


## HEXACHLOROETHANE– N° CAS : 67-72-1

L'hexachloroéthane est utilisé en pyrotechnie : cette substance inhibe l'explosivité du méthane et la combustion du perchlorate d'ammonium. De plus, les fumées contenant de l'hexachloroéthane sont utilisées pour éteindre les feux.

### IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE

<b>Substance chimique</b>	Hexachloroéthane
<b>Numéro CAS</b>	67-72-1
<b>Formule moléculaire</b>	C <sub>2</sub> Cl <sub>6</sub>
<b>Code SMILES</b>	C(C(Cl)(Cl)Cl)(Cl)(Cl)Cl
<b>Structure moléculaire</b>	

## **EVALUATIONS EXISTANTES ET INFORMATIONS REGLEMENTAIRES**

<b>Evaluation existante</b>	-
<b>Phrases de risque et classification</b>	La substance est non classée à l'annexe I de la Directive 67/548/CEE (C.E., 1967) ni à l'annexe VI du règlement 1272/2008/CE (C.E., 2008).
<b>Effets endocriniens</b>	L'hexachloroéthane n'est pas cité dans la stratégie communautaire concernant les perturbateurs endocriniens (E.C., 2004) et dans le rapport d'étude de la DG ENV sur la mise à jour de la liste prioritaire des perturbateurs endocriniens à faible tonnage (Petersen <i>et al.</i> , 2007).
<b>Critères PBT / POP</b>	La substance ne remplit pas les critères PBT/vPvB <sup>1</sup> (C.E., 2006) ou POP <sup>2</sup> (PNUE, 2001).
<b>Normes de qualité existantes</b>	<p><u>Allemagne</u> : Norme de qualité pour les eaux prélevées destinées à la consommation = 10 µg/L (ETOX, 2007<sup>3</sup>)</p> <p><u>Union Européenne</u> : Norme de qualité pour les hydrosystèmes (projet) = 10 µg/L (ETOX, 2007<sup>3</sup>)</p> <p><u>Etats-Unis</u> : Norme de qualité pour les organismes aquatiques, eau douce = 540 µg/L (ETOX, 2007<sup>3</sup>)</p> <p><u>Etats-Unis</u> : Norme de qualité pour l'eau et les poissons destinés à la consommation = 1.9 µg/L (ETOX, 2007<sup>3</sup>)</p> <p><u>Etats-Unis</u> : Norme de qualité pour la consommation de poisson et la protection de la santé humaine = 8.9 µg/L (ETOX, 2007<sup>3</sup>)</p>
<b>Mesures de restriction</b>	-
<b>Substance(s) associée(s)</b>	-

<sup>1</sup> Les PBT sont des substances persistantes, bioaccumulables et toxiques et les vPvB sont des substances très persistantes et très bioaccumulables. Les critères utilisés pour la classification des PBT sont ceux repris par la Commission Européenne. Ils apparaissent dans le guide technique européen (E.C., 2003).

<sup>2</sup> Les 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 repris par l'UNEP (*United Nations Environment Programme*). [<http://www.ecologie.gouv.fr/-Polluants-organiques-persistants-.html>].

<sup>3</sup> 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]	236.74	SRC, 1988 ; MITI, 1992
Hydrosolubilité [mg/L]	50 à 22°C	SRC, 1988 ; Verschueren, 2001
Pression de vapeur [Pa]	28 à 20°C	Archer, 1979 ; Chemfinder, 2004
Constante de Henry [Pa.m <sup>3</sup> /mol]	394	-
Log du coefficient de partage Octanol-eau (log Kow)	4.14	SRC, 1988 ; RIVM, 1999
Coefficient de partage carbone organique-eau (Koc) [L/kg]	2188 (mesuré)	HSDB, 2000
Constante de dissociation (pKa)	Pas d'information nécessaire.	

## COMPORTEMENT DANS L'ENVIRONNEMENT

### PERSISTANCE

		Source
Hydrolyse	Dans les conditions environnementales de températures et de pH (à 25°C et pH = 7), le temps de demi-vie d'hydrolyse de l'hexachloroéthane a été estimé à 1.8.10 <sup>9</sup> ans.	Jeffers <i>et al.</i> , 1989
Photolyse	Pas d'information disponible.	
Biodégradabilité	L'hexachloroéthane peut résister à la biodégradation en conditions aérobies, mais se biodégraderait facilement sous des conditions anaérobies (réduction en tétrachloroéthylène).  Le MITI a effectué un essai de biodégradation inhérente (LD OCDE 302C : Test MITI modifié) pendant 2 semaines, avec une concentration de boue de 30 mg/L et une concentration de substance de 100 mg/L. Aucune biodégradation n'a été observée.	HSDB, 2000  MITI, 1992

## DISTRIBUTION DANS L'ENVIRONNEMENT

		Source
<b>Adsorption</b>	La valeur de K <sub>oc</sub> de l'hexachloroéthane est supérieure à 1000 L/kg ; cette substance aura donc tendance à s'adsorber sur les particules en suspension dans l'eau et les sédiments.	HSDB, 2000
<b>Volatilisation</b>	Compte tenu de sa solubilité, de sa pression de vapeur et de sa constante de Henry, l'hexachloroéthane est considéré comme très volatile.  L'étude de la volatilisation de la substance dans un modèle de rivière a montré un temps de demi-vie de 15 h. Syracuse Research Corporation (SRC) fait état d'études de volatilisation qui estiment des temps de demi-vies de volatilisation de 5 h pour un modèle de rivière et de 6 jours pour un modèle de lac.  Il est donc crucial de vérifier si des précautions particulières ont été mises en œuvre pour limiter la volatilisation de cette substance lors des essais d'écotoxicité.	Lymam, 1982 ; SRC, 1988
<b>Bioaccumulation</b>	Expérimentalement, des facteurs de bioconcentration ont été déterminés chez des poissons :  <i>Oncorhynchus mykiss</i> , pour une concentration de $7.1 \cdot 10^{-9}$ g/L ; T = 15°C ; durée : 105 jours ; BCF = 1200  <i>Lepomis macrochirus</i> pour une concentration de $6 \cdot 10^{-3}$ g/L ; T = 16°C ; durée : 28 jours ; BCF = 139  <i>Pimephales promelas</i> : BCF = 707  Ces BCF expérimentaux sont du même ordre de grandeur que le BCF théorique (659) calculé à partir du log K <sub>ow</sub> . L'hexachloroéthane a donc un potentiel de bioconcentration modéré.  <b>Un BCF de 1200 est utilisé dans la détermination des normes de qualité.</b>	Oliver et Niimi, 1982  Veith <i>et al.</i> , 1980  Veith et Kosian, 1982 ;  Ahmad <i>et al.</i> , 1984

## ECOTOXICITE ET TOXICITE

### ORGANISMES AQUATIQUES

Dans les tableaux ci-dessous, ne sont reportés pour chaque taxon uniquement les résultats des tests d'écotoxicité montrant la plus forte sensibilité à la substance. Toutes les données présentées ont été validées par l'INERIS.

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

## ECOTOXICITE

### ECOTOXICITE AQUATIQUE AIGUË

			Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	87 mg/L <sup>(1)</sup> <i>Selenastrum capricornutum</i> , EC <sub>50</sub> (96 h)	US-EPA, 1978
	Milieu marin	8.57 mg/L <sup>(1)</sup> <i>Skeletonema costatum</i> , EC <sub>50</sub> (96 h)	US-EPA, 1978
Invertébrés	Eau douce	1.359 mg/L <i>Daphnia magna</i> , LC <sub>50</sub> (48 h)	Thurston <i>et al.</i> , 1985
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
	Sédiment	Pas d'information disponible.	
Poissons	Eau douce	0.94 mg/L <i>Oncorhynchus mykiss</i> , LC <sub>50</sub> (96 h)	Call <i>et al.</i> , 1983
		0.84 mg/L <i>Oncorhynchus mykiss</i> , LC <sub>50</sub> (96 h)	Ahmad <i>et al.</i> , 1984
		1.178 mg/L <i>Oncorhynchus mykiss</i> , LC <sub>50</sub> (96 h)	Thurston <i>et al.</i> , 1985
		Moyenne géométrique LC <sub>50</sub> (96 h) = 0.98 mg/L	
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	

(1) Ces deux résultats d'essais sont donnés à titre indicatif car ils n'ont pas pu être validés faute d'information sur le protocole expérimental utilisé. De plus, le critère d'effet considéré (mesure de la chlorophylle A) n'est pas un critère habituellement utilisé.

### ECOTOXICITE AQUATIQUE CHRONIQUE

			Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	Pas d'information disponible.	
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
Invertébrés	Eau douce	Pas d'information disponible.	
	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). Elles sont obtenues en divisant la plus faible valeur de NOEC ou d'EC<sub>50</sub> valide par un facteur d'extrapolation (AF, *Assessment Factor*).

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

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

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

Pour l'hexachloroéthane, il n'existe pas de donnée d'écotoxicité chronique valide. Parmi les données aiguës, les données pour les algues n'ont pas été jugées valides. Des résultats d'essais aigus ont été validés uniquement pour les invertébrés et les poissons. Ce manque de données valides ne permet normalement pas de calculer une norme de qualité. Il semble toutefois, au vu des données trouvées pour les algues, que celles-ci ne représentent pas le niveau trophique le plus sensible. Nous proposons donc une valeur provisoire pour la norme de qualité pour la colonne d'eau.

Les poissons semblent donc être l'espèce la plus sensible en aigu. Plusieurs données de toxicité aiguë sont disponibles chez les truites. Une moyenne géométrique égale à 0.98 mg/L a été calculée à partir de ces résultats.

Cette valeur est retenue et un facteur d'extrapolation de 1000 lui est appliqué pour dériver la norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau conformément au guide technique européen (E.C., 2003).

$$AA-QS_{water\_eco} = 0.98 \text{ [mg/L]} / 1000 = 0.98 \text{ }\mu\text{g/L}$$

- **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 utilisé (ECHA, 2008, E.C., 2009).

Des résultats d'essais aigus ont été validés uniquement pour les invertébrés et les poissons. Ce manque de données valides ne permet normalement pas de calculer une MAC. Il semble toutefois, au vu des données trouvées pour les algues, que celles-ci ne représentent pas le niveau trophique le plus sensible. Un facteur d'extrapolation de 100 s'applique pour calculer une MAC :

$$MAC = 0.98/100 = 0.0098 \text{ mg/L, soit } 10 \text{ }\mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau douce)		
Moyenne annuelle [AA-QS <sub>water_eco</sub> ]	1	µg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC]	10	µg/L

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

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

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

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

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

Ce modèle suppose que :

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

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

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

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

Avec :

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

$K_{\text{susp-eau}}$  : coefficient de partage matière en suspension/eau en  $\text{m}^3/\text{m}^3$ . En l'absence d'une valeur exacte, les valeurs génériques proposées par Lepper, 2002) et le guide technique européen (équation 24 page 47, E.C., 2003) sont utilisées. Le coefficient est alors calculé selon la formule suivante :  $0.9 + 0.025 * Koc$  soit  $K_{\text{susp-eau}} = 55.6 \text{ m}^3/\text{m}^3$ .

Ainsi, on obtient :

$$QS_{\text{sed wet weight}} [\mu\text{g/kg}] = \frac{55.6}{1150} * 0.98 * 1000$$

$$QS_{\text{sed wet weight}} = 47.4 \mu\text{g/kg} \text{ (poids humide)}$$

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 :  $0.1 \text{ m}^3/\text{m}^3$ .

$RHO_{\text{solide}}$  : 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 :  $2500 \text{ kg}/\text{m}^3$ .

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

$$QS_{\text{sed dry\_weight}} = 47.4 * 4.6 = 217.95 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$$

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 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.



<b>Proposition de valeur guide de qualité pour les sédiments (eau douce)</b>	47	µg/kg <sub>sed poids humide</sub>
	218	µg/kg <sub>sed poids sec</sub>
<b>Considérations particulières</b>	<p>Avec un Koc de 2188 L/kg et un Log Kow = 4.14, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment peut être justifiée selon le projet de guide européen (E.C., 2009).</p> <p>Néanmoins, le seuil proposé n'est fondé que sur la méthode du coefficient de partage à l'équilibre : il est calculé à partir de la norme de qualité dans l'eau et du Koc. L'incertitude de cette méthode devrait être prise en compte lors la mise en application du seuil sédiment.</p>	

## EMPOISONNEMENT SECONDAIRE ET SANTE HUMAINE

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

Afin de couvrir ces sources de variabilité, mais aussi pour tenir compte des autres sources de variabilité ou d'incertitude (variabilité inter et intra-espèces, extrapolation du court terme au long terme, etc.) des facteurs d'extrapolation sont nécessaires pour le calcul de la  $QS_{\text{biota\_sec pois}}$ . 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/LOAEL [mg/kg <sub>corporel</sub> /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg <sub>biota</sub> ]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Rat	NOAEL = 1	NCI, 1978	10	10
	Etude de 16 semaines Administration orale via la nourriture. Toxicité rénale.				
Toxicité pour la reproduction	Pas d'information disponible.				

### TOXICITE ORALE POUR LES OISEAUX

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

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

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

Pour l'hexachloroéthane, un facteur de 90 est appliqué car la durée du test retenu (NOAEL à 1 mg/kg<sub>corporel</sub>/j sur rat, soit une NOEC de 10 mg/kg<sub>biota</sub>) est de 16 semaines. On obtient donc :

$$QS_{biota\_sec\ pois} = 10 \text{ [mg/kg}_{biota}] / 90 = 0.111 \text{ mg/kg}_{biota} = 111 \text{ }\mu\text{g/kg}_{biota}$$

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

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

Avec :  
BCF : facteur de bioconcentration,  
BMF : facteur de biomagnification.

Ce calcul tient compte du fait que la substance présente dans l'eau du milieu peut se bioaccumuler dans le biota. Il donne la concentration à ne pas dépasser dans l'eau afin de respecter la valeur de la 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). 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 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'hexachloroéthane, un BCF de 1200 sur *Oncorhynchus mykiss* (Oliver et Niimi, 1982) et un BMF de 1 (cf. E.C., 2003) ont été retenus. On a donc :

$$QS_{\text{water sp}} = 111 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] / (1200 \cdot 1) = 0.092 \mu\text{g}/\text{L}$$

<b>Proposition de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire des prédateurs</b>	111	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$
valeur correspondante dans l'eau	0.09	$\mu\text{g}/\text{L}$

## SANTE HUMAINE

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

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

Toutes les données présentées ont été validées.

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

## TOXICITE

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

	Type de test	NOAEL/LOAEL [mg/kg <sub>corporel</sub> /j]	Source	Valeur toxicologique de référence (VTR) [µg/kg <sub>corporel</sub> /j]
<b>Toxicité sub-chronique et/ou chronique</b>	Rat Etude de 16 semaines Administration orale via la nourriture. Toxicité rénale.	NOAEL = 1	NCI, 1978	1 <sup>(1)</sup> Facteur d'incertitude : 1000 Avec : AF inter-espèce = 10 AF sensibilité de l'espèce humaine = 10 AF durée de l'exposition = 10
<b>Cancérogénèse</b>	Souris Etude de 78 semaines. Administration orale par gavage Effet : carcinome hépatocellulaire	Classé dans la catégorie C selon la classification de l'US EPA	NCI, 1978	0.071 <sup>(1)</sup> Dose associée à un risque de 10 <sup>-6</sup>

(1) Ces VTR ont été déterminées par l'US-EPA.

	Classement CMR	Source
<b>Cancérogénèse</b>	Classé dans la catégorie C selon la classification de l'US EPA (substance cancérigène possible pour l'homme). L'hexachloroéthane est classé dans le groupe 2B l'IARC (substance cancérigène possible pour l'homme). La substance n'est pas inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008	HSDB, 2000  C.E., 2008
<b>Mutagénèse</b>	Les études disponibles ne permettent pas de conclure à un caractère mutagène de la substance. La substance n'est pas inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008	HSDB, 2000  C.E., 2008
<b>Toxicité pour la reproduction</b>	La substance n'est pas inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008	C.E., 2008

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

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

$$QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * VTR [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{\text{Cons. Journ. Moy.} [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]}$$

Ce calcul tient compte de :

- un facteur correctif de 10% (soit 0.1) : la VTR donnée ne tient compte en effet que d'une exposition par voie orale, et pour la consommation de produits de la pêche uniquement. Mais la contamination peut aussi se faire par la consommation d'autres sources de nourriture, par la consommation d'eau, et d'autres voies d'exposition sont possibles (inhalation ou contact cutané). Le facteur correctif de 10% (soit 0.1) permet de rendre l'objectif de qualité plus sévère d'un facteur 10 afin de tenir compte de ces autres sources de contamination possibles,
- la valeur toxicologique de référence (VTR), correspondant à une dose totale admissible par jour ; pour cette substance, elle sera considérée égale à 0.071  $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}$  (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,

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 journaliers contribuant à la dose journalière tolérable apporte une certaine marge de sécurité (E.C., 2009).

Pour l'hexachloroéthane, le calcul aboutit à :

$$QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * 0.071 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{0.115 [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} = 4.32 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$$

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

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

Pour l'hexachloroéthane, on obtient donc :

$$QS_{\text{water\_hh food}} [\mu\text{g}/\text{L}] = 4.32 / (1200 * 1) = 3.6 \cdot 10^{-3} \mu\text{g}/\text{L}$$

<b>Proposition de norme de qualité pour la santé humaine via la consommation de produits de la pêche</b>	4	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$
Valeur correspondante dans l'eau	$4 \cdot 10^{-3}$	$\mu\text{g}/\text{L}$

## 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 (Lepper, 2005) :

HEXACHLOROETHANE – n° CAS : 67-72-1

$$QS_{\text{eau brute}} [\mu\text{g/L}] = \frac{0.1 * VTR [\mu\text{g/kg}_{\text{corporel/j}}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{\text{Cons.moy.eau [L/j]}}$$

Ce calcul tient compte de :

- la valeur toxicologique de référence (VTR) ; pour cette substance, elle sera considérée égale à 0.071  $\mu\text{g/kg}_{\text{corporel/j}}$  (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.

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 l'hexachloroéthane, on obtient :

$$QS_{\text{dw\_hh}} = \frac{0.1 * 0.071 * 70}{2 * (1 - 0)} = 0.248 \mu\text{g/L}$$

<b>Proposition de norme de qualité pour l'eau destinée à l'eau potable</b>	0.2	$\mu\text{g/L}$
--	-----	-----------------

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

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

		Valeur	Unité
<b>PROPOSITION DE NORMES DE QUALITE</b>			
Organismes aquatiques (eau douce) moyenne annuelle	AA-QS <sub>water_eco</sub>	1	µg/L
Organismes aquatiques (eau douce) Concentration Maximum Acceptable	MAC	10	µg/L
Empoisonnement secondaire des prédateurs valeur correspondante dans l'eau	QS <sub>biota sec pois</sub>	111	µg/kg <sub>biota</sub>
	QS <sub>water_sp</sub>	0.09	µg/L
Santé humaine via la consommation de produits de la pêche valeur correspondante dans l'eau	QS <sub>biota hh</sub>	4	µg/kg <sub>biota</sub>
	QS <sub>water hh food</sub>	4.10 <sup>-3</sup>	µg/L
Santé humaine via l'eau destinée à l'eau potable	QS <sub>dw_hh</sub>	0.2	µg/L

Pour l'hexachloroéthane la norme de qualité pour la santé humaine est la valeur la plus protectrice pour l'ensemble des approches considérées. La proposition de NQE pour l'hexachloroéthane est donc la suivante :

<b>PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE</b>		
<b>Moyenne Annuelle dans l'eau :</b>	<b>NQE<sub>EAU</sub> =</b>	<b>4.10<sup>-3</sup> µg/L</b>
<b>Fondée sur la proposition norme de qualité pour la protection de la santé humaine via la consommation de produits de la pêche :</b>	<b>NQE<sub>BIOTE</sub> =</b>	<b>4 µg/kg<sub>biote</sub></b>
<b>Concentration Maximale Acceptable dans l'eau :</b>	<b>MAC =</b>	<b>10 µg/L</b>

### **VALEURS GUIDES POUR LE SEDIMENT**

Avec un Koc de 2188 L/kg et un Log Kow = 4.14, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment peut être justifiée selon le projet de guide européen (E.C., 2009).

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

<b>Sédiments (eau douce)</b>	<b>QS<sub>sed</sub></b>	<b>47</b>	<b>µg/kg<sub>sed</sub> poids humide</b>
		<b>218</b>	<b>µg/kg<sub>sed</sub> poids sec</b>

## **BIBLIOGRAPHIE**

Ahmad, N., D. Benoit, *et al.* (1984). Aquatic toxicity tests to characterize the hazard of volatile organic chemicals in water: a toxicity data summary - Parts I and II. Duluth, Minnesota, US-EPA, office of research and development, Environmental research laboratory.

Archer, W. L. (1979). *Kirk-Othmer Encycl Chem Tech.* New York, Wiley. 5: 722-42.

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.

Call, D. J., L. T. Brooke, *et al.* (1983). Toxicity and metabolism studies with EPA priority pollutants and related chemicals in freshwater organisms, EPA.

Chemfinder. (2004). 2004, from <http://chemfinder.cambridgesoft.com/>.

E.C. (2003). Technical Guidance Document on Risk Assessment in support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) N° 1488/94 on Risk Assessment for existing substances, Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market. Luxembourg, Office for Official Publications of the European Communities.

E.C. (2004). Commission staff working document on implementation of the Community Strategy for Endocrine Disrupters - a range of substances suspected of interfering with the hormone systems of humans and wildlife (COM(1999) 706). SEC(2004) 1372., European Commission.

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

ECHA (2008). Chapter R.10: Characterisation of dose [concentration]-response for environment. Guidance on information requirements and chemical safety assessment., European Chemicals Agency: 65.

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

HSDB (2000). Hazardous Substances Data, National Library of Medicine.

Jeffers, P. M., L. M. Ward, *et al.* (1989). "Homogeneous hydrolysis rate constants for selected chlorinated methanes, ethanes, ethenes and propanes." *Environ. Sci. Technol.* **23**(8): 965-968.

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.



- Lymam, W. J., W. F. Reehl and D. H. Rosenblatt, (1982). "Estimation Methods; Environmental Behavior of Organic Compounds. New York, McGraw-Hill."
- MITI (1992). Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the Chemical Substances Control Law (CSCL). Japan, Chemicals Inspection and Testing Institute (CITI) from the Ministry of International Trade and Industry.
- NCI (1978). NCI (National Cancer Institute). Bioassays of Hexachloroethane for Possible Carcinogenicity. CAS No. 67-72-1. NCI-CG-TR-68. Tech. Report Ser. No. 68. U.S. DHEW. Publ. No. (NIH) 78-1318.
- Oliver, B. G. and A. J. Niimi (1982). "Bioconcentration of chlorobenzenes from water by rainbow trout: Correlations with partition coefficients and environmental residues." Environ. Sci. Technol. **17**(5): 287-291.
- 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.
- RIVM (1999). Environmental Risk Limits in the Netherlands, RIVM.
- SRC (1988). Syracuse Research Corporation.
- Thurston, R. V., T. A. Gilfoil, *et al.* (1985). "Comparative toxicity of ten organic chemicals to ten common aquatic species." Wat. Res. **19**(9): 1145-1155.
- US-EPA (1978). In depth studies on health and environmental impacts of selected water pollutants. Duluth, US-EPA: 9.
- Veith, G., K. J. Macek, *et al.* (1980). An evaluation of using partition coefficients and water solubility to estimate bioconcentration factors for organic chemicals in fish. In : Aquatic Toxicology, ASTM STP 707, Eaton, J.G., Parrish, P.R., Hendricks, A.C. (Eds.): 116-129.
- Veith, G. D. and P. Kosian (1982). "Physical behavior of PCBs in the Great Lakes." Ann Arbor Sci. **15**: 269-282.
- Verschuere, K. (2001). Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. New York, NY, Van Nostrand Reinhold Co.