

CHLOROBENZÈNE— n° CAS : 108-90-7

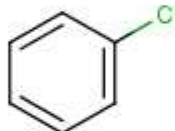
Le chlorobenzène est obtenu en mélange avec du dichlorobenzène et d'autres produits chimiquement voisins, par chloration du benzène en présence d'un catalyseur (chlorure ferrique, stannique ou alumineux). Il est ensuite extrait par distillation et cristallisation.

Le chlorobenzène est ou a été utilisé comme solvant dans les peintures, teintures adhésifs, cires, produits pharmaceutiques et le caoutchouc naturel.

Il est d'autre part utilisé comme intermédiaire dans la fabrication du phénol et de composés organiques halogénés retrouvés dans certains pesticides et insecticides.

Enfin, il est ou été également employé comme fluide diélectrique et fluide de transfert de chaleur.

IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE

Substance chimique	Chlorobenzène
Synonymes	Chlorure de phényle Monochlorobenzène Benzène chloride Benzène chloro Phenyl chloride
Numéro CAS	108-90-7
Formule moléculaire	C ₆ H ₅ Cl
Code SMILES	c1(ccccc1)Cl
Structure moléculaire	

EVALUATIONS EXISTANTES ET INFORMATIONS REGLEMENTAIRES

Evaluation existante	-
Phrases de risque et classification	<p><i>Annexe I Directive 67/548/CEE (C.E., 1967)</i> R10 Xn ; R20 N ; R51-53</p> <p><i>Annexe VI Règlement (CE) No 1272/2008 (C.E., 2008)</i> Flam. Liq. 3 H226 Acute Tox. 4 H332 Aquatic Chronic 2 H411</p>
Critères PBT /POP	La substance ne remplit pas les critères PBT/vPvB ¹ (C.E., 2006) ou POP ² (PNUE, 2001).
Effets endocriniens	Le chlorobenzène n'est pas cité dans la stratégie communautaire concernant les perturbateurs endocriniens (E.C., 2004a) 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).
Normes de qualité existantes	<p><u>Canada</u> : Critère de qualité pour les organismes aquatiques, eau douce = 1.3 µg/L (ETOX, 2007³)</p> <p><u>Allemagne</u> : Norme de qualité pour les eaux prélevées destinées à la consommation = 1 µg/L (ETOX, 2007³)</p> <p><u>Etats-Unis</u> : Critère de qualité pour la consommation d'eau et de poisson = 680 µg/L (ETOX, 2007³)</p> <p><u>Etats-Unis</u> : Critère de qualité pour la consommation de poisson et la protection de la santé = 21 000 µg/L (ETOX, 2007³)</p>
Mesure de restriction	-
Substance(s) associée(s)	-

¹ 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).

² 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).

³ Les données issues de cette source (<http://webetox.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.

PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES

	Valeurs	Source
Poids moléculaire [g/mol]	112.56	ATSDR, 1990
Hydrosolubilité [mg/L]	442 à 20/25 °C	ATSDR, 1990
Pression de vapeur [Pa]	1171 1580 à 25 °C	ATSDR, 1990 Verschueren, 2001
Constante de Henry [Pa.m ³ /mol]	345 à 20°C 315 à 25°C	Hempfling <i>et al.</i> , 1997 ; HSDB, 2011
Log du coefficient de partage Octanol-eau (log K _{ow})	2.85	ATSDR, 1990
Coefficient d'adsorption (carbone organique (K _{oc}) [L/kg])	224	US-EPA, 1996
Constante de dissociation (pKa)	Pas d'information disponible.	

COMPORTEMENT DANS L'ENVIRONNEMENT**PERSISTANCE**

		Source
Hydrolyse	Le chlorobenzène ne subit probablement aucune hydrolyse en raison de l'absence de groupes fonctionnels hydrolysables.	Lyman <i>et al.</i> , 1990
Photolyse	Pas d'information disponible.	
Biodégradabilité	Certains essais standards ont montré que la substance n'était pas facilement biodégradable, notamment : - 15 % après 28 jours (méthode OCDE 301C) - 27 % après 63 jours (méthode OCDE 301B) - 0 % après 28 jours (méthode OCDE 301C) D'autres essais ont démontré que le chlorobenzène est probablement dégradé de façon inhérente.	IUCLID, 1996 MITI, 1992 Rittman <i>et al.</i> , 1980 ; Freitag <i>et al.</i> , 1984

DISTRIBUTION DANS L'ENVIRONNEMENT

		Source
Adsorption	La valeur de Koc du chlorobenzène (224 L/kg) est faible. Le chlorobenzène n'a donc pas tendance à s'adsorber sur les sédiments ou les particules en suspension dans l'eau.	-
Volatilisation	D'après la valeur de la constante de Henry, le chlorobenzène peut être considéré comme volatil.	-
Bioaccumulation/ Biomagnification	<p>Les facteurs de bioconcentration dans les organismes aquatiques ont été calculés, et varient de 0.25 à 450 selon les espèces concernées.</p> <p>Chez la carpe (<i>Cyprinus carpio</i>), des BCF de 4.3 à 40, et de 3.9 à 23 ont été déterminés après 8 semaines pour des concentrations aquatiques de 0.15 et 0.015 mg/L respectivement.</p> <p>Plusieurs résultats d'essais de bioaccumulation chez le poisson sont disponibles :</p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>Lepomis macrochirus</i> (14 jours) BCF = 41, - <i>Pimephales promelas</i> (28 jours) BCF = 447, <p>Un BCF de 447 est utilisé dans la détermination des normes de qualité ce qui correspond à un BMF₁ de 1 auquel s'ajoute pour les organismes marins un BMF₂ de 1.</p>	<p>MITI, 1992</p> <p>IUCLID, 1996 Veith <i>et al.</i>, 1979</p>

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 par l'INERIS.

Ces résultats d'écotoxicité sont principalement exprimés sous forme de NOEC (*No Observed Effect Concentration*), concentration sans effet observé, d'EC₁₀, concentration produisant 10% d'effets et équivalente à la NOEC, ou de EC₅₀, 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 EC₅₀ sont plutôt utilisées pour caractériser les effets à court terme.

ECOTOXICITE**ECOTOXICITE AQUATIQUE AIGUË**

			Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	12.5 mg/L <i>Selenastrum capricornutum</i> , EC ₅₀ (96 h)	Calamari <i>et al.</i> , 1983
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
Invertébrés	Eau douce	4.3 mg/L <i>Daphnia magna</i> , EC ₅₀ (24 h)	Calamari <i>et al.</i> , 1983
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
	Sédiment	Pas d'information disponible.	
Poissons	Eau douce	4.7 mg/L <i>Oncorhynchus mykiss</i> , LC ₅₀ (96 h)	Dalich <i>et al.</i> , 1982
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	

ECOTOXICITE AQUATIQUE CHRONIQUE

			Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	<6.8 mg/L <i>Selenastrum capricornutum</i> , NOEC (96 h)	Calamari <i>et al.</i> , 1983
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
Invertébrés	Eau douce	0.32 mg/L <i>Daphnia magna</i> , NOEC (16 j), croissance	DeWolf <i>et al.</i> , 1988
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
	Sédiment	Pas d'information disponible.	
Poissons	Eau douce	2.9 mg/L <i>Oncorhynchus mykiss</i> , NOEC (30 j)	Dalich <i>et al.</i> , 1982
	Milieu marin	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 projet de guide technique européen pour la détermination des normes de qualité environnementale (E.C., 2010). Elles sont obtenues en divisant la plus faible valeur de NOEC ou d'EC50 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 guide technique européen (E.C., 2010).

En ce qui concerne les organismes marins, selon le projet de document guide technique pour la détermination de normes de qualité environnementale (E.C., 2010), la sensibilité des espèces marines à la

toxicité des substances organiques peut être considérée comme équivalente à celle des espèces dulçaquicoles, à moins qu'une différence ne soit montrée.

Néanmoins, le facteur d'extrapolation appliqué pour déterminer la AA-QS_{marine_eco} doit prendre en compte les incertitudes additionnelles telles que la sous-représentation de taxons clefs et une diversité d'espèces plus complexe en milieu marin.

• **Moyenne annuelle (AA-QS_{water_eco} et AA-QS_{marine_eco}) :**

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

Pour le chlorobenzène, on dispose de données valides pour 3 niveaux trophiques à la fois en aigu et en chronique. En aigu comme en chronique ce sont les invertébrés les plus sensibles. 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 (E.C., 2010). On obtient donc :

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

En ce qui concerne les organismes marins, aucun essai n'est disponible. Le jeu de données disponible ne permet pas de montrer une différence de sensibilité. En l'absence de taxon additionnel (mollusque, échinodermes, ...) le facteur appliqué est de 100 conformément au guide technique européen (E.C., 2010) :

$$AA-QS_{marine_eco} = 0.32 \text{ [mg/L]} / 100 = 3.2 \text{ } \mu\text{g/L}$$

• **Concentration Maximum Acceptable (MAC et MAC_{marine})**

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 (E.C., 2010).

On dispose de données aiguës sur les trois niveaux trophiques (algues, invertébrés, poissons), la plus faible étant celle sur *Daphnia magna*, EC₅₀ (24 h) = 4.3 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., 2010), 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 chlorobenzène, l'écart-type des valeurs de L(E)C₅₀ est < 5 et cette variation peut être considérée comme faible. En conséquence, il est proposé d'abaisser le facteur d'extrapolation à 10.

$$MAC = 4.3/10 = 0.43 \text{ mg/L, soit } 430 \text{ } \mu\text{g/L}$$

$$MAC_{marine} = 4.3/100 = 0.043 \text{ mg/L, soit } 43 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau douce)		
Moyenne annuelle [AA-QS_{water_eco}]	32	µg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC]	430	µg/L
Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau marine		
Moyenne annuelle [AA-QS_{marine_eco}]	3.2	µg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC_{marine}]	43	µg/L

VALEUR GUIDE DE QUALITE POUR LE SEDIMENT (QS_{SED} ET QS_{SED-MARIN})

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.

Une valeur guide de qualité pour le sédiment peut être alors calculée selon l'équation suivante (E.C., 2010) :

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

Avec :

RHO_{sed} : masse volumique du sédiment en $[\text{kg}_{\text{sed}}/\text{m}^3_{\text{sed}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le guide technique européen (E.C., 2010) est utilisée : $1300 \text{ kg}/\text{m}^3$.

$K_{\text{sed-eau}}$: coefficient de partage sédiment/eau en m^3/m^3 . En l'absence d'une valeur exacte, les valeurs génériques proposées par le guide technique européen (E.C., 2010) sont utilisées. Le coefficient est alors calculé selon la formule suivante : $0.8 + 0.025 * K_{\text{oc}}$ soit $K_{\text{susp-eau}} = 6.4 \text{ m}^3/\text{m}^3$.

Ainsi, on obtient :

$$QS_{\text{sed wet weight}} [\mu\text{g/kg}] = \frac{6.4}{1300} * 32 * 1000$$

$$QS_{\text{sed wet weight}} = 157.54 \mu\text{g/kg} \text{ (poids humide)}$$

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

$$\frac{RHO_{\text{sed}}}{F_{\text{solide}_{\text{sed}}} * RHO_{\text{solide}}} = \frac{1300}{500} = 2.6$$

Avec :

CHLOROBENZENE- n°CAS : 108-90-7

$F_{\text{solide}_{\text{sed}}}$: fraction volumique en solide dans les sédiments en $[\text{m}^3_{\text{solide}}/\text{m}^3_{\text{susp}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le guide technique européen (E.C., 2010) est utilisée : $0.2 \text{ m}^3/\text{m}^3$.

RHO_{solide} : masse volumique de la partie sèche en $[\text{kg}_{\text{solide}}/\text{m}^3_{\text{solide}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le guide technique européen (E.C., 2010) est utilisée : $2500 \text{ kg}/\text{m}^3$.

Pour le chlorobenzène, la concentration correspondante en poids sec est :

$$QS_{\text{sed dry_weight}} = 157.54 * 2.6 = 409.6 \text{ } \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$$

Selon la même approche que pour le sédiment d'eau douce, une valeur guide de qualité pour le sédiment marin peut être calculée selon la formule suivante :

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

$$QS_{\text{sed-marin wet weight}} = 15.75 \text{ } \mu\text{g}/\text{kg} \text{ (poids humide)}$$

La concentration correspondante en poids sec est alors la suivante :

$$QS_{\text{sed-marin dry_weight}} = 40.95 \text{ } \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$$

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 substances 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.

Proposition de valeur guide de qualité pour les sédiments (eau douce)	158	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids humide}}$
	410	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$
Proposition de valeur guide de qualité pour les sédiments (eau marine)	16	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids humide}}$
	41	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$
Conditions particulières	Avec un Koc de 224 L/kg et un Log Kow = 2.85, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée par le projet de guide européen (E.C., 2010).	

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). Toutes les données présentées ont été validées puisqu'elles sont issues d'une source fiable.

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.

Pour calculer la norme de qualité liée à l'empoisonnement secondaire des prédateurs, il est nécessaire de connaître la concentration de substance dans le biote 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 projet de guide technique européen pour la détermination de normes de qualité (E.C., 2010). 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 $QS_{\text{biota_sec\ pois}}$. Les valeurs recommandées pour ces facteurs d'extrapolation sont données dans le guide technique européen (E.C., 2010). 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

TOXICITE ORALE POUR LES MAMMIFERES

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Chiens beagle mâles et femelles. 13 semaines. Administration orale (capsules) 5 j/semaine. Effet : changement histopathologique du foie.	NOAEL = 27.25 NOAEL _{ajustée} = 19 pour passer à une administration sur 7 jours par semaine.	Monsanto Company, 1967	40	760

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
	Souris 13 semaines Administration orale. Effet : nécroses thymiques, déplétions lymphoïdes et myéloïdes de la moelle osseuse, de la rate et du thymus.	LOAEL= 250 NOAEL _{corr} ⁽¹⁾ = 25 (AF _{dose-réponse} = 10)	NTP, 1985	8.3	207.5
Toxicité sur la reproduction	Pas d'information disponible.				

(1) La NOAEL_{corr} correspond à la NOAEL déduite à partir de la LOAEL disponible.

TOXICITE ORALE POUR LES OISEAUX

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Pas d'information disponible.				
Toxicité pour la reproduction	Pas d'information disponible.				

NORME DE QUALITE EMPOISONNEMENT SECONDAIRE (QS_{BIOTA_SEC POIS})

La norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire (QS_{biota_sec pois}) est calculée conformément aux recommandations du guide technique européen (E.C., 2010). Elle est obtenue en divisant la plus faible valeur de NOEC valide par les facteurs d'extrapolation recommandés (E.C., 2010).

Pour le chlorobenzène, un facteur de 90 est appliqué car la durée du test retenu (NOAEL à 25 mg/kg_{corporel}/j sur le rat, soit une NOEC de 207.5 mg/kg_{biota}) est de 13 semaines. On obtient donc :

$$QS_{biota_sec\ pois} = 207.5 \text{ [mg/kg}_{biota}] / 90 = 2.30 \text{ mg/kg}_{biota} = 2300 \text{ }\mu\text{g/kg}_{biota}$$

Cette valeur de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire peut être ramenée :

- à une concentration dans l'eau selon la formule suivante :

$$QS_{water\ sp} \text{ [}\mu\text{g/L]} = \frac{QS_{biota_sec\ pois} \text{ [}\mu\text{g/kg}_{biota}]}{BCF \text{ [L/kg}_{biota}] * BMF_1}$$

- à une concentration dans l'eau marine selon la formule suivante :

$$QS_{marin\ sp} \text{ [}\mu\text{g/L]} = \frac{QS_{biota_sec\ pois} \text{ [}\mu\text{g/kg}_{biota}]}{BCF \text{ [L/kg}_{biota}] * BMF_1 * BMF_2}$$

Avec :

BCF : facteur de bioconcentration,

BMF₁ : facteur de biomagnification,

BMF₂ : facteur de biomagnification additionnel pour les organismes marins.

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

La bioaccumulation tient compte à la fois du facteur de bioconcentration (BCF, ratio entre la concentration dans le biote 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 BMF₁ et le BMF₂, celles-ci peuvent être estimées à partir du BCF selon le guide technique européen (E.C., 2010).

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 biote, 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 chlorobenzène, un BCF de 447 (sur *Pimephales promelas*, Veith *et al.* (1979)) et un BMF₁ = BMF₂ de 1 (cf. E.C., 2010) ont été retenus. On a donc :

$$QS_{\text{water sp}} = 2300 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] / (447 * 1) = 5.15 \mu\text{g}/\text{L}$$

$$QS_{\text{marin sp}} = 2300 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] / (447 * 1 * 1) = 5.15 \mu\text{g}/\text{L}$$

Proposition de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire des prédateurs	2300	μg/kg _{biota}
valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	5	μg/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 cancérigène ou mutagène sont également pris en compte.

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Valeur toxicologique de référence (VTR) [mg/kg _{corporel} /j]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Chiens beagle mâles et femelles. 13 semaines. Adm. orale, 5 j/semaine. Effet : changement histopathologique du foie.	NOAEL = 27.25 NOAEL _{ajustée} = 19 pour passer à une administration sur 7 jours par semaine.	Monsanto Company, 1967	0.02 ⁽¹⁾ Facteur d'incertitude utilisé : 1000 - AF extrapolation des résultats de l'animal à l'homme = 10 - AF variation inter-individuelle = 10 - AF durée de l'exposition = 10

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

	Classement CMR	Source
Cancérogénèse	Selon la classification de l'US-EPA le chlorobenzène est considéré comme appartenant au groupe D (substance non classifiable quant à sa cancérogénicité pour l'homme). Le chlorobenzène n'est pas classé cancérogène par l'Union Européenne. 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	ATSDR, 1990 E.C., 2004b C.E., 2008
Mutagénèse	Le chlorobenzène a été examiné par l'Union Européenne mais n'a pas été classé. 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.	ATSDR, 1990 C.E., 2008
Toxicité pour la reproduction	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_{BIOTA_HH})

La norme de qualité pour la santé humaine est calculé de la façon suivante (E.C., 2010) :

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

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 de 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 0.02 mg/kg_{corporel}/j (cf. tableau ci-dessus),
- un poids corporel moyen de 70 kg,
- Cons. Journ. Moy : une consommation 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., 2010).

Pour le chlorobenzène, le calcul aboutit à :

$$QS_{\text{biota hh}} = \frac{0.1 * 0.02 [\text{mg}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{0.115 [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} = 1.22 \text{ mg}/\text{kg}_{\text{biota}} = 1220 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$$

Comme pour l'empoisonnement secondaire, la concentration correspondante :

- dans l'eau douce peut être estimée en tenant compte de la bioaccumulation de la substance :

$$QS_{\text{water_hh food}} [\mu\text{g}/\text{L}] = \frac{QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}]}{\text{BCF} [\text{L}/\text{kg}_{\text{biota}}] * \text{BMF}_1}$$

- dans l'eau marine peut être estimée en tenant compte de la bioaccumulation de la substance :

$$QS_{\text{marin_hh food}} [\mu\text{g}/\text{L}] = \frac{QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}]}{\text{BCF} [\text{L}/\text{kg}_{\text{biota}}] * \text{BMF}_1 * \text{BMF}_2}$$

Pour le chlorobenzène, on obtient donc :

$$QS_{\text{water_hh food}} = 1.22 / (447 * 1) = 0.0027 \text{ mg}/\text{L} = 2.7 \mu\text{g}/\text{L}$$

Validation groupe d'experts : Mars 2011

Version 4 : 29/03/2011

Page 13

DRC-11-112070-04145A

CHLOROBENZENE- n°CAS : 108-90-7

$$QS_{\text{marin_hh food}} = 1.22 / (447 * 1 * 1) = 0.0027 \text{ mg/L} = 2.7 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour la santé humaine via la consommation de produits de la pêche	1.2	mg/kg _{biota}
Valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	2.7	μg/L

NORME DE QUALITE POUR LA SANTE HUMAINE VIA L'EAU DE BOISSON (QS_{DW_HH})

La norme de qualité pour l'eau de boisson est calculé de la façon suivante (E.C., 2010) :

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

Ce calcul tient compte de :

- un facteur correctif de 10% (soit 0.1) 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 0.02 mg/kg_{corporel/j} (cf. tableau ci-dessus),
- un poids corporel moyen de 70 kg,
- une consommation d'eau moyenne de 2 L par jour,

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.

$$QS_{\text{dw_hh}} [\text{mg/L}] = \frac{QS_{\text{eau brute}} [\text{mg/L}]}{1 - \text{fraction éliminée}}$$

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 chlorobenzène, on obtient :

$$QS_{\text{dw_hh}} = \frac{0.1 * 0.02 * 70}{2 * (1 - 0)} = 0.07 \text{ mg/L} = 70 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour l'eau destinée à l'eau potable	70	μg/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
PROPOSITION DE NORMES DE QUALITE			
Organismes aquatiques (eau douce) moyenne annuelle	AA-QS _{water_eco}	32	µg/L
Organismes aquatiques (eau douce) Concentration Maximum Acceptable	MAC	430	µg/L
Organismes aquatiques (eau marine) moyenne annuelle	AA-QS _{marine_eco}	3.2	µg/L
Organismes aquatiques (eau marine) Concentration Maximum Acceptable	MAC _{marine}	43	µg/L
Empoisonnement secondaire des prédateurs valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	QS _{biota sec pois}	2.3	mg/kg _{biota}
	QS _{water_sp}	5	µg/L
	QS _{marin_sp}		
Santé humaine via la consommation de produits de la pêche valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	QS _{biota hh}	1.2	mg/kg _{biota}
	QS _{water hh food}	2.7	µg/L
	QS _{marin hh food}		
Santé humaine via l'eau destinée à l'eau potable	QS _{dw_hh}	70	µg/L

Pour le chlorobenzène, la norme de qualité pour l'eau douce et celle pour l'eau marine sont les valeurs les plus faibles pour l'ensemble des approches considérées et pour les compartiments considérés. La proposition de NQE pour le chlorobenzène est donc la suivante :

PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE

EAU DOUCE

Moyenne Annuelle dans l'eau : $NQ_{EAU-DOUCE} = 2.7 \mu\text{g/L}$

fondée sur la proposition norme de qualité pour la protection de la santé humaine via la consommation de produits de la pêche : $NQ_{BIOTE} = 1220 \mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$

Concentration Maximale Acceptable dans l'eau : $MAC_{EAU-DOUCE} = 430 \mu\text{g/L}$

EAU MARINE

Moyenne Annuelle dans l'eau : $NQ_{EAU-MARINE} = 2.7 \mu\text{g/L}$

fondée sur la proposition norme de qualité pour la protection de la santé humaine via la consommation de produits de la pêche : $NQ_{BIOTE} = 1220 \mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$

Concentration Maximale Acceptable dans l'eau : $MAC_{EAU-MARINE} = 43 \mu\text{g/L}$

VALEURS GUIDES POUR LE SEDIMENT

Avec un Koc de 224 L/kg et un Log Kow = 2.85, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée par le projet de guide européen (E.C., 2010).

BIBLIOGRAPHIE

ATSDR (1990). Toxicological Profiles: Chlorobenzene. . Atlanta, Georgia, Agency for Toxic Substances and Disease Registry. <http://www.atsdr.cdc.gov/toxpro2.html>.

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.

Calamari, D., S. Galassi, *et al.* (1983). "Toxicity of selected chlorobenzenes to aquatic organisms." Chemosphere, **12**(2): 253-262.

Dalich, G., R. Larson, *et al.* (1982). "Acute and Chronic Toxicity Studies with Monochlorobenzene in Rainbow Trout." Aquat.Toxicol. **2**: 127-142.

DeWolf, W., J. H. Canton, *et al.* (1988). "Quantitative structure-activity relationships and mixture-toxicity studies of alcohols and chlorohydrocarbons: reproducibility and effects on growth and reproduction of *Daphnia magna*." Aquat tToxicol **12**: 39-49.

E.C. (2004). Commission Directive 2004/73/EC, 29th time Council directive 67/548/CEE. Official Journal 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. Brussels, European Commission.

E.C. (2010). Draft Technical Guidance Document for deriving Environmental Quality Standards (February 2010 version). Not yet published.

ETOX. (2007). "ETOX: Datenbank für ökotoxikologische Wirkungsdaten und Qualitätsziele." from <http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>.

Freitag, D., J. P. Lay, *et al.* (1984). " Environmental hazard profile - Test results as related to structures and translation into the environment. In:QSAR in environmental toxicology. Proceeding of the workshop on quantitative structure-activity relationships (QSAR) in environmental toxicology held at McMaster University, Hamilton, Ontario, Canada, 1983, D. Reidel Publishing Company. K.L.E. Kaiser."

Hempfling, R., P. Doetsch, *et al.* (1997). "USM-System zur Atlantenbeurteilung - Instrument für die Pladübergreifende Abschätzung und Beurteilung von Atlasverdächtigen Flächen Institut Fresenius, Erlangen & Focon-Ingenieurgesellschaft, Aachen."

HSDB. (2011). "Hazardous Substances Data Bank." from <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>.

IUCLID (1996). Chlorobenzene. International Uniform Chemical Information Database, European Commission ISPRA. CR-ROOM.

Lyman, W. J., W. F. Reehl, *et al.* (1990). Handbook of chemical property estimation methods. Washington DC., American Chemical Society.

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.

Monsanto Company (1967). "13-week oral administration - gogs. Monochlorobenzene. Prepared by Hazelton Laboratories, Project N °341-105. Final report."

NTP (1985). Toxicology and carcinogenesis studies of chlorobenzene (CAS N° 108-90-70) in F344/N rats and B6C3F mice (gavage studies). National Toxicology Programm, U.S. Department of Health and Human Services. Research triangle Park, NC. NTP TR 255.

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.

Rittman, B. E., E. J. Bouwer, *et al.* (1980). Biodegradation of trace organic compounds in groundwater systems. Department of Civil Engineering, Stanford University,. Stanford, California. , Technical Report No.255, Grant No EPA-R-804431.

US-EPA (1996). "Soil Screening Guidance: Technical Background Document. U.S. Environmental Protection Agency. Washington. Publication 9355.4-17A- EPA/540/R-95/128-PB96-963502.<http://www.epa.gov/epahome/search.html>."

Veith, G. D., D. L. De Foe, *et al.* (1979). "Measuring and estimating the bioconcentration factors of chemicals in fish." *J. Fish. Res. Board Can.* **36**(9): 1040-1048.

Verschueren, K. (2001). Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition. New York, NY,, Van Nostrand Reinhold Co.