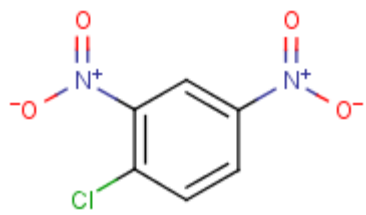


1-CHLORO-2,4-DINITROBENZÈNE – n° CAS : 97-00-7

Le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène entre dans la fabrication de colorants azoïques. Il est également utilisé comme réactif pour la détermination de l'acide nicotinique, nicotinamide et d'autres pyridines (HSDB, 2003).

IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE

Substance chimique	1-Chloro-2,4-dinitrobenzène
Synonymes	Chlorodinitrobenzène DNCB
Numéro CAS	97-00-7
Formule moléculaire	C ₆ H ₃ ClN ₂ O ₄
Code SMILES	<chem>c1(cc(ccc1Cl)[N+](=O)[O-])[N+](=O)[O-]</chem>
Structure moléculaire	

EVALUATIONS EXISTANTES ET INFORMATIONS REGLEMENTAIRES

Evaluation existante	-
Phrases de risque et classification	Chlorodinitrobenzène : T ; R23/24/25 ; R33 ; N ; R50-53 (Annexe VI Règlement (CE) No 1272/2008 (C.E., 2008))
Effets endocriniens	Le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène n'est pas cité dans la stratégie communautaire concernant les perturbateurs endocriniens (E.C., 2004).
Critères PBT / POP	La substance n'est pas citée dans les listes PBT/vPvB ¹ (C.E., 2006) ou POP ² (PNUE, 2001).
Norme de qualité existante (cf. ETOX, 2011³)	<u>Allemagne</u> : norme de qualité pour les eaux prélevées destinées à la consommation = 5 µg/L.
Mesures de restriction	-
Substance(s) associée(s)	1,3-dinitrobenzène (99-65-0)

¹ Les PBT sont des substances persistantes, bioaccumulables et toxiques et les vPvB sont des substances très persistantes et très bioaccumulables. Les critères utilisés pour la classification des PBT sont ceux fixés par l'Annexe XIII du règlement n° 1907/2006 (REACH).

² Les Polluants Organiques Persistants (POP) sont des substances persistantes (aux dégradations biotiques et abiotiques), fortement bioaccumulables, et qui peuvent être transportées sur de longues distances et être retrouvée de façon ubiquitaire dans l'environnement. Les critères utilisés pour la classification POP sont ceux fixés par l'Annexe 5 de la Convention de Stockholm placée sous l'égide du PNUE (Programme des Nations Unies pour l'Environnement).

³ Les données issues de cette source (<http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>) ne sont données qu'à titre indicatif ; elles n'ont donc pas fait l'objet d'une validation par l'INERIS.

PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES

	Valeurs	Source
Poids moléculaire [g/mol]	202.55	Verschuereen, 2001
Hydrosolubilité [mg/L]	360 à 20°C	Verschuereen, 2001
Pression de vapeur [Pa]	0.01 à 20°C 0.01 à 25°C (extrapolation)	Verschuereen, 2001 Daubert et Danner, 1991
Constante de Henry [Pa.m ³ /mol]	0.20 à 20°C 0.28 à 25°C (calculé)	BUA, 1989 Daubert et Danner, 1991
Log du coefficient de partage Octanol-eau (log Kow)	2.1 (calculé) 2.17	Verschuereen, 2001 Debnath <i>et al.</i> , 1991
Coefficient d'adsorption (carbone organique) (Koc) [L/kg]	360 (calculé)	HSDB, 2003
Constante de dissociation (pKa)	Pas d'information disponible.	

COMPORTEMENT DANS L'ENVIRONNEMENT**PERSISTANCE**

		Source
Hydrolyse	Le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène ne subit probablement aucune hydrolyse en raison de l'absence de groupes fonctionnels hydrolysables. Un temps de demi-vie de plusieurs mois est mentionné dans le BUA.	Lyman <i>et al.</i> , 1990 BUA, 2000
Photolyse	Il est supposé que la photolyse du 1-chloro-2,4-dinitrobenzène est lente : un temps de demi-vie de d'environ 1 an est reporté.	BUA, 2000
Biodégradabilité	Le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène n'est pas facilement biodégradable (méthode OCDE 301 C): après 14 jours, aucune dégradation de la substance n'a été observée. Des essais sur des isomères du 1-chloro-2,4-dinitrobenzène ont montré une biodégradation lente.	MITI, 1992

DISTRIBUTION DANS L'ENVIRONNEMENT

		Source
Adsorption	D'après le Koc (360 L/kg), la substance est modérément adsorbable.	HSDB, 2003
Volatilisation	Au vu de la valeur de sa constante de Henry, le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène en solution aqueuse n'aura pas tendance à se volatiliser.	-
Bioaccumulation/ Biomagnification	<p>Des facteurs de bioconcentration de 4.2 et 44 ont été mesurés sur <i>Cyprinus carpio</i> après 6 semaines d'exposition au 1-chloro-2,4-dinitrobenzène.</p> <p>Un BCF de 9.4 a été estimé par QSAR à partir du log Kow (2.17).</p> <p>Ces résultats suggèrent un faible potentiel de bioconcentration pour cette substance.</p> <p>Un BCF de 44 est utilisé dans la détermination des normes de qualité. Le document guide technique européen pour la dérivation des NQE recommande l'utilisation des valeurs par défaut suivantes pour ce qui est de la prise en compte de la biomagnification : $BMF_1 = BMF_2 = 1$.</p>	MITI, 1992

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, 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

Les tableaux ci-dessous répertorient les données d'écotoxicité jugées pertinentes pour notre étude.

ECOTOXICITE AQUATIQUE AIGUË

			Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	0.8 mg/L <i>Chlorella pyrenoidosa</i> , EC ₅₀ (96 h) (biomasse)	Maas-Diepeveen et Van Leeuwen, 1986
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
Invertébrés	Eau douce	0.49 mg/L <i>Daphnia magna</i> , EC ₅₀ (48 h)	Dierickx et Van der Wielen, 1986
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
	Sédiment	Pas d'information disponible.	
Poissons	Eau douce	0.13 mg/L <i>Poecilia reticulata</i> , LC ₅₀ (14 j)	Hermens et al., 1985
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	

ECOTOXICITE AQUATIQUE CHRONIQUE

			Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	0.067 mg/L <i>Scenedesmus subspicatus</i> , NOEC (72 h) (biomasse)	AgrEvo, 1995
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
Invertébrés	Eau douce	0.1 mg/L <i>Daphnia magna</i> , NOEC (21 j) (taux de reproduction)	Hoechst AG, 1994aa
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
	Sédiment	Pas d'information disponible.	
Poissons	Eau douce	0.016 mg/L <i>Brachydanio rerio</i> , NOEC (28 j)	Hoechst AG, 1994bb
	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 la détermination des normes de qualité environnementale (E.C., 2011). 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., 2011).

En ce qui concerne les organismes marins, selon le guide technique pour la détermination de normes de qualité environnementale (E.C., 2011), 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, les facteurs d'extrapolation appliqués pour déterminer les normes de qualité pour le milieu marin doivent prendre en compte les incertitudes additionnelles telles que la sous-représentation des taxons clés et une diversité d'espèces plus complexe en milieu marin.

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

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

Pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, on dispose de données valides pour 3 niveaux trophiques à la fois en aigu et en chronique. En chronique, la plus basse NOEC a été observée pour *Brachydanio rerio* (NOEC 28 j à 0.016 mg/L). Les poissons représentent aussi le niveau trophique ayant la LC₅₀ la plus basse dans les essais court terme. Conformément au guide technique européen pour la détermination des normes de qualité environnementale (E.C., 2011), un facteur d'extrapolation de 10 est donc appliqué pour calculer la AA-QS_{water_eco}. On obtient donc :

$$AA-QS_{water_eco} = 0.016 \text{ [mg/L]} / 10 = 0.0016 \text{ mg/L soit}$$

$$AA-QS_{water_eco} = 1.6 \text{ } \mu\text{g/L}$$

En ce qui concerne les organismes marins, aucun essai n'est disponible. Par conséquent, conformément au guide technique européen pour la détermination des normes de qualité environnementale (E.C., 2011), la AA-QS_{marine_eco} sera déterminée en appliquant un facteur de sécurité de 100 sur la plus faible NOEC disponible (NOEC 28 j à 0.016 mg/L obtenue pour *Brachydanio rerio*). L'INERIS propose donc la valeur suivante :

$$AA-QS_{marine_eco} = 0.016 \text{ [mg/L]} / 100 = 0.00016 \text{ mg/L soit}$$

$$AA-QS_{marine_eco} = 0.16 \text{ } \mu\text{g/L}$$

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

La concentration maximale acceptable est calculée afin de protéger les organismes de la colonne d'eau de possibles effets de pics de concentrations de courtes durées (E.C., 2011).

Pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, on dispose de données aiguës pour trois niveaux trophiques (algues, invertébrés, poissons). Les trois niveaux trophiques ont une sensibilité comparable. Un facteur d'extrapolation de 100 devrait s'appliquer sur la plus faible donnée aiguë pour calculer la MAC. Or, selon le document guide technique pour la détermination des normes de qualité environnementale (E.C., 2011), pour les substances qui n'ont pas de mode d'action spécifique et pour lesquelles les données disponibles montrent que la variation interspécifique est faible, le facteur peut être diminué. Pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, l'écart-type des valeurs Log de L(E)C₅₀ est < 0.5 et cette variation peut être considérée comme faible. Un facteur d'extrapolation de 10 est donc proposé pour calculer la MAC :

$$MAC = 0.13 / 10 = 0.013 \text{ mg/L, soit}$$

$$MAC = 13 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Pour le milieu marin, aucun essai spécifique n'est disponible. Par défaut, un facteur d'extrapolation de 1000 devrait s'appliquer pour calculer la MAC. Cependant, pour les mêmes raisons que celles évoquées pour le compartiment eau douce et conformément au guide technique européen pour la détermination des normes de qualité environnementale (E.C., 2011), il est proposé d'abaisser ce facteur à 100 :

$$\text{MAC}_{\text{marine}} = 0.13 / 100 = 0.0013 \text{ mg/L, soit}$$

$$\text{MAC}_{\text{marine}} = 1.3 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau douce)		
Moyenne annuelle [AA-QS_{water_eco}]	1.6	μg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC]	13	μg/L
Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau marine)		
Moyenne annuelle [AA-QS_{marine_eco}]	0.16	μg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC_{marine}]	1.3	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) (C.E., 2000).

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., 2011) :

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

Avec :

RHO_{sed} : masse volumique du sédiment en $[\text{kg}_{\text{sed}}/\text{m}^3_{\text{sed}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le document guide technique européen (E.C., 2011) est utilisée : $1300 \text{ kg}/\text{m}^3$.

$K_{\text{sed-eau}}$: coefficient de partage sédiment/eau en m^3/m^3 . En l'absence d'une valeur exacte, les valeurs génériques proposées par le guide technique européen (E.C., 2011) sont utilisées. Le coefficient est alors calculé selon la formule suivante : $0.8 + 0.025 * K_{\text{oc}}$ soit $K_{\text{sed-eau}} = 9.8 \text{ m}^3/\text{m}^3$

Pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, on obtient :

$$QS_{\text{sed wet weight}} [\mu\text{g/kg}] = \frac{9.8}{1300} * 1.6 * 1000$$

$$QS_{\text{sed wet weight}} = 12 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{poids humide}}$$

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

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

Avec :

$F_{\text{solide}_{\text{sed}}}$: fraction volumique en solide dans les sédiments en $[\text{m}^3_{\text{solide}}/\text{m}^3_{\text{susp}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le document guide technique européen (E.C., 2011) est utilisée : $0.2 \text{ m}^3/\text{m}^3$.

RHO_{solide} : masse volumique de la partie sèche en $[\text{kg}_{\text{solide}}/\text{m}^3_{\text{solide}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par le document guide technique européen (E.C., 2011) est utilisée : $2500 \text{ kg}/\text{m}^3$.

Pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, la concentration correspondante en poids sec est :

$$QS_{\text{sed dry weight}} = QS_{\text{sed wet weight}} * 2.6 = 12 * 2.6 = 31 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$$

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

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

Pour, le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène on obtient :

$$QS_{\text{sed-marin wet weight}} [\mu\text{g/kg}] = \frac{9.8}{1300} * 0.16 * 1000$$

$QS_{\text{sed-marin wet weight}} = 1.2 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{poids humide}}$

La concentration correspondante en poids sec est alors la suivante:

$QS_{\text{sed-marin dry weight}} = 3 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$

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 substance 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)	12	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids humide}}$
	31	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$
Proposition de valeur guide de qualité pour les sédiments (eau marine)	1.2	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids humide}}$
	3	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$
Conditions particulières	Avec un Koc de 360 L/kg et un log Kow = 2.17, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée selon le guide européen (E.C., 2011).	

EMPOISONNEMENT SECONDAIRE

Ce chapitre traite de la toxicité chronique induite par la substance sur les prédateurs *via* la consommation d'organismes aquatiques contaminés (appelés biote, i.e. poissons ou invertébrés vivant dans la colonne d'eau ou dans les sédiments). Il s'agit donc d'évaluer la toxicité chronique de la substance par la voie d'exposition orale uniquement.

Dans les tableaux ci-dessous, ne sont reportés pour chaque type de test que les résultats permettant d'obtenir les NOEC ou la valeur toxicologique de référence (VTR) les plus protectrices. N'ont été recherchés que des tests sur mammifères ou oiseaux exposés par voie orale (exposition par l'alimentation ou par gavage). Toutes les données présentées ont été validées.

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

Pour calculer la norme de qualité liée à l'empoisonnement secondaire des prédateurs, il est nécessaire de connaître la concentration de substance dans le biote n'induisant pas d'effets observés pour les prédateurs (exprimée sous forme de NOEC). Il est possible de déduire une NOEC à partir d'une NOAEL grâce à des facteurs de conversion empiriques variables selon les espèces testées. Les

Validation groupe d'experts : Avril 2012

Version 2 : 26/06/2012

Page 9

DRC-11-112070-03942B

facteurs utilisés ici sont ceux recommandés par le guide technique européen pour la détermination de normes de qualité (E.C., 2011). 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., 2011). 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

En l'absence de données pertinentes pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, il est proposé de retenir celles disponibles pour le 1,3-dinitrobenzène (99-65-0), utilisées à défaut en première approximation, dans le cadre d'un screening/hiérarchisation de substances.

	Type de test	NOAEL ⁽¹⁾ [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sub-chronique et/ou Chronique	Rat Durée : 16 semaines Administration orale via l'eau de boisson Effet(s) : augmentation du poids de la rate	0.4	OECD, 2001	Donnée de l'étude	3 (1,3-dinitrobenzène (99-65-0))
Toxicité pour la reproduction	Pas d'information disponible.				

⁽¹⁾ NOAEL : No Observed Adverse Effect Level

TOXICITE ORALE POUR LES OISEAUX

	Type de test	NOAEL/LOAEL ⁽¹⁾ [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Pas d'information disponible.				
Toxicité pour la reproduction	Pas d'information disponible.				

⁽¹⁾ NOAEL : No Observed Adverse Effect Level. LOAEL : Lowest Observed Adverse Effect Level

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

La norme de qualité pour l’empoisonnement secondaire (QS_{biota_sec pois}) est calculée conformément aux recommandations du guide technique européen (E.C., 2011). Elle est obtenue en divisant la plus faible valeur de NOEC valide par les facteurs d’extrapolation recommandés (E.C., 2011).

Pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, un facteur de 90 est appliqué car la durée du test retenu (NOEC de 3 mg/kg_{biota} obtenue avec le 1,3-dinitrobenzène (99-65-0)) est de 16 semaines. On obtient donc :

$$QS_{\text{biota_sec pois}} = 3 \text{ [mg/kg}_{\text{biota}}] / 90 = 33 \text{ }\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$$

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

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

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

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

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

Avec :

BCF : facteur de bioconcentration,

BMF₁ : facteur de biomagnification,

BMF₂ : facteur de biomagnification additionnel pour les organismes marins.

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

La bioaccumulation tient compte à la fois du facteur de bioconcentration (BCF, ratio entre la concentration dans le biote et la concentration dans l’eau) et du facteur de biomagnification (BMF, ratio entre la concentration dans l’organisme du prédateur en bout de chaîne alimentaire, et la concentration dans l’organisme de la proie au début de la chaîne alimentaire). En l’absence de valeurs mesurées pour le BMF₁ et le BMF₂, celles-ci peuvent être estimées à partir du BCF selon le guide technique européen (E.C., 2011).

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 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, un BCF de 44 et un BMF₁ = BMF₂ de 1 (cf. E.C., 2011) ont été retenus. On a donc :

$$QS_{\text{water sp}} = 33 \text{ [}\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}] / (44 * 1) = 0.75 \text{ }\mu\text{g/L}$$

$$QS_{\text{marin sp}} = 33 \text{ [}\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}] / (44 * 1 * 1) = 0.75 \text{ }\mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire des prédateurs	33	µg/kg _{biota}
valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	0.7	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.

En l'absence de données pertinentes pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, il est proposé de retenir la VTR du 1,3-dinitrobenzène (99-65-0), utilisée à défaut en première approximation, dans le cadre d'un screening/hiérarchisation de substances.

	Type de test	NOAEL ⁽¹⁾ [mg/kg _{corporel} /j]	Source	Valeur toxicologique de référence (VTR) ⁽²⁾ [µg/kg _{corporel} /j]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Rat 16 semaines Administration orale via l'eau de boisson Effet(s) : augmentation du poids de la rate	0.4	Cody et al., 1981 cité par US EPA	0.11 ⁽²⁾ (1,3-dinitrobenzène) AF= 3000, avec AF intra-espèces : 10 AF inter-espèces : 10 AF durée exposition : 10 AF qualité des données : 3

(1) NOAEL : No Observed Adverse Effect Level

(2) Cette VTR a été déterminée par l'US-EPA, 1988

	Classement CMR	Source
Cancérogénèse	Des études chroniques sur rats et souris démontrent que le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène ne présente pas de potentiel cancérogène. La substance n'est pas inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008.	BUA, 1989 C.E., 2008
Mutagenèse	La substance présente un pouvoir mutagène : in vitro, tous les résultats de tests (test d'Ames sur Salmonella typhimurium) sont positifs. Cependant la substance n'est pas inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008.	E. C., 2000 C.E., 2008
Toxicité pour la reproduction	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_{BIOTA_HH})

La norme de qualité pour la santé humaine est calculée de la façon suivante (E.C., 2011) :

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

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 0.11 $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}$ (cf. tableau ci-dessus),
- un poids corporel moyen de 70 kg,
- $F_{\text{sécurité}}$: facteur de sécurité supplémentaire de 10 pour tenir compte des potentiels effets CMR ou de perturbation endocrine de la substance. Le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène ne présentant aucune de ces propriétés, le facteur de sécurité est fixé à 1,
- Cons. Journ. Moy : une consommation journalière moyenne de produits de la pêche (poissons, mollusques, crustacés) égale à 115 g par jour.

Ce calcul n'est donné qu'à titre indicatif. Il peut être inadapté pour couvrir les risques pour les individus plus sensibles ou plus vulnérables (masse corporelle plus faible, forte consommation de produits de la pêche, voies d'exposition individuelles particulières). Le facteur correctif de 10% n'est donné que par défaut, car la contribution des différentes voies d'exposition varie selon les propriétés de la substance (et en particulier sa distribution entre les différents compartiments de l'environnement), ainsi que selon les populations considérées (travailleurs exposés, exposition pour les consommateurs/utilisateurs, exposition via l'environnement uniquement). L'hypothèse cependant que la consommation des produits de la pêche ne représente pas plus de 10% des apports journaliers contribuant à la dose journalière tolérable apporte une certaine marge de sécurité (E.C., 2011).

Pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, le calcul aboutit à :

$$QS_{\text{biota_hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * 0.11 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{0.115 [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} = 6.7 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$$

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

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

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

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

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

Pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, on obtient donc :

$$QS_{\text{water_hh food}} = 6.7 / (44 * 1) = 0.15 \mu\text{g}/\text{L}$$

$$QS_{\text{marine_hh food}} = 6.7 / (44 * 1 * 1) = 0.15 \mu\text{g}/\text{L}$$

Proposition de norme de qualité pour la santé humaine via la consommation de produits de la pêche	7	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$
valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	0.1	$\mu\text{g}/\text{L}$

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

En principe, lorsque des normes de qualité 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 $0.1 \mu\text{g}/\text{L}$).

Pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, la Directive 98/83/CE ainsi que l'OMS ne fixent aucune valeur.

A titre de comparaison, la valeur seuil provisoire pour l'eau de boisson est calculée de la façon suivante (E.C., 2011):

$$MPC_{\text{dw, hh}} [\mu\text{g}/\text{L}] = \frac{0.1 * \text{VTR} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * \text{poids corporel} [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{\text{Cons.moy.eau} [\text{L}/\text{j}]} * \frac{1}{F_{\text{sécurité}}}$$

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 0.11 µg/kg_{corporel}/j (cf. tableau ci-dessus),
- Cons.moy.eau [L/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,
- F_{sécurité} : facteur de sécurité supplémentaire pour tenir compte des potentiels effets CMR ou de perturbation endocrinienne de la substance. Le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène ne présentant aucune de ces propriétés, le facteur de sécurité est fixé à 1.

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.

Ainsi, la norme de qualité correspondante dans l'eau brute se calcule de la manière suivante :

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

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 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, on obtient :

$$QS_{dw_hh} = \frac{0.1 * 0.11 * 70}{2 * (1 - 0)} = 0.38 \mu g/L$$

En l'absence de valeur seuil fixée par la directive 98/83/CE ou l'OMS, la valeur calculée ci-dessus est proposée comme norme de qualité pour l'eau destinée à la production d'eau potable.

Proposition de norme de qualité pour l'eau destinée à l'eau potable	0.4	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}	1.6	µg/L
Organismes aquatiques (eau douce) Concentration Maximum Acceptable	MAC	13	µg/L
Organismes aquatiques (eau marine) moyenne annuelle	AA-QS _{marine_eco}	0.16	µg/L
Organismes aquatiques (eau marine) Concentration Maximum Acceptable	MAC _{marine}	1.3	µg/L
Empoisonnement secondaire des prédateurs	QS _{biota sec pois}	33	µg/kg _{biota}
valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	QS _{water_sp} QS _{marine_sp}	0.7	µg/L
Santé humaine via la consommation de produits de la pêche	QS _{biota hh}	7	µg/kg _{biota}
valeur correspondante dans l'eau (douce et marine)	QS _{water hh food} QS _{marine hh food}	0.1	µg/L
Santé humaine via l'eau destinée à l'eau potable	QS _{dw_hh}	0.4	µg/L

Pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène, la norme de qualité Santé humaine via la consommation de produits de la pêche est la valeur la plus faible pour l'ensemble des approches considérées. La proposition de NQE pour le 1-chloro-2,4-dinitrobenzène est donc la suivante :

PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE

EAU DOUCE

Moyenne Annuelle dans l'eau : $NQE_{EAU-DOUCE} = 0.1 \mu\text{g/L}$

fondée sur la proposition norme de qualité pour la protection de la santé humaine via la consommation de produits de la pêche : $NQE_{BIOTE} = 7 \mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$

Concentration Maximale Acceptable dans l'eau: $MAC_{EAU-DOUCE} = 13 \mu\text{g/L}$

EAU MARINE

Moyenne Annuelle dans l'eau : $NQE_{EAU-MARINE} = 0.1 \mu\text{g/L}$

fondée sur la proposition norme de qualité pour la protection de la santé humaine via la consommation de produits de la pêche : $NQE_{BIOTE} = 7 \mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$

Concentration Maximale Acceptable dans l'eau: $MAC_{EAU-MARINE} = 1.3 \mu\text{g/L}$

VALEURS GUIDES POUR LE SEDIMENT

Avec un Koc de 360 L/kg et un log Kow = 2.17, la mise en œuvre d'un seuil pour le sédiment n'est pas recommandée selon le guide européen (E.C., 2011).

BIBLIOGRAPHIE

- AgrEvo (1995). Unpublished report [Unveröffentlichter Bericht]. CE94/059. February 20.
- BUA (1989). BUA report 42 - 1-Chloro-2,4-dinitrobenzene. GDCh-Advisory Committee on Existing Chemicals of Environmental Relevance, 42. December 1989.
- BUA (2000). BUA Report 219 (Supplementary Reports VI). GDCh-Advisory Committee on Existing Chemicals of Environmental Relevance
- 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. (2000). Directive 2000/60/CE du Parlement Européen et du Conseil du 23 octobre 2000 établissant un cadre pour une politique communautaire dans le domaine de l'eau, JO L 327 du 22.12.2000: 1-86.
- 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.
- Daubert T.E. et Danner R.P. (1991). Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals, Supplement 1, Hemisphere Pub (March 1991).
- Debnath A.K., Lopez de Compadre R.L., Debnath G., Shusterman A.J. et Hansch C. (1991). "Structure-activity relationship of mutagenic aromatic and heteroaromatic nitro compounds. Correlation with molecular orbital energies and hydrophobicity." J. Med. Chem. **34**: 786-797.
- Dierickx P.J. et Van der Wielen C. (1986). "Glutathione-Dependent Toxicity of the Algicide 1-Chloro-2,4-Dinitrobenzene to *Daphnia magna* Strauss." Bull. Environ. Contam. Toxicol. **37**(4): 629-632.
- E. C. (2000). UCLID Dataset for 1-chloro-2,4-dinitrobenzène (97-00-7). European Chemicals Bureau
- 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, Brussels
- E.C. (2011). Technical Guidance For Deriving Environmental Quality Standards. Guidance Document No. 27 for the Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). Technical Report - 2011 - 055.
http://circa.europa.eu/Public/irc/env/wfd/library?l=/framework_directive/guidance_documents/tgd-egs_cis-wfd/ EN 1.0 &a=d.
- ETOX. (2011). "Datenbank für ökotoxikologische Wirkungsdaten und Qualitätsziele." from <http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>.
- Hermens J., Leeuwangh P. et Musch A. (1985). "Joint toxicity of mixtures of groups of organic aquatic pollutants to the guppy (*Poecilia reticulata*)." Ecotoxicology and Environmental Safety **9**: 321–326.
- Hoechst AG (1994a). Unpublished report [Unveröffentlichter Bericht] of the department [Abteilung] Pharma Development Corporate Toxicology of April 26, 1994, 94.0218

Hoechst AG (1994b). Unpublished report [Unveröffentlichter Bericht] of the department [Abteilung] Pharma Development Corporate Toxicology of April 15, 1994, 94.0276

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

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

Maas-Diepeveen J.L. et Van Leeuwen C.J. (1986). Aquatic toxicity of aromatic nitro compounds and anilines to several freshwater species. Laboratory for Ecotoxicology, Institute for Inland Water Management and Waste Water Treatment, The Neederlands, Report No.86-42

MITI (1992). Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the Chemical Substances Control Law (CSCL). Chemicals Inspection and Testing Institute (CITI) from the Ministry of International Trade and Industry, Japan

OECD (2001). "SIDS Initial Assessment Report for 1-Chloro-2-nitrobenzene (88-73-3)."

PNUE (2001). Convention de Stockholm sur les Polluants Organiques Persistants: pp 47.

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