	
<b>Poissons</b>	<b>Eau douce</b>	1.9 mg/L <i>Danio rerio</i> , NOEC (28 j) Semi-statique, concentrations mesurées	Van Leeuwen <i>et al.</i> , 1990 Cité dans UNEP, 2006
	<b>Milieu marin</b>	Pas d'information disponible.	

## NORMES DE QUALITE POUR LA COLONNE D'EAU

Les normes de qualité pour les organismes de la colonne d'eau sont calculées conformément aux recommandations du guide technique européen pour l'évaluation des risques dus aux substances chimiques (E.C., 2003) et au projet de guide technique européen pour la détermination des normes de qualité environnementale (E.C., 2009). Elles sont obtenues en divisant la plus faible valeur de NOEC ou d'EC<sub>50</sub> valide par un facteur d'extrapolation (AF, *Assessment Factor*).

La valeur de ce facteur d'extrapolation dépend du nombre et du type de tests pour lesquels des résultats valides sont disponibles. Les règles détaillées pour le choix des facteurs sont données dans le tableau 16, page 101, du guide technique européen (E.C., 2003).

- **Moyenne annuelle (AA-QS<sub>water\_eco</sub>) :**

Une concentration annuelle moyenne est déterminée pour protéger les organismes de la colonne d'eau d'une possible exposition prolongée.

Pour le 4-chlorotoluène, on dispose de données valides pour 3 niveaux trophiques à la fois en aigu et en chronique. En chronique, la plus basse NOEC a été observée pour *Daphnia magna*, (NOEC (16 j) à 0.32 mg/L). Un facteur d'extrapolation de 10 est donc appliqué (cf. note d du tableau 16, page 101 de E.C., 2003). On obtient donc :

$$AA-QS_{water\_eco} = 0.32 \text{ [mg/L]} / 10 = 32 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Notons que cette valeur a été validée comme PNEC<sub>aqua</sub> (concentration prédite sans effet) lors de l'évaluation de la substance par l'OCDE.

- **Concentration Maximum Acceptable (MAC) :**

La concentration maximale acceptable est calculée afin de protéger les organismes de la colonne d'eau de possibles effets de pics de concentrations de courtes durées. Pour la détermination de la MAC, le document guide pour l'évaluation des effets des substances avec des rejets intermittents est utilisée (ECHA, 2008, E.C., 2009)

On dispose de données aiguës sur les trois niveaux trophiques (algues, invertébrés, poissons), la plus faible étant celle sur *Ceriodaphnia dubia*, LC<sub>50</sub> (48 h) = 1.6 mg/L. Par défaut, un facteur d'extrapolation de 100 s'applique pour calculer la MAC. Cependant, selon le projet de document guide technique pour la détermination des normes de qualité environnementales (E.C., 2009), pour les substances qui n'ont pas de mode d'action spécifique et pour lesquelles les données disponibles montrent que la variation interspécifique est faible, le facteur peut être diminué. Pour le 4-chlorotoluène, l'écart-type des valeurs de L(E)C50 est < 2.3 et cette variation peut être considérée comme faible. En conséquence, il est proposé de d'abaisser le facteur d'extrapolation à 10.

$$MAC = 1.6/10 = 0.16 \text{ mg/L, soit } 160 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau douce)		
Moyenne annuelle [AA-QS <sub>water_eco</sub> ]	32	μg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC]	160	μg/L

**VALEUR GUIDE DE QUALITE POUR LE SEDIMENT (QS<sub>SED</sub>)**

Un seuil de qualité dans le sédiment est nécessaire (i) pour protéger les espèces benthiques et (ii) protéger les autres organismes d'un risque d'empoisonnement secondaire résultant de la consommation de proies provenant du benthos. Les principaux rôles des normes de qualité pour les sédiments sont de :

1. Identifier les sites soumis à un risque de détérioration chimique (la norme sédiment est dépassée)
2. Déclencher des études pour l'évaluation qui peuvent conduire à des études plus poussées et potentiellement à des programmes de mesures
3. Identifier des tendances à long terme de la qualité environnementale (Art. 4 Directive 2000/60/CE).

Aucune information d'écotoxicité pour les organismes benthiques n'a été trouvée dans la littérature.

A défaut, une valeur guide pour le sédiment peut être calculée à partir du modèle de l'équilibre de partage.

Ce modèle suppose que :

- il existe un équilibre entre la fraction de substances adsorbées sur les particules sédimentaires et la fraction de substances dissoutes dans l'eau interstitielle du sédiment,
- la fraction de substances adsorbées sur les particules sédimentaires n'est pas biodisponible pour les organismes et que seule la fraction de substances dissoutes dans l'eau interstitielle est susceptible d'impacter les organismes,
- la sensibilité intrinsèque des organismes benthiques aux toxiques est équivalente à celle des organismes vivant dans la colonne d'eau. Ainsi, la norme de qualité pour la colonne d'eau peut être utilisée pour définir la concentration à ne pas dépasser dans l'eau interstitielle.

*NB : La pollution actuelle peut être suivie dans les matières en suspension et les couches superficielles du sédiment. Les couches profondes intègrent la contamination historique sur des dizaines voire des centaines d'années et ne sont pas jugées pertinentes pour caractériser la pollution actuelle. Les paramètres par défaut préconisés par Lepper (2002) et le guide technique européen (E.C., 2003) ont été choisis empiriquement pour caractériser les matières en suspension et les couches superficielles. Matières en suspension et couches superficielles contiennent relativement plus d'eau et de matière organique que les couches profondes du sédiment.*

Une valeur guide de qualité pour le sédiment peut être alors calculée selon l'équation suivante (adaptation de l'équation 70 page 113 du guide technique européen, E.C., 2003) :

$$QS_{\text{sed wet weight}} [\mu\text{g/kg}] = \frac{K_{\text{susp-eau}}}{RHO_{\text{susp}}} * AA-QS_{\text{water\_eco}} [\mu\text{g/L}] * 1000$$

Avec

$RHO_{\text{susp}}$  : masse volumique de la matière en suspension en  $[\text{kg}_{\text{sed}}/\text{m}^3_{\text{sed}}]$ . En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par Lepper, 2002) et le guide technique européen (équation 18 page 44, E.C., 2003) est utilisée :  $1150 \text{ kg}/\text{m}^3$ .

$K_{\text{susp-eau}}$  : coefficient de partage matière en suspension/eau en  $\text{m}^3/\text{m}^3$ . En l'absence d'une valeur exacte, les valeurs génériques proposées par Lepper, 2002) et le guide technique européen (équation 24 page 47, E.C., 2003) sont utilisées. Le coefficient est alors calculé selon la formule suivante :  $0.9 + 0.025 * K_{\text{oc}}$  soit  $K_{\text{susp-eau}} = 9.075-13.7 \text{ m}^3/\text{m}^3$ .

Ainsi, on obtient :

$$QS_{\text{sed wet weight}} = 252.5-381.2 \mu\text{g/kg} \text{ (poids humide)}$$

La concentration correspondante en poids sec peut être estimée en tenant compte du facteur de conversion suivant :



$$RHO_{\text{susp}} \quad 1150$$

$$\text{-----} = \text{-----} = 4.6$$

$$F_{\text{solide}_{\text{susp}}} * RHO_{\text{solide}} \quad 250$$

Avec :

$F_{\text{solide}_{\text{susp}}}$  : fraction volumique en solide dans les matières en suspension en [ $m^3_{\text{solide}}/m^3_{\text{susp}}$ ]. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par Lepper (2002) et le guide technique européen (tableau 5 page 43, E.C., 2003) est utilisée :  $0.1 m^3/m^3$ .

$RHO_{\text{solide}}$  : masse volumique de la partie sèche en [ $kg_{\text{solide}}/m^3_{\text{solide}}$ ]. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par Lepper (2002) et le guide technique européen (tableau 5 page 43, E.C., 2003) est utilisée :  $2500 kg/m^3$ .

Pour le 4-chlorotoluène, la concentration correspondante en poids sec est :

$$QS_{\text{sed dry\_weight}} = QS_{\text{sed wet weight}} * 4.6 = 1161.6-1753.6 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$$

Le LogKow de la substance étant inférieur à 5, un facteur additionnel de 10 n'est pas jugé nécessaire.

Il faut rappeler que les incertitudes liées à l'application du modèle de l'équilibre de partage sont importantes. Les sédiments naturels peuvent avoir des propriétés très variables en termes de composition (nature et quantité de matières organiques, composition minéralogique), de granulométrie, de conditions physico-chimiques, de conditions dynamiques (taux de déposition/taux de resuspension). Par ailleurs ces propriétés peuvent évoluer dans le temps en fonction notamment des conditions météorologiques et de la morphologie de la masse d'eau. Si bien que le partage entre la fraction de substance adsorbée et la fraction de substance dissoute peut être extrêmement variable d'un sédiment à un autre et l'hypothèse d'un équilibre entre ces deux fractions ne semble pas très réaliste pour des conditions naturelles.

Par ailleurs, certains organismes benthiques peuvent ingérer les particules sédimentaires, et donc être contaminés par la fraction de substance adsorbée sur ces particules, ce qui n'est pas pris en compte par la méthode.

<b>Proposition de valeur guide de qualité pour les sédiments (eau douce)</b>	252	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids humide}}$
	1162	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$
<b>Conditions particulières</b>	<p>Avec un Koc mesuré compris entre 327-512 L/kg, mais toutefois un Log Kow = 3.3, la détermination d'un seuil pour le sédiment est recommandée par le projet de guide européen (E.C., 2009).</p> <p>Le seuil proposé n'est fondé que sur la méthode du coefficient de partage à l'équilibre, et calculé à partir de la norme de qualité dans l'eau et le Koc mesuré. L'incertitude de cette méthode devrait être prise en compte lors la mise en application du seuil sédiment.</p>	

## EMPOISONNEMENT SECONDAIRE

Ce chapitre traite de la toxicité chronique induite par la substance sur les prédateurs *via* la consommation d'organismes aquatiques contaminés (appelés biote, *i.e.* poissons ou invertébrés vivant dans la colonne d'eau ou dans les sédiments). Il s'agit donc d'évaluer la toxicité chronique de la substance par la voie d'exposition orale uniquement.



Dans les tableaux ci-dessous, ne sont reportés pour chaque type de test que les résultats permettant d'obtenir les NOEC ou la valeur toxicologique de référence (VTR) les plus protectrices. N'ont été recherchés que des tests sur mammifères ou oiseaux exposés par voie orale (exposition par l'alimentation ou par gavage).

Les résultats de toxicité sont généralement exprimés en quantité de substance administrée par unité de masse corporelle de l'animal testé et par jour: NOAEL (*No Observed Adverse Effect Level*), ou LOAEL (*Lowest Observed Adverse Effect Level*).

Pour calculer la norme de qualité liée à l'empoisonnement secondaire des prédateurs, il est nécessaire de connaître la concentration de substance dans le biota n'induisant pas d'effets observés pour les prédateurs (exprimée sous forme de NOEC). Il est possible de déduire une NOEC à partir d'une NOAEL grâce à des facteurs de conversion empiriques variables selon les espèces testées. Les facteurs utilisés ici sont ceux recommandés par le guide technique européen (Tableau 22, page 129, E.C., 2003) et le projet de guide technique européen pour la détermination de normes de qualité (E.C., 2009). Les valeurs de ces facteurs de conversion dépendent de la masse corporelle des animaux et de leur consommation journalière de nourriture. Celles-ci peuvent donc varier d'une façon importante selon le niveau d'activité et le métabolisme de l'animal, la valeur nutritive de sa nourriture, etc. En particulier elles peuvent être très différentes entre un animal élevé en laboratoire et un animal sauvage.

Afin de couvrir ces sources de variabilité, mais aussi pour tenir compte des autres sources de variabilité ou d'incertitude (variabilité inter et intra-espèces, extrapolation du court terme au long terme, etc.) des facteurs d'extrapolation sont nécessaires pour le calcul de la  $QS_{\text{biota\_sec}} \text{ pois}$ . Les valeurs recommandées pour ces facteurs d'extrapolation sont données dans le guide technique européen (tableau 23, page 130, E.C., 2003). Un facteur d'extrapolation supplémentaire ( $AF_{\text{dose-réponse}}$ ) est utilisé dans le cas où la toxicité a été établie à partir d'une LOAEL plutôt que d'une NOAEL.

## ECOTOXICITE POUR LES VERTEBRES TERRESTRES

Pour le 4-chlorotoluène, aucune donnée valide de toxicité orale n'est disponible. Cependant, des données sont disponibles pour un autre chlorotoluène ayant également fait l'objet d'une évaluation par l'OCDE : le 2-chlorotoluène (UNEP, 2004). Comme le 2-chlorotoluène est une substance similaire ayant des propriétés physico-chimiques proches du 4-chlorotoluène, les résultats d'essais réalisés sur 2-chlorotoluène sont présentés ci-dessous et sont utilisés pour la détermination de la norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire. Toutes les données présentées sont issues des évaluations OCDE (UNEP, 2006 ; UNEP, 2004) ; elles n'ont donc pas fait l'objet d'une validation supplémentaire.

### TOXICITE ORALE POUR LES MAMMIFERES

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg <sub>corporel</sub> /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg <sub>biota</sub> ]
<b>Toxicité sub-chronique et/ou chronique</b>	Rat 15 semaines Adm. orale Effet(s) : Augmentation du poids des glandes surrénales	NOAEL = 20	US-EPA, 1990, cité dans UNEP, 2006	10	NOEC = 200 (Essai réalisé sur le 2-chlorotoluène)
<b>Toxicité pour la reproduction</b>	Pas d'information disponible.				

## TOXICITE ORALE POUR LES OISEAUX

	Type de test	NOAEL/LOAEL	Source	Facteur de conversion	NOEC
<b>Toxicité sub-chronique et/ou chronique</b>	Pas d'information disponible.				
<b>Toxicité pour la reproduction</b>	Pas d'information disponible.				

**NORME DE QUALITE EMPOISONNEMENT SECONDAIRE (QS<sub>BIOTA\_SEC POIS</sub>)**

La norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire (QS<sub>biota\_sec pois</sub>) est calculée conformément aux recommandations du guide technique européen (E.C., 2003). Elle est obtenue en divisant la plus faible valeur de NOEC valide par les facteurs d'extrapolation recommandés dans le tableau 23 page 130 du guide (E.C., 2003).

Comme indiqué ci-dessus, en l'absence de donnée valide de toxicité orale sur le 4-chlorotoluène, les données obtenues avec le 2-chlorotoluène sont utilisées pour la détermination de la norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire des prédateurs. Un facteur de 90 est appliqué car la durée du test retenu (NOAEL à 20 mg/kg<sub>corporel</sub>/j sur rat, soit une NOEC de 200 mg/kg<sub>biota</sub>) est de 15 semaines. Cette durée de test est insuffisante pour pouvoir appliquer un facteur 30. On obtient donc :

$$QS_{biota\_sec\ pois} = 200 \text{ mg/kg}_{biota} / 90 = 2222 \text{ } \mu\text{g/kg}_{biota}$$

Cette valeur de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire peut être ramenée à une concentration dans l'eau selon la formule suivante :

$$QS_{water\ sp} [\mu\text{g/L}] = \frac{PNEC_{sec\ pois\ dans\ biota} [\mu\text{g/kg}_{biota}]}{BCF [L/kg_{biota}] * BMF}$$

Avec :

BCF : facteur de bioconcentration,

BMF : facteur de biomagnification.

Ce calcul tient compte du fait que la substance présente dans l'eau du milieu peut se bioaccumuler dans le biota. Il donne la concentration à ne pas dépasser dans l'eau afin de respecter la valeur de la PNEC pour l'empoisonnement secondaire déterminée dans le biota.

La bioaccumulation tient compte à la fois du facteur de bioconcentration (BCF, ratio entre la concentration dans le biota et la concentration dans l'eau) et du facteur de biomagnification (BMF, ratio entre la concentration dans l'organisme du prédateur en bout de chaîne alimentaire, et la concentration dans l'organisme de la proie au début de la chaîne alimentaire). En l'absence de valeurs mesurées pour le BMF, celles-ci peuvent être estimées à partir du BCF selon le tableau 29, page 160, du guide technique européen (E.C., 2003).

Ce calcul n'est donné qu'à titre indicatif. Il fait en effet l'hypothèse qu'un équilibre a été atteint entre l'eau et le biota, ce qui n'est pas véritablement réaliste dans les conditions du milieu naturel. Par ailleurs il repose sur un facteur de bioaccumulation qui peut varier de façon importante entre les espèces considérées.

Pour le 4-chlorotoluène, un BCF de 101.6 (valeur maximale) sur *Cyprinus carpio* (MITI, 1992) et un BMF de 1 (cf. E.C., 2003) ont été retenus. On a donc :

$$QS_{\text{water sp}} = 2222 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] / (101.6 \cdot 1) = 21.87 \mu\text{g}/\text{L}$$

<b>Proposition de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire des prédateurs</b>	2222	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$
valeur correspondante dans l'eau	22	$\mu\text{g}/\text{L}$

## SANTE HUMAINE

Ce chapitre traite de la toxicité chronique induite par la substance sur l'homme soit *via* la consommation d'organismes aquatiques contaminés, soit *via* l'eau de boisson.

Dans les tableaux ci-dessous, ne sont reportés pour chaque type de test que les résultats permettant d'obtenir les NOEC ou la valeur toxicologique de référence (VTR) les plus protectrices. Compte tenu du mode d'exposition envisagée, seuls les tests sur mammifères exposés par voie orale (dans l'alimentation ou par gavage) ont été recherchés.

Toutes les données présentées ont été validées.

Les résultats de toxicité sont principalement donnés sous forme de doses journalières : NOAEL (*No Observed Adverse Effect Level*), ou LOAEL (*Lowest Observed Adverse Effect Level*). NOAEL et LOAEL sont exprimées en termes de quantité de substance administrée par unité de masse corporelle de l'animal testé, et par jour.

## TOXICITE

Pour l'évaluation des effets sur la santé humaine, seuls les résultats sur mammifères sont considérés comme pertinents. Contrairement à l'évaluation des effets pour les prédateurs, les effets de type cancérogène ou mutagène sont également pris en compte.

Pour le 4-chlorotoluène, aucune donnée valide de toxicité orale n'est disponible. Or, le 2-chlorotoluène présente des propriétés physico-chimiques et un comportement dans l'environnement similaire au 4-chlorotoluène. C'est pourquoi, les résultats de toxicité du 2-chlorotoluène sont utilisés pour la détermination des normes de qualité pour la santé humaine et pour l'eau destinée à l'eau potable.

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg <sub>corporel</sub> /j]	Source	Valeur toxicologique de référence (VTR) [mg/kg <sub>corporel</sub> /j]
<b>Toxicité sub-chronique et/ou chronique</b>	Rat 15 semaines Adm. orale Effet(s) : Augmentation du poids des glandes surrénales.	NOAEL = 20	US-EPA, 1990 cité dans UNEP, 2006	$2.10^{-2(1)}$ Facteur d'incertitude: 1000 Avec : AF inter-espèces = 10 AF intra-espèces = 10 AF durée de l'exposition = 10 (Essai réalisé sur le 2-chlorotoluène)
<b>Toxicité pour la reproduction</b>	Pas d'information disponible.			

(1) Cette VTR a été déterminée par l'US-EPA.

	Classement CMR	Source
<b>Cancérogène</b>	La substance est inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008 mais ne fait pas l'objet d'un classement pour la cancérogénèse	C.E., 2008
<b>Mutagène</b>	<i>In vitro</i> et <i>in vivo</i> , le 4-chlorotoluène ne présente pas de pouvoir mutagène.	UNEP, 2006
	La substance est inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008 mais ne fait pas l'objet d'un classement pour la mutagénèse.	C.E., 2008
<b>Toxicité pour la reproduction</b>	La substance est inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008 mais ne fait pas l'objet d'un classement pour la reproduction.	C.E., 2008

## NORME DE QUALITE POUR LA SANTE HUMAINE VIA LA CONSOMMATION DES PRODUITS DE LA PECHE (QS<sub>BIOTA\_HH</sub>)

La norme de qualité pour la santé humaine est calculée de la façon suivante (Lepper, 2005) :

$$QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * VTR [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * \text{poids corporel} [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{\text{Cons. Journ. Moy.} [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]}$$

Ce calcul tient compte de :

- un facteur correctif de 10% (soit 0.1) : la VTR donnée ne tient compte en effet que d'une exposition par voie orale, et pour la consommation de produits de la pêche uniquement. Mais la contamination peut aussi se faire par la consommation d'autres sources de nourriture, par la consommation d'eau, et d'autres voies d'exposition sont possibles (inhalation ou contact cutané). Le facteur correctif de 10% (soit 0.1) permet de rendre l'objectif de qualité plus sévère d'un facteur 10 afin de tenir compte de ces autres sources de contamination possibles.
- la valeur toxicologique de référence (VTR), correspondant à une dose totale admissible par jour ; pour cette substance elle sera considérée égale à  $2.10^{-2} \text{ mg}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}$  (cf. tableau ci-dessus),
- un poids corporel moyen de 70 kg,
- Cons. Journ. Moy : une consommation journalière moyenne de produits de la pêche (poissons, mollusques, crustacés) égale à 115 g par jour.

Ce calcul n'est donné qu'à titre indicatif. Il peut être inadapté pour couvrir les risques pour les individus plus sensibles ou plus vulnérables (masse corporelle plus faible, forte consommation de produits de la pêche, voies d'exposition individuelles particulières). Le facteur correctif de 10% n'est donné que par défaut, car la contribution des différentes voies d'exposition varie selon les propriétés de la substance (et en particulier sa distribution entre les différents compartiments de l'environnement), ainsi que selon les populations considérées (travailleurs exposés, exposition pour les consommateurs/utilisateurs, exposition via l'environnement uniquement). L'hypothèse cependant que la consommation des produits de la pêche ne représente pas plus de 10% des apports journalier contribuant à la dose journalière tolérable apporte une certaine marge de sécurité (E.C., 2009).

Pour le 4-chlorotoluène, le calcul aboutit à :

$$QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * 20 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{0.115 [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} = 1217.39 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$$

4-CHLOROTOLUENE – n° CAS : 106-43-4

Comme pour l'empoisonnement secondaire, la concentration correspondante dans l'eau du milieu peut être estimée en tenant compte de la bioaccumulation de la substance :

$$QS_{\text{water\_hh food}} [\mu\text{g/L}] = \frac{QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}]}{\text{BCF} [\text{L/kg}_{\text{biota}}] * \text{BMF}}$$

Pour le 4-chlorotoluène, on obtient donc :

$$QS_{\text{water\_hh food}} = 1217.39 / (101.6 * 1) = 11.98 \mu\text{g/L}$$

<b>Proposition de norme de qualité pour la santé humaine via la consommation de produits de la pêche</b>	1217	$\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$
Valeur correspondante dans l'eau	12	$\mu\text{g/L}$

**NORME DE QUALITE POUR LA SANTE HUMAINE VIA L'EAU DE BOISSON (QS<sub>DW\_HH</sub>)**

La norme de qualité pour l'eau de boisson est calculée de la façon suivante (Lepper, 2005):

$$QS_{\text{eau brute}} [\mu\text{g/L}] = \frac{0.1 * \text{VTR} [\mu\text{g/kg}_{\text{corporel/j}}] * \text{poids corporel} [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{\text{Cons.moy.eau} [\text{L/j}]}$$

Ce calcul tient compte de :

- la valeur toxicologique de référence (VTR); pour le 4-chlorotoluène, aucune donnée valide de toxicité orale n'est disponible. C'est pourquoi la VTR (20  $\mu\text{g/kg}_{\text{corporel/j}}$  (cf. tableau ci-dessus)) déterminée pour le 2-chlorotoluène est utilisée,
- Cons.moy.eau [L/j] : une consommation d'eau moyenne de 2 L par jour,
- un poids corporel moyen de 70 kg,
- un facteur correctif de 10% (soit 0.1) afin de tenir compte de ces autres sources de contamination possibles.

L'eau de boisson est obtenue à partir de l'eau brute du milieu après traitement pour la rendre potable. La fraction éliminée lors du traitement dépend de la technologie utilisée ainsi que des propriétés de la substance.

$$QS_{\text{dw\_hh}} [\mu\text{g/L}] = \frac{QS_{\text{eau brute}} [\mu\text{g/L}]}{1 - \text{fraction éliminée}}$$

En l'absence d'information, on considèrera que la fraction éliminée est nulle et le critère pour l'eau de boisson s'appliquera alors à l'eau brute du milieu. Par ailleurs, on rappellera que ce calcul n'est donné qu'à titre indicatif et peut s'avérer inadéquat pour certaines substances et certaines populations.

Pour le 4-chlorotoluène, on obtient :

$$QS_{\text{dw\_hh}} = \frac{0.1 * 20 * 70}{2 * (1 - 0)} = 70 \mu\text{g/L}$$

<b>Proposition de norme de qualité pour l'eau destinée à l'eau potable</b>	70	$\mu\text{g/L}$
--	----	-----------------

**PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE (NQE)**

La NQE est définie à partir de la valeur de la norme de qualité la plus protectrice parmi tous les compartiments étudiés.

		Valeur	Unité
<b>PROPOSITION DE NORMES DE QUALITE</b>			
Organismes aquatiques (eau douce) moyenne annuelle	AA-QS <sub>water_eco</sub>	32	µg/L
Organismes aquatiques (eau douce) Concentration Maximum Acceptable	MAC	160	µg/L
Empoisonnement secondaire des prédateurs valeur correspondante dans l'eau	QS <sub>biota sec pois</sub>	2222	µg/kg <sub>biota</sub>
	QS <sub>water_sp</sub>	22	µg/L
Santé humaine via la consommation de produits de la pêche valeur correspondante dans l'eau	QS <sub>biota hh</sub>	1217	µg/kg <sub>biota</sub>
	QS <sub>water hh food</sub>	12	µg/L
Santé humaine via l'eau destinée à l'eau potable	QS <sub>dw_hh</sub>	70	µg/L

Pour le 4-chlorotoluène, la norme de qualité pour la santé humaine via la consommation des produits de la pêche (établie à partir des résultats d'essais pour le 2-chlorotoluène) est la valeur la plus faible pour l'ensemble des approches considérées. La proposition NQE du 4-chlorotoluène est donc la suivante :

<b>PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE</b>		
<b>Moyenne Annuelle dans l'eau :</b>	<b>NQE<sub>EAU</sub> =</b>	<b>12 µg/L</b>
<b>fondée sur la proposition norme de qualité pour la protection de la santé humaine via la consommation de produits de la pêche :</b>	<b>NQE<sub>BIOTE</sub> =</b>	<b>1217 µg/kg<sub>biota</sub></b>
<b>Concentration Maximale Acceptable dans l'eau :</b>	<b>MAC =</b>	<b>160 µg/L</b>

**VALEURS GUIDES POUR LE SEDIMENT**

Avec un Koc mesuré compris entre 327-512 L/kg, mais toutefois un Log Kow = 3.3, la détermination d'un seuil pour le sédiment est recommandée par le projet de guide européen (E.C., 2009).

Le seuil proposé n'est fondé que sur la méthode du coefficient de partage à l'équilibre, et calculé à partir de la norme de qualité dans l'eau et le Koc mesuré. L'incertitude de cette méthode devrait être prise en compte lors la mise en application du seuil sédiment.

	QS <sub>sed</sub>		
<b>Sédiments (eau douce)</b>		<b>252</b>	<b>µg/kg<sub>sed</sub> poids humide</b>
		<b>1162</b>	<b>µg/kg<sub>sed</sub> poids sec</b>



## **BIBLIOGRAPHIE**

- Bayer Industry Services (2004). Alga, growth inhibition test. Unpublished report n°1298 A/04 Al.
- BUA (1989). BUA report 38 - Chlorotoluenes (Methylchlorobenzenes), GDCh-Advisory Committee on Existing Chemicals of Environmental Relevance.
- C.E. (1967). Directive 67/548/CEE du Conseil, du 27 juin 1967, concernant le rapprochement des dispositions législatives, réglementaires et administratives relatives à la classification, l'emballage et l'étiquetage des substances dangereuses. Journal officiel n° 196 du 16/08/1967 p. 0001 - 0098.
- C.E. (2006). Règlement (CE) n°1907/2006 du Parlement européen et du Conseil du 18 décembre 2006 concernant l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances (REACH), instituant une agence européenne des produits chimiques, modifiant la directive 1999/45/CE et abrogeant le règlement (CEE) n° 793/93 du Conseil et le règlement (CE) n°1488/94 de la Commission ainsi que la directive 76/769/CEE du Conseil et les directives 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE et 2000/21/CE de la Commission, JO L 396 du 30.12.2006: p. 1–849.
- C.E. (2008). Règlement (CE) no 1272/2008 du Parlement européen et du Conseil du 16 décembre 2008 relatif à la classification, à l'étiquetage et à l'emballage des substances et des mélanges, modifiant et abrogeant les directives 67/548/CEE et 1999/45/CE et modifiant le règlement (CE) no 1907/2006.
- E.C. (2003). Technical Guidance Document on Risk Assessment in support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) N° 1488/94 on Risk Assessment for existing substances, Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market. Luxembourg, Office for Official Publications of the European Communities.
- E.C. (2004). Commission staff working document on implementation of the Community Strategy for Endocrine Disrupters - a range of substances suspected of interfering with the hormone systems of humans and wildlife (COM(1999) 706)). SEC(2004) 1372., European Commission.
- E.C. (2009). Draft Technical Guidance Document for deriving Environmental Quality Standards (July 2009 version). Not yet published.
- ECHA (2008). Chapter R.10: Characterisation of dose [concentration]-response for environment. Guidance on information requirements and chemical safety assessment., European Chemicals Agency: 65.
- ETOX. (2007). "Datenbank für ökotoxikologische Wirkungsdaten und Qualitätsziele." from <http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>.
- Hermens, J., H. Canton, *et al.* (1984). "Quantitative structure-activity relationships and toxicity studies of mixtures of chemicals with anaesthetic potency : acute lethal and sublethal toxicity to *Daphnia magna*." Aquat. Toxicol. **5**: 143-154.
- HSDB. (2002). "Hazardous Substances Data Bank." from <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>.
- Lepper, P. (2002). Towards the derivation of quality standards for priority substances in the context of the water framework directive., Fraunhofer-Institute Molecular Biology and Applied Ecology.
- Lepper, P. (2005). Manual on the Methodological Framework to Derive Environmental Quality Standards for Priority Substances in accordance with Article 16 of the Water Framework Directive (2000/60/EC). Schmallenberg, Germany., Fraunhofer-Institute Molecular Biology and Applied Ecology.
- MITI (1992). Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the Chemical Substances Control Law (CSCL). Japan, Chemicals Inspection and Testing Institute (CITI) from the Ministry of International Trade and Industry.
- Petersen, G., D. Rasmussen, *et al.* (2007). Study on enhancing the Endocrine Disrupter priority list with a focus on low production volume chemicals, DHI: 252.



PNUE (2001). Convention de Stockholm sur les Polluants Organiques Persistants: pp 47.

Rose, R. M., M. S. J. Warne, *et al.* (1998). "Quantitative Structure-Activity Relationships and Volume Fraction Analysis for Nonpolar Narcotic Chemicals to the Australian Cladoceran *Ceriodaphnia*." Arch.Environ.Contam.Toxicol. **34**(3): 248-252.

UNEP (2004). OECD High Production Volume Chemicals Program, Screening Information Dataset for 2-chlorotoluene / CAS n°95-49-8.

UNEP (2006). OECD High Production Volume Chemicals Program, Screening Information Dataset for p-chlorotoluene / CAS n° 106-43-4: 154 p.

US-EPA. (1990). "Integrated Risk Information System (IRIS)." from <http://www.epa.gov/iris/>.

US-EPA (2000). EPI Suite, EPA's office of pollution prevention toxics and Syracuse Research Corporation (SRC).

Van Leeuwen, C. J., D. M. M. Adema, *et al.* (1990). "Quantitative structure-activity relationships for fish early life stage toxicity." Aquatic Toxicol. **16**: 321-334.