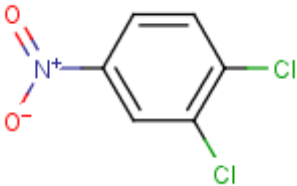


3,4-DICHLORONITROBENZÈNE – n° CAS : 99-54-7

Le 3,4-dichloronitrobenzène est ou a été utilisé comme intermédiaire de synthèse de colorants, d'herbicides et de médicaments (BUA, 1990).

Dans le cadre des travaux de l'OCDE réalisés pour les substances produites à fort tonnage (programme HPVC), le 3,4-dichloronitrobenzène a été évalué et le dossier SIDS¹ de la substance est disponible sur le site de l'UNEP (UNEP, 2005a).

IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE

Substance chimique	3,4-Dichloronitrobenzène
Synonymes	1,2-Dichloro-4-nitrobenzène 3,4-Dichloro-1-nitrobenzène 1-Nitro-3,4-dichlorobenzène
Numéro CAS	99-54-7
Code SMILES	<chem>c1(cc(c(Cl)cc1)Cl)[N+](=O)[O-]</chem>
Formule moléculaire	C ₆ H ₃ Cl ₂ NO ₂
Structure moléculaire	

¹ SIDS : Screening Information Data Set. Les dossiers SIDS regroupent le minimum d'informations nécessaires à une évaluation initiale des dangers des substances chimiques existantes. Ces évaluations des dangers sont gérées par l'OCDE (Organisation de Coopération et de Développement Economiques).

EVALUATIONS EXISTANTES ET INFORMATIONS REGLEMENTAIRES

Evaluation existante	UNEP, 2005a. OECD High Production Volume Chemicals Program, Screening Information Dataset for 1,2-Dichloro-4-nitrobenzene / CAS n° 99-54-7.
Phrases de risque et classification	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).
Effets endocriniens	Le 3,4-dichloronitrobenzène n'est pas cité dans la stratégie communautaire concernant les perturbateurs endocriniens (E.C., 2004) et dans le rapport d'étude de la DG ENV sur la mise à jour de la liste prioritaire des perturbateurs endocriniens à faible tonnage (Petersen <i>et al.</i> , 2007).
Critères PBT / POP	La substance ne remplit pas les critères PBT/vPvB ² (C.E., 2006) ou POP ³ (PNUE, 2001).
Normes de qualité existantes ()	<p><u>Allemagne</u>: norme de qualité pour les eaux prélevées destinées à la consommation = 10 µg/L (ETOX, 2007⁴),</p> <p><u>Allemagne</u>: critère de qualité pour la vie aquatique, l'eau douce = 20 µg/L (fraction totale) (ETOX, 2007⁴),</p> <p><u>Allemagne</u>: critère de qualité pour les eaux de surface = 1 µg/L (fraction totale) (ETOX, 2007⁴).</p>
Mesures de restriction	-
Substance(s) associée(s)	2,3-dichloronitrobenzène (UNEP, 2005b) ; 2,4-dichloronitrobenzène (UNEP, 2005c)

Dans le cadre des travaux de l'OCDE réalisés pour les substances produites à fort tonnage (programme HPVC), le 2,3-dichloronitrobenzène a été évalué et le dossier SIDS de la substance est disponible sur le site de l'UNEP (UNEP, 2005a). Les données issues de ce rapport ont été revues par les états membres de l'OCDE et n'ont pas fait l'objet d'une validation supplémentaire.

² 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).

³ 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>].

⁴ 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]	192	UNEP, 2005a
Hydrosolubilité [mg/L]	121 à 20°C (mesurée)	UNEP, 2005a
Pression de vapeur [Pa]	2 à 25°C	UNEP, 2005a
Constante de Henry [Pa.m ³ /mol]	0.82 à 25°C (mesurée)	UNEP, 2005a
Coefficient de partage Octanol-eau (log Kow)	3.04 à 25°C (mesuré)	UNEP, 2005a
Coefficient de partage carbone organique-eau (Koc) [L/kg]	417 (mesuré)	Wu <i>et al.</i> , 2001
Constante de dissociation (pKa)	Pas d'information disponible.	

COMPORTEMENT DANS L'ENVIRONNEMENT**PERSISTANCE**

		Source
Hydrolyse	Aucune réaction d'hydrolyse n'est attendue en conditions environnementales.	UNEP, 2005a
Photolyse	Bien que la substance absorbe les rayonnements lumineux supérieurs à 290 nm, elle ne réagit pas à ces longueurs d'ondes en solution aqueuse.	BUA, 1990
Biodégradabilité	<10% de biodégradation après 21 jours (BOD). La substance est considérée comme non facilement biodégradable. Il est à noter que les concentrations testées lors de cet essai sont susceptibles d'induire l'inhibition de l'inoculum. De plus, des études ont montré que la substance subit une biodégradation primaire par des microorganismes adaptés (en condition aérobie) et par des organismes non adaptés (en condition anaérobie).	UNEP, 2005a

DISTRIBUTION DANS L'ENVIRONNEMENT

		Source
Adsorption	D'après le Koc (417 L/kg), la substance semble être adsorbable sur les sédiments et les matières en suspension.	-
Volatilisation	Au vu de la valeur de sa constante de Henry (0.82 Pa.m ³ /mol), le 3,4-dichloronitrobenzène semble modérément volatil en solution aqueuse. L'étude de la volatilisation de la substance dans un modèle de rivière et un modèle de lac indique des temps de demi-vie de 6 jours et de 51 jours respectivement.	- US-EPA, 2007
Bioaccumulation	Un BCF compris entre 26 et 65 a été mesuré chez <i>Cyprinus carpio</i> après 56 jours d'exposition au 3,4-dichloronitrobenzène. Un BCF de 117 a été mesuré chez <i>salmo gairdneri</i> après 36 jours d'exposition au 3,4-dichloronitrobenzène. La valeur maximale de 117 est utilisée dans la détermination des normes de qualité.	MITI, 1992 Niimi <i>et al.</i> , 1989
Transport	Selon le modèle de fugacité de Mackay niveau I (US-EPA, 2000), on retrouve le 3,4-dichloronitrobenzène majoritairement dans l'air avec 48.3% et dans l'eau avec 44%.	UNEP, 2005a

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 sont issues de l'évaluation OCDE et n'ont donc pas fait l'objet d'une validation supplémentaire.

Ces résultats d'écotoxicité sont principalement exprimés sous forme de NOEC (*No Observed Effect Concentration*), concentration sans effet observé, ou de EC₅₀, concentration produisant 50% d'effets. Les NOEC sont principalement rattachées à des tests chroniques, qui mesurent l'apparition d'effets sub-létaux à long terme, alors que les EC₅₀ sont plutôt utilisées pour caractériser les effets à court terme.

ECOTOXICITE**ECOTOXICITE AQUATIQUE AIGUË**

			Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	0.32 mg/L <i>Chlorella fusca</i> , E _r C ₅₀ (24 h) (taux de croissance)	Schmitt <i>et al.</i> , 2000
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
Invertébrés	Eau douce	3 mg/L <i>Daphnia magna</i> , EC ₅₀ (24 h)	Knie <i>et al.</i> , 1983
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
	Sédiment	Pas d'information disponible.	
Poissons	Eau douce	3.1 mg/L <i>Leuciscus idus</i> , LC ₅₀ (48 h) Statique	Knie <i>et al.</i> , 1983
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	

ECOTOXICITE AQUATIQUE CHRONIQUE

			Source
Algues & plantes aquatiques	Eau douce	>0.1 mg/L <i>Scenedesmus subspicatus</i> , E _r C ₁₀ (48 h)	Kuehn <i>et al.</i> , 1988
	Milieu marin	Pas d'information disponible.	
Invertébrés	Eau douce	0.025 mg/L <i>Daphnia magna</i> , NOEC (21 j) (taux de reproduction) Semi-statique, système clos, concentration mesurée	Kuehn <i>et al.</i> , 1988
	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'EC₅₀ valide par un facteur d'extrapolation (AF, *Assessment Factor*).

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

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

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

Pour le 3,4-dichloronitrobenzène, on dispose de données valides pour 2 niveaux trophiques en chronique et pour 3 niveaux trophiques en aigu. En chronique, la plus basse NOEC a été observée pour *Daphnia magna* (NOEC 21 j à 0.025 mg/L). C'est pourquoi, un facteur d'extrapolation de 50 est appliqué à la plus basse NOEC (cf. note b du tableau 16, page 101 de E.C., 2003). On obtient donc :

$$AA-QS_{water_eco} = 0.025 \text{ [mg/L]} / 50 = 0.5 \text{ }\mu\text{g/L}$$

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

On dispose de données aiguës sur les trois niveaux trophiques (algues, invertébrés, poissons), la plus faible étant celle sur *Chlorella fusca*, EC₅₀ (48 h) = 0.32 mg/L. Un facteur d'extrapolation de 100 s'applique pour calculer la MAC :

$$MAC = 0.32/100 = 0.0032 \text{ mg/L, soit } 3.2 \text{ }\mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour les organismes de la colonne d'eau (eau douce)		
Moyenne annuelle [AA-QS _{water_eco}]	0.5	µg/L
Concentration Maximum Acceptable [MAC]	3	µg/L

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

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

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

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

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

Ce modèle suppose que :

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

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

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

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

Avec :

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

$K_{\text{susp-eau}}$: coefficient de partage matière en suspension/eau en m^3/m^3 . En l'absence d'une valeur exacte, les valeurs génériques proposées par Lepper, (2002) et le guide technique européen (équation 24 page 47, E.C., 2003) sont utilisées. Le coefficient est alors calculé selon la formule suivante : $0.9 + 0.025 * Koc$ soit $K_{\text{susp-eau}} = 11.325 \text{ m}^3/\text{m}^3$.

Ainsi, on obtient :

$$QS_{\text{sed wet weight}} [\mu\text{g/kg}] = \frac{11.325}{1150} * 0.5 * 1000$$

$$QS_{\text{sed wet weight}} = 4.92 \mu\text{g/kg} \text{ (poids humide)}$$

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

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

Avec :

$F_{\text{solide_susp}}$: fraction volumique en solide dans les matières en suspension en $[\text{m}^3_{\text{solide}}/\text{m}^3_{\text{susp}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par Lepper (2002) et le guide technique européen (tableau 5 page 43, E.C., 2003) est utilisée : $0.1 \text{ m}^3/\text{m}^3$.

RHO_{solide} : masse volumique de la partie sèche en $[\text{kg}_{\text{solide}}/\text{m}^3_{\text{solide}}]$. En l'absence d'une valeur exacte, la valeur générique proposée par Lepper (2002) et le guide technique européen (tableau 5 page 43, E.C., 2003) est utilisée : 2500 kg/m^3 .

3,4-DICHLORONITROBENZENE – n° CAS : 99-54-7

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

$$QS_{\text{sed dry_weight}} = 4.92 * 4.6 = 22.65 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$$

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.

Proposition de valeur guide de qualité pour les sédiments (eau douce)	5	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids humide}}$
	23	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{sed poids sec}}$
Considérations particulières	Avec un Koc de 417 L/kg et un Log Kow = 3.04, 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.	

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

Validation groupe d'experts : Octobre 2009

Version 2 : 12/11/2009

Page 8

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 _{corporel} /j]	Source	Facteur de conversion	NOEC [mg/kg _{biota}]
Toxicité sub-chronique et/ou chronique	Rat Modification des paramètres hématologiques (nombre d'hématies, hématicrite, volume globulaire moyen, nombre de réticulocytes) 28 jours	4	UNEP, 2005a	10	40
Toxicité pour la reproduction	Rat (pureté de la substance : 85%) Méthémoglobinémie chez la mère et le fœtus Exposition entre le 6ème et le 15ème jour de gestation	10	Monsanto Company, 1987	10	100

TOXICITE ORALE POUR LES OISEAUX

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

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

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

Pour le 3,4-dichloronitrobenzène, un facteur de 300 est appliqué car la durée du test retenu (NOEC égale à 40 mg/kg_{biota} sur rat) est de 28 jours. On obtient donc :

$$QS_{\text{biota_sec pois}} = 40 \text{ [mg/kg}_{\text{biota}}] / 300 = 133.33 \text{ } \mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$$

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

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

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 biote.

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 le 3,4-dichloronitrobenzène, un BCF de 117 sur *salmo gairdneri* (Niimi *et al.*, 1989) et un BMF de 1 (cf. E.C., 2003) ont été retenus. On a donc:

$$PNEC_{\text{secpois dans eau}} = 133.33 \text{ [}\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}] / (117 * 1) = 1.1 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour l'empoisonnement secondaire des prédateurs	133	$\mu\text{g/kg}_{\text{biota}}$
valeur correspondante dans l'eau	1	$\mu\text{g/L}$

SANTE HUMAINE

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

Validation groupe d'experts : Octobre 2009

Version 2 : 12/11/2009

Page 10

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 Modification des paramètres hématologiques (nombre d'hématies, hémocrite, volume globulaire moyen, nombre de réticulocytes) 28 jours	LOAEL = 4	UNEP, 2005a	2 ⁽¹⁾ Facteur d'incertitude : 1800 Avec : AF inter-intra espèces = 100 AF durée de l'exposition = 6 AF LOAEL-NOAEL = 3

(1) Cette VTR a été déterminée par l'INERIS.

	Classement CMR	Source
Cancérogénèse	La substance n'est pas inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008.	C.E., 2008
Mutagénèse	<i>In vitro</i> , le 3,4-dichloronitrobenzène présente des résultats positifs pour le test d'Ames et sur culture de cellules de rongeurs la substance est mutagène (test d'échange de chromatides sœurs).	BUA, 1990
	<i>In vivo</i> , la substance ne présente pas de pouvoir clastogène (test d'aberration chromosomique chez le rat). La substance n'est pas inscrite à l'Annexe VI du règlement (CE) No 1272/2008.	UNEP, 2005a 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 (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 2 $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}$ (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 le 3,4-dichloronitrobenzène, le calcul aboutit à :

$$QS_{\text{biota hh}} [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}] = \frac{0.1 * 2 [\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{corporel}}/\text{j}] * 70 [\text{kg}_{\text{corporel}}]}{0.115 [\text{kg}_{\text{biota}}/\text{j}]} = 121.74 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$$

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 :

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

Pour le 3,4-dichloronitrobenzène, on obtient donc :

$$QS_{\text{water_hh food}} = 121.74 / (117 * 1) = 1.04 \mu\text{g}/\text{L}$$

Proposition de norme de qualité pour la santé humaine via la consommation de produits de la pêche	122	$\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{biota}}$
Valeur correspondante dans l'eau	1	$\mu\text{g}/\text{L}$

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

La norme de qualité pour l'eau de boisson est calculée de la façon suivante (Lepper, 2005):

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

Ce calcul tient compte de :

- la valeur toxicologique de référence (VTR) ; pour cette substance elle sera considérée égale à 2 $\mu\text{g/kg}_{\text{corporel}}/\text{j}$,
- une consommation d'eau moyenne de 2 L par jour,
- un poids corporel moyen de 70 kg,
- un facteur correctif de 10% (soit 0.1) afin de tenir compte de ces autres sources de contamination possibles.

L'eau de boisson est obtenue à partir de l'eau brute du milieu après traitement pour la rendre potable. La fraction éliminée lors du traitement dépend de la technologie utilisée ainsi que des propriétés de la substance.

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

En l'absence d'information, on considèrera que la fraction éliminée est nulle et le critère pour l'eau de boisson s'appliquera alors à l'eau brute du milieu. Par ailleurs, on rappellera que ce calcul n'est donné qu'à titre indicatif et peut s'avérer inadéquat pour certaines substances et certaines populations.

Pour le 3,4-dichloronitrobenzène, on obtient :

$$QS_{\text{dw_hh}} = \frac{0.1 \cdot 2 \cdot 70}{2 \cdot (1 - 0)} = 7 \mu\text{g/L}$$

Proposition de norme de qualité pour l'eau destinée à l'eau potable	7	μg/L
--	---	------

PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE (NQE)

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

		Valeur	Unité
PROPOSITION DE NORMES DE QUALITE			
Organismes aquatiques (eau douce) moyenne annuelle	AA-QS _{water_eco}	0.5	µg/L
Organismes aquatiques (eau douce) Concentration Maximum Acceptable	MAC	3	µg/L
Empoisonnement secondaire des prédateurs valeur correspondante dans l'eau	QS _{biota sec pois}	133	µg/kg _{biota}
	QS _{water_sp}	1	µg/L
Santé humaine via la consommation de produits de la pêche valeur correspondante dans l'eau	QS _{biota hh}	122	µg/kg _{biota}
	QS _{water hh food}	1	µg/L
Santé humaine via l'eau destinée à l'eau potable	QS _{dw_hh}	7	µg/L

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

PROPOSITION DE NORME DE QUALITE ENVIRONNEMENTALE

Moyenne Annuelle dans l'eau :	NQE_{EAU} =	0.5 µg/L
Concentration Maximale Acceptable dans l'eau :	MAC =	3 µg/L

VALEURS GUIDES POUR LE SEDIMENT

Avec un Koc de 417 L/kg et un Log Kow = 3.04, 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.

Sédiments (eau douce)	QS_{sed}	5	µg/kg_{sed poids humide}
		23	µg/kg_{sed poids sec}

BIBLIOGRAPHIE

BUA (1990). BUA report for 1,2-dichloronitrobenzenes (1,2-dichloro-3-nitrobenzene, 1,2-dichloro-4-nitrobenzene). BUA report 52, GDCh-Advisory Committee on Existing Chemicals of Environmental Relevance.

C.E. (1967). Directive 67/548/CEE du Conseil, du 27 juin 1967, concernant le rapprochement des dispositions législatives, réglementaires et administratives relatives à la classification, l'emballage et l'étiquetage des substances dangereuses. Journal officiel n° 196 du 16/08/1967 p. 0001 - 0098.

C.E. (2006). Règlement (CE) n°1907/2006 du Parlement européen et du Conseil du 18 décembre 2006 concernant l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des substances chimiques, ainsi que les restrictions applicables à ces substances (REACH), instituant une agence européenne des produits chimiques, modifiant la directive 1999/45/CE et abrogeant le règlement (CEE) n° 793/93 du Conseil et le règlement (CE) n°1488/94 de la Commission ainsi que la directive 76/769/CEE du Conseil et les directives 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CE et 2000/21/CE de la Commission, JO L 396 du 30.12.2006: p. 1–849.

C.E. (2008). Règlement (CE) no 1272/2008 du Parlement européen et du Conseil du 16 décembre 2008 relatif à la classification, à l'étiquetage et à l'emballage des substances et des mélanges, modifiant et abrogeant les directives 67/548/CEE et 1999/45/CE et modifiant le règlement (CE) no 1907/2006.

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

Knie, J., A. Hälke, *et al.* (1983). "Results of Studies on Chemical Substances with Four Biotests. (Ergebnisse der Untersuchungen von chemischen Stoffen mit vier Biotests)." Deutsches gewässerkundliche Mitteilungen **27**(3): 77-79.

Kuehn, R., M. Pattard, *et al.* (1988). "Schadstoffwirkungen von Umweltchemikalien im Daphnien-Reproduktions-Test als Grundlage fuer die Bewertung der Umweltvertraeglichkeit in aquatischen Systemen." **UFOPLAN Nr 10603052 des BMU.**

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.

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.

3,4-DICHLORONITROBENZENE – n° CAS : 99-54-7

Monsanto Company (1987). Rat teratology study with nitrated orthene (report no. ML-84-104). Monsanto Co., St Louis (OTS0524331, 88-900000145).

Niimi, A. J., H. B. Lee, *et al.* (1989). "Octanol/water partition coefficients and bioconcentration factors of chloronitrobenzenes in rainbow trout (*salmo gairdneri*)."
Environ. Toxicol. Chem. **8**: 817-823.

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.

Schmitt, H., R. Altenburger, *et al.* (2000). "Quantitative Structure-Activity Analysis of the algae toxicity of nitroaromatic compounds."
chem res toxicol **13**: 441-450.

UNEP (2005a). OECD High Production Volume Chemicals Program, Screening Information Dataset for 1,2-Dichloro-4-nitrobenzene / CAS n° 99-54-7: 165 p.

UNEP (2005b). OECD High Production Volume Chemicals Program, Screening Information Dataset for 2,3-Dichloronitrobenzene / CAS n° 3209-22-1: 31 p.

UNEP (2005c). OECD High Production Volume Chemicals Program, Screening Information Dataset for 2,4-Dichloronitrobenzene / CAS n° 611-06-3: 37 p.

US-EPA (2000). EPI Suite, EPA's office of pollution prevention toxics and Syracuse Research Corporation (SRC).

US-EPA (2007). EPI Suite, v.3.20 (February 2007), EPA's office of pollution prevention toxics and Syracuse Research Corporation (SRC).

Wu, C. D., D. B. Wei, *et al.* (2001). "Estimation of the sorption of substituted aromatic compounds on the sediment of the Yangtse river."
Bull Environ Contam Toxicol **66**: 777-783.