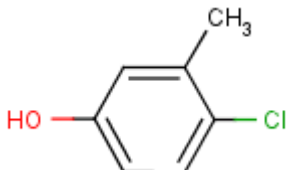


4-CHLORO-3-METHYLPHENOL – n° CAS : 59-50-7

Le 4-chloro-3-méthylphénol (chlorocrésol) fait partie des substances actives existantes notifiées dans le cadre de la directive biocides 98/8/CE (C.E., 1998). Le dossier est en cours d'évaluation et n'a pas encore été publié (Rapporteur : France).

Les chlorophénols sont souvent formés suite à la chloration de l'eau (réaction entre le chlore et les composés phénolés, fréquents dans le milieu naturel).

IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE

Substance chimique	4-Chloro-3-méthylphénol
Synonymes	Chlorocrésol p-Chloro-m-crésol 4-Chloro-m-crésol p-Chlor-m-crésol p-Chlorocrésol PCMC
Numéro CAS	59-50-7
Code SMILES	<chem>c1(c(ccc(c1)O)Cl)C</chem>
Structure moléculaire	<p style="text-align: center;">C₇-H₇-Cl-O</p> 

EVALUATIONS EXISTANTES ET INFORMATIONS REGLEMENTAIRES

Evaluation existante	US-EPA (1997) : Reregistration Eligibility Decision (RED) p-chloro-m-cresol List C, case 3046
Phrases de risque et classification	<p><i>Annexe I Directive 67/548/CEE (C.E., 1967)</i></p> <p>Xn ; R21/22 Xi ; R41, R43 N ; R50</p> <p><i>Annexe VI Règlement (CE) No 1272/2008 (C.E., 2008)</i></p> <p>Acute Tox. 4 (*) H312 Acute Tox. 4 (*) H302 Eye Dam. 1 H318 Skin Sens. 1 H317 Aquatic Acute 1 H400</p>
Effets endocriniens	<p>Dans sa communication de 2001, la Commission européenne avait identifié le 4-chloro-3-méthylphénol comme un perturbateur endocrinien potentiel (Tableau 2 de COM (2001) 262 (C.E., 2001)). Une évaluation plus approfondie a été demandée ; elle a été réalisée par le WRc en 2002 (E.C, 2002). A l'issue de l'étude bibliographique réalisée pour ce rapport, il apparaît que les effets sur la reproduction des invertébrés ou des poissons sont observés à des niveaux équivalents ou légèrement plus bas que ceux correspondant à des effets sur la mortalité ou la croissance. Cependant, il n'a pas été possible de conclure si ces effets sur la reproduction sont effectivement liés à une perturbation du système endocrinien des organismes. En particulier le fonctionnement du système endocrinien des invertébrés est très mal connu.</p> <p>Dans le rapport de la DG-environnement (Petersen <i>et al.</i>, 2007), la substance fait partie des substances à effets perturbateurs endocriniens potentiels pour l'homme (catégorie 2).</p> <p>La substance est classée en catégorie 3 pour la faune sauvage : les informations sur la substance sont insuffisantes pour pouvoir juger du caractère perturbateur endocrinien.</p>
Critères PBT / POP	Le chlorocresol ne répond pas aux critères PBT/POP
Norme de qualité existante (ETOX, 2007¹)	Allemagne : norme de qualité pour les eaux prélevées destinées à la consommation = 10 µg/L.
Mesure de restriction	-
Substance(s) associée(s)	-

¹ 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]	142.59	HSDB, 2003
Hydrosolubilité [mg/L]	3600-3900 à 20°C 4000 à 25°C et pH 5.1 3830 à 25°C	Verschueren, 2001 Kühne <i>et al.</i> , 1995
Pression de vapeur [Pa]	6.67 à 25°C 8 à 20°C	Mabey <i>et al.</i> , 1982 Verschueren, 2001
Constante de Henry [Pa.m ³ /mol]	0.253 (à 20°C, par calcul) 0.28	Verschueren, 2001 Mabey <i>et al.</i> , 1982
Log du coefficient de partage Octanol-eau (log Kow)	3.10 (mesuré) 2.18 3 ; 3.02 (mesuré) ; 3.1 (mesuré)	HSDB, 2003
Coefficient d'adsorption (carbone organique) (Koc) [L/kg]	490 L/kg	Veith <i>et al.</i> , 1979 Hansch et Leo, 1979 Verschueren, 2001
Constante de dissociation (pKa)	9.55	HSDB, 2003

COMPORTEMENT DANS L'ENVIRONNEMENT**PERSISTANCE**

		Source
Hydrolyse	Il n'y a pas d'information disponible sur l'éventuelle hydrolyse du 4-chloro-3-méthylphénol.	BUA, 1993
Photolyse	Dans des conditions environnementales correspondant à une zone tempérée, le temps de demi-vie du 4-chloro-3-méthylphénol par photolyse directe a été estimé à 15 jours en été et 503 jours en hiver. Dans des eaux riches en acides humiques la dégradation par photolyse est plus importante (temps de demi vie de 21-46 heures dans une eau chargée à 10 mg/L de substances humiques et pour un éclaircissement caractéristique des conditions printanières).	BUA, 1993
Biodégradabilité	Le 4-chloro-3-méthylphénol est intrinsèquement biodégradable en conditions aérobies: la dégradation est possible par des souches bactériennes adaptées et après une phase de latence suffisamment longue.	BUA, 1993

DISTRIBUTION DANS L'ENVIRONNEMENT

		Source
Adsorption	Le Koc (490 L/kg) indique une adsorption modérée.	HSDB, 2003
Volatilisation	Au vu de sa constante d'Henry, la substance en solution aqueuse a tendance à se volatiliser.	-
Bioaccumulation	Le log Kow du 4-chloro-3-méthylphénol suggère un certain potentiel de bioconcentration. Toutefois, des essais expérimentaux (conformes à la ligne directrice OCDE 305C) donnent un BCF effectif de l'ordre de 10 pour <i>Cyprinus carpio</i> et <i>Oryzias latipes</i> .	BUA, 1993
Transport	Pas d'information disponible.	

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.

Ces résultats d'écotoxicité sont principalement exprimés sous forme de NOEC (*No Observed Effect Concentration*), concentration sans effet observé, 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	15 mg/L <i>Chlorella pyrenoidosa</i> , EC ₅₀ (72 h) (taux de croissance)	Ramos <i>et al.</i> , 1999
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
Invertébrés	Eau douce	1.5 mg/L <i>Daphnia magna</i> , EC ₅₀ (48 h)	Ramos <i>et al.</i> , 1998
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
	Sédiment	Pas d'information disponible.	
Poissons	Eau douce	0.92 mg/L <i>Oncorhynchus mykiss</i> , LC ₅₀ (96 h)	Gagliano et Bowers, 1993
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	

ECOTOXICITE AQUATIQUE CHRONIQUE

			Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	1.9 mg/L <i>Chlorella pyrenoidosa</i> , NOEC (72 h) (taux de croissance)	Ramos <i>et al.</i> , 1999
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
Invertébrés	Eau douce	1.3 mg/L <i>Daphnia magna</i> , NOEC (21 j) (taux de reproduction)	Kühn <i>et al.</i> , 1989
	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 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). Elle est obtenue 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 tableau 16, page 101, du guide technique européen (E.C., 2003).

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

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

On ne dispose de résultats chroniques que pour deux niveaux trophiques : les algues et les invertébrés. Pour les données aiguës, des données valides pour trois niveaux trophiques sont disponibles. La valeur de toxicité aiguë la plus faible concerne un poisson *Oncorhynchus mykiss* (Gagliano et Bowers, 1993) dont la LC₅₀ 96 h est de 0.92 mg/L. Cette valeur est plus faible que la plus faible des NOEC chroniques disponibles. On ne dispose pas de données chroniques sur poisson, mais la sensibilité du poisson et des daphnies est équivalente en aigu. Conformément à la Table 16, remarque (c), du TGD (E.C., 2003), et compte-tenu de l'effet potentiellement endocrinien de la substance, la AA-QS_{water_eco} est alors calculée en appliquant un facteur 100 sur cette LC₅₀. On a donc :

On a donc : AA-QS_{water_eco} = 0.92 / 100 = 0.0092 mg/L, soit

$$AA-QS_{water_eco} = 9.2 \mu\text{g/L}$$

- **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)

Pour le 4-chloro-3-méthylphénol, on dispose de données valides pour 3 niveaux trophiques en aigu. La plus basse donnée aiguë a été observée pour *Oncorhynchus mykiss* (Gagliano et Bowers, 1993) dont la LC₅₀ 96 h est de 0.92 mg/L. Un facteur d'extrapolation de 100 s'applique donc pour calculer la MAC (EC, 2009)

$$\text{MAC} = 0.92/100 = 0.0092 \text{ mg/L, soit } 9.2 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau douce)		
Moyenne annuelle [AA-QS _{water_eco}]	9	µg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC]	9	µg/L

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

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_{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 kg/m^3 .

$K_{\text{susp-eau}}$: coefficient de partage matière en suspension/eau en m^3/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 $K_{\text{susp-eau}} = 13.15 \text{ m}^3/\text{m}^3$.

Ainsi, on obtient :

$$QS_{\text{sed wet weight}} [\mu\text{g/kg}] = \frac{13.15}{1150} * 9.2 * 1000$$

$$QS_{\text{sed wet weight}} = 105.2 \mu\text{g/kg} \text{ (poids humide)}$$

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

$$\frac{RHO_{\text{susp}}}{F_{\text{solide}_{\text{susp}}} * RHO_{\text{solide}}} = \frac{1150}{250} = 4.6$$

Avec $F_{\text{solide}_{\text{susp}}}$: fraction volumique en solide dans les matières en suspension en $[\text{m}^3_{\text{solide}}/\text{m}^3_{\text{susp}}]$. 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 : $0.1 \text{ m}^3/\text{m}^3$.

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 Lepper (2002) et le guide technique européen (tableau 5 page 43, E.C., 2003) est utilisée : 2500 kg/m^3 .

Pour le 4-chloro-3-méthylphénol, la concentration correspondante en poids sec est :

$$QS_{\text{sed dry weight}} = 105.2 * 4.6 = 483.92 \mu\text{g/kg}_{\text{sed poids sec}}$$

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 toxique adsorbé et la fraction de toxique dissous 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)	105	µg/kg _{sed poids humide}
	484	µg/kg _{sed poids sec}
Conditions particulières	Avec un Koc de 490 L/kg et un Log Kow proche de 3, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée selon le projet de guide européen (E.C., 2009).	

EMPOISONNEMENT SECONDAIRE

Ce chapitre traite de la toxicité chronique induite par la substance sur les prédateurs et l'homme *via* l'environnement aquatique, soit *via* la consommation d'organismes aquatiques contaminés (appelés biota, i.e. poissons ou invertébrés vivant dans la colonne d'eau ou dans les sédiments), soit *via* l'eau de boisson. 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.

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 toxique 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 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 $QS_{\text{biota_sec\ pois}}$. 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

TOXICITE ORALE POUR LES MAMMIFERES

	Type de test	NOAEL [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Rat Durée : 2 ans Effets sur le cerveau des femelles (diminution du poids, compression)	LOEC ⁽¹⁾ = 400 ppm LOAEL = 27.7 mg/kg _{corporel} /j ($AF_{\text{dose-réponse}} = 3$) NOEC _{corr} = 133 ppm	US-EPA, 1997	1	133
Toxicité pour la reproduction	Rat (maternelle) Durée (exposition + observation) : 15 jours (OECD n°14) Exposition entre le 6 ^{ème} et 15 ^{ème} jour de gestation Effets tératogènes	NOAEL = 30 mg/kg _{corporel} /j	E.C., 2000	12.5	375

(1) Lowest Observed Effect Concentration.

TOXICITE ORALE POUR LES OISEAUX

	Type de test	NOAEL/LOAEL	Source	Facteur de conversion	NOEC
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_{secpois}) 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).

Pour le 4-chloro-3-méthylphénol, un facteur de 30 est appliqué car la durée du test retenu (LOEC à 400 ppm sur rat, soit une NOEC de 133 mg/kg_{biota}) est de 24 mois. On obtient donc :

$$QS_{\text{biota_sec pois}} = 133 \text{ [mg/kg}_{\text{biota}}] / 30 = 4444 \text{ } \mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$$

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

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

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 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). Les valeurs de BCF peuvent être couramment trouvées dans la littérature. 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 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 4-chloro-3-méthylphénol, un BCF de 10 pour *Cyprinus carpio* et *Oryzias latipes* (BUA, 1993) et un BMF de 1 (cf. E.C., 2003) ont été retenus. On a donc :

$$QS_{\text{water sp}} = 4444 \text{ [}\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}] / (10*1) = 444.4 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire des prédateurs	4444	$\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$
valeur correspondante dans l'eau	444	$\mu\text{g/L}$

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.

	Type de test	NOAEL/LOAEL	Source	Valeur toxicologique de référence (VTR)
Toxicité chronique	Rat Durée : 2 ans Effets sur le cerveau des femelles (diminution du poids, compression)	LOEC ⁽¹⁾ = 400 ppm LOAEL = 27.7 mg/kg _{corporel} /j (AF dose-réponse = 3) NOAEL = 9 mg/kg _{corporel} /j	US-EPA, 1997	0.09 mg/kg _{corporel} /j ⁽²⁾ Avec : AF inter-espèces = 10 AF intra-espèces = 10
Cancérogenèse	Pas d'information disponible.			

(1) Lowest Observed Effect Concentration ; (2) VTR déterminée par l'INERIS

	Classement CMR	Source
Cancérogénèse	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
Mutagénèse	La substance ne présente pas de pouvoir mutagène	US-EPA, 1997
	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 (Lepper, 2005) :

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

Ce calcul tient compte de :

- la valeur toxicologique de référence (VTR), correspondant à une dose totale admissible par jour ; pour cette substance elle sera considérée égale à 0.09 mg/kg_{corporel}/j (cf. tableau ci-dessus) = 90 µg/kg_{corporel}/j,
- 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, mais 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).

Pour le 4-chloro-3-méthylphénol, le calcul aboutit à :

$$QS_{\text{biota_hh}} = \frac{0.1 * 90 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{0.115 [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} = 5478 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$$

$$0.115 \text{ [kg}_{\text{biota}}/\text{j}]$$

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 :

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

Pour le 4-chloro-3-méthylphénol, on obtient donc :

$$QS_{\text{water_hh food}} = 5478 / (10*1) = 547.8 \text{ }\mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour la santé humaine	5478	$\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$
valeur correspondante dans l'eau	548	$\mu\text{g/L}$

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

En principe, lorsque des normes de qualité réglementaires dans l'eau de boisson existent, soit dans la Directive 98/83/CE (C.E., 1998), soit déterminées par l'OMS, elles peuvent être adoptées. Les valeurs réglementaires de la Directive 98/83/CE doivent être privilégiées par rapport aux valeurs de l'OMS qui ne sont que de simples recommandations.

En leur absence, la norme de qualité pour l'eau de boisson est calculée de la façon suivante (Lepper, 2005, E.C., 2009) :

$$QS_{\text{dw_hh}} \text{ [}\mu\text{g/L]} = \frac{0.1 * \text{VTR [}\mu\text{g/kg}_{\text{corporel}}/\text{j]} * 70 \text{ [kg}_{\text{corporel}}]}{2 \text{ [L/j]}}$$

Ce calcul tient compte de :

- la valeur toxicologique de référence (VTR) ; pour cette substance elle sera considérée égale à $0.09 \text{ mg/kg}_{\text{corporel}}/\text{j} = 90 \text{ }\mu\text{g/kg}_{\text{corporel}}/\text{j}$,
- 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.

$$QS_{\text{dw_hh}} \text{ [}\mu\text{g/L]} = \frac{QS_{\text{santé humaine dans eau de boisson}} \text{ [}\mu\text{g/L]}}{1 - \text{fraction éliminée}}$$

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-chloro-3-méthylphénol, on obtient :

$$QS_{dw_hh} = \frac{0.1 * 90 * 70}{2 * (1 - 0)} = 315 \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour l'eau destinée à l'eau potable	315 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 faible parmi tous les compartiments étudiés.

		Valeur	Unité
PROPOSITION DE NORMES DE QUALITE			
Organismes aquatiques (eau douce) moyenne annuelle	AA-QS _{water_eco}	9	µg/L
Organismes aquatiques (eau douce) Concentration Maximum Acceptable	MAC	9	µg/L
Empoisonnement secondaire des prédateurs valeur correspondante dans l'eau	QS _{biota sec pois}	4444	µg/kg _{biota}
	QS _{water_sp}	444	µg/L
Santé humaine via la consommation de produits de la pêche valeur correspondante dans l'eau	QS _{biota hh}	5478	µg/kg _{biota}
	QS _{water hh food}	548	µg/L
Santé humaine via l'eau destinée à l'eau potable	QS _{dw_hh}	315	µg/L

Pour le 4-chloro-3-méthylphénol, la norme de qualité pour les organismes aquatiques est la valeur la plus protectrice pour l'ensemble des approches considérées. La proposition de NQE pour le 4-chloro-3-méthylphénol est donc la suivante :

PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE

Moyenne Annuelle dans l'eau : **NQE_{EAU} = 9 µg/L**

Concentration Maximale Acceptable dans l'eau : **MAC = 9 µg/L**

VALEURS GUIDES POUR LE SEDIMENT

Avec un Koc de 490 L/kg et un Log Kow proche de 3, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée selon le projet de guide européen (E.C., 2009).

BIBLIOGRAPHIE

BUA (1993). BUA report n°135 - 4-chloro-3-methylphenol, GDCh-Advisory Committee on Existing Chemicals of Environmental Relevance.

C.E. (1998). Directive 98/8/CE du Parlement Européen et du Conseil du 16 février 1998 concernant la mise sur le marché des produits biocides., JO L 123 du 24.4.1998 p. 1–63.

C.E. (2001). Communication de la Commission au Conseil et au Parlement européen sur la mise en œuvre de la stratégie communautaire concernant les perturbateurs endocriniens. - une série de substances suspectées d'influer sur le système hormonal des hommes et des animaux (COM (1999) 706). Bruxelles.

E.C. (2000). IUCLID dataset for chlorocresol (CAS 59-50-7).

E.C. (2002). Study on the scientific evaluation of 12 substances in the context of endocrine disrupter priority list of actions: 613 p.

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.

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

Gagliano, G. et L. Bowers (1993). Acute Toxicity of Preventol CMK Technical to the Rainbow Trout (*Oncorhynchus mykiss*) Under Static Renewal Conditions., Miles Inc., Agricultural Division, Research and Development Department, Environmental Research Section, 17745 South Metcalf, Stilwell, KS 66085 Performing Lab. ID PR812201.

Hansch, C. et A. Leo (1979). Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. New York, John Wiley & Sons.

HSDB. (2003). "Hazardous Substances Data Bank." from <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>.

Kühn, R., M. Pattard, K.-D. Pernak et A. Winter (1989). "Results of the harmful effects of water pollutants to *Daphnia magna* in the 21 day reproduction test (OECDG Data File)." Wat. Res. **23**(4): 501-510.

Kühne, R., R. Ebert, F. Kleint, G. Schmidt et G. Schüürmann (1995). "Group Contribution Methods to Estimate Water Solubility of Organic Chemicals." Chemosphere **30**(11): 2061-2077.

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.

Mabey, W., J. Smith, R. Podoll, H. Johnson, T. Mill, T. Chiou, J. Gate, I. Waight-Partridge, H. Jaber et D. Vandenberg (1982). Aquatic Fate Process for Organic Priority Pollutants.

Petersen, G., D. Rasmussen et K. Gustavson (2007). Study on enhancing the Endocrine Disrupter priority list with a focus on low production volume chemicals, DHI: 252.

Ramos, E., W. Vaes, P. Mayer et P. Hermens (1999). "Algal Growth Inhibition of *Chlorella pyrenoidosa* by Polar Narcotic Pollutants: Toxic Cell Concentrations and QSAR Modeling." Aquat.Toxicol. **46**(1): 1-10.

Ramos, E., C. Vermeer, W. Vaes et J. Hermens (1998). "Acute Toxicity of Polar Narcotics to Three Aquatic Species (*Daphnia magna*, *Poecilia reticulata* and *Lymnaea stagnalis*) and Its Relation to Hydrophobicity." Chemosphere **37**(4): 633-650.

US-EPA (1997). Reregistration Eligibility Decision (RED) p-chloro-m-cresol List C, case 3046, U.S.EPA, Office of Pesticide Programs, Prevention, Pesticides and Toxic Substances (7568W).

Veith, G., N. Austin et R. Morris (1979). "A rapid method for estimating log P for organic chemicals." Water Res. **13**: 43-47.

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