

AMINOTRIAZOLE - N°CAS : 61-82-5

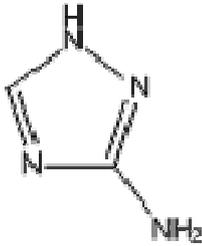
L'aminotriazole est un herbicide, un défoliant et un régulateur de croissance des plantes. Il appartient à la famille chimique des triazoles. Il est surtout utilisé pour détruire le chiendent et les autres plantes vivaces à racines profondes.

L'aminotriazole a été évalué par la DG SANCO (E.C., 2001). Suite à son évaluation, l'aminotriazole a été inclus à l'annexe I de la Directive 91/414/EEC (C.E., 1991).

Il existe également pour l'aminotriazole un rapport de l'US-EPA établi dans le cadre de la procédure de Reregistration Eligibility Decision (RED) (US-EPA, 1996).

Des résultats supplémentaires sont disponibles dans les bases de données « Pesticide Ecotoxicity Database » (US-EPA, 2011), AGRITOX, 2011, HSDB, 2011 et AQUIRE (US-EPA, 2011).

IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE

Substance chimique	Aminotriazole
Synonymes	Amitrole 3-Amino-s-triazole 3-Amino-1,2,4-triazole
Numéro CAS	61-82-5
Formule moléculaire	C ₂ H ₄ N ₄
Code SMILES	NC1=NNC=N1
Structure moléculaire	

PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES

	Valeurs	Source
Poids moléculaire [g/mol]	84.08	E.C., 2001
Hydrosolubilité [mg/L]	280 000 à 23°C 264 000 à pH 7 261 000 à pH 10	E.C., 2001
Pression de vapeur [Pa]	$3.3 \cdot 10^{-5}$ à 20°C	E.C., 2001
Constante de Henry [Pa.m ³ /mol]	$1.76 \cdot 10^{-8}$ à 20°C	E.C., 2001
Log du coefficient de partage Octanol-eau (log Kow)	-0.969 à pH 7 et à 23°C	E.C., 2001
Coefficient d'adsorption (carbone organique) (Koc) [L/kg]	20-202	E.C., 2001
Constante de dissociation (pKa)	pKa1 4.14 à 20°C, pKa2 10.7 à 20°C	E.C., 2001

COMPORTEMENT DANS L'ENVIRONNEMENT**PERSISTANCE**

Des études sur le devenir de l'aminotriazole dans des systèmes eau/sédiment ont été réalisées et les résultats sont présentés dans le rapport de la DG SANCO, 2001 (E.C., 2001). Selon les études, les temps de demi-vies déterminés pour la dissipation de l'aminotriazole sont variables. Ils sont compris entre 47 et 94 jours dans l'eau et entre 91 et 95 jours dans l'ensemble du système.

		Source
Hydrolyse	Les résultats d'une étude de 30 jours portant sur la dégradation par hydrolyse de l'aminotriazole sont présentés dans le rapport de l'US EPA. Ces résultats permettent de conclure que l'aminotriazole n'est pas susceptible d'être dégradé par hydrolyse dans les conditions environnementales (pH 5-9, 25°C).	US-EPA, 1996, E.C., 2001
Photolyse	La photolyse n'est pas une voie importante de dégradation de l'aminotriazole. En effet, cette substance n'est pas susceptible d'être dégradé par photolyse dans les conditions environnementales (pH 5-9, 25°C)	E.C., 2001
Biodégradabilité	L'aminotriazole n'est pas une substance facilement biodégradable	E.C., 2001

DISTRIBUTION DANS L'ENVIRONNEMENT

		Source
Adsorption	L'aminotriazole possède un Koc moyen de 91 L/kg. Cette substance ne va donc pas s'adsorber sur les sédiments ou les particules en suspension dans l'eau.	E.C., 2001
Volatilisation	Compte-tenu de ses propriétés physico-chimiques, l'aminotriazole est considérée comme soluble et non volatile.	E.C., 2001
Bioaccumulation/ Biomagnification	Un BCF de 2.38 a été déterminé chez <i>Lepomis macrochirus</i> (poisson entier). L'aminotriazole n'est donc pas susceptible de se bioaccumuler chez les organismes aquatiques. Un BCF de 2 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.	E.C., 2001

ECOTOXICITE ET TOXICITE**ORGANISMES AQUATIQUES**

Dans les tableaux ci-dessous, sont reportés pour chaque taxon les résultats des tests d'écotoxicité de la substance. Toutes les données présentées ont été validées par l'INERIS ou par un organisme européen reconnu.

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**

Le tableau ci-dessous répertorie les données d'écotoxicité aiguë jugées pertinentes pour notre étude.

Organisme	Espèce	Pureté (%)	Critère d'effet	Valeur (mg/L)	Validité	Référence	
Algues et plantes aquatiques	Eau douce	<i>Navicula pelliculosa</i>	91.7	EC ₅₀ (5 j) statique	0.0015	Valide	KBN 1998, cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA.
		<i>Scenedesmus subspicatus</i>	?	EC ₅₀ (72 h) statique	2.3	Valide	E.C., 2001
		<i>Selenastrum capricornutum</i>	91.7	EC ₅₀ (5 j) statique	2.3	Valide	KBN 1998, cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA
		<i>Anabaena flos-aquae</i>	?	EC ₅₀ (72 h)	2.5	Valide	E.C., 2001
		<i>Lemna gibba</i>	91.7	EC ₅₀ (14 j) statique	2.5	Valide	E.C., 2001.
		<i>Anabaena flos-aquae</i>	?	E _b C ₅₀ (120 h)	3.9	Valide	AGRITOX, 2011
		<i>Anabaena flos-aquae</i>	91.7	EC ₅₀ (5 j) statique	3.4	Valide	KBN 2000, cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA
		<i>Selenastrum capricornutum</i>	98.22	EC ₅₀ (72 h)	> 5.7	Valide	Cross 1993 cité dans le RED de l'US EPA
		<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	86	EC ₅₀ (72 h) statique	18	Etude supplémentaire	F. Jenkins 1997 cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA.
		Milieu marin	<i>Skeletonema costatum*</i>	91.7	EC ₅₀ (5 j) statique	3.1	Valide
Micro-crustacés	Eau douce	<i>Daphnia magna</i>	86	EC ₅₀ (48 h) statique	6.1	Valide	E.C., 2001
		<i>Daphnia magna</i>	86	EC ₅₀ (48 h) statique	6.9	Valide	F. Jenkins 1997 cité dans la pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA.
		<i>Daphnia magna</i>	91.8	EC ₅₀ (48 h) statique	18	Valide	Forbis 1985 cité dans le RED de l'US EPA et dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA
		<i>Daphnia magna</i>	Tech	EC ₅₀ (26 h)	23	Etude supplémentaire	Crosby 1966 cité dans le RED de l'US EPA et dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA
		<i>Gammarus fasciatus</i>	90	LC ₅₀ (96 h) statique	>10	Etude supplémentaire	Cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA et dans AGRITOX

Organisme		Espèce	Pureté (%)	Critère d'effet	Valeur (mg/L)	Validité	Référence
	Milieu marin	<i>Mysidopsis bahia</i>	98.22	EC ₅₀ (96 h) statique	2.8	Valide	Collins 1993 cité dans le RED de l'US EPA J. Sylvester 1993, cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA
	Eau douce	Pas d'information disponible.					
Mollusques	Milieu marin	<i>Crassostrea virginica</i>	98.22	EC ₅₀ (96 h) Flux continu	110	Valide	Dionne 1993 cité dans le RED de l'US EPA
		<i>Crassostrea virginica</i>	98.2	EC ₅₀ (96 h) Flux continu	>110	Valide	J. Sylvester 1993, cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA
Poissons	Eau douce	<i>Oncorhynchus tshawytscha</i>	?	LC ₅₀ (48 h)	155 (conditions d'essai non décrites)	Non valide	HSDB, 2011
		<i>Oncorhynchus mykiss</i>	90	LC ₅₀ (96 h)	>180	Valide	McCann 1976 cité dans le RED de l'US EPA
		<i>Oncorhynchus tshawytscha</i>	?	LC ₅₀ (24 h)	185 (conditions d'essai non décrites)	Non valide	HSDB, 2011
		<i>Pimephales promelas</i> (1.2g)	90	LC ₅₀ (96 h) statique	>100	Valide	Johnson 1980 cité dans le RED de l'US EPA
		<i>Ictalurus punctatus</i> (1.8g)	90	LC ₅₀ (96 h) statique	>160	Valide	Johnson 1980 cité dans le RED de l'US EPA
		<i>Lepomis macrochirus</i> (0.53g)	90	LC ₅₀ (96 h) statique	>180	Valide	McCann 1976 cité dans le RED de l'US EPA
		<i>Oncorhynchus kisutch</i>	?	LC ₅₀ (48 h)	325 (conditions d'essai non décrites)	Non valide	HSDB, 2011
		<i>Notropis atherinoides</i> (53 mm)	?	LC ₅₀ (96 h) statique	420	Etude supplémentaire	M. Rexrode 1982, cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA.
		<i>Poecilia reticulata</i>	?	LC ₅₀ (48 h)	567 (conditions d'essai non décrites)	Non valide	HSDB, 2011
		<i>Lepomis macrochirus</i> (0.21g)	96.5	LC ₅₀ (96 h)	>1000	Valide	McAllister 1985 cité dans le RED de l'US EPA

Organisme	Espèce	Pureté (%)	Critère d'effet	Valeur (mg/L)	Validité	Référence
	<i>Oncorhynchus mykiss</i> (0.36g)	96.5	LC ₅₀ (96 h) statique	>1000	Valide	E.C., 2001
	<i>Micropterus salmoides</i>	?	LC ₅₀ (48 h)	>1000 (conditions d'essai non décrites)	Non valide	HSDB, 2011
	<i>Carassius auratus</i>	?	LC ₅₀ (96 h) statique	> 6000	Valide	E.C., 2001
	<i>Poecilia reticulata</i>	?	LC ₅₀ (96 h)	12500 (conditions d'essai non décrites)	Non valide	HSDB, 2011
Milieu marin	<i>Cyprinodon variegatus</i>	98.22	LC ₅₀ (96 h) statique	>1000	Valide	Collins 1993 cité dans le RED de l'US EPA

ECOTOXICITE AQUATIQUE CHRONIQUE

Organismes	Espèces	Pureté (%)	Critère d'effet	Valeur (mg/L)	Validité	Référence	
Algues et plantes aquatiques	<i>Navicula pelliculosa</i>	91.7	NOEC (5 j) statique	0.0008	Valide	KBN 1998, cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA	
	<i>Lemna gibba</i>	91.7	NOEC (14 j) statique	0.35	Valide	GAI 1999, cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA	
	<i>Selenastrum capricornutum</i>	91.7	NOEC (5 j) statique	0.63	Valide	KBN 1998, cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA	
	<i>Anabaena flos-aquae</i>	91.7	NOEC (5 j) statique	1.3	Valide	KBN 2000, cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA	
	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	86	NOEC (72 h) Statique	7	Etude supplémentaire	F. Jenkins 1997 cité dans la pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA.	
	Milieu marin	<i>Skeletonema costatum</i>	91.7	NOEC (5 j) statique	1.3	Valide	KBN 1998, cité dans la Pesticide Ecotoxicity Database de l'US EPA
Micro-crustacés	Eau douce	<i>Daphnia magna</i>	96.5	NOEC (21 j) statique	0.32	Valide	E.C., 2001
	Milieu marin	Pas d'information disponible.					
Poissons	Eau douce	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	-	NOEC (21 j) statique	100	Valide	E.C., 2001
	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 l'aminotriazole, nous disposons de données aiguës et chroniques pour trois niveaux trophiques. Etant donné que les algues sont les plus sensibles en aigu comme en chronique, un facteur de sécurité de 10 est appliqué à la plus faible NOEC, soit celle obtenue pour *Navicula pelliculosa* (NOEC (5 j) égale à 0.0008 mg/L) pour la détermination de la AA-QS_{water_eco} :

AA-QS_{water_eco} = 0.0008/10, soit :

$$AA-QS_{water_eco} = 0.08 \mu\text{g/L}$$

En ce qui concerne les organismes marins, des essais sont disponibles pour trois niveaux trophiques en aigu et seulement pour les algues en chronique. Le jeu de données disponible ne permet pas de montrer une différence de sensibilité. En l'absence de taxon additionnel en chronique (mollusque, échinodermes, ...) la norme de qualité sera donc déterminée conformément au guide technique (E.C., 2010), en appliquant un facteur d'extrapolation de 100 sur la plus faible NOEC valide disponible: AA-QS_{marine_eco} = 0.0008/100 mg/L, soit :

$$AA-QS_{marine_eco} = 0.008 \mu\text{g/L}$$

- **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).

Nous disposons de données aiguës pour trois niveaux trophiques, la plus faible étant celle sur *Navicula pelliculosa*, EC50(5j) = 0.0015 mg/L. Par défaut, un facteur d'extrapolation de 100 s'applique pour calculer la MAC. Cependant le projet de document guide pour la détermination de normes de qualité environnementale (E.C., 2010) prévoit que, pour les substances dont le mode d'action est bien connu (ici un herbicide) et pour lesquelles des données sont disponibles pour le taxon le plus sensible (algues), ce facteur puisse être diminué. Pour l'aminotriazole, il est proposé d'abaisser ce facteur à 10 :

$$MAC = 0.0015/10 = 0.00015 \text{ mg/L, soit } 0.15 \mu\text{g/L}$$

Pour le milieu marin, par défaut, un facteur d'extrapolation de 1000 s'applique pour calculer la MAC. Cependant, pour les mêmes raisons que celles évoquées pour le milieu d'eau douce, la facteur peut être abaissé à 100 :

$$MAC_{\text{marine}} = 0.0015/100 = 0.000015 \text{ mg/L, soit } 0.015 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau douce)		
Moyenne annuelle [AA-QS _{water_eco}]	0.08	μg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC]	0.15	μg/L
Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau marine		
Moyenne annuelle [AA-QS _{marine_eco}]	0.008	μg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC _{marine}]	0.015	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 $[kg_{sed}/m^3_{sed}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le guide technique européen (E.C., 2010) est utilisée : $1300 kg/m^3$.

$K_{sed-eau}$: 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 : $0.8 + 0.025 * Koc$ soit $K_{sed-eau} = 1.3 - 5.85 m^3/m^3$.

Ainsi, on obtient :

$$QS_{sed\ wet\ weight} = 0.08 - 0.36 \mu g/kg \text{ (poids humide)}$$

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

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

Avec :

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

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

Pour l'aminotriazole, la concentration correspondante en poids sec est :

$$QS_{sed\ dry_weight} = 0.08 * 2.6 = 0.2 - 0.9 \mu g/kg_{sed\ poids\ sec}$$

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 :

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

$$QS_{sed-mar\in\ wet\ weight} = 0.008 - 0.036 \mu g/kg \text{ (poids humide)}$$

La concentration correspondante en poids sec est alors la suivante :

$$QS_{sed-mar\in\ dry_weight} = 0.02 - 0.09 \mu g/kg_{sed\ poids\ sec}$$

Le log Kow 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)	0.08	µg/kg _{sed poids humide}
	0.2	µg/kg _{sed poids sec}
Proposition de valeur guide de qualité pour les sédiments (eau marine)	0.008	µg/kg _{sed poids humide}
	0.02	µg/kg _{sed poids sec}
Conditions particulières	Avec un Koc compris entre 20 et 202 L/kg et un Log Kow = -0.969, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée par le projet de document 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 biota, 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 un 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 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 [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Rat Durée de l'étude : 90 jours. Administration orale. Effet sur la thyroïde.	0.1	E.C., 2001	20	2
Toxicité sur la reproduction	Rat Etude sur deux générations Administration orale via l'alimentation. Doses administrées : 0.5, 2, 15 et 112.5 ppm. Effets : augmentation du poids de la thyroïde et sur le poids.	0.9	E.C., 2001	Donnée spécifique de l'étude	15

(1) NOEL : No Observed Effect Level

TOXICITE ORALE POUR LES OISEAUX

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sur la reproduction	Caille, Canard	-	E.C., 2001	-	100

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 projet de guide technique européen pour la détermination de normes de qualité (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 l'aminotriazole, un facteur de 90 est appliqué car la durée du test retenu (NOAEL à 0.1 mg/kg_{corporel}/j sur le rat, soit une NOEC de 2 mg/kg_{biota}) est de 90 jours. On obtient donc :

$$QS_{biota_sec\ pois} = 2 \text{ [mg/kg}_{biota}\text{]} / 90 = 0.022 \text{ mg/kg}_{biota} = 22 \text{ }\mu\text{g/kg}_{biota}$$

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

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

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

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

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

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 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 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 l'aminotriazole, un BCF de 2 (poissons, E.C. (2001)) et un BMF₁ = BMF₂ de 1 (cf. E.C., 2010) ont été retenus. On a donc :

$$QS_{\text{water sp}} = 22 [\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}] / (2*1) = 11 \mu\text{g/L}$$

$$QS_{\text{marin sp}} = 22 [\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}] / (2*1*1) = 11 \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire des prédateurs	22	μg/kg _{biota}
valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	11	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 cancérogène ou mutagène sont également pris en compte.

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Valeur toxicologique de référence (VTR) [µg/kg _{corporel} /j]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Rat	0.1	E.C., 2001	1 ⁽¹⁾
	Durée de l'étude : 90 jours. Administration orale. Effet sur la thyroïde.			Facteur d'incertitude utilisé : 100 - AF variation inter- espèce = 10 - AF intra-espèce = 10

(1) Cette VTR a été déterminée par E.C., 2001.

	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. La substance est classé dans le groupe 3 selon l'IARC (Inclassable quant à sa cancérogénicité pour l'homme).	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 et est classé pour sa toxicité pour la reproduction (Repr. 2).	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) :

$$QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * VTR [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * \text{poids corporel} [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{\text{Cons. Journ. Moy.} [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} * \frac{1}{3}$$

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 1 µg/kg_{corporel}/j (Cf. Tableau ci-dessus),
- 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

Validation groupe d'experts : Juin 2011

Version 1 :13/12/2011

Page 14

DRC-11-118981-13453A

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.

- $F_{\text{sécurité}}$: facteur de sécurité supplémentaire pour tenir compte des effets perturbateurs endocriniens de la substance. Seul un facteur de 3 est nécessaire car les effets mesurés dans l'essai sur lequel est basé la VTR portent sur la thyroïde.

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 l'aminotriazole, le calcul aboutit à :

$$QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * 1 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{0.115 [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} * \frac{1}{3} = 20.3 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$$

Comme pour l'empoisonnement secondaire, la concentration correspondante :

- dans l'eau douce du milieu 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 du milieu 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 l'aminotriazole, on obtient donc :

$$QS_{\text{water_hh food}} = 20.3 / (2 * 1) = 10 \mu\text{g}/\text{L}$$

$$QS_{\text{marine_hh food}} = 20.3 / (2 * 1 * 1) = 10 \mu\text{g}/\text{L}$$

Proposition de norme de qualité pour la santé humaine via la consommation de produits de la pêche	20	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$
Valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	10	$\mu\text{g}/\text{L}$

NORME DE QUALITE POUR LA SANTE HUMAINE VIA L'EAU DE BOISSON (QS_{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.

Il faut signaler que ces normes réglementaires ne sont pas nécessairement établies sur la base de critères (éco)toxicologiques (par exemple les normes pour les pesticides avaient été établies par rapport à la limite de quantification analytique de l'époque pour ce type de substance, soit 0.1 µg/L).

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

$$MPC_{dw_hh} [\mu\text{g/L}] = \frac{0.1 \cdot VTR [\mu\text{g/kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] \cdot \text{poids corporel} [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{\text{Cons.moy.eau} [\text{L/j}]} \cdot \frac{1}{3}$$

Ce calcul tient compte de :

- la valeur toxicologique de référence (VTR), cette substance, elle sera considérée égale à 1 µg/kg_{corporel}/j (Cf. Tableau ci-dessus),
- 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.
- F_{sécurité} : facteur de sécurité supplémentaire pour tenir compte des effets perturbateurs endocriniens de la substance. Seul un facteur de 3 est nécessaire car les effets mesurés dans l'essai sur lequel est basé la VTR portent sur la thyroïde.

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.

$$QS_{dw_hh} [\mu\text{g/L}] = \frac{MPC_{dw_hh} [\mu\text{g/L}]}{1 - \text{fraction éliminée}}$$

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 l'aminotriazole, on obtient :

$$QS_{dw_hh} = \frac{0.1 \cdot 1 \cdot 70}{2 \cdot (1 - 0)} \cdot \frac{1}{3} = 1.16 \mu\text{g/L}$$

La norme recommandée par la Directive 98/83/CE de façon générique pour les pesticides est plus faible que la valeur calculée selon le guide technique (E.C., 2010). Elle est donc proposée comme norme de qualité pour l'eau de boisson.

Proposition de norme de qualité pour l'eau destinée à l'eau potable	0.1	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}	0.08	µg/L
Organismes aquatiques (eau douce) Concentration Maximum Acceptable	MAC	0.15	µg/L
Organismes aquatiques (eau marine) moyenne annuelle	AA-QS _{marine_eco}	0.008	µg/L
Organismes aquatiques (eau marine) Concentration Maximum Acceptable	MAC _{marine}	0.015	µg/L
Empoisonnement secondaire des prédateurs valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	QS _{biota sec pois}	22	µg/kg _{biota}
	QS _{water_sp}	11	µg/L
	QS _{marine_sp}		
Santé humaine via la consommation de produits de la pêche valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	QS _{biota hh}	20	µg/kg _{biota}
	QS _{water hh food}	10	µg/L
	QS _{marine hh food}		
Santé humaine via l'eau destinée à l'eau potable	QS _{dw_hh}	0.1	µg/L

Pour l'aminotriazole, 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 l'aminotriazole est donc la suivante :

PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE**EAU DOUCE****Moyenne Annuelle dans l'eau :** $NQ_{EAU-DOUCE} = 0.08 \mu\text{g/L}$ **Concentration Maximale Acceptable dans l'eau:** $MAC_{EAU-DOUCE} = 0.15 \mu\text{g/L}$ **EAU MARINE****Moyenne Annuelle dans l'eau :** $NQ_{EAU-MARINE} = 0.008 \mu\text{g/L}$ **Concentration Maximale Acceptable dans l'eau:** $MAC_{EAU-MARINE} = 0.015 \mu\text{g/L}$ **VALEURS GUIDES POUR LE SEDIMENT**

Avec un Koc compris entre 20 et 202 L/kg et un log Kow = -0.969, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée par le projet de document guide européen (E.C., 2010).

BIBLIOGRAPHIE

AGRITOX. (2011). "AGRITOX - Base de données sur les substances actives phytopharmaceutiques ", from <http://www.dive.afssa.fr/agritox/php/fiches.php>.

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. (1991). Directive du conseil du 15 juillet 1991 concernant la mise sur le marché des produits phytopharmaceutiques (91/414/CEE), Journal officiel n° L 230 du 19/08/1991 : p. 0001 – 0032.

C.E. (1998). Directive 98/83/CE du conseil du 3 novembre 1998 relative à la qualité des eaux destinées à la consommation humaine, Journal Officiel L 330/32 du 5.12.1998: 32-54.

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. (2001). "Review report for the active substance Amitrole finalised in the standing committee on the food chain and animal health at its meeting on 12 December 2000 in view of the inclusion of Chlorpropham in Annex I of Directive 91/414/EEC. Amitrole 6839/VI/97-final 22 March 2001.http://ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/existactive/list1_amitrol_en.pdf."

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. (2009). Draft Technical Guidance Document for deriving Environmental Quality Standards (July 2009 version). Not yet published.

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

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

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.

US-EPA (1996). "Reregistration Eligibility Decision (RED) for Amitrole United States Environmental Protection Agency, Office of Prevention, Pesticides and Toxic Substances., Washington DC, 20460. <http://www.epa.gov/opsrrd1/REDS/0095red.pdf>."

US-EPA. (2011). "AQUatic toxicity Information REtrieval." from <http://www.epa.gov/ecotox/>.

US-EPA. (2011). "Pesticide Ecotoxicity Database, Environmental Fate and Effects Division of the Office of Pesticide Programs." from <http://www.ipmcenters.org/Ecotox/DataAccess.cfm>.