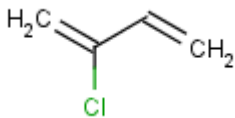


CHLOROPRENE – n° CAS : 126-99-8

Le chloroprène est ou a été utilisé comme intermédiaire dans la fabrication de polychloroprènes (UNEP, 2003).

IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE

| | |
|------------------------------|--|
| Substance chimique | Chloroprène |
| Synonymes | 2-Chloro-1,3-butadiène 2-Chloroprène Beta-chloroprène |
| Numéro CAS | 126-99-8 |
| Formule moléculaire | C ₄ H ₅ Cl |
| Code SMILES | C(C=C)(=C)Cl |
| Structure moléculaire |  |

EVALUATIONS EXISTANTES ET INFORMATIONS REGLEMENTAIRES

| | |
|--|--|
| Evaluation existante | UNEP (2003). "SIDS Initial Assessment Report for Chloroprene (126-99-8)." |
| Phrases de risque et classification | <p><i>Annexe I Directive 67/548/CEE (C.E., 1967)</i></p> <p>F; R11 Carc. Cat. 2; R45 Xn ; R20/22-48/20 Xi ; R36/37/38</p> <p><i>Annexe VI Règlement (CE) No 1272/2008 (C.E., 2008)</i></p> <p>Flam. Liq. 2 H225 Carc. 1B H350 Acute Tox. 4 H332 Acute Tox. 4 H302 STOT RE 2 H373 Eye Irrit. 2H319 STOT SE 3 H335 Skin Irrit. 2 H315</p> |
| Effets endocriniens | Le chloroprène 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). |
| Critères PBT / POP | La substance ne remplit pas les critères PBT/vPvB ¹ (C.E., 2006) ou POP ² (PNUE, 2001). |
| Norme de qualité existante () | <u>Allemagne</u> : norme de qualité pour les eaux prélevées destinées à la consommation = 10 µg/L (ETOX, 2007 ³). |
| Mesures de restriction | - |
| Substance(s) associée(s) | - |

Dans le cadre des travaux de l'OCDE réalisés pour les substances produites à fort tonnage (programme HPVC), le chloroprène a fait l'objet d'une évaluation collective par les états membres de l'OCDE et le dossier SIDS⁴ de la substance est disponible sur le site de l'UNEP (UNEP, 2003). 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.

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.

⁴ 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).

PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES

| | Valeur | Source |
|--|-------------------------------|------------|
| Poids moléculaire [g/mol] | 88.54 | HSDB, 2011 |
| Hydrosolubilité [mg/L] | 256-480 à 20°C | UNEP, 2003 |
| Pression de vapeur [Pa] | 25000 à 20°C | UNEP, 2003 |
| Constante de Henry [Pa.m ³ /mol] | 7950 à 20°C | BUA, 1991 |
| Log du coefficient de partage Octanol-eau (log K _{ow}) | 2.2 (calculé) | UNEP, 2003 |
| Coefficient d'adsorption (carbone organique) (K _{oc}) [L/kg] | 68 (calculé) | UNEP, 2003 |
| Constante de dissociation (pK _a) | Pas d'information disponible. | |

COMPORTEMENT DANS L'ENVIRONNEMENT**PERSISTANCE**

| | | Source |
|-------------------------|--|------------|
| Hydrolyse | En raison du caractère volatil de la substance dans l'eau, l'hydrolyse peut être considérée comme négligeable. | UNEP, 2003 |
| | Aucune réaction d'hydrolyse n'est attendue en conditions environnementales en raison de l'absence de groupes fonctionnels hydrolysables. | HSDB, 2011 |
| Photolyse | En raison du caractère volatil de la substance dans l'eau, la photolyse de la substance peut être considérée comme négligeable. | UNEP, 2003 |
| Biodégradabilité | 10% après 28 jours (OCDE 301D) : la substance est non facilement biodégradable. | UNEP, 2003 |

DISTRIBUTION DANS L'ENVIRONNEMENT

Selon le modèle de fugacité de Mackay niveau I (US-EPA et Syracuse Research Corporation, 1998), on retrouve le chloroprène majoritairement dans l'air avec 99.96% (0.036% dans l'eau) (UNEP, 2003).

| | | Source |
|--|--|------------|
| Adsorption | D'après le Koc (68 L/kg) calculé, la substance semble être peu adsorbable. | UNEP, 2003 |
| Volatilisation | De l'eau vers l'air, le temps de demi-vie du chloroprène est estimé à 4.9 heures et au plus à 1-4 jours. En solution aqueuse, la substance a donc une forte tendance à se volatiliser. | UNEP, 2003 |
| | Le temps de demi-vie du chloroprène est estimé à 3 heures dans une rivière et à 4 jours dans un lac. | HSDB, 2011 |
| Bioaccumulation/ Biomagnification | BCF = 18 (calculé) : la substance ne peut pas être considérée comme bioaccumulable. Un BCF de 18 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. | HSDB, 2011 |

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'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 | 380 mg/L <i>Navicula seminulum</i> , EC ₅₀ (7 j) (inhibition de la croissance) | UNEP, 2003 |
| | Milieu marin | Pas d'information disponible. | |
| Invertébrés | Eau douce | 348 mg/L <i>Daphnia magna</i> , EC ₅₀ (24 h) | UNEP, 2003 |
| | Milieu marin | Pas d'information disponible. | |
| | Sédiment | Pas d'information disponible. | |
| Poissons | Eau douce | 245 mg/L <i>Lepomis macrochirus</i> , LC ₅₀ (96 h) | UNEP, 2003 |
| | Milieu marin | Pas d'information disponible. | |

ECOTOXICITE AQUATIQUE CHRONIQUE

| | | | Source |
|-----------------------------|--------------|---|------------|
| Algues & plantes aquatiques | Eau douce | 87 mg/L <i>Navicula seminulum</i> , EC ₁₁ (7 j) (inhibition de la croissance) | UNEP, 2003 |
| | Milieu marin | Pas d'information disponible. | |
| Invertébrés | Eau douce | 3.2 mg/L <i>Daphnia magna</i> , NOEC (21 j) | UNEP, 2003 |
| | Milieu marin | Pas d'information disponible. | |
| | Sédiment | Pas d'information disponible. | |
| Poissons | Eau douce | Pas d'information disponible. | |
| | 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 chloroprène, on dispose de données valides pour 2 niveaux trophiques en chronique et pour 3 niveaux trophiques en aigu. En chronique, la plus basse NOEC a été observée pour *Daphnia magna*, (NOEC 21 j à 3.2 mg/L) mais en aigu, ce sont les poissons (pour lesquels aucune donnée chronique n'est disponible) qui apparaissent comme les plus sensibles. Cependant, on peut constater en aigu que la sensibilité entre les différents niveaux trophiques est similaire. C'est pourquoi un facteur d'extrapolation de 50 peut donc être appliqué (E.C., 2010). On obtient donc :

$$AA-QS_{water_eco} = 3200 \text{ [}\mu\text{g/L]} / 50 = 64 \text{ }\mu\text{g/L}$$

Notons que cette valeur diverge avec la PNEC_{aqua} (concentration prédite sans effet) calculée par l'OCDE en utilisant un facteur d'extrapolation de 100 (UNEP, 2003).

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 500 conformément au guide technique européen (E.C., 2010) :

$$AA-QS_{marine_eco} = 3200 \text{ [}\mu\text{g/L]} / 500 = 6.4 \text{ }\mu\text{g/L}$$

- **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 *Lepomis macrochirus*, LC₅₀ (96 h) = 245mg/L. Un facteur d'extrapolation de 100 s'applique pour calculer la MAC :

$$MAC = 245/100 = 2.45 \text{ mg/L, soit } 2450 \text{ }\mu\text{g/L}$$

Pour le milieu marin, un facteur d'extrapolation de 1000 s'applique pour calculer la MAC_{marine} :

$$MAC_{marine} = 245/1000 = 0.245 \text{ mg/L, soit } 245 \text{ }\mu\text{g/L}$$

| | | |
|--|-----|------|
| Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau douce) | | |
| Moyenne annuelle [AA-QS_{water_eco}] | 64 | µg/L |
| Concentration Maximum Acceptable [MAC] | 2.4 | mg/L |
| Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau marine | | |
| Moyenne annuelle [AA-QS_{marine_eco}] | 6.4 | µg/L |
| Concentration Maximum Acceptable [MAC_{marine}] | 0.2 | mg/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 $K_{\text{sed-eau}} = 2.5 \text{ m}^3/\text{m}^3$.

Ainsi, on obtient :

CHLOROPRENE – n°CAS : 126-99-8

$$QS_{\text{sed wet weight}} [\mu\text{g/kg}] = \frac{2.5}{1300} * 64 * 1000$$

$$QS_{\text{sed wet weight}} = 123 \mu\text{g/kg (poids humide)}$$

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 :

$F_{\text{solide}_{\text{sed}}}$: 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 chloroprène, la concentration correspondante en poids sec est :

$$QS_{\text{sed dry_weight}} = 61.54 * 2.6 = 320 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$$

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 :

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

$$QS_{\text{sed-marin wet weight}} = 12.3 \mu\text{g/kg (poids humide)}$$

La concentration correspondante en poids sec est alors la suivante :

$$QS_{\text{sed-marin dry_weight}} = 32 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$$

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.

Validation groupe d'experts : Mars 2011

Version 4 : 29/03/2011

Page 8

DRC-11-112070-04192A

| | | |
|---|--|---|
| Proposition de valeur guide de qualité pour les sédiments (eau douce) | 123 | $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed}}$ poids humide |
| | 320 | $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed}}$ poids sec |
| Proposition de valeur guide de qualité pour les sédiments (eau marine) | 12.3 | $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed}}$ poids humide |
| | 32 | $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed}}$ poids sec |
| Conditions particulières | Avec un Koc calculé par QSAR de 68 L/kg et un Log Kow calculé de 2.2, 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 jugées valides par l'INERIS.

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 $QS_{\text{biota_sec}} \text{ pois}$. 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 | Rat 24 semaines Léthargie, augmentation du poids des organes (foie, rate, gonades) et augmentation de l'activité beta-galactosidase hépatique | NOAEL = 5.10 ⁻⁴ | Krasovsky <i>et al.</i> , 1980 | 10 | 0.005 |
| Toxicité pour la reproduction | Pas d'information 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 chloroprène, un facteur de 90 est appliqué car la durée du test retenu (NOAEL à 5.10⁻⁴ mg/kg_{corporel}/j sur rat, soit une NOEC de 0.005 mg/kg_{biota}) est de 24 semaines. Cette durée de test n'est pas assez élevée pour pouvoir considérer cette étude comme chronique et donc appliquer un facteur 30. On obtient donc :

$$QS_{biota_sec\ pois} = 5 \text{ [}\mu\text{g/kg}_{biota}\text{]} / 90 = 0.055 \text{ }\mu\text{g/kg}_{biota}$$

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

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

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

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

$$QS_{\text{marin sp}} [\mu\text{g/L}] = \frac{QS_{\text{biota_sec pois}} [\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}]}{\text{BCF} [\text{L/kg}_{\text{biota}}] * \text{BMF}_1 * \text{BMF}_2}$$

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 biota. 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 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 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 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 chloroprène, un BCF de 18 (calculé) (HSDB, 2011) et un BMF₁ = BMF₂ de 1 (cf. E.C., 2010). On a donc :

$$QS_{\text{water sp}} = 0.055 [\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}] / (18*1) = 0.003 \mu\text{g/L}$$

$$QS_{\text{marin sp}} = 0.055 [\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}] / (18*1*1) = 0.003 \mu\text{g/L}$$

| | | |
|--|-------|------------------------|
| Proposition de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire des prédateurs | 0.05 | μg/kg _{biota} |
| valeur correspondante dans l'eau (douce et marine) | 0.003 | 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 | Rat 24 semaines Oral Effets : Léthargie, augmentation du poids des organes (foie, rate, gonades) et augmentation de l'activité beta-galactosidase hépatique | NOAEL = 5.10 ⁻⁴ | Krasovsky <i>et al.</i> , 1980 | 2.5.10 ⁻⁷⁽¹⁾ Facteur d'incertitude: 2000 Avec AF inter-espèces = 10 AF intra-espèces = 10 AF dose-réponse = 10 ⁽²⁾ AF durée de l'exposition = 2 |
| Toxicité pour la reproduction | Pas d'information disponible. | | | |

(1) Cette VTR a été déterminée par l'INERIS. (2) Selon le TGD REACH sur la relation dose-réponse, un facteur 6 pourrait être appliqué. Mais compte tenu des effets cancérigènes importants, il est plus sécuritaire d'appliquer 10.

| | Classement CMR | Source |
|--------------------------------------|---|--|
| Cancérogénèse | La substance est considérée cancérigène. Le chloroprène pourrait être cancérigène pour l'homme (Groupe 2B selon l'IARC). Le chloroprène n'est pas cancérigène pour les rats, souris et hamsters. La substance est inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008 et est classée Carc. 1B (H350) | UNEP, 2003 IPCS- INCHEM, 1999 BUA, 1991 C.E., 2008 |
| Mutagénèse | 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 |
| 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 calculée 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 :

- la valeur toxicologique de référence (VTR), correspondant à une dose totale admissible par jour; pour cette substance elle est considérée égale à $2.5 \cdot 10^{-7}$ mg/kg_{corporel}/j (cf. tableau ci-dessus) = $2.5 \cdot 10^{-4}$ µg/kg_{corporel}/j,
- Cons. Journ. Moy : une consommation moyenne de produits de la pêche (poissons, mollusques, crustacés) égale à 115 g par jour,
- un poids corporel moyen de 70 kg,
- 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.

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 chloroprène, le calcul aboutit à :

$$QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * 2.5 \cdot 10^{-4} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{0.115 [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} = 0.0152 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$$

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 :

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

Pour le chloroprène, on obtient donc :

CHLOROPRENE – n° CAS : 126-99-8

$$QS_{\text{water_hh food}} = 0.0152 / (18 \cdot 1) = 0.0008 \text{ } \mu\text{g/L}$$

$$QS_{\text{marine_hh food}} = 0.0152 / (18 \cdot 1 \cdot 1) = 0.0008 \text{ } \mu\text{g/L}$$

| | | |
|--|--------|---------------------------------|
| Proposition de norme de qualité pour la santé humaine via la consommation de produits de la pêche | 0.02 | $\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$ |
| Valeur correspondante dans l'eau (douce et marine) | 0.0008 | $\mu\text{g/L}$ |

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

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

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

Ce calcul tient compte de :

- la valeur toxicologique de référence (VTR) ; pour cette substance elle est considérée égale à $2.5 \cdot 10^{-7} \text{ mg/kg}_{\text{corporel}/j} = 2.5 \cdot 10^{-4} \text{ } \mu\text{g/kg}_{\text{corporel}/j}$,
- 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 chloroprène, on obtient :

$$QS_{\text{dw_hh}} = \frac{0.1 \cdot 2.5 \cdot 10^{-4} \cdot 70}{2 \cdot (1 - 0)} = 0.0009 \text{ } \mu\text{g/L}$$

| | | |
|--|--------|-----------------|
| Proposition de norme de qualité pour l'eau destinée à l'eau potable | 0.0009 | $\mu\text{g/L}$ |
|--|--------|-----------------|

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 |
|---|------------------------------|--------|------------------------|
| PROPOSITION DE NORMES DE QUALITE | | | |
| Organismes aquatiques (eau douce) moyenne annuelle | AA-QS _{water_eco} | 64 | µg/L |
| Organismes aquatiques (eau douce) Concentration Maximum Acceptable | MAC | 2.4 | mg/L |
| Organismes aquatiques (eau marine) moyenne annuelle | AA-QS _{marine_eco} | 6.4 | µg/L |
| Organismes aquatiques (eau marine) Concentration Maximum Acceptable | MAC _{marine} | 0.2 | mg/L |
| Empoisonnement secondaire des prédateurs valeur correspondante dans l'eau (douce et marine) | QS _{biota sec pois} | 0.05 | µg/kg _{biota} |
| | QS _{water_sp} | 0.003 | 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} | 0.02 | µg/kg _{biota} |
| | QS _{water hh food} | 0.0008 | µg/L |
| | QS _{marine hh food} | | |
| Santé humaine via l'eau destinée à l'eau potable | QS _{dw_hh} | 0.0009 | µg/L |

Pour le chloroprène, 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 chloroprène est donc la suivante :

PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE

EAU DOUCE

Moyenne Annuelle dans l'eau : $NQE_{EAU-DOUCE} = 1 \text{ ng/L}$

fondée sur la proposition norme de qualité pour la protection de la santé humaine via la consommation de produits de la pêche : $NQE_{BIOTE} = 0.02 \text{ } \mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$

EAU MARINE

Moyenne Annuelle dans l'eau : $NQE_{EAU-MARINE} = 1 \text{ ng/L}$

Compte tenu de la forte différence entre la toxicité générale sur organismes aquatiques et la cancérogénicité sur les mammifères de la substance, il n'est pas recommandé de Concentration Maximale Acceptable (MAC) pour celle-ci, que ce soit pour l'eau douce et l'eau marine.

VALEURS GUIDES POUR LE SEDIMENT

Avec un Koc estimé par QSAR de 58 L/kg et un Log Kow estimé de 2.2, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée par le projet de guide européen (E.C., 2010).

BIBLIOGRAPHIE

BUA (1991). Chloroprene (2-Chloro-1,3-butadiene). BUA Report 87, 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. (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). "Datenbank für ökotoxikologische Wirkungsdaten und Qualitätsziele." from <http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>.

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

IPCS-INCHEM. (1999). "International Agency for Research on Cancer (IARC) - Summaries & Evaluations on chloroprene." from <http://www.inchem.org/documents/iarc/vol71/003-chloroprene.html>.

Krasovsky, G. N., R. V. Merkurieva, *et al.* (1980). "Effect of chloroprene on enzyme systems of rats and its hygienic implications." Gigiena i Sanitariia **2**: 17-19.

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.

UNEP (2003). OECD High Production Volume Chemicals Program, Screening Information Dataset for chloroprene / CAS n° 126-99-8 : 165 p.

US-EPA and Syracuse Research Corporation (1998). EPI Suite, US EPA.