

Références

- Alexander. M. Biodegradation. Problems of molecular recalcitrance and microbial failibility in *Advances of Applied Microbiology Acad. Press. New York* (1965).
- Ankley G.T. et al. (1992) Bioaccumulation of PCBs from sediments by oligochètes and fishes. Comparison of laboratory and field studies. *Can.Journal Fish. Aquatic Science.* 49-2080-2085
- J.Arnot et F.Gobas (2006) A review of bioconcentration factors BCF and bioaccumulation factors BAF assessments for organic chemicals in aquatic organisms *Env. Review* 14, (4) 257-297
- Aronson D.and Howard P.H. (1997) Anaerobic degradation rates of organic compounds in groudwater. A summary of field and laboratory studies. American Petroleum Institute
- F.Birgand et al. (2007) Nitrogen removal in streams of agricultural catchments. A literature review. *Env. Sci. and Technology* n°37 1-107
- R.S.Boethling (2000) Handbook of property estimation methods for chemicals. CRC press
- De Boes J. Van des Valk et al. (1994)
Environ. Sci. Technol. 28 / p. 2242-2248.
- Brunson E.L. (1998) dans US EPA National Sediment Bioaccumulation Conference .
 Proceedings EPA 823-A-98-002
- Chapman P.M. (1996) *Hum. Ecol. Risk Assessment* Vol 2 n°3
- Chiou C.T. et al (1979) A physical concept of soil water equilibria for non ionic organic compounds *Science* 206, 831-32
- Cohen Y. W. Cocchio and D. MacKay. (1978) Laboratory studies of liquid phase controlled volatilization rates in presence of wind waves *Env. Sci Technol.* 12 553-58
- Collins C.E. et al (1978). The effects of temperature on biological wastewater treatment processes. Purdue University Wat. Res. Center Technical report n° 98 West Lafayette Indiana.
- Commission Européenne (2002) Guidance document on aquatic ecotoxicity SANCO/3268/2001 (17 octobre 2002)
- Commission Européenne (1998) Guidance document on terrestrial ecotoxicology 2021/VI/98
- Cemagref, Compagnie Nationale du Rhône, Agence de l'eau Artois Picardie, Tauw Environnement (2001) Guide Méthodologique : Caractérisation des sédiments

CSTEE (Comité Scientifique pour la Toxicité, l'Ecotoxicité et l'Environnement) (2002)
Opinion of the CSTEE on the revision of the TGD 1996 (marine risk assessment)
http://ec.europa.eu/food/fs/sc/sct/out152_en.pdf

Di Toro et al. (1991) Technical basis for establishing sediment quality criteria for non ionic organic chemicals using equilibrium partitioning. *Env. Techn. and Chemistry* 10, 1541-1583

ECETOC (2003) Technical Report: persistence of chemicals in the environment

ECETOC (2001) Technical report n°82 Risk Assessment in the marine environment

ECETOC (2005) Technical report n°92 Soil and sediment risk assessment of organic chemicals

ECETOC (2005) Technical Report n°98. Risk assessment of PBT

ECETOC (2007) WR 10 Workshop on biodegradability and persistence

ECETOC (2009) Bioavailability. ECETOC Workshop report n°17

Environment Agency UK (2004) R and D Technical Report P5-091 Soil screening value for use in UK ecological risk assessment

Environment Agency UK (2002) R and D Technical Report P2-245/TR P.Noble P.Morgan

O.Englund et al. (2000) Bioaccumulation and differential partitioning of PCB in freshwater planktonic food web. *Canadian Journal of fisheries and aquatic sciences* 57 (6) 1160-1168

T.W.Federlé et al. (1997) Extrapolating mineralization rates from the ready CO₂ screening test to activated sludge, river water, and soil. *Env.Tox.Chemistry* 16, 124-135

FOCUS Forum for the coordination of pesticides fate modeling and their use. Soil modeling workgroup report Doc 7617/VI/96

Gonzalez-Doncel et al (2003) Report on biomagnification. Biomagnification concept and modelling approaches. ECO-1AINIA -1100 CEFIC LRI Programme

C.Gourley (2004) Thèse ENGREF de l'Ecole Nationale du Génie Rural, des Eaux et Forêts Biodisponibilité des HAP dans les écosystèmes aquatiques. Influence de la matière organique

Gobas F.A. et H.A.Morrison (2000) « Bioconcentration and biomagnification in the aquatic environment », dans R.S. Boethling et D. Mackay, éditeurs, *Handbook of property estimation methods for chemicals, environmental and health sciences*, Boca Raton, Fla., CRC Press., 2000, p. 189-231.

T.Harner et al (1999) Using the octanol-air partition coefficient to describe sorption to aerosols. American Chemical Society Symposium. Preprints of extended abstracts Vol 39 N°1, 431-433

Haakon Hop et al. Marine Food Web structures and pathways in the Barents Sea revealed by stable isotopes and fatty acid markers Norwegian Polar Institute
<http://www.havforsk.etp.no/havforsk/vedlegg/3-hop.pdf>

P.H. Howard (1993) Handbook of environmental fate and exposure data for organic chemicals Lewis publishers

Ingersoll C.G. et al. (1995) Methods for assessing BSAF with fresh water invertebrates ; Env. Toxicol. Chemistry 14- 1885-1894

D.T.Jager (1997) Estimation methods for bioaccumulation in risk assessment of organic chemicals. RIVM report 679102013

M.J.Jourdain et col. (2007) Etat des connaissances sur le devenir des polluants dans les sols lors de la biodégradation naturelle et après biotraitement. Etude RECORD n°05-0513/1A
www.record-net.org

S.E.Jorgensen et al. (1998) Handbook of Estimation Methods in ecotoxicology and environmental CRC Press

S.W.Karickhoff (1981) Semi empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments and soils. Chemosphere, 10, 833-846

Karickhoff S.W. (1979) Sorption of hydrophobic pollutants in natural sediments and soils Env. Sci. Techn. 14 (12) 1524-1548

Klasmeier J. et al. (2006) Application of multimedia models for screening assessment of LRTP and overall persistence. Env. Sci. Technol. 40 (1) 53-60

M.Lapertot (2006) Thèse n°3548-2006 de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne Chapitre 2 : Biodegradability assessment of several priority hazardous substances.

R.Kloskowski et al: Draft guidance on the calculation of predicted environmental concentration value (PEC) of plant protection products for soil, ground water, surface water and sediment

Lawrence Berkeley National Laboratory (1999) Evaluating chemical persistence in a multimedia environment. A CART analysis D.Bennett et al. LBNL 42897

Gerald A Le Blanc (1995) Trophic level differences in the bioconcentration of chemicals. Implication in assessing environmental biomagnification. Env. Science and Technology 29, 154-160

Leip A. Lammel G. FeichterJ. (2001) Long Range Transport and overall persistence as determined by a multicompartement chemistry transport model SETAC meeting Baltimore

- P.Leonards et al. (2008) Assessing the risk of POPs to top predators Integ. Env. Assessment Management 4-4, 386-398
- Liss P.S and P.G Slater (1974) Flux of gases across the air sea interface Nature 247 181-184.
- X.Lu (2003) Thèse de l'Université de Louisiane : Bioavailibility and bioaccumulation of sediment associated with desorption resistant fractions of PAHs contaminants
- W. J. Lyman et al. (1990) Handbook of Chemical Property estimation methods. American Chemical Society. Washington DC.
- Mabey W. et T. Mill (1978) Stanford Research Institute: Critical review of hydrolysis of Organic compounds in water under Environmental conditions J. Phys. Chem. Ref. Data 7 383-415 (1978). <http://www.nist.gov/srd/PDFfiles/jpcrd114.pdf>
- Mac Kay D. et al. (1999) Defining the partitioning persistence and transport attributes of priority chemicals ACS symposium of Anaheim. Extended abstracts Vol 39 n°1 113-116
- MacLeod et al. (2007) Model results for overall persistence and potential of long range transport for chemicals http://www.sust-chem.ethz.ch/docs/UNECE_POP_candidates/the_tool.pdf
- Marchand M et C.Tissier (2006) Analyse du risque chimique en milieu marin. L'approche méthodologique européenne IFREMER INERIS
- Metcalf and Eddy Inc. (1991) Wastewater Engineering. Treatment, Disposal and Reuse. 3rd edition, McGraw-Hill, New York
- Neely W.B. et al Partition coefficient to measure Bioconcentration Potentials of Organic Chemicals in fish Env. Sci. Tech. 8, 1113-15 (1974)
- T.Netzera et al (2008) Rationalising outliers in QSAR for bioaccumulation. Joint Research Centre European Chemicals Bureau Ispra Italie
- OCDE (2008) Lignes directrices pour les essais de produits chimiques. Bioaccumulation chez les oligochètes benthiques fousseurs.
- OCDE;(2007) OCDE guidelines for testing of chemicals <http://www.oecd.org/env/testguidelines>
- OCDE (2001) Env health and safety publications. Series on testing and assessment n°27 Guidance document on the use of the harmonized system for the classification of chemicals which are hazardous for the aquatic environment. ENV./JM/HCL (2001)
- OCDE (2004) Guidance document on the use of multi-media models for estimating overall environment persistence and Long Range Transport Potential n°45 OCDE health and Safety Paris

- OCDE (1995) Guidance document for aquatic assessment OECD Environment monograph n°92 OCDE health and Safety Paris
- OCDE (2006) Frequently asked questions: new proposed OECD Guideline: Simulation tests for assessing primary and ultimate biodegradation of chemicals.
www.oecd.org/dataoecd/50/2/37178488.pdf
- ONU (2007) Document guide sur les dangers pour le milieu aquatique Annexe 9
- Oliver (1984) Uptake of chlorinated organics from sediments by oligochètes. Can. J. Fish. Aquatic Science 41, 878-883
- OSPAR Oslo and Paris Convention. Proceedings du Workshop de Paris 20.21 mai 1997. Communication de N. Scholtz.
- H.A.Painter (1995) Detailed review paper on biodegradability testing OECD series on the tests guideline programme n°2 OCDE /GD(95)/43
- Paterson S et al ; (1991) Env. Sci. Technology 25 866-871
- Pavan M. et al (2006) Review of QSAR models for bioconcentration. ECB report EUR 22327 EN 2006
- B.Pellet (2005) Rôle de la matière organique particulaire dans la contamination des organismes aquatiques : piège ou vecteur des micropolluants ? Thèse de l'Ecole des Mines de Paris Université Pierre et Marie Curie, Ecole des Eaux et Forêts, Master Sciences de l'Univers, Environnement, Ecologie
- Prinn et al. (2001) Evidence for substantial variations in atmospheric hydroxyl radicals in the past two decades Science 292 1882-1883
- RIVM (1995) Manual for summarising and evaluating the environmental aspects of pesticides Report 679-10-10-22 B.J.Mensink et al
- RIVM (1997) Estimation methodes for bioaccumulation in risk assessment of organic chemicals Report n° 679 102013
<http://www.rivm.nl/bibliotheek/rapporten/679102013.html>
- RIVM (2001) Ecotoxicological Serious Risk concentrations (SRCs) for soil sediment and groundwater Updated proposals for a first serie of compunds EMJ Verbruggen et al Report n° 711 701 020
- RIVM (2001) Technical evaluation of the intervention values for soil, sediment and groundwater .Report n° 711 701 023

- RIVM (2004) Guidance for deriving dutch Environmental Risk Limits for the EU Environmental Risk Assessment Reports for existing chemicals, MPM Janssen, Report 601 501 020
- Romijn, C.A.F.et al (1993). Presentation of a General Algorithm to Include Effect Assessment on Secondary Poisoning in the Derivation of Environmental Quality Criteria. Part 1: Aquatic food chains. *Ecotox. Environ. Saf.* 26, 61-85.
- Romijn, C.A.F.et al (1994). Presentation of a general algorithm to include effect assessment on secondary poisoning in the derivation of environmental quality criteria. Part 2. Terrestrial food chains. *Ecotox. Environ. Saf.* 27, 107-127.
- B.Rodan (1999) Screening for persistent organic pollutants. Techniques to provide a scientific basis for POPs criteria in international regulation (US EPA) *Env.Sci.Technolog.* 33,20,3482-3488.
- Sauvé S. et al (2000) Solid solution partitioning of metals in contaminated soils. Dependence of pH Total metal burden and organic matter *Env. Sci. Technology* 34, 1125-1131
- SETAC (2008) Summary of the SETAC Pellston Workshop on Science-Based Guidance and Framework for the Evaluation and Identification of PBTs and POPs, 28 January–1 February 2008, Pensacola, Florida USA
- SETAC (1995) Procedures for assessing the environmental fate and ecotoxicology for pesticides
- Skolglund, D. L. S. a. R. S. (1991). The Role of Phytoplankton in the partitioning of Hydrophobic Organic Contaminants in Water. *Organic Substances and Sediments in Water.* R. A. Backer, Lewis Publisher
- C.E.Smet et al.(2000) Secondary poisoning of cadmium, copper, mercury Report RIVM 601-501-009
- Smith J.H. and D.C. Bomberger Prediction of volatilization rates of chemicals in water *Water* (1978). *AICh E Symposium series* 190 75, 375-81 (1979).
- Smith J.H. and al (1980) Prediction of volatilization rates of high volatility chemicals from natural water bodies *Env. SciTechnol.* 14, 1332. 1337.
- Struips J.et R.Van den Berg (1995) Standardised biodegradation tests: extrapolation to aerobic environment *Water Res.* 29,255-262
- Thomann R.V. et al. (1992) An equilibrium model of organic chemical accumulation in aquatic food webs with sediment interaction. *Env. Toxicol. Chemistry* 11-615-629
- Thomann B. V. (1989) *Env. Sci. Technol.* 23 / p. 694-707.
- UNEP/IPCS Training Module n°3 section B Environmental Risk Assessment

UNEP (1998) UNEP/POPS/INC 1/6 du 20 avril 1998

Union Européenne Technical Guidance Document on risk assessment of existing substances in the context of Regulation EC n° 1488/94 in accordance with Council regulation EEC 793/93 on the evaluation and control of existing substances.(2003)

Union Européenne Guidance documents on information Requirements and Chemical Safety for the implementation of the REACH Regulation EC 1907/2006
http://reach.jrc.it/docs/guidance_document/information_requirements_en.htm

U.S.Army Corps of Engineers April 2008 BSAF database

US EPA (2008) Procedures for deriving Bioaccumulation Factors for the Lake Michigan Basin Section 302 Water Quality Standards

US EPA Fate, transport and transformation tests guidelines OPPTS 835.0001 Principles and strategies related to biodegradation testing of organic chemicals under the Toxic Substance Control Act EPA 712-C-08-008 Oct 2008

US EPA (1995) Final Water Quality Guidance for the Great Lakes System. Federal Register March 23 1995 vol.60 number 56 pages 15365-15425

US EPA (2000) Interim Guidance for using ready and inherent biodegradation tests to derive input data for multimedia models and waste water treatment plants models.

US EPA (1999) Anaerobic degradation rates of organic chemicals in groundwater. A summary of field and laboratory studies. (Office of solid wastes)

US EPA (1993) Wildlife Exposure Factors Handbook EPA 600/R93/187 sur
<http://cfpub.epa.gov/ncea/cfm>
<http://cfpub.epa.gov/ncea/cfm/recordisplay.cfm?deid=12464>

US EPA (2007) Framework for metals risk assessment EPA 120 R-07/001 March 2007

US EPA (2003) Methodology for deriving ambient Water Quality Criteria for the protection of human health. Technical Support Document Vol 2 Development of national bioaccumulation factors EPA-822-R03-030

US EPA (2009) Methodology for deriving ambient Water Quality Criteria for the protection of human health. Technical Support Document Vol 3 Development of site specific bioaccumulation factors EPA-822-R09-008 Sep. 2009

Veith G.D et al “Measuring and estimating the Bioconcentration Factor of Chemicals for fish” J. Fish Res. Board Can. 36 1040-48 (1979).

Veith G.D et al An evaluation of using partition coefficients and water solubility to estimate bioconcentration Factors for Organic chemicals in fish J. Fish Res. Board. Canada (1980)

Wania F. et D.Mackay (1996) *Envir. Sci. Technology* 30, 390-396

ANNEXES

ANNEXE 1

DÉFINITIONS

ABIOTIQUE

Un processus abiotique est un processus non biologique qui dépend des conditions physico-chimiques de la substance et de son environnement, tel que photolyse, hydrolyse, photo-oxydation..

AGEING (Vieillessement)

Décroissance de la biodisponibilité d'une substance avec le temps par augmentation des processus d'association de la substance avec le support où elle est adsorbée.

BIOCONCENTRATION

C'est le résultat net de l'absorption, de la distribution et de l'élimination de la substance par l'espèce étudiée, du fait de l'exposition de l'espèce dans l'eau.

BIOACCUMULATION

On appelle bioaccumulation le résultat net des phénomènes d'absorption (uptake) de distribution et d'élimination de la substance dans l'espèce, du fait de toutes les voies d'exposition (eau, nourriture...).

BIODISPONIBILITE

Le concept de biodisponibilité permet de faire la distinction entre les substances dont l'état physico-chimique leur permet d'agir sur le vivant et celles qui ne le peuvent pas. Est biodisponible une substance sous une forme physico-chimique qui lui permet de franchir les barrières biologiques d'un organisme.

BIODISPONIBILITÉ (Bioavailability)

Propriété d'une espèce chimique ou d'un élément présent dans un compartiment de l'environnement d'être plus ou moins facilement absorbé par les organismes vivants (végétaux, animaux, micro-organismes) On définit la fraction biodisponible de la substance en fonction de cette propriété.

Elle dépend des propriétés physiques et chimiques de la substance et des concentrations libres qui résultent de facteurs propres au milieu, tels la présence de matières organiques dissoutes ou en suspension, qui captent une partie de la substance.

BIOMAGNIFICATION

On appelle biomagnification l'accumulation et le transfert de substances chimiques à travers la chaîne alimentaire (par exemple algues – invertébrés – poissons – mammifères) due à l'ingestion d'une espèce par l'autre et dont le résultat est l'augmentation du niveau de concentration de la substance dans les organismes successifs rencontrés dans la chaîne, avec correction par la teneur en lipides. Les canadiens parlent de BIOAMPLIFICATION

CHAINE TROPHIQUE

Ensemble des relations qui s'établissent entre des organismes en fonction de la façon dont ceux-ci se nourrissent. Comprend des **producteurs** (algues, phytoplancton, végétaux chlorophylliens qui transforment le CO₂ en matière organique), des **consommateurs primaires** (crustacés, herbivores, phytophages), des **consommateurs secondaires** (carnivores, poissons) et des **décomposeurs** (ou détritivores). Les polluants qui ne se dégradent pas ou peu (métaux lourds) vont se concentrer au sommet de la chaîne trophique, chez les prédateurs.

La chaîne alimentaire aquatique comprend un producteur, généralement une algue, un consommateur primaire, par exemple la daphnie, un consommateur secondaire, le poisson, et un prédateur qui se nourrit de poissons (oiseaux, mammifères,) Il y a donc 4 niveaux trophiques à cette chaîne ;

COMPARTIMENT (anglais compartment)

Subdivision de l'environnement telle que l'eau, l'air, le sol... synonyme : milieu.

DEMI-VIE (anglais Half Life)

Temps nécessaire pour qu'une masse, une concentration, une activité d'un agent physique, chimique ou biologique, soit réduite de moitié.

DOSE JOURNALIERE ADMISSIBLE

La dose journalière admissible est, pour les substances non génotoxiques à seuil de toxicité, la dose sans effet toxique pour l'organisme. Elle se définit en général en milligrammes par kilo de poids corporel et par jour (parfois par semaine pour l'OMS)

EXCES DE RISQUE INDIVIDUEL

C'est la probabilité de survenue d'un danger lié à une exposition à un agent génotoxique, pendant la vie entière de l'individu.

EXCES DE RISQUE UNITAIRE

Estimation de la valeur du ERI pour une exposition à une unité de dose de l'agent génotoxique pendant la vie entière.

**Les Propriétés Environnementales des Substances Rév 1– Roger Papp © CNEEIC –
Collège National d'Experts en Environnement de l'Industrie Chimique - www.cneiec.org**

ÉPURATION (Depuration)

C'est l'élimination de la substance par un organisme. La vitesse d'épuration est exprimée en demi-vie ou le temps nécessaire pour éliminer 50 % de la substance dans un milieu non contaminé. Cette valeur est appelée DT_{50} , temps d'élimination.

EQC MODEL

Equilibrium Criterium Model. Modèle de fugacité multi-média qui suppose l'équilibre thermodynamique réalisé. Il s'agit des modèles de fugacité de classe I et II.

FACTEUR DE BIOMAGNIFICATION BMF

Le BMF est le rapport entre la concentration en substance dans la fraction lipide d'une espèce d'un certain niveau trophique, et la concentration en substance dans la fraction lipide de ses proies, c'est-à-dire de sa nourriture. La bioamplification peut donc s'interpréter comme une succession de BMF dans la chaîne trophique, dont certains sont supérieurs à 1.

HYDROPHOBE, LIPOPHYLE

Une substance est hydrophobe (du grec peur de l'eau) lorsque sa solubilité dans l'eau est faible.

L'hydrophobie d'une substance est définie par son coefficient K_{ow} de partage à l'équilibre entre l'octanol et l'eau. Une substance hydrophobe est souvent **lipophile**, c'est-à-dire ayant une affinité pour la fraction lipide d'un organisme, représentée dans le K_{ow} par l'octanol

INDICE ou QUOTIENT de RISQUE

C'est le rapport entre la dose journalière d'exposition et la dose journalière admissible pour les substances à seuil de toxicité

LC₀ Concentration la plus élevée qui n'entraîne pas de mortalité des individus exposés au test.

LC₅₀ Une concentration qui pour une période donnée, entraîne 50 % de mortalité des organismes exposés au test.

LOAEC ou LOAEL Lowest Observed Adverse Effect Concentration (ou Level)

La concentration ou la dose la plus faible à laquelle un effet statistiquement significatif peut être observé, par rapport à un groupe témoin. En Français, DMENO dose minimale pour laquelle un effet nocif est observé.

MINERALISATION

La production de substances inorganiques par biodégradation aérobie ou anaérobie de substances organiques.

NOAEL No Observed Adverse Effect Level

La concentration ou la dose la plus élevée à laquelle aucun effet adverse n'est observé. En Français, DSENO dose sans effet nocif observé

NOEC No Observed Effect Concentration

La concentration la plus élevée à laquelle la substance testée n'a pas d'effet observé sur les organismes testés.

PERSISTANCE (anglais persistence)

Propriété d'une substance à demeurer présente dans l'environnement. Elle se mesure dans chaque compartiment de l'environnement par le temps de demi-vie. La tendance actuelle est de rechercher une « persistance globale » en pondérant les masses de substance de chaque compartiment, calculée par un modèle EQC, par les constantes cinétiques de vitesse de dégradation pour l'air, l'eau, les sols et les sédiments,

PEC (predicted environmental concentration)

La PEC est une indication de la concentration à attendre d'une substance dans un milieu, en tenant compte de la concentration existante et ajoutée, de sa distribution, et des dégradations.

PHENOMENE DE TRANSFERT

Une substance subit des phénomènes de transfert lorsqu'elle passe d'un compartiment de l'environnement à un autre, par exemple par volatilisation ou adsorption. La substance n'est pas détruite mais elle n'existe plus dans le compartiment

PHOTOLYSE

Décomposition d'une substance en molécules plus simples sous l'effet de l'absorption de rayonnement lumineux d'une longueur d'onde appropriée.

PHOTO- OXYDATION

Oxydation d'une substance sous l'effet d'un rayonnement lumineux de longueur d'onde appropriée.

PNEC Predicted Non Effect Concentration

Niveau de concentration présumé sans effet, établi sur la base de tests sur espèces de plusieurs niveaux trophiques, conformément aux définitions du document guide technique associé au règlement 94/1488/CEE (TGD)

QUOTIENT DE DANGER OU QUOTIENT DE RISQUE

C'est le rapport entre la dose d'exposition exprimée en dose journalière d'exposition et la dose journalière admissible pour les substances à seuil de toxicité non génotoxiques

REFERENCE DOSE RfD

C'est la dose de référence définie par l'US EPA pour les substances à seuil, pour l'ingestion et l'inhalation.

SUBSTANCES A EFFET TOXIQUE SANS SEUIL

Il s'agit pour l'essentiel des substances cancérigènes génotoxiques et des mutations génétiques.

SUBSTANCES A SEUIL

Pour ces substances, les effets toxiques ne surviennent que si une certaine dose d'exposition est atteinte, dépassant les capacités de détoxication, de réparation ou de compensation de l'organisme

SUBSTRAT

Substance d'un milieu fournissant aux microorganismes le carbone, ou l'azote, ou les éléments nécessaires à leur développement.

TAXON

Le taxon est représentatif d'une espèce dans un ordre hiérarchique comme une chaîne trophique

TOXICITÉ SECONDAIRE (Secondary poisoning)

Le produit de la biomagnification et de la toxicité.

VALEUR TOXICOLOGIQUE DE REFERENCE VTR

Appellation générique regroupant tous les types d'indices toxicologiques qui permettent d'établir une relation entre une dose et un effet toxique (substances à seuil) ou entre une dose et une probabilité d'effet toxique (substances sans seuil)

oooooooooooooooooooo

ANNEXE 2 : SOURCES DE DONNEES

Que ce soit pour les KOC, KOW, BCF, les propriétés de biodégradation il est toujours préférable de partir de données expérimentales documentées.

Pour les substances commercialisées dans l'Union Européenne à plus de 1 000 tonnes par an, les producteurs ont fourni les données en leur possession au Centre Européen d'Ispra (Italie) (**European Chemical Bureau ECB**).

Ce dernier a créé une banque de données ESIS pour European Chemical Substances Information System (2604 substances)

European Chemical Substances Information System, disponible gratuitement sur internet sur le site :

<http://ecb.j.r.c.it/IUCLID-Datasheets/50000.pdf>

La monographie de la substance est appelée IUCLID Chemical Data Sheet.

On entre par le nom de la substance, ou le numéro CAS, le numéro EINECS (Europe Inventory of Existing Commercial Chemical Substances).

Exemple : IUCLID Data Sheet du formaldéhyde comprend 419 pages :

- Les productions,
- Le classement, l'étiquetage,
- Les propriétés physiques,
- Log Kow (Pow)
- Solubilité – limites d'inflammation
- Photo dégradation
- Répartition entre les compartiments (résultats d'un modèle de fugacité)
- Biodégradation – bioaccumulation
- Toxicité – écotoxicité
- Bibliographie

Il s'agit d'une compilation des données fournies. Le contributeur est mentionné. L'ECB a ajouté in fine une remarque sur la fiabilité des informations. Des données hétérogènes peuvent être constatées selon les sources et il y a peu d'études critiques.

Les analyses de risques du programme « existing Chemicals » sont consultables sur le site <http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/> Il existe 121 draft risk assessment, 97 final reports. Ces rapports sont de qualité, et peuvent servir de référence ;

Pour les éléments traces, l'Académie des Sciences a publié en 1998 un rapport n° 42 « Contamination des sols pour les éléments en traces, les risques et leur gestion (Lavoisier). Ont été étudié le mercure, le plomb, le cadmium, le cuivre, le zinc, l'arsenic, le sélénium, le nickel et le chrome. L'INRA a publié les concentrations de fond géologique dans le programme ASPITET Résultats sur <http://www.etm.orleans.inra.fr/gammes3.htm>

L'INERIS publie des Fiches de données toxicologiques et environnementales des substances chimiques (nombre assez limité : 70) sur son site <http://www.ineris.fr/index.php?module=cms>

Des fiches de données toxicologiques et environnementales sont également publiées par **Environnement Canada** (Canadian Environmental Protection Act : priority substances list assessment reports) et l'**US EPA** ainsi que par l'**ATSDR** (USA) (Toxicological profiles) sur son site www.atsdr.cdc.gov/toxpro2.html

IFREMER a publié des Fiches de synthèse sur les substances prioritaires de la directive cadre sur l'eau (39 substances), qui sont des compilations, consultables sur http://www.ifremer.fr/delcpc/pdf/RAPPORT_FICHES33_SUBSTANCES.pdf

- **EUROCHLOR** a publié les monographies de toutes les substances chlorées commercialisées en quantités notables (Eurochlor, 4 av. E. Van Nieuwenhuyse Box 2 B 1160 Bruxelles). On peut trouver 20 monographies avec analyse de risques environnementale, en ligne sur <http://www.eurochlor.org/science>
- **L'Union Européenne** a publié une base de données internet ECDIN : Environmental Chemical Data and Information Network. La source étant le JRC d'Ispra. On peut s'attendre à retrouver les données d'IUCLID 5.
- Autre source : **P. Howard et al.** Lewis Publishers N.Y USA – Handbook of Environmental Degradation Rates (1991).
- **OMS** : International Programme on Chemical Safety **Environmental Health Criteria** CD ROM disponible au WHO (World Health Organisation) à Genève. Nombre de substances limité. En ligne sur www.inchem.org/pages/ehc.html
- **Syracuse Research Corporation** : propriétés physiques des substances organiques (1997) – base de données PHYSPROP (25250 substances) fournit solubilité, Kow, constante de Henry. La Syracuse Research Corporation est coéditeur, avec l'US EPA, de la suite EPIWIN. <http://www.syrres.com/esc/default.htm>
- P.H. Howard Syracuse Research Corporation **Environmental Fate Data Base (EFDB)** comprend DATALOG, CHEMFATE, BIOLOG, BIODEG – 20 000 substances sur <http://esc.syrres.com/efdb.htm>

DATALOG Banque de données bibliographiques sur 18 types de données environnementales

BIOLOG Microbial degradation data

CHEMFATE 25 types de données environnementales (voir tableau ci-joint)

BIODEG Données expérimentales sur la biodégradation

Ces banques de données sont essentiellement bibliographiques et ne renseignent pas toujours. On trouvera en annexe, outre le tableau des types de données de CHEMFATE, les résultats

obtenus pour le trichlorobenzène 1-2-3, pour le BCF et la biodégradation in situ. Les références citées sont sérieuses.

PHYSPROP : banque de données US propriétés physiques des substances

<http://www.syrres.com/esc/physprop-htm>

NICNAS site australien regroupant les données et analyses de risques de substances prioritaires pour l'Australie sur <http://www.nicnas.gov.au/publications/CAR/>

HSDB Hazard Substances Data Bank dans TOXNET regroupe les données toxicologiques et écotoxicologiques des substances <http://toxnet.nlm.nih.gov/>

Les logiciels de calcul

Les plus utilisés sont ceux de l'EPI « Estimation Programme Interface » ou encore appelée EPI suite. EPIWIN 2000 version 3.20 est une suite de logiciels disponibles en version Windows auprès de l'US EPA.

Le site « EPI suite » <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pub/episuite.htm>

contient les contacts pour se procurer la suite gratuitement.

Autre site <http://cfpub.epa.gov/ecotox>

Les logiciels ont été développés par l'US EPA et la Syracuse Research Corporation (SRC).

Que trouve-t-on dans EPI suite ?

KOWWIN est un logiciel de calcul du coefficient K_{OW} de partition eau-octanol, basé sur les structures de la molécule.

Inutile de dire que les valeurs expérimentales sont préférables.

AOPWIN : est le logiciel développé par W. Meylan et P. Howard à partir du modèle d'Atkinson pour calculer la demi-vie de la substance dans l'air. Programme du SRC (voir annexe 1). Ce logiciel calcule la constante cinétique de la réaction photochimique dans l'air avec une assez bonne cohérence avec les valeurs expérimentales.

HENRYWIN : calcule la constante de Henry. Utile pour les substances dont le coefficient d'activité des solutions n'est pas constant dans tout l'intervalle de solubilité.

MPBPWIN : calcule les tensions de vapeur, les solubilités, les points de fusion, d'ébullition.

BIOWIN : calcule les vitesses de biodégradation des produits organiques traitant 7 modèles différents en milieu aérobie et anaérobie.

Préférez les résultats expérimentaux BIOWIN est un logiciel préconisé par le Règlement REACH pour les critères de persistance. Les résultats de ce logiciel ne doivent donc pas être ignorés. D'autre part le modèle doit pouvoir incorporer quelques données issues de tests, ce qui peut permettre de fournir des temps de demi-vie plus fiables

BIOHCWIN : calcule les demi-vies des hydrocarbures dans les compartiments de l'environnement.

PC KOC WIN : calcule les K_{OC} . Préférez les résultats expérimentaux.

HYDROWIN : calcule les $\frac{1}{2}$ vies des produits hydrolysables avec catalyse acide ou basique.

BCFWIN : calcule les BCF à partir des K_{ow} . Mais il n'y a qu'une valeur de K_{ow} alors qu'il existe autant de BCF que d'espèces ! Ce modèle peut faire des dégâts en analyse de risques

LEV 3 EPI : il s'agit d'un modèle de fugacité de niveau 3 qui prédit la répartition de la substance dans l'eau, l'air, les sols et les sédiments dans des conditions stationnaires. TRES UTILE !

STPWIN ce logiciel simule une station d'épuration biologique à boues activées. C'est un programme concurrent de Simple Treat qui fait partie de la suite EUSES

Commentaires

1. De nombreux modèles utilisent des valeurs par défaut qui ne sont pas nécessairement pertinentes. En général on peut les changer, à condition d'y faire attention.
2. Lorsqu'il existe des valeurs expérimentales, elles sont souvent précisées, ce qui est très utile...
3. **Tous les organismes de réglementation utilisent ces logiciels. Il est donc utile d'en connaître les résultats pour éventuellement les contester lorsqu'ils sont différents des résultats expérimentaux, ce qui est fréquent.**
4. Les logiciels de la suite EPIWIN utilisent souvent la technique QSAR (quantitative structure activity relationship) c'est-à-dire la prévision d'une propriété d'après la structure de la molécule. Bien que très utile, cette technique n'est pas infallible. En outre pour que le logiciel puisse « lire » la structure de la molécule il faut l'écrire dans un langage codé tel que SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification).

On trouvera ci-dessous la liste complète des logiciels contenus dans la suite **EPI 3.20 (2008)**

How Do the Individual Models that Make up EPI Suite™ Work?

- **KOWWIN™**: Estimates the log octanol-water partition coefficient, $\log K_{ow}$, of chemicals using an atom/fragment contribution method.
- **AOPWIN™**: Estimates the gas-phase reaction rate for the reaction between the most prevalent atmospheric oxidant, hydroxyl radicals, and a chemical. Gas-phase ozone radical reaction rates are also estimated for olefins and acetylenes. In addition, AOPWIN™ informs the user if nitrate radical reaction will be important. Atmospheric half-lives for each chemical are automatically calculated using assumed average hydroxyl radical and ozone concentrations.
- **HENRYWIN™**: Calculates the Henry's Law constant (air/water partition coefficient) using both the group contribution and the bond contribution methods.
- **MPBPWIN™**: Melting point, boiling point, and vapor pressure of organic chemicals are estimated

**Les Propriétés Environnementales des Substances Rév 1 – Roger Papp © CNEEIC –
Collège National d'Experts en Environnement de l'Industrie Chimique - www.cneiec.org**

using a combination of techniques. Included is the subcooled liquid vapor pressure, which is the vapor pressure a solid would have if it were liquid at room temperature. It is important in fate modeling.

- **BIOWIN™**: Estimates aerobic and anaerobic biodegradability of organic chemicals using 7 different models. Two of these are the original Biodegradation Probability Program (BPP™). The seventh and newest model estimates anaerobic biodegradation potential.
- **BioHCwin**: Estimates biodegradation half-life for compounds containing only carbon and hydrogen (i.e. hydrocarbons).
- **KOCWIN™**: Formerly called PCKOCWIN™, this program estimates the organic carbon-normalized sorption coefficient for soil and sediment; i.e. K_{OC} . K_{OC} is estimated using two different models: the Sabljic molecular connectivity method with improved correction factors; and the traditional method based on $\log K_{OW}$.
- **WSKOWWIN™**: Estimates an octanol-water partition coefficient using the KOWWIN™ program, then estimates a chemical's water solubility from this value and applicable correction factors if any.
- **WATERNT™**: Estimates water solubility directly using a "fragment constant" method similar to that used in the KOWWIN™ program.
- **BCFBAF™**: Formerly called BCFWIN™, this program estimates fish bioconcentration factor and its logarithm using two different methods. The first is the traditional regression based on $\log K_{OW}$ plus any applicable correction factors, and is analogous to the WSKOWWIN™ method. The second is the Arnot-Gobas method, which calculates BCF from mechanistic first principles. BCFBAF also incorporates prediction of apparent metabolism half-life in fish, and estimates BCF and BAF for three trophic levels.
- **HYDROWIN™**: Estimates aqueous hydrolysis rate constants and half-lives for the following chemical classes: esters, carbamates, epoxides, halomethanes, selected alkyl halides, and phosphorus esters. Estimates rate constants for acid- and base-catalyzed hydrolysis, but with the exception of phosphorus esters, not neutral hydrolysis. In addition, HYDROWIN™ identifies a variety of chemical structure classes for which hydrolysis may be significant (e.g. carbamates) and gives relevant experimental data.
- **KOAWIN**: Estimates K_{OA} , the octanol/air partition coefficient, using the ratio of the octanol/water partition coefficient (K_{OW}) from KOWWIN™ and the dimensionless Henry's Law constant (K_{AW}) from HENRYWIN™. K_{OA} has multiple uses in chemical assessment.
- **AEROWIN™**: Estimates the fraction of airborne substance sorbed to airborne particulates, i.e. the parameter ϕ (ϕ), using three different methods. AEROWIN™ results are also displayed with AOPWIN™ output as an aid in interpretation of the latter.
- **WVOLWIN™**: Estimates the rate of volatilization of a chemical from rivers and lakes; and calculates the half-life for these two processes from their rates. The model makes certain default assumptions with respect to water body depth, wind velocity, etc.
- **STPWIN™**: Using several outputs from EPI Suite™, this program predicts the removal of a chemical in a typical activated sludge-based sewage treatment plant. Values are given for total removal and three processes that may contribute to removal: biodegradation, sorption to sludge, and air stripping. The program assumes a standard system design and set of default operating conditions.
- **LEV3EPI™**: This program contains a level III multimedia fugacity model and predicts partitioning of chemicals among air, soil, sediment, and water under steady state conditions for a default model "environment". Some (but not all) system default values can be changed by the user.
- **ECOSAR™**: Estimates the toxicity of chemicals discharged to water. ECOSAR™ predicts toxicity to fish, aquatic invertebrates and algae using an extensive set of structure-activity relationships (SARs). The program estimates a chemical's acute (short-term) toxicity and, when available, chronic (long-term or delayed) toxicity.

A propos de SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification).

SMILES est un langage codé développé par O. Weininger en 1988. On pourra consulter l'article de base « Introduction to methodology and encoding rules » J. Chem. Inf. Comput. Sci. (28) 31-36.

Ce langage utilise un certain nombre de règles d'écriture : par exemple :

- la liaison simple est implicite et non représentée,
- les valeurs libres des atomes sont supposées complétées par des atomes d'hydrogène. Ainsi l'éthane est représentée CC,
- la double liaison est écrite = la triple ≠
- l'éthylène s'écrit donc C = C
- l'eau s'écrit O (hydrogène implicite)
- l'éthanol CH₃ – CH₂ OH → CCO
- les ramifications sont placées entre parenthèses –
- exemple l'acide acétique CH₃ - CO OH → CC (= O) O
- la fermeture des cycles est indiquée par des chiffres qui indiquent les atomes à relier
- ex : cyclohexane – C₆ H₁₂ → C1CCCCC1

CHEMFATE Search Parameters

CAS#:
Formula: C6H3CL3

Name: 1,2,3-TRICHLOROBENZENE

Print full reference list Yes No

Limit Search by selecting data types listed below.
NO SELECTIONS will cause ALL records for chemical to be retrieved

Number of records present for each data type is indicated next to the data type name.

- | | | | |
|----------------------------|---|----------------------------|-------------------------------------|
| 1 <input type="checkbox"/> | ID-Identification | 1 <input type="checkbox"/> | BIOC-Log Bioconcentration Factor |
| 1 <input type="checkbox"/> | MELT-Melting Point | 1 <input type="checkbox"/> | HYDR-Hydrolysis |
| 1 <input type="checkbox"/> | BOIL-Boiling Point | 0 <input type="checkbox"/> | OXID-Oxidation & Other Reactions |
| 1 <input type="checkbox"/> | UV-Ultra Violet Absorption | 0 <input type="checkbox"/> | PHOT-Photolysis |
| 0 <input type="checkbox"/> | PKA-Log Acid Dissociation Constant | 0 <input type="checkbox"/> | MICD-Microbial Degradation |
| 1 <input type="checkbox"/> | LOGP-Log Octanol/Water Partition Coeff. | 0 <input type="checkbox"/> | NSYD-Degradation in Natural Systems |
| 1 <input type="checkbox"/> | WSOL-Water Solubility | 0 <input type="checkbox"/> | ECOS-Ecosystem |
| 1 <input type="checkbox"/> | VP-Vapor Pressure | 0 <input type="checkbox"/> | AIRM-Air Monitoring |
| 1 <input type="checkbox"/> | HENL-Henry's Law Constant | 0 <input type="checkbox"/> | WATM-Water Monitoring |
| 0 <input type="checkbox"/> | EVAW-Evaporation from Water | 0 <input type="checkbox"/> | SOIM-Soil Monitoring |
| 3 <input type="checkbox"/> | SOIA-Soil Adsorption Constant | 0 <input type="checkbox"/> | BIOM-Biota Monitoring |
| 0 <input type="checkbox"/> | SCOL-Soil Column Transport | 1 <input type="checkbox"/> | FIEL-Field Studies |
| 0 <input type="checkbox"/> | SRF-Soil Thin Layer Chromatography | | |

BIODEG Search Results

[Return to EFDB](#)

CAS #: 000087-61-6 Name: 1,2,3-TRICHLOROBENZENE

CAS #: 87-61-6 1,2,3-TRICHLOROBENZENE
 Parameter Type : Field Test
 Study Biodeg Eval: NE
 Half Life (days) : 1.9; 30; 21
 Oxygen Condition : NOT STATED
 Envir Sample Type: FRESHWATER
 Study Location : RHINE RIVER
 Chem Conc (ppm) : 0.008
 Fate Process Elim: NONE
 Remarks : ESTIMATED HALF-LIFE BASED ON MONITORING DATA, OXYGEN
 CONDITION NOT STATED, NEAR LOBITH AND KAMPEN; RHINE
 RIVER
 NEAR GORINCHEM & HARIN & VLIET; RHINE RIVER NEAR KAMPEN
 &
 IJSSELL
 Reference : ZOETEMAN,BCJ ET AL. (1980)

ZOETEMAN,BCJ ET AL. (1980)
 ZOETEMAN,B.C.J.; HARMSSEN,K.; LINDERS,J.B.H.J.; MORRA,C.F.H.; SLOOFF,W.;
 PERSISTENT ORGANIC POLLUTANTS IN RIVER WATER AND GROUND WATER OF THE
 NETHERLANDS.; CHEMOSPHERE.; 9:231-49.; 1980

End of Search

ANNEXE 3 : EXEMPLE D'APPLICATION D'UN MODELE DE MACKAY niveau I**Ultimate distribution in the environment according to Mackay level I model
(details of calculation)****Chemical: 1,2,4-trichlorobenzene**

Fugacity Level I calculation

Temperature (C) 20

Molecular weight (g/mol) 181.45

Vapor pressure (Pa) 36

Solubility (g/m3) 36

Solubility (mol/m3) 0.20

Henry's law constant (PA.m3/mol) 181

Log octanol water part. coefficient 4.20

Octanol water part. coefficient 15848.93

Organic C-water part. coefficient 6498.06

Air-water partition coefficient 0.07

Soil-water partition coefficient 194.94

Sediment-water partition coefficient 389.88

Amount of chemical (moles) 1

Fugacity (Pa) .38552894-6

Total VZ products 2593838.94

Phase properties and compositions:

Phase :	Air	Water	Soil	Sediment
Volume (m3) :	.6000E+10	.70000E+7	.45000E+5	.21000E+5
Density(kgm3) :	.12056317E+2	.10000E+4	.15000E+4	.15000E+4
Frn org carb. :	.00000E+0	.00000E+0	.20000000E-1	.40000000E-1
Z mol/m3.Pa :	.41029864E-3	.55111600E-2	.10743558E+1	.21487116E+1
VZ mol/Pa :	.24617918E+7	.38578120E+5	.48346011E+5	.45122944E+5
Fugacity :	.38552894E-6	.38552894E-6	.38552894E-6	.38552894E-6
Conc mol/m3 :	.15818200E-9	.21247117E-8	.41419526E-6	.82839053E-6
Conc g/m3 :	.28702124E-7	.38552894E-6	.75155731E-4	.15031146E-3
Conc ug/g :	.23806708E-5	.38552894E-6	.50103820E-4	.10020764E-3
Amount mol :	.94909202E+0	.14872982E-1	.18638787E-1	.17396201E-1
Amount %	94.91	1.49	1.86	1.74

**ANNEXE 4 : CRITERES DE PERSISTANCE ET DE BIOACCUMULATION POUR
LA DEFINITION DES SUBSTANCES PBT**

selon le REGLEMENT REACH (PART C PBT assessment)

Table C.1-1: PBT and vPvB criteria according to Annex XIII of the REACH Regulation	Property	PBT-criteria
Persistence₁	<ul style="list-style-type: none"> - $T_{1/2} > 60$ days in marine water, or - $T_{1/2} > 40$ days in fresh- or estuarine water, or - $T_{1/2} > 180$ days in marine sediment, or - $T_{1/2} > 120$ days in fresh- or estuarine sediment, or 	<ul style="list-style-type: none"> - $T_{1/2} > 120$ days in soil. - $T_{1/2} > 60$ days in marine, fresh- or estuarine water, or - $T_{1/2} > 180$ days in marine, fresh- or estuarine sediment, or
Bioaccumulation *	BCF > 2000 L/kg	
Toxicity <ul style="list-style-type: none"> - NOEC < 0.01 mg/L for marine or freshwater organisms, or - substance is classified as carcinogenic (category 1 or 2), mutagenic (category 1 or 2), or toxic for reproduction (category 1, 2 or 3), or 	<ul style="list-style-type: none"> - there is other evidence of chronic toxicity, as identified by the classifications: T, R48, or Xn, R48 according to Directive 67/ 	

* **A noter** : le CSTEE met en doute la valeur scientifique de l'approche choisie pour caractériser les substances PBT et vPvB. Il est rejoint par le l'European Chemical Agency (Finlande) et la SETAC.(Society of Environmental Toxicology and Chemistry, société internationale non gouvernementale à but non lucratif)

CRITERES DE PERSISTANCE BIOACCUMULATION ET TOXICITE
SELON LE REGLEMENT REACH (PART C PBT ASSESSMENT)

criteria for Persistency, Bioaccumulation, and Toxicity²	Type of data	Criterion
Persistence		
Ready biodegradability test		Readily biodegradable
Enhanced ready biodegradability test		Readily biodegradable
Specified tests on inherent biodegradability Zahn-Wellens (OECD 302B)	MITI II test (OECD 302C) ≥ 70 % mineralisation (DOC removal) within 7 d; log phase no longer than 3d; removal before degradation occurs below 15%; no pre-adapted inoculum	≥ 70% mineralisation (O ₂ uptake) within 14 days; log phase no longer than 3d; no pre-adapted inoculum Not P
Biowin 2 (non-linear model prediction) and Biowin 3 (ultimate biodegradation time) or	Biowin 6 (MITI non-linear model prediction) and Biowin 3 (ultimate biodegradation time) Does not biodegrade fast (probability <0.5), and ultimate biodegradation timeframe prediction: ≥months (value < 2.2) or	Does not biodegrade fast (probability <0.5) and ultimate biodegradation timeframe prediction: ≥months (value < 2.2) P
Bioaccumulation		
Convincing evidence that a substance can biomagnify in the food chain (e.g. field data)		e.g. BMF > 1
Octanol-water partitioning coefficient (experimentally determined or estimated by QSAR) Log K _{ow} ≤ 4.5		
Toxicity		
Short-term aquatic toxicity		EC50 or LC50 < 0.01 mg/L
Short-term aquatic toxicity		EC50 or LC50 < 0.1 mg/L
Avian toxicity (subchronic or chronic toxicity or toxic for reproduction)		NOEC < 30 mg/kg food

Table R. 11-1: PBT and vPvB criteria according to Annex XIII

Property	PBT-criteria	vPvB-criteria
Persistence The assessment of the persistency in the environment shall be based on available half-life data collected under the adequate conditions, which shall be described by the registrant.	<ul style="list-style-type: none"> - $T_{1/2} > 60$ days in marine water, or - $T_{1/2} > 40$ days in fresh- or estuarine water, or - $T_{1/2} > 180$ days in marine sediment, or - $T_{1/2} > 120$ days in fresh- or estuarine sediment, or - $T_{1/2} > 120$ days in soil. 	<ul style="list-style-type: none"> - $T_{1/2} > 60$ days in marine, fresh- or estuarine water, or - $T_{1/2} > 180$ days in marine, fresh- or estuarine sediment, or - $T_{1/2} > 180$ days in soil.
Bioaccumulation The assessment of bioaccumulation shall be based on measured data on bioconcentration in aquatic species. Data from freshwater as well as marine water species can be used.	BCF > 2000 L/kg	BCF > 5000 L/kg
Toxicity	<ul style="list-style-type: none"> - NOEC (long-term) < 0.01 mg/L for marine or freshwater organisms, or - substance is classified as carcinogenic (category 1 or 2), mutagenic (category 1 or 2), or toxic for reproduction (category 1, 2 or 3), or - there is other evidence of chronic toxicity, as identified by the classifications: T, R48, or Xn, R48 according to Directive 67/548/EEC. 	-

Tableaux extraits des “ Guidance documents” R11, PBT assessment et Part C PBT and vPvB Assessment

Consultables sur

http://reach.jrc.it/docs/guidance_document/information_requirements_en.htm

A noter : l’European Chemical Agency a exprimé des réserves sur le caractère rigide de ces critères, que l’Agence estime non justifié, compte tenu de la complexité des phénomènes en cause. Même critique de la part d’ECETOC et de la SETAC. On peut donc s’attendre à des évolutions.

Annexe 5 : les essais OCDE de produits chimiques**Dégradation et Accumulation****Essai n° 301: Biodégradabilité Facile**

<u>OCDE 301A</u>	<u>Test Die-Away-DOC (substance soluble, non volatile)</u>
<u>OCDE 301B</u>	<u>Test d'évolution du CO₂ (substance insoluble non volatile)</u>
<u>OCDE 301C</u>	<u>Test MITI modifié (substance insoluble, volatile)</u>
<u>OCDE 301D</u>	<u>Test closed-bottle (substance insoluble, volatile)</u>
<u>OCDE 301E</u>	<u>Test criblage OCDE modifié</u>
<u>OCDE 301F</u>	<u>Test respirométrique (Sapromat)</u>

Essai n° 302A: Biodégradabilité dite intrinsèque: Méthode SCAS modifiée

Essai n° 302B: Biodégradabilité dite intrinsèque: Essai Zahn-Wellens/EMPA (substance soluble, non volatile et filtrable)

Essai n° 302C: Biodégradabilité dite intrinsèque: Essai MITI modifié (II)**Essai n° 302 D : Biodégradabilité inhérente Concawe test**

Essai n° 303A et B: Essai de simulation - Traitement aérobie des eaux usées - A: Unités de traitement par boues; B: Biofilms

Essai n° 304A: Biodégradabilité intrinsèque dans le sol**Essai n° 305: Bioconcentration: Essai dynamique chez le poisson****Essai n° 306: Biodégradabilité dans l'eau de mer****Essai n° 307: Transformation aérobie et anaérobie dans le sol****Essai n° 308: Transformation aérobie et anaérobie dans les sédiments aquatiques****Essai n° 309: Minéralisation aérobie dans les eaux superficielles - Essai de simulation de la biodégradation****Essai n° 310 : Biodégradabilité facile - dégagement de CO₂ dans des flacons hermétiquement clos (essai de l'espace libre au-dessus du liquide)**

Essai n° 311 : Essai de biodégradabilité anaérobie des composés organiques dans une boue digérée : mesure du dégagement gazeux

Essai n° 312: Lixiviation sur des colonnes de sol

Test N° 313: Estimation des émissions issues de bois traité par un produit de préservation dans l'environnement: Méthode de laboratoire applicable aux articles en bois sans revêtement qui sont en contact avec de l'eau douce ou de l'eau de mer

Essai n° 314 : Essais de simulation pour évaluer la biodégradabilité de produits chimiques rejetés dans les eaux usées

Essai n° 315 : Bioaccumulation chez les oligochètes benthiques fousseurs

Essai n° 316 : Phototransformation de produits chimiques dans l'eau - Photolyse directe

Essai ISO 11734 Biodégradabilité anaérobie

Essai OPPTS 8353400 (EPA) Anaerobic biodegradation of organic chemicals

ISO DIS 14952-1 test de simulation de la biodégradation aérobie (minéralisation) dans les rivières

LES LIGNES DIRECTRICES DE L'OCDE POUR LES ESSAIS DE PRODUITS CHIMIQUES COMPORTENT 5 SECTIONS :

SECTION 1 PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES
SECTION 2 EFFETS SUR LES SYSTEMES BIOLOGIQUES
SECTION 3 DEGRADATION ET BIOACCUMULATION
SECTION 4 EFFETS SUR LA SANTE
SECTION 5 AUTRES NORMES

CES NORMES SONT DISPONIBLES SUR <http://www.oecd.org/env/testguidelines>

ANNEXE 6 : RAPPELS DE CINÉTIQUE CHIMIQUE

Cinétique de premier ordre

- La formule $\ln C_0/C = kt$ ou $C/C_0 = e^{-kt}$ est la loi de vitesse intégrée pour une réaction d'ordre 1. C'est l'intégration de l'équation $dC/dt = -kC$, où C est la concentration de la substance au temps t C₀ la concentration au temps t=0
- On peut écrire la formule de la façon suivante:

$$\ln C = -kt + \ln C_0$$

- Cette forme de la loi de vitesse intégrée indique qu'un graphique de $\ln[C]$ en fonction du temps est une ligne droite avec une pente de -k

La connaissance de 2 concentrations de la substance pour des temps connus permet de calculer la constante de vitesse k et plusieurs concentrations permettent de vérifier la pertinence du modèle de 1er ordre.

Exemple 1

La concentration de benzo-a-pyrène dans un sol a été réduite de moitié en 365 jours. Si on admet que le ruissellement et la lixiviation sont négligeables, on peut écrire une équation de biodégradation de 1er ordre :

$$0,5 = e^{-365k} \text{ d'où } k = 1,89 \cdot 10^{-3} \text{ jours}^{-1}$$

Lorsqu'on dispose de plusieurs couples de valeurs concentration-temps, la construction de la courbe $\ln C$ fonction de t permet de vérifier que la cinétique est de premier ordre, si on obtient bien une droite, comme le montre l'exemple 2

Exemple 2 essai de dégradation par photolyse

On a soumis un échantillon de pyrène en solution dans l'eau à 0,135 mg/l à l'action d'une lampe reproduisant l'exposition solaire. On a obtenu les résultats suivants :

Temps 0 mn 0,135 mg/l, temps 10 mn 0,07 mg/l, temps 20mn 0,05 mg/l temps 30mn 0,025 mg/l, temps 40mn 0,02 mg/l, temps 50 mn 0,007 mg/l, temps 60 mn 0,00 mg/l

La courbe obtenue montre une cinétique de 1er ordre dont l'équation peut s'écrire :

$$\ln C/C_0 = -kt$$

représentée par une droite de pente k, qui est égale à 0,055 min⁻¹

Demi-vie

La demi-vie est définie comme le temps nécessaire pour réduire de 50% la concentration initiale C_0

D'où : $0,5 = e^{-kt}$

t étant la demi-vie. On en déduit $kt = \ln 2$ et que $t_{1/2} = \ln 2/k$ soit $0,693/k$

La demi-vie est indépendante de la concentration initiale

Exemple

Dans l'essai de photolyse du pyrène, on a trouvé que k est égal à $0,055 \text{ min}^{-1}$

La demi-vie est donc de $0,693/0,055 = 12,6$ minutes

ANNEXE 7 : Food Chain Multipliers (US EPA)

Le FCM de l'US EPA est le rapport entre le BAF d'un niveau trophique i (exprimé en concentration de la substance dans la fraction lipide du tissu) et le BCF de niveau 1, en général phytoplancton, également rapporté à la fraction lipide, et pour la fraction biodisponible de la substance dans l'eau. (Valable pour les substances non ou peu métabolisées)

Table 5-6. Food-Chain Multipliers for Trophic Levels (TLs) 2, 3, and 4 (Mixed Pelagic and Benthic Food Web Structure and $\log_{10} K_{ow}/K_{ow} = 23$)

Log K_{ow}	TL 2	TL 3 ^a	TL 4	Log K_{ow}	TL 2	TL 3 ^a	TL 4
4.0	1.00	1.23	1.07	6.6	1.00	12.9	23.8
4.1	1.00	1.29	1.09	6.7	1.00	13.2	24.4
4.2	1.00	1.36	1.13	6.8	1.00	13.3	24.7
4.3	1.00	1.45	1.17	6.9	1.00	13.3	24.7
4.4	1.00	1.56	1.23	7.0	1.00	13.2	24.3
4.5	1.00	1.70	1.32	7.1	1.00	13.1	23.6
4.6	1.00	1.87	1.44	7.2	1.00	12.8	22.5
4.7	1.00	2.08	1.60	7.3	1.00	12.5	21.2
4.8	1.00	2.33	1.82	7.4	1.00	12.0	19.5
4.9	1.00	2.64	2.12	7.5	1.00	11.5	17.6
5.0	1.00	3.00	2.51	7.6	1.00	10.8	15.5
5.1	1.00	3.43	3.02	7.7	1.00	10.1	13.3
5.2	1.00	3.93	3.68	7.8	1.00	9.31	11.2
5.3	1.00	4.50	4.49	7.9	1.00	8.46	9.11
5.4	1.00	5.14	5.48	8.0	1.00	7.60	7.23
5.5	1.00	5.85	6.65	8.1	1.00	6.73	5.58
5.6	1.00	6.60	8.01	8.2	1.00	5.88	4.19
5.7	1.00	7.40	9.54	8.3	1.00	5.07	3.07
5.8	1.00	8.21	11.2	8.4	1.00	4.33	2.20
5.9	1.00	9.01	13.0	8.5	1.00	3.65	1.54
6.0	1.00	9.79	14.9	8.6	1.00	3.05	1.06
6.1	1.00	10.5	16.7	8.7	1.00	2.52	0.721
6.2	1.00	11.2	18.5	8.8	1.00	2.08	0.483
6.3	1.00	11.7	20.1	8.9	1.00	1.70	0.320
6.4	1.00	12.2	21.6	9.0	1.00	1.38	0.210
6.5	1.00	12.6	22.8				

^a The FCMs for trophic level 3 are the geometric mean of the FCMs for sculpin and alewife.

S

Le niveau trophique 1 est le phytoplancton (Taux de lipides 0,5%)

Le niveau trophique 2 est le zooplancton (Taux de lipides 5%)

Le niveau trophique 3 est le poisson (sculpin et alewife, sorte de hareng) (taux de lipides 4 et 7%)

Le niveau trophique 4 est le salmonidé, poisson carnivore (taux de lipides 11%)

Les invertébrés benthiques sont au niveau 3 (taux de lipides 3%)

Le FCM n'est pas un BMF, lequel représente le rapport entre deux BAF successifs de niveau i et $i+1$, (normalisés en lipides) Le BMF peut se déduire de la valeur des FCM i et $i+1$

Mais la bioaccumulation par la nourriture ne dépend pas seulement du caractère lipophile de la substance, représenté par le K_{ow} , mais aussi de l'aptitude à la métabolisation des espèces.

C'est pourquoi l'US EPA précise que ces valeurs ne sont applicables que pour une métabolisation nulle.

Le BMF du TGD est un facteur de correction du BCF de la même espèce, pour tenir compte de l'apport par l'alimentation, non pris en compte par le BCF. Il ne correspond donc pas à la définition des BMF. L'usage d'un BAF mesuré dans l'environnement local supprime la nécessité de cette correction puisqu'elle prend en compte l'effet de la biodisponibilité et du métabolisme jusqu'au niveau trophique de l'espèce.

On a vu au Chapitre III que le BMF peut se déduire de tests de bioaccumulation par l'alimentation, test en cours de normalisation par l'OCDE

Source: Methodology for deriving Ambient Water Quality Criteria for the protection of human health. Technical Support Document Vol 3 Development of site specific bioaccumulation Factors EPA-822-R09-008 Sep 2009

oo