



HAL
open science

Hiérarchisation de polluants non réglementés dans l'air ambient

Thibault Mansuy

► **To cite this version:**

Thibault Mansuy. Hiérarchisation de polluants non réglementés dans l'air ambient. Sciences pharmaceutiques. 2020. hal-03298134

HAL Id: hal-03298134

<https://hal.univ-lorraine.fr/hal-03298134v1>

Submitted on 23 Jul 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-thesesexercice-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

UNIVERSITE DE LORRAINE
2020

FACULTE DE PHARMACIE

THESE

Présentée et soutenue publiquement

le 30 juin 2020 sur un sujet dédié à :

**Hierarchisation de polluants non réglementés dans l'air
ambient**

pour obtenir

le Diplôme d'Etat de Docteur en Pharmacie

par Thibault MANSUY

né(e) le 09/09/1992

Membres du Jury

Président : M. Bertrand RIHN, Professeur des Universités, Médecin, Faculté de Pharmacie de Nancy

Juges : M. Luc FERRARI, Professeur des Universités, Directeur de thèse, Faculté de Pharmacie de Nancy
M. Olivier BLANCHARD, Professeur, Ecole des Hautes Etudes en Santé Publique
Mme. Emmanuelle DURAND, Pharmacien

UNIVERSITÉ DE LORRAINE
FACULTÉ DE PHARMACIE
Année universitaire 2019-2020

DOYEN

Raphaël DUVAL

Vice-Doyen

Julien PERRIN

Directrice des études

Marie SOCHA

Conseil de la Pédagogie

Présidente, Brigitte LEININGER-MULLER

Vice-Présidente, Alexandrine LAMBERT

Collège d'Enseignement Pharmaceutique Hospitalier

Présidente, Béatrice DEMORE

Commission Prospective Facultaire

Président, Christophe GANTZER

Vice-Président, Jean-Louis MERLIN

Commission de la Recherche

Présidente, Caroline GAUCHER

Chargés de Mission

Communication

Innovation pédagogique

Référente ADE

Référente dotation sur projet (DSP)

Référent vie associative

Aline BONTEMPS

Alexandrine LAMBERT

Virginie PICHON

Marie-Paule SAUDER

Arnaud PALLOTTA

Responsabilités

Filière Officine

Filière Industrie

Filière Hôpital

Pharma Plus ENSIC

Pharma Plus ENSAIA

Pharma Plus ENSGSI

Cellule de Formation Continue et Individuelle

Commission d'agrément des maîtres de stage

ERASMUS

Caroline PERRIN-SARRADO

Julien GRAVOULET

Isabelle LARTAUD,

Jean-Bernard REGNOUF de VAINS

Béatrice DEMORE

Marie SOCHA

Jean-Bernard REGNOUF de VAINS

Xavier BELLANGER

Igor CLAROT

Luc FERRARI

François DUPUIS

Mihayl VARBANOV

DOYENS HONORAIRES

Chantal FINANCE

Francine PAULUS

Claude VIGNERON

PROFESSEURS EMERITES

Jeffrey ATKINSON

Max HENRY

Pierre LEROY

Philippe MAINCENT

Claude VIGNERON

PROFESSEURS HONORAIRES

Jean-Claude BLOCK

Pierre DIXNEUF

Chantal FINANCE

Marie-Madeleine GALTEAU

Thérèse GIRARD

MAITRES DE CONFERENCES HONORAIRES

Monique ALBERT

Mariette BEAUD

François BONNEAUX

Gérald CATAU

Jean-Claude CHEVIN

Pierre LABRUDE
Vincent LOPPINET
Alain NICOLAS
Janine SCHWARTZBROD
Louis SCHWARTZBROD

Jocelyne COLLOMB
Bernard DANGIEN
Marie-Claude FUZELLIER
Françoise HINZELIN
Marie-Hélène LIVERTOUX
Bernard MIGNOT
Blandine MOREAU
Dominique NOTTER
Francine PAULUS
Christine PERDICAKIS
Marie-France POCHON
Anne ROVEL
Gabriel TROCKLE
Maria WELLMAN-ROUSSEAU
Colette ZINUTTI

ASSISTANTS HONORAIRES

Marie-Catherine BERTHE
Annie PAVIS

ENSEIGNANTS

Section CNU
*

Discipline d'enseignement

PROFESSEURS DES UNIVERSITES - PRATICIENS HOSPITALIERS

Danièle BENSOUSSAN-LEJZEROWICZ	82	Thérapie cellulaire
Béatrice DEMORE	81	Pharmacie clinique
Jean-Louis MERLIN	82	Biologie cellulaire
Jean-Michel SIMON	81	Economie de la santé, Législation pharmaceutique
Nathalie THILLY	81	Santé publique et Epidémiologie

PROFESSEURS DES UNIVERSITES

Ariane BOUDIER	85	Chimie Physique
Christine CAPDEVILLE-ATKINSON	86	Pharmacologie
Igor CLAROT	85	Chimie analytique
Joël DUCOURNEAU	85	Biophysique, Acoustique, Audioprothèse
Raphaël DUVAL	87	Microbiologie clinique
Béatrice FAIVRE	87	Hématologie, Biologie cellulaire
Luc FERRARI	86	Toxicologie
Pascale FRIANT-MICHEL	85	Mathématiques, Physique
Christophe GANTZER	87	Microbiologie
Frédéric JORAND	87	Eau, Santé, Environnement
Isabelle LARTAUD	86	Pharmacologie
Dominique LAURAIN-MATTAR	86	Pharmacognosie
Brigitte LEININGER-MULLER	87	Biochimie
Patrick MENU	86	Physiologie
Jean-Bernard REGNOUF de VAINS	86	Chimie thérapeutique
Bertrand RIHN	87	Biochimie, Biologie moléculaire

MAITRES DE CONFÉRENCES DES UNIVERSITÉS - PRATICIENS HOSPITALIERS

Alexandre HARLE	82	Biologie cellulaire oncologique
Julien PERRIN	82	Hématologie biologique
Loïc REPEL	82	Biothérapie
Marie SOCHA	81	Pharmacie clinique, thérapeutique et biotechnique

MAITRES DE CONFÉRENCES

Xavier BELLANGER ^H	87	Parasitologie, Mycologie médicale
Emmanuelle BENOIT ^H	86	Communication et Santé
Isabelle BERTRAND ^H	87	Microbiologie

Michel BOISBRUN ^H	86	Chimie thérapeutique
Cédric BOURA ^H	86	Physiologie
Sandrine CAPIZZI	87	Parasitologie
Antoine CAROF	85	Informatique
Sébastien DADE	85	Bio-informatique
Dominique DECOLIN	85	Chimie analytique
Natacha DREUMONT ^H	87	Biochimie générale, Biochimie clinique
Florence DUMARCAY ^H	86	Chimie thérapeutique
François DUPUIS ^H	86	Pharmacologie
Reine EL OMAR	86	Physiologie
Adil FAIZ	85	Biophysique, Acoustique
Anthony GANDIN	87	Mycologie, Botanique
Caroline GAUCHER ^H	86	Chimie physique, Pharmacologie
Stéphane GIBAUD ^H	86	Pharmacie clinique
Thierry HUMBERT	86	Chimie organique
Olivier JOUBERT ^H	86	Toxicologie, Sécurité sanitaire

ENSEIGNANTS (suite)

Section CNU

*

Discipline d'enseignement

Alexandrine LAMBERT	85	Informatique, Biostatistiques
Julie LEONHARD	86/01	Droit en Santé
Christophe MERLIN ^H	87	Microbiologie environnementale
Maxime MOURER ^H	86	Chimie organique
Coumba NDIAYE	86	Epidémiologie et Santé publique
Arnaud PALLOTTA	85	Bioanalyse du médicament
Marianne PARENT	85	Pharmacie galénique
Caroline PERRIN-SARRADO	86	Pharmacologie
Virginie PICHON	85	Biophysique
Sophie PINEL ^H	85	Informatique en Santé (e-santé)
Anne SAPIN-MINET ^H	85	Pharmacie galénique
Marie-Paule SAUDER	87	Mycologie, Botanique
Guillaume SAUTREY	85	Chimie analytique
Rosella SPINA	86	Pharmacognosie
Sabrina TOUCHET	86	Pharmacochimie
Mihayl VARBANOV	87	Immuno-Virologie
Marie-Noëlle VAULTIER	87	Mycologie, Botanique
Emilie VELOT ^H	86	Physiologie-Physiopathologie humaines
Mohamed ZAIYOU ^H	87	Biochimie et Biologie moléculaire

PROFESSEUR ASSOCIE

Julien GRAVOULET	86	Pharmacie clinique
------------------	----	--------------------

PROFESSEUR AGREGÉ

Christophe COCHAUD	11	Anglais
--------------------	----	---------

^H Maître de conférences titulaire HDR

* Disciplines du Conseil National des Universités :

80 : Personnels enseignants et hospitaliers de pharmacie en sciences physico-chimiques et ingénierie appliquée à la santé

81 : Personnels enseignants et hospitaliers de pharmacie en sciences du médicament et des autres produits de santé

82 : Personnels enseignants et hospitaliers de pharmacie en sciences biologiques, fondamentales et cliniques

85 ; Personnels enseignants-chercheurs de pharmacie en sciences physico-chimiques et ingénierie appliquée à la santé

86 : Personnels enseignants-chercheurs de pharmacie en sciences du médicament et des autres produits de santé

87 : Personnels enseignants-chercheurs de pharmacie en sciences biologiques, fondamentales et cliniques

11 : Professeur agrégé de lettres et sciences humaines en langues et littératures anglaises et anglo-saxonnes

« LA FACULTE N'ENTEND DONNER AUCUNE APPROBATION, NI IMPROBATION AUX OPINIONS EMISES DANS LES THESES, CES OPINIONS DOIVENT ETRE CONSIDEREES COMME PROPRES A LEUR AUTEUR ».

SERMENT DE GALIEN

En présence des Maitres de la Faculté, je fais le serment :

D'honorer ceux qui m'ont instruit(e) dans les préceptes de mon art et de leur témoigner ma reconnaissance en restant fidèle aux principes qui m'ont été enseignés et d'actualiser mes connaissances

D'exercer, dans l'intérêt de la santé publique, ma profession avec conscience et de respecter non seulement la législation en vigueur, mais aussi les règles de Déontologie, de l'honneur, de la probité et du désintéressement ;

De ne jamais oublier ma responsabilité et mes devoirs envers la personne humaine et sa dignité

En aucun cas, je ne consentirai à utiliser mes connaissances et mon état pour corrompre les mœurs et favoriser des actes criminels.

De ne dévoiler à personne les secrets qui m'auraient été confiés ou dont j'aurais eu connaissance dans l'exercice de ma profession

De faire preuve de loyauté et de solidarité envers mes collègues pharmaciens

De coopérer avec les autres professionnels de santé

Que les Hommes m'accordent leur estime si je suis fidèle à mes promesses.

Que je sois couvert(e) d'opprobre et méprisé(e) de mes confrères si j'y manque.

Remerciements

A mon directeur de thèse, Monsieur Luc FERRARI.

Pour m'avoir fait l'honneur de diriger cette thèse, pour votre disponibilité, et pour les enseignements que vous m'avez apportés veuillez trouver ici l'expression de ma sincère reconnaissance.

A mes juges,

Monsieur Bertrand RINH

Pour m'avoir fait l'honneur de présider ce jury de thèse, pour votre disponibilité, et pour les enseignements que vous m'avez apportés, veuillez recevoir mes remerciements les plus sincères.

Monsieur Olivier BLANCHARD

Pour m'avoir fait l'honneur de participer à ce jury de thèse, pour votre disponibilité, et pour l'aide et les enseignements apportés dans le cadre du Master 2 SPRE, qui ont conduit à la réalisation de cette thèse, veuillez recevoir mes remerciements les plus sincères.

Madame Emmanuelle DURAND

Pour m'avoir fait l'honneur de participer à ce jury de thèse, pour le formidable encadrement et le soutien très important que tu m'as apporté pendant mon stage et après celui-ci, je t'en suis reconnaissant et je t'adresse mes meilleurs remerciements.

A tous ceux qui ont participé à la réalisation de cette thèse ;

Monsieur Guillaume PEROUEL

Pour le formidable encadrement et le soutien très important que tu m'as apporté pendant mon stage et après celui-ci, je t'en suis reconnaissant et je t'adresse mes meilleurs remerciements.

L'unité d'évaluation des risques liés à l'air,

Pour l'excellent accueil que vous m'avez fait pendant mon stage et pour votre aide, recevez mes sincères remerciements.

A mes proches,

A mes parents

Pour votre soutien sans faille tout au long de mes longues études, et l'aide précieuse que vous m'avez apporté durant toutes ces années. Merci d'avoir cru en moi et de m'avoir permis d'arriver jusque-là.

A mes amis

Merci à Caroline pour m'avoir supporté comme binôme pendant tout notre cursus. Merci à Sandrine, Opaline, Noémie, Claire, Carole, Arthur, Christelle et toutes celles et ceux avec qui j'ai passé d'excellents moments sur les bancs peu confortables des amphithéâtres de la faculté. Merci à mes amis de Master 2 SPRE, pour leur soutien sans faille. Merci à vous tous.

Sommaire

Table des tableaux	3
Table des figures	4
Liste des abréviations	5
1. Introduction	7
1.1. Contexte	7
1.2. Polluants réglementés dans l'air ambiant.....	7
1.3. Les acteurs impliqués dans l'évaluation et le contrôle de l'air ambiant	8
1.3.1. Les AASQA	8
1.3.2. L'Anses.....	9
1.4. Problématique	11
1.5. Objectifs.....	14
1.5.1. Polluants de la catégorie 2a	14
1.5.2. Polluants de la catégorie 2b	16
2. Méthodologie	20
2.1. Synthèse bibliographique	20
2.2. Méthodes de hiérarchisation et critères identifiés	28
2.2.1. Les méthodes avec calcul d'un score	28
2.2.2. Les méthodes visuelles ou graphiques	31
2.2.3. Critères identifiés	33
2.3. Méthodes sélectionnées.....	36
2.3.1. Méthode retenue pour la hiérarchisation des polluants de Catégorie 2a	36
2.3.2. Méthode retenue pour la hiérarchisation des polluants de Catégorie 2b.....	42
3. Résultats	54
3.1. Résultats de la hiérarchisation des polluants de la catégorie 2a	54
3.2. Résultats de la hiérarchisation des polluants de la catégorie 2b	59
4. Discussion, conclusion et perspectives	62

4.1. Polluants de la catégorie 2a.....	62
4.2. Polluants de la catégorie 2b.....	63
4.3. Perspectives.....	71
5. Bibliographie.....	72
Annexe I : Tableau de synthèse des VTi.....	75
Annexe II: Données sanitaires et d'exposition du TOP 20	78
Annexe III : Analyse de sensibilité : Demi-vies dans l'atmosphère et volatilité.....	79
Annexe IV : Fiches d'information des polluants de la catégorie 2b	80
Annexe V	100

Table des tableaux

Tableau I: Classement des polluants de la catégorie 1 en fonction de leur score de risque..	13
Tableau II: Liste des polluants de la catégorie 2a	14
Tableau III: Liste des polluants de la catégorie 2b	16
Tableau IV: Facteurs d'incertitudes pour la construction de valeurs de référence (Anses, 2018)	40
Tableau V: Règles d'équivalences (Farion, 2017).....	44
Tableau VI: Définition des différentes catégories des classifications CMR, PE et STOT RE.	45
Tableau VII : Modalités définies pour les cinq critères choisis pour la hiérarchisation des polluants de la catégorie 2b.....	48
Tableau VIII : Résultats de la hiérarchisation des polluants de la catégorie 2a (Scores de risque)	57
Tableau IX: Résultats de la hiérarchisation des 20 premiers polluants de la catégorie 2b après application de la méthode SIRIS et départage des égalités.	61
Tableau X : Résultats des analyses de sensibilité conduites pour estimer l'impact de permutations de critères dans la méthode SIRIS.....	65
Tableau XI : Probabilité d'occurrence dans l'air et source des polluants du TOP 20.....	69

Table des figures

Figure 1 : missions des AASQA (ATMO France)	8
Figure 2: logo de l'Anses	9
Figure 3 : Méthode de catégorisation des polluants de l'expertise Anses	12
Figure 4 : Mots clés utilisés pour la recherche bibliographique visant à identifier des exercices de hiérarchisation	20
Figure 5 : Profil de recherche bibliographique détaillé (PRISMA)	21
Figure 6: Exemple de matrice Danger/Exposition (Wolf et al., 2016)	31
Figure 7 : Exemple de hiérarchisation basée sur l'approche "Partial Order Theory" (Lerche et al., 2004)	32
Figure 8 : Mots clés utilisés pour la recherche d'études toxicologiques	37
Figure 9: Attribution des pénalités aux différents critères - Méthode SIRIS.....	50
Figure 10: Attribution des pénalités à des classes de critères - Méthode SIRIS.....	51
Figure 11 : Sources des différentes études toxicologiques pour chaque polluant de la catégorie 2a.....	54
Figure 12 : Sources des études ayant permis la construction de VTi pour les polluants de la catégorie 2a	54
Figure 13 : Voies d'exposition des différentes études utilisées pour la construction de VTi ou VTR.....	55
Figure 14 : Espèces utilisées dans les différentes études utilisées pour la construction de VTi ou VTR.....	55
Figure 15 : Durée des études utilisées pour la construction de VTi	55
Figure 16 : Origines des données utilisées pour le calcul des concentrations moyennes dans l'air ambiant des polluants de la catégorie 2a	56
Figure 17 : Classification pour les différents dangers sanitaires des polluants de la catégorie 2b.....	60
Figure 18 : Distribution des demi-vies des polluants de la catégorie 2b.....	60
Figure 19: Répartition des polluants de la catégorie 2b selon leur volatilité	61
Figure 20 : Arbre décisionnel pour déterminer la probabilité d'occurrence dans l'air des polluants du TOP 20.....	68

Liste des abréviations

(K_{oc}) : Coefficient de partage avec le carbone organique

(log K_{ow}) : Coefficient de partage octanol/eau

AASQA : Associations agréées pour la surveillance de la qualité de l'Air

Afssa : Agence française de sécurité sanitaire des aliments

Afsset : Agence française de sécurité sanitaire de l'environnement et du travail

Anses : Agence nationale de sécurité sanitaire de l'alimentation, de l'environnement et du travail

CES : Comité d'experts spécialisé

CIRC : Centre International de Recherche sur le Cancer

CL50 : Concentration létale 50

CLP : Règlement sur la classification, l'étiquetage et l'emballage

CMR : Cancérogène, mutagène, reprotoxique

DER : Direction de l'évaluation des risques

DGEC : Direction générale de l'énergie et du climat

DGPR : Direction générale de la prévention des risques

DGS : Direction générale de la santé

DJA : Dose journalière acceptable

ECHA : Agence européenne des produits chimiques

ELECTRE : Elimination et choix traduisant la réalité

EQRS : Evaluation quantitative des risques sanitaires

GT : Groupe de travail

LAURE : Loi sur l'air et l'utilisation rationnelle de l'énergie

MEC95 : 95^{ème} percentil des concentrations mesurées

NTP : National toxicology program

PBPK : Modèle pharmacocinétique physiologique

PE : Perturbateur endocrinien

PEA : Polluants émergents dans l'air ambiant

PM_{2,5} : Particules en suspension dans l'air, d'un diamètre aérodynamique inférieur à 2,5 micromètres

PM₁₀ : Particules en suspension dans l'air, d'un diamètre aérodynamique inférieur à 10 micromètres

PNEC : Seuil prévisible sans effet

POT : Partial Order Theory

QSAR : Relation quantitative structure à activité

REACH : Réglementations européennes relatives à l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des produits chimiques

SGH : Système Général Harmonisé de classification et d'étiquetage des produits chimiques

SIN list : Substitute It Now! list

SIRIS : Système d'intégration des risques par interaction des scores

TEDX : The endocrine disruption exchange

UERA : Unité d'évaluation des risques liés à l'air

US EPA : United States environmental protection agency

VGAI : Valeur guide de qualité de l'air intérieur

VLEP : Valeur limite d'exposition professionnelle

VTR : Valeur Toxicologique de Référence

1. Introduction

1.1. Contexte

La pollution de l'air ambiant¹ est une problématique majeure de santé publique. En 2010, en Europe, elle aurait contribué à plus de 430 000 décès prématurés et à plus de 7 millions d'année de vie en bonne santé perdues. (OMS, 2013). La pollution atmosphérique a été classée comme cancérigène certain pour l'Homme par le CIRC (groupe 1) en 2013. En France, la loi du 30 décembre 1996 du code de l'environnement, sur l'air et l'utilisation rationnelle de l'énergie (LAURE) charge l'État de la surveillance de la qualité de l'air. Elle est assurée au quotidien dans les différentes régions par les associations agréées pour la surveillance de la qualité de l'air (AASQA). Au niveau européen, la stratégie de la surveillance de la qualité de l'air est encadrée par les directives 2004/107/CE et 2008/50/CE qui fixent notamment des normes de qualité de l'air pour un certain nombre de polluants présents dans la phase gazeuse et/ou particulaire de l'air.

1.2. Polluants réglementés dans l'air ambiant

Dans le cadre de l'application des directives 2004/107/CE et 2008/50/CE, les AASQA sont en charge de la surveillance d'un certain nombre de polluants, dis « polluants réglementés ». Les polluants concernés par ces deux directives sont les suivants :

- le dioxyde d'azote (NO₂) ;
- les oxydes d'azote (NO_x) ;
- le dioxyde de soufre (SO₂) ;
- les PM₁₀ ;
- les PM_{2,5} ;
- le monoxyde de carbone (CO) ;
- le benzène ;
- le plomb ;
- l'arsenic ;
- le cadmium ;
- le nickel ;
- les mercures gazeux ;
- l'ozone ;
- le benzo(a)pyrène (et les six HAP mesurés conjointement : benzo(a)anthracène, benzo(b)fluoranthène, benzo(j)fluoranthène, benzo(k)fluoranthène, indéno(1,2,3,c,d)pyrène, dibenzo(a,h)anthracène).

¹ Le terme « air ambiant » est utilisé au sens « d'air extérieur ».

1.3.1. Les AASQA

Les AASQA sont des associations à but non-lucratif qui mesurent et étudient la pollution atmosphérique au niveau l'air ambiant. Présentes dans les différentes régions administratives de métropole et d'outre-mer, elles sont regroupées au sein de la fédération ATMO France, et bénéficient d'un agrément donné par le ministère de l'Ecologie. Elles ont plusieurs grandes missions (Figure 1): surveiller et prévoir l'air et l'atmosphère, par le biais de mesures et de modélisation ; informer et sensibiliser la population et les acteurs locaux ; accompagner les décideurs et améliorer les connaissances. (ATMO France). La gouvernance des AASQA est effectuée par différents acteurs : l'Etat, les collectivités, des entreprises, ainsi que des associations qualifiées en santé-environnement.



Figure 1 : missions des AASQA (ATMO France)



Figure 2: logo de l'Anses

L'Agence nationale de sécurité sanitaire de l'alimentation, de l'environnement et du travail (Anses), est une agence sanitaire créée le 1^{er} juillet 2010 suite à l'application de la loi « Hôpital, Patients, Santé et Territoires » du 21 juillet 2009. Elle est issue de la fusion de l'Agence française de sécurité sanitaire des aliments (Afssa) et de l'Agence française de sécurité sanitaire de l'environnement et du travail (Afsset). Elle assure des missions de veille, d'expertise, de recherche et de référence dans les domaines de la santé humaine, ainsi que la santé et le bien-être animal et la santé des végétaux.

L'Anses est placée sous la tutelle des ministères chargés de la santé, de l'agriculture, de l'environnement, de travail et de la consommation.

Elle est également en lien avec le Parlement, et collabore avec différentes agences européennes et le Parlement Européen.

La Direction de l'évaluation des risques

La Direction de l'évaluation des risques (DER) fait partie du pôle « Sciences pour l'Expertise » de l'Anses. Elle a pour activité principale l'évaluation des risques dans les différents champs d'expertise de l'Agence. Dans le cadre de ses missions, la DER conduit des expertises collectives qui permettent à l'Anses d'émettre des avis et des recommandations, et de rendre des rapports.

Elle est également en charge de l'évaluation des substances chimiques dans le cadre des réglementations européennes relatives à l'enregistrement, l'évaluation et l'autorisation des produits chimiques (REACH, règlement n°1907/2006) et à la classification, l'étiquetage et l'emballage des substances, des mélanges et des articles (CLP, règlement n°1272/2008).

Afin de mener à bien ses missions, la DER est structurée en trois domaines d'activité :

- Expertise et évaluation des risques, composé de sept unités et faisant appel à différents comités d'experts spécialisés (CES) et à des collectifs d'experts constitués en groupes de travail (GT)
- Méthodologie et observatoires, composé de trois unités en charge de mener des développements méthodologique et statistiques utiles aux travaux d'expertise, ainsi que de la conception et l'exploitation des systèmes de collecte de données
- Appui à l'expertise, composé d'un service qui assure le soutien administratif de l'expertise dans ses différentes composantes.

L'Unité d'évaluation des risques liés à l'air

L'Unité d'évaluation des risques liés à l'air (UERA) fait partie de la DER. Elle est en charge de la réalisation des travaux d'expertise sur les agents chimiques et biologiques présents, aussi bien dans l'air extérieur, que dans les environnements intérieurs. L'UERA coordonne notamment le CES « évaluation des risques liés aux milieux aériens ». Elle assure également des missions pérennes en lien avec la proposition de valeurs guides de qualité de l'air intérieur (VGAI) et de valeurs limites d'exposition professionnelle (VLEP).

1.4. Problématique

Suite à l'évolution des technologies, des polluants pas ou peu émis jusqu'à présent peuvent désormais être présents dans l'atmosphère à des concentrations plus élevées. Par ailleurs l'évolution des connaissances a quant à elle permis de mettre en évidence une présence significative ou croissante dans l'air ambiant de certains polluants, et de nouveaux effets toxiques sur la santé et l'environnement. L'Organisation mondiale de la santé (OMS) a publié ces dernières années plusieurs rapports visant à mettre à jour les connaissances relatives aux effets sanitaires de polluants de l'air ambiant et les valeurs guides de qualité de l'air.

Dans ce contexte, l'Anses a été saisie le 12 octobre 2015 par la Direction générale de la santé (DGS), la Direction générale de l'énergie et du climat (DGEC) et la Direction générale de la prévention des risques (DGPR) afin de dresser un état des lieux des polluants chimiques de l'air ambiant non réglementés à ce jour par les directives 2004/107/CE et 2008/50/CE mais constituant un intérêt au regard de leur impact potentiel sur la santé ou l'environnement.

Afin d'y répondre, un GT pluridisciplinaire a été mis en place. La liste socle des polluants à considérer dans l'expertise a été constituée en incluant (Anses, 2018a) :

- Des polluants non réglementés mesurés dans l'air ambiant en France par les AASQA et des laboratoires de recherche depuis 2006 ;
- Des polluants issus d'auditions de parties prenantes (associations et experts scientifiques français) ;
- Des polluants figurant sur des listes de polluants d'intérêt établies par des organismes internationaux :
 - List of hazardous air pollutants (US EPA, 2015) ;
 - Priority list of hazardous substances, (ATSDR, 2015).
 - Expert Consultation WHO Global Air quality guidelines (OMS, 2016) ;
- Des polluants identifiés suite à une revue de la littérature centrée sur les concepts de l'émergence et de la pollution atmosphérique.

Les polluants biologiques, les pesticides, les radioéléments et les gaz à effets de serre ont été exclus du périmètre de l'expertise fixé par la saisine.

Au final, une liste de 557 polluants d'intérêt a été établie. Le GT a ensuite proposé une méthode de catégorisation adaptée de la méthode NORMAN (Figure 3). Celle-ci a été effectuée sur la base de critères d'occurrence dans l'air et sanitaires (Anses, 2018a). Les polluants ont été répartis dans quatre catégories :

- Catégorie 1 : polluants prioritaires pour une hiérarchisation en vue d'une surveillance réglementaire ;
- Catégorie 2a : polluants nécessitant l'acquisition de données sanitaires ;

- Catégorie 2b : polluants nécessitant l'acquisition de données d'exposition, et éventuellement sanitaires ;
- Catégorie 3 : polluants non prioritaires pour une surveillance.

L'objectif pour les polluants des catégories 2a et 2b est de pouvoir catégoriser ces polluants en catégorie 1 ou en catégorie 3, du fait de l'acquisition de nouvelles données.

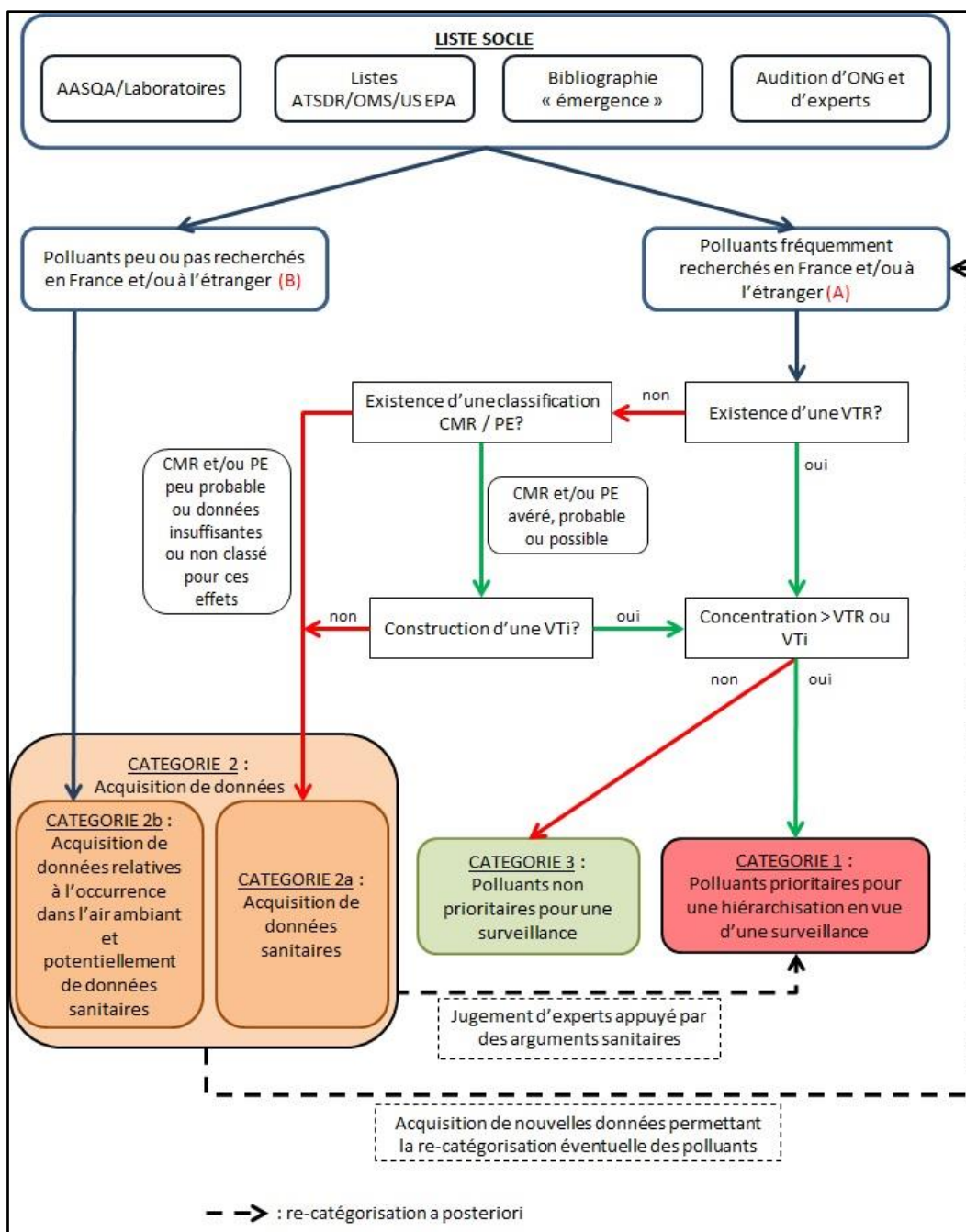


Figure 3 : Méthode de catégorisation des polluants de l'expertise Anses

Les polluants de la catégorie 1 ont ensuite été hiérarchisés en calculant un score de risque (Tableau I). Différents éléments (sources d'exposition et usages des polluants notamment) ont été pris en compte pour établir des recommandations en matière de surveillance de ces polluants.

Tableau I: Classement des polluants de la catégorie 1 en fonction de leur score de risque

Numéro CAS	Polluant	Score de risque	Rang de classement
106-99-0	1,3-butadiène	5,1	1
7439-96-5	Manganèse	1,4	2
7783-06-4	Sulfure d'hydrogène	0,9	3
107-13-1	Acrylonitrile	0,88	4
79-00-5	1,1,2-trichloroéthane	0,86	5
7440-50-8	Cuivre	0,7	6
79-01-6	Trichloroéthylène	0,4	7
7440-62-2	Vanadium	0,3	8
7440-48-4	Cobalt	0,2	9
7440-36-0	Antimoine	0,088	10
91-20-3	Naphtalène	0,087	11
-	Particules ultrafines (PUF)	Polluants ne pouvant être hiérarchisés selon la méthode retenue	
-	Carbone suie		

Suite à ces résultats, il a été conseillé de mettre en œuvre une surveillance nationale du 1,3-butadiène, associé à la proposition d'un objectif environnemental en lien avec la protection de la santé humaine. Il a également été suggéré d'augmenter sur le territoire national le nombre de sites de mesures pour les PUF et le carbone suie. Enfin pour les autres polluants de la catégorie 1, compte-tenu des dépassements de VTR constatés dans des contextes particuliers, il a été conseillé de conduire des campagnes de mesures complémentaires pour étudier l'exposition des populations à proximité des sources d'émission (Anses, 2018a).

Les polluants de la catégorie 2 n'ont pas été hiérarchisés dans les délais de l'expertise. Cette hiérarchisation a été l'objectif de mon stage et constitue le sujet de cette thèse.

1.5. Objectifs

Mes travaux ont été réalisés dans le cadre d'un stage résultant des recommandations établies par le CES « Air » qui a validé l'expertise réalisée par le GT en mars 2018. L'objectif est de proposer une méthode de hiérarchisation pour les polluants des catégories 2a et 2b, catégories qui n'ont pas pu être traitées par le GT dans le cadre de ses travaux. Une revue de la littérature des exercices de hiérarchisation existants a ainsi été effectuée afin de proposer une méthode de hiérarchisation adaptée aux polluants de chaque catégorie et déterminer les paramètres pertinents à prendre en compte dans chacune de ces deux méthodes. Une recherche de sources et de bases d'informations pour chacun des paramètres sélectionnés a ensuite été réalisée afin de permettre l'application des méthodes de hiérarchisation choisies. Des analyses de sensibilité ont été conduites pour estimer l'impact des paramètres sur les résultats de la hiérarchisation. Ce travail doit permettre *in fine* d'identifier les besoins d'acquisition de données pour les polluants de chaque catégorie.

1.5.1. Polluants de la catégorie 2a

Les polluants de la catégorie 2a sont des polluants fréquemment recherchés dans l'air ambiant en France et/ou à l'étranger, mais qui ne sont pas classés comme cancérigène, mutagène, reprotoxique (CMR) ou perturbateur endocrinien (PE) avérés et qui ne possèdent pas de valeur toxicologique de référence (VTR) (Tableau II).

L'objectif de la méthode de hiérarchisation est de déterminer :

- Les polluants pour lesquels la construction d'un VTR par inhalation serait pertinente pour une problématique de qualité de l'air ambiant ;
- Les polluants pour lesquels la conduite d'études toxicologiques serait nécessaire ;
- Les polluants qui ne sont pas prioritaires pour une surveillance dans l'air ambiant et pourraient donc être rebasculés en catégorie 3.

Tableau II: Liste des polluants de la catégorie 2a

CAS	Substance	CAS	Substance	CAS	Substance
106-97-8	N-butane	592-41-6	1-hexène	Matière organique	Matière organique
106-98-9	1-butène	624-64-6	Trans-2-butène	7440-56-4	Germanium
107-83-5	2-méthylpentane	627-20-3	Cis-2-pentène	7440-65-5	Yttrium
108-67-8	1,3,5-triméthylbenzène	644-76-8	Galactosan	25323-30-2	Dichloroéthylène
109-66-0	N-pentane	646-04-8	Trans-2-pentène	25323-89-1	Trichloroéthane
109-67-1	1-pentène	7440-05-3	Palladium	131-11-3	Dimethyl phthalate
111-65-9	N-octane	7440-06-4	Platine	7439-95-4	Magnésium
111-84-2	Nonane	7440-28-0	Thallium	7440-09-7	Potassium
123-86-4	Butyl acétate	7440-32-6	Titane	7440-17-7	Rubidium
124-18-5	N-décane	7440-67-7	Zirconium	7440-23-5	Sodium
14127-61-8	Ion calcium	7440-70-2	Calcium	183658-27-7	EH TBB

CAS	Substance	CAS	Substance	CAS	Substance
14168-65-1	Mannosan	74-84-0	Ethane	26040-51-7	BEH TEBP
142-82-5	N-heptane	74-85-1	Ethène	23488-38-2	TBX
14798-03-9	Ion ammonium	74-86-2	Acétylène	141-62-8	L4
14808-79-8	Ion sulfate	74-98-6	Propane	608-90-2	PBBZ
17341-25-2	Ion sodium	75-28-5	Isobutane	cocaïne	cocaïne
22537-22-0	Ion magnésium	75-75-2	Acide méthylsulfonique	540-97-6	D6
24203-36-9	Ion potassium	78-78-4	Isopentane	85-22-3	PBEB
33543-31-6	2-méthylfluoranthène	95-47-6	O-xylènes	24968-12-5	PBT
498-07-7	Lévoglucosan	95-63-6	1,2,4-triméthylbenzène	37853-59-1	BTBPE
526-73-8	1,2,3-triméthylbenzène	96-14-0	3-méthylpentane	541-05-9	D3 (hexamethylcyclotrisiloxane)
540-84-1	Isooctane	Carbone organique	Carbone organique	107-46-0	L2
590-18-1	Cis-2-butène	Ion chlorure	Ion chlorure	107-51-7	L3

1.5.2. Polluants de la catégorie 2b

La catégorie 2b regroupe des polluants peu ou pas recherchés en France ou à l'étranger (Tableau III). La fréquence de recherche d'un polluant est définie dans l'expertise Anses à partir d'un nombre minimal de campagnes conduites en France ou à l'étranger sur les cinq dernières années en environnement urbain ou bien d'un nombre minimal de publications scientifiques documentant leur occurrence dans l'air ambiant en France ou à l'étranger (Anses, 2018a).

L'objectif de la méthode de hiérarchisation est de déterminer :

- Les polluants devant faire l'objet de campagnes d'occurrence dans l'air ambiant ;
- Les polluants pour lesquels la réalisation d'une étude de filière serait nécessaire pour préciser leurs sources et usages en France ;
- Les polluants pour lesquels les informations disponibles sont insuffisantes et nécessitent la mise en place d'une veille scientifique sur les données toxicologiques et d'exposition.

Tableau III: Liste des polluants de la catégorie 2b

CAS	Substance	CAS	Substance	CAS	Substance
100-02-7	4-nitrophénol	156-62-7	Cyanamide calcique	75-25-2	Bromoforme
100-44-7	Chlorure de benzyle	25168-05-2	Chlorotoluène	75-44-5	Phosgène
100-51-6	Alcool benzylique	25321-22-6	Dichlorobenzène	75-55-8	2-méthyl-aziridine
101-14-4	4,4'-Méthylènebis(2-chloroaniline)	28777-67-5	Diméthylhexane	75-56-9	Oxyde de propylène
101-68-8	4,4'-diisocyanate de diphenylméthylène	302-01-2	Hydrazine	7726-95-6	Dibrome
101-77-9	Diamino-4,4' diphenylméthane	334-88-3	Diazométhane	77-47-4	Hexachlorocyclopentadiène
104-51-8	N-butylbenzène	463-58-1	Oxysulfure de carbone	77-78-1	Sulfate de diméthyle
105-60-2	Caprolactame	510-15-6	Chlorobenzilate	78-59-1	Isophorone
105-67-9	2,4-xylénol	51-28-5	2,4-dinitrophénol	78-87-5	1,2-dichloropropane
106-50-3	Paraphénylènediamine	532-27-4	Chloroacétophénone	79-06-1	Acrylamide
106-51-4	1,4-benzoquinone	53-96-3	2-Acétamidofluorène	79-10-7	Acide acrylique
106-88-7	2-éthyl oxirane	541-73-1	1,3-dichlorobenzène	79-11-8	Acide chloroacétique
106-89-8	Épichlorohydrine	542-88-1	Ether dichlorodiméthylque	79-34-5	1,1,2,2-tétrachloroéthane
107-05-1	Chlorure d'allyle	57-14-7	1,1-diméthylhydrazine	79-44-7	Chlorure de diméthylcarbamoyle
107-30-2	Chlorométhoxyméthane	57-57-8	Beta-propiolactone	79-46-9	2-nitropropane
107-31-3	Formiate de méthyle	584-84-9	Diisocyanate de toluène	80-62-6	Méthacrylate de méthyle
108-05-4	Acétate de vinyle	591-78-6	2-hexanone	822-06-0	Diisocyanate d'hexaméthylène
108-31-6	Anhydride maléique	593-60-2	Bromure de vinyle	85-44-9	Anhydride phtalique
109-60-4	Acétate de propyle	59-89-2	N-nitrosomorpholine	87-68-3	Hexachlorobutadiène
109-99-9	Tétrahydrofurane	60-11-7	4-diméthylaminoazobenzène	88-06-2	2,4,6-trichlorophénol
110-75-8	2-Chloroethyl vinyl ether	60-35-5	Acétamide	88-74-4	2-nitroaniline
111-42-2	Diéthanolamine	624-83-9	Isocyanate de méthyle	90-04-0	O-anisidine
111-44-4	Ether dichloro-2,2' diéthylque	62-53-3	Aniline	91-22-5	Quinoline
1120-71-4	Propane sultone-1,3	62-75-9	N-nitrosodiméthylamine	91-94-1	3,3'-dichlorobenzidine

CAS	Substance	CAS	Substance	CAS	Substance
119-90-4	3,3'-diméthoxybenzidine	64-67-5	Diéthyl sulfate	92-52-4	Biphényle
119-93-7	3,3'-diméthylbenzidine	67-72-1	Hexachloroéthane	92-67-1	Amino-4-diphényle
120-80-9	Pyrocatechol	680-31-9	Hexaméthylphosphoramide	92-87-5	Benzidine
121-14-2	2,4-dinitrotoluène	68-12-2	N,n-diméthylformamide	92-93-3	4-nitrobiphényle
121-44-8	Triéthylamine	683-53-4	2-bromo-1,1-dichloroéthane	95-53-4	O-toluidine
121-69-7	Diméthylaniline	684-93-5	N-méthyl-n-nitrosourée	95-80-7	M-toluylènediamine
122-66-7	1,2-diphénylhydrazine	71-23-8	Propan-1-ol	95-95-4	2,4,5-trichlorophénol
123-31-9	Hydroquinone	7440-21-3	Silicium	96-09-3	Oxyde de styrène
123-91-1	benzotriazole	7440-22-4	Argent	96-12-8	1,2-dibromo-3-chloropropane
124-48-1	Dibromochlorométhane	7440-57-5	Or	96-45-7	Ethylènethiourée
126-99-8	Chloroprène	7440-74-6	Indium	98-07-7	Trichlorure de benzyle
1332-21-4	Asbestos	74-83-9	Bromométhane	98-95-3	Nitrobenzène
140-88-5	Acrylate d'éthyle stabilisé	74-88-4	Iodométhane	60-34-4	Methyl hydrazine
151-56-4	Aziridine	74-90-8	Cyanure d'hydrogène	75-27-4	Bromodichloromethane
156-59-2	Cis-1,2-dichloroéthène	75-00-3	Chloroéthane	75-35-4	Vinylidene chloride OR 1,1-Dichloroethylene
156-60-5	Trans-1,2-dichloroéthène	75-21-8	Oxyde d'éthylène	7550-45-0	Titanium tetrachloride
1861-32-1	Chlorthal-diméthyle	96-37-7	Méthylcyclopentane	106-44-5	p-crésol
25429-29-2	Pentachlorobiphényl	98-82-8	Cumene	109-79-5	Butyl mercaptan
26914-33-0	Tétrachloro-1,1'-biphényl	98-86-2	Acétophénone	109-86-4	2-méthoxyéthanol
57-12-5	Cyanide	85535-86-0	Paraffines chlorées à chaîne longue (C18-C30)	110-15-6	Acide succinique
7440-44-0	Charbon actif	99717-56-3	2-Bromoallyl-2,4,6-tribromophenyl ether (TBP BAE)	110-16-7	Acide maléique
99-87-6	Méthyl-4-(1-méthyléthyl)benzène	39569-21-6	2,3,4,5-tetrabromo-6-chlorotoluène (TBCT)	110-17-8	Acide fumarique
25322-20-7	Tétrachloroéthane	59447-55-1	Pentabromobenzyl acrylate (PBB Acr)	110-49-6	2-méthoxyéthyl acétate
25551-13-7	Triméthyl benzène	35109-60-5	2,3-Dibromopropyl 2,4,6-tribromophenyl ether (TBP DBPE)	110-80-5	2-éthoxyéthanol
103-65-1	N-propyl benzène	BB101	brominated biphenyl 101 (BB101)	111-15-9	2-éthoxyéthyl acétate
104-76-7	2-éthylhexanol	155613-93-7	octabromo-1,3,3-triméthyl-1-phenylindane (OBTMPI)	111-16-0	Acide pimélique
107-02-8	Acroléine	79-94-7	Tetrabromobisphenol A (TBBP-A)	111-66-0	1-octène
107-21-1	Éthylène glycol	1222-05-5	Galaxolide OR HHCB	1119-40-0	Dimethyl pentanedioate
108-10-1	Méthylisobutylcétone	1506-02-1	Tonalide (AHTN)	1120-21-4	N-undécane
108-21-4	Acétate d'isopropyle	80-09-1	BPS = Bisphénol S ?	112-07-2	2-butoxyéthyl acétate
108-87-2	Méthylcyclohexane	3278-89-5	Allyl 2,4,6-tribromophenyl ether (TBP AE)	112-31-2	Décanal
110-62-3	Pentanal	cannabinoid	cannabinoid	112-40-3	Dodécane
110-82-7	Cyclohexane	opiate	opiate	115-11-7	Isobutène
120-82-1	1,2,4-trichlorobenzène	299-42-3	éphédrine	1163-19-5	BDE 209
123-38-6	Propionaldehyde	amphétamines	amphétamines	117-84-0	DnOP
13494-80-9	Tellure	UV filters	UV filters	121-33-5	Vanilline
14265-44-2	Phosphate	85535-85-9	Paraffines chlorées à chaîne moyenne (C14-C17) (MCCPs)	121-34-6	Acide vanillique
540-59-0	1,2-dichloroéthylène	50-37-3	LSD	123-72-8	Butyraldéhyde
622-96-8	4-éthyltoluène	personal care products	personal care products	124-04-9	Acide adipique
624-92-0	Diméthyldisulfure	Stéroïdes	Stéroïdes	124-11-8	1-nonène
64-17-5	Éthanol	7440-33-7	Tungsten	124-19-6	Nonanal
67-56-1	Methanol	Hormones	Hormones	127-63-9	Diphényl sulfone

CAS	Substance	CAS	Substance	CAS	Substance
67-63-0	Isopropanol	1,13-tridécadiène	1,13-tridécadiène	132-65-0	Dibenzothiophène
67-66-3	Chloroforme	1730-37-6	1-Méthylfluorene	1336-21-6	Ammoniaque
7439-91-0	Lanthane	2523-39-9	3-Méthylfluorene	13475-82-6	2,2,4,6,6-pentaméthylheptane
7440-55-3	Gallium	1+3-MethFluo	1+3-MethFluo	13849-96-2	17a(H)-21b(H)-hopane
75-05-8	Acetonitrile	100-21-0	Acide téréphtalique	141-82-2	Acide malonique
75-34-3	Ethylidene dichloride (1,1-Dichloroethane)	100-52-7	Benzaldéhyde	7782-41-4	Fluor
76-13-1	1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoroéthane	104-40-5	Nonylphénol	17301-32-5	4,7-diméthylundecane
7647-01-0	Hydrochloric acid	107-03-9	1-propanethiol	17302-28-2	2,6-diméthylnonane
7664-39-3	Acide fluorhydrique	107-98-2	1-méthoxy-2-propanol	54352-50-0	17 α (H)-21 β (H)-22R-bishomohopane
7782-50-5	Dichlore	108-08-7	2,4-diméthylpentane	67069-26-5	17 α (H)-21 β (H)-22R-trishomohopane
79-20-9	Acétate de méthyle	108-38-3	m-xylène	67069-16-3	17 α (H)-21 β (H)-22S-trishomohopane
84-74-2	Dibutylphthalate	106-42-3	p-xylène	81600-07-9	17 α (H)-21 β (H)-norhopane
87-86-5	Pentachlorophénol	95-47-6	o-xylène	189084-64-8	BDE 100
95-48-7	o-Cresol	108-39-4	m-crésol	19037-58-2	SyringylAcetone
191-07-1	Coronene	38380-08-4	PCB 156	60305-23-9	17 α (H)-21 β (H)-22S-homohopane
1921-70-6	Pristane	39635-31-9	PCB 189	60348-60-9	BDE 99
205-43-6	benzo(b)naphtho(1,2-d)thiophène	4/9-MethPhe	4/9-MethPhe	611-14-3	O-éthyltoluène
207122-15-4	BDE 154	41318-75-6	2,4,4'-Tribromodiphenyl ether (BDE 28)	613-12-7	2-méthylantracène
207122-16-5	BDE 183	4170-30-3	Aldéhyde crotonique	617-78-7	3-éthylpentane
2152-56-9	Arabitol	4206-58-0	SinapylAldehyde	620-14-4	3-éthyltoluène
217-59-4	Triphénylène	458-36-6	Coniferylaldehyde	62016-26-6	2,2,3-triméthyl-octane
2213-23-2	2,4-diméthylheptane	464-06-2	2,2,3-triméthylbutane	62016-37-9	2,4,6-triméthyl-octane
2278-22-0	Nitrate de peroxyacétyle	473-72-3	Acide pinonique	62183-79-3	2,2,4,4-tétraméthyl-octane
2381-21-7	1-méthylpyrène	483-65-8	Retene	627-93-0	Adipate de diméthyle
239-35-0	benzo(b)naphtho(2,1-d)thiophène	498-02-2	Acetovanillone	1724-02-3	Acide glutaconique
243-46-9	benzo(b)naphtho(2,3-d)thiophène	50-21-5	Acide lactique	629-59-4	Tétradécane
24581-03-1	1,5-heptadien-4-ol	505-48-6	Acide subérique	638-36-8	Phytane
2478-38-8	Acetosyringone	50-70-4	Sorbitol	64-19-7	Acide acétique
2503-46-0	GuaiacylAcetone	50-99-7	Glucose	6484-52-2	Nitrate d'ammonium
2531-84-2	2-méthylphénanthrène	513-53-1	2-butanethiol	65510-44-3	PCB 123
25339-56-4	1-heptène	52663-72-6	PCB 167	65-85-0	Acide benzoïque
27193-28-8	Octylphénol	526-75-0	2,3-diméthylphénol	66-25-1	Hexaldéhyde
28664-02-0	Acide pinique	530-57-4	Acide syringique	6638-05-7	4-méthylsyringol
287-92-3	Cyclopentane	53584-59-1	17- α -H-tris-nor-Hopane	6766-82-1	4-propénylsyringol
298-12-4	Acide glyoxylique	5436-43-1	BDE 47	68631-49-2	BDE 153
300-85-6	Acide bêta-hydroxybutyrique	544-76-3	Hexadécane	6915-15-7	Acide malique
306-08-1	Acide homovanillique	560-21-4	2,3,3-triméthylpentane	69-65-8	Mannitol
30997-39-8	1-méthylfluoranthène	562-49-2	3,3-diméthylpentane	69782-90-7	PCB 157
31508-00-6	PCB 118	565-75-3	2,3,4-triméthylpentane	7012-37-5	PCB 28
32598-13-3	PCB 77	57465-28-8	PCB 126	70362-50-4	PCB 81
32598-14-4	PCB 105	576-26-1	2,6-diméthylphénol	71-36-3	N-butanol
32774-16-6	PCB 169	57-88-5	Cholestérol	7314-30-9	Diméthylpropiothetin

CAS	Substance	CAS	Substance	CAS	Substance
3351-31-3	3-Méthylchrysène	589-34-4	3-méthylhexane	7439-88-5	Iridium
06/12/3353	4-méthylpyrène	590-86-3	Isovaléraldéhyde	7439-93-2	Lithium
3458-28-4	Mannose	592-27-8	2-méthylheptane	7740-04-2	Osmium
35065-27-1	PCB 153	591-76-4	2-méthylhexane	7440-16-6	Rhodium
35065-28-2	PCB 138	590-35-2	2,2-diméthylpentane	7440-18-8	Ruthénium
35065-29-3	PCB 180	591-93-5	1,4-pentadiène	7440-20-2	Scandium
3524-73-0	5-méthyl-1-hexène	594-82-1	Tétraméthylbutane	7440-37-1	Argon
35693-99-3	PCB 52	5989-27-5	Limonène	7440-45-1	Cérium
3658-80-8	Diméthyl trisulfide	600-18-0	Acide alpha-cétobutyrique	7440-46-2	Césium
37680-73-2	PCB 101	60305-22-8	17 α (H)-21 β (H)-22R-homohopane	7440-58-6	Hafnium
3769-23-1	4-méthyl-1-hexène	80-56-8	Alpha-pinène	7440-69-9	Bismuth
38380-03-9	PCB 110	832-69-9	1-méthylphénanthrène	74472-37-0	PCB 114
74-93-1	Méthanethiol	832-71-3	3-méthylphénanthrène	95-65-8	3,4-diméthylphénol
74-97-5	Bromochlorométhane	83-48-7	Stigmastérol	95-87-4	2,5-diméthylphénol
75-08-1	Ethanéthiol	84-69-5	DiBP	98-01-1	Furfural
75-18-3	Sulfure de diméthyle	871-83-0	2-méthylnonane	98-54-4	Tert-butyl-4 phénol
75-33-2	2-propanethiol	87-69-4	Acide tartrique	99-65-0	1,3-dinitrobenzène
75-66-1	Tert-butylthiol	88-99-3	Acide phtalique	BPT(2,1)	BPT(2,1)
7782-77-6	Acide nitreux	90-12-0	1-méthylnaphtalène	Carbone totale	Carbone totale
78-83-1	Isobutanol	90989-38-1	Xylènes + C8 aromatics	DNT(2,1)	DNT(2,1)
78-92-2	2-butanol	91-10-1	Syringol	Ethylterbutyléther 0,5 0,7	Ethylterbutyléther 0,5 0,7
79-09-4	Acide propanoïque	928-94-9	Cis-2-Hexen-1-ol	Ion oxalate	Ion oxalate
79-14-1	Acide glycolique	55199-72-9	18ALPHA(H)-22,29,30-TRISNORNEOHOPANE		
79-92-5	Camphène	13560-89-9	Dechlorane plus (DDC-CO)		

2. Méthodologie

Les travaux du stage ont été présentés pour avis au GT « Polluants émergents dans l'air ambiant » et au CES « air » en mars et juin 2018.

2.1. Synthèse bibliographique

Dans un premier temps, un travail de recherche bibliographique a été effectué. L'objectif était d'identifier dans des articles scientifiques et des rapports de différentes institutions internationales, des exercices de hiérarchisation ainsi que les critères utilisés afin de s'en inspirer pour proposer une méthode adaptée à chacune des situations des deux catégories de polluants. Dix-neuf rapports et articles ont été identifiés en amont de cette synthèse bibliographique, soit parce qu'il s'agissait de rapports d'expertise de l'Anses, soit parce qu'ils étaient issus d'une recherche préalablement effectuée dans le cadre de l'expertise Anses. Une recherche bibliographique a ensuite été conduite sur les bases de données SCOPUS et PUBMED, ainsi que dans les moteurs de recherche GOOGLE et GOOGLE SCHOLAR à l'aide des mots clés présentés sur la Figure 4.

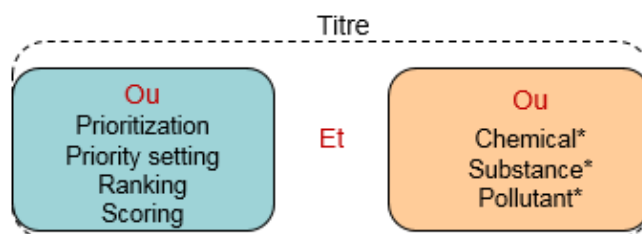


Figure 4 : Mots clés utilisés pour la recherche bibliographique visant à identifier des exercices de hiérarchisation

Cette requête n'était pas restreinte au média « air » puisque des exercices utilisés pour d'autres milieux peuvent être intéressants et être adaptés à la situation précise de l'air ambiant. La méthode de catégorisation utilisée dans le rapport PEA est d'ailleurs une méthode initialement appliquée aux polluants des milieux aquatiques.

Après l'élimination des doublons et des articles non pertinents, 17 nouvelles références viennent s'ajouter aux 19 identifiées au préalable, pour un total de 45 exercices de hiérarchisation différents (Figure 5).

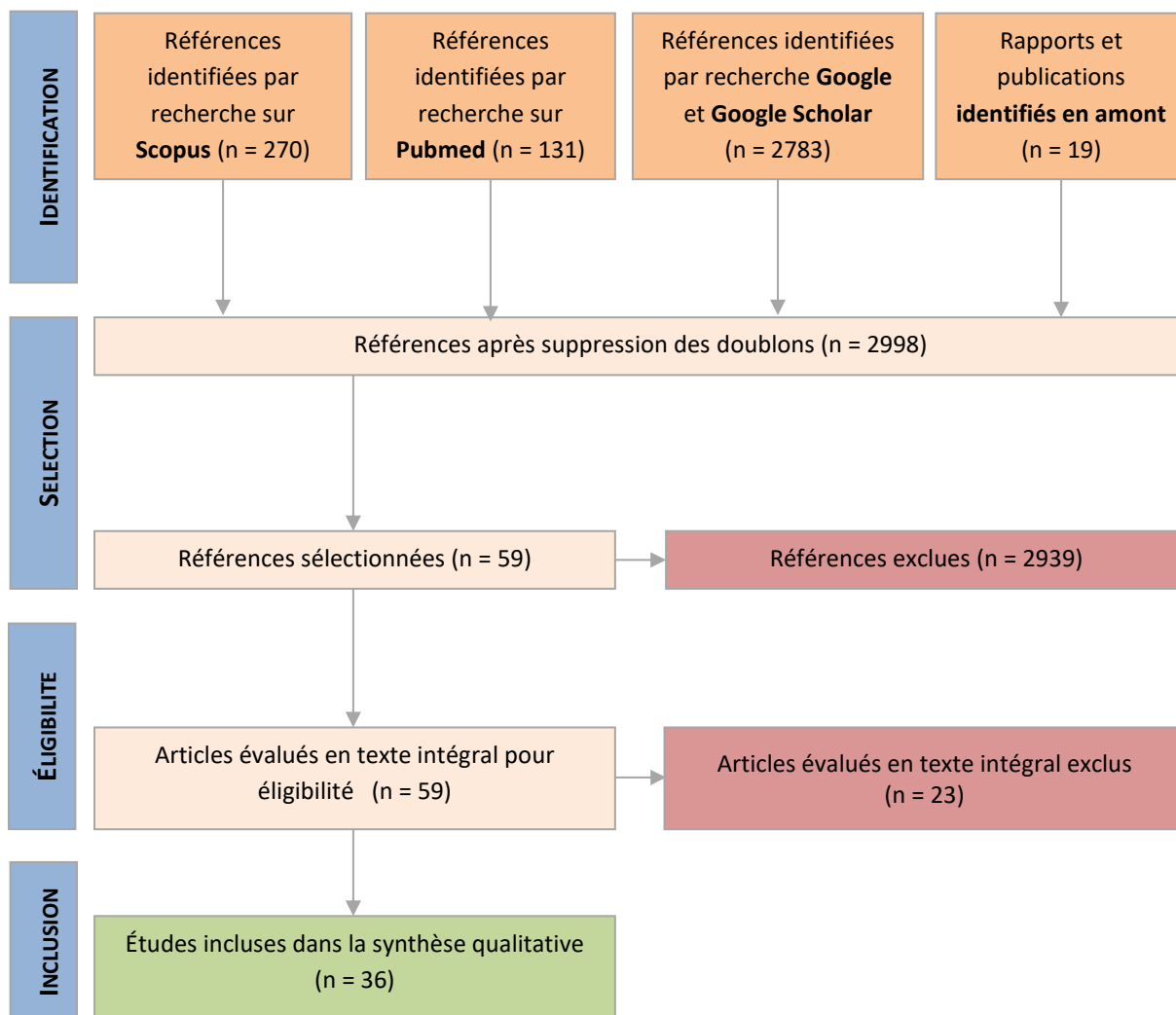


Figure 5 : Profil de recherche bibliographique détaillé (PRISMA)

Nom du rapport ou de l'article	NORMAN Prioritisation framework for emerging substances	INERIS - Définition d'une méthode d'identification et de hiérarchisation de substances préoccupantes	Nedellec <i>et al.</i> : Déchets ménagers	Mosqueron et Nedellec : OQAI	Papadopoulos <i>et al.</i> : TDS	Bonvallot <i>et al.</i> : Substances reprotoxiques	ANSES - infrastructures routières	ANSES - pesticides dans l'air ambiant
Objectif	Hiérarchiser les substances dites "émergentes", car en raison de leur nombre en hausse et de moyens insuffisants, il n'est pas possible de toutes les prendre en compte.	Dans le cadre du PNSE2, l'INERIS est chargée d'élaborer une méthode de hiérarchisation des substances préoccupantes dans le but d'établir une liste de substances prioritaires pour le PNSE3	Projet AMESTIS : Construire des fonctions dose-réponse pour les polluants non cancérigènes et permettre ainsi d'estimer un impact sanitaire	Construire une hiérarchisation des agents dangereux mesurés afin d'optimiser les coûts métrologiques de la future campagne opérationnelle de l'OQAI.	Obtenir une méthode générale pour prioriser les substances à étudier dans les études de l'alimentation totale	Identifier les substances chimiques possédant un potentiel reprotoxique afin de les hiérarchiser pour mieux cibler les travaux de construction de VTR à entreprendre	Mise à jour d'une note méthodologique et notamment d'une liste de seize polluants recherchés.	Etablir un état des connaissances des niveaux de contamination en pesticides de l'air ambiant et des expositions par la voie aérienne pour la population générale.
Compartiment atmosphérique (OUI/NON)	NON	OUI et NON	OUI	NON	NON	NON	OUI	OUI
Effets sanitaires aigus ou chroniques ?	-	CHRONIQUES	CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	CHRONIQUES	CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES
Méthode(s) utilisée(s)	Score de risque	Méthode ELECTRE	Score de risque	Score de risque	Score de risque	Score de risque	Score de risque	Méthode ELECTRE (Sph'air)

Nom du rapport ou de l'article	ANSES - Produits d'ameublement (COV)	ANSES - Lutte antivectorielle	ANSES - Parkings	ANSES - Priorisation des substances				Afsset - Substitution des CMR
Objectif	Déterminer et hiérarchiser, sur la base de considérations sanitaires et des données d'exposition, les substances chimiques principalement émises par les produits d'ameublement et proposer une liste de dix substances (environ) pouvant faire l'objet d'un étiquetage	Effectuer une revue de toutes les substances actives en cours d'évaluation, et identifier les produits insecticides autorisés dans le cadre phytosanitaire et identifiés par diverses instances.	Avis de l'Afsset sur les valeurs limites de concentration en polluants à respecter dans l'air des parcs de stationnement couverts.	Document interne ayant pour objectif de lister les différentes méthodes de priorisation de substances existantes en vue d'établir une démarche de priorisation des substances à étudier dans le cadre des évaluations des risques sanitaires et des valeurs de référence.				Procéder à une étude sur la substitution des agents chimiques classés cancérogènes, mutagènes et toxiques pour la reproduction (CMR) de catégories 1 et 2 par l'Union européenne
Compartiment atmosphérique (OUI/NON)	NON	OUI ET NON	NON	NON	NON	NON	NON	NON
Effets sanitaires aigus ou chroniques ?	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	CHRONIQUES
Méthode(s) utilisée(s)	Score de danger	Méthode SIRIS	Score de risque	Score de risque (Homme et environnement)	Score de risque	Scores de danger	Méthode SIRIS	Méthode SIRIS

Nom du rapport ou de l'article	ANSES - Substances d'intérêt REACH-CLP	RIVM	NEPC - National pollutant inventory	Fraunhofer-Institut - COMMPS Procedure (EU)	OSPAR Commission - DYNAMEC (EU)	ATSDR - Substance Priority List	US EPA : Chemical Hazard Evaluation for Management Strategy: a method for ranking and scoring chemicals by potential human health and environmental impacts	Snyder et al., 2000 - SCRAM
Objectif	Identifier les substances pour lesquelles un danger ou risque pour la santé humaine ou l'environnement est suspecté et recommander aux autorités françaises des mesures de gestion (classification /étiquetage, autorisation, restriction).	Détecter les risques émergents pour les travailleurs et les actions de suivi	Le comité technique consultatif de l'inventaire national des polluants a été formé en mars 1997 pour recommander les substances à inclure dans l'inventaire national des polluants.	Etablir une liste des substances classées par ordre de priorité en fonction du risque qu'elles représentent pour l'homme et l'environnement aquatique.	Créer un mécanisme dynamique de sélection des substances dangereuses et de classement de celles-ci en fonction des priorités (mécanisme DYNAMEC).	Etablir une liste prioritaire des substances dangereuses communément retrouvées au niveau des installations figurant sur la CERCLA National Priorities List (NPL)	Etablir des priorités concernant le choix des substances à évaluer au sein des programmes environnementaux.	Fournir une procédure de hiérarchisation des substances chimiques basé sur la persistance dans l'environnement de celles-ci et leurs effets toxiques.
Compartiment atmosphérique (OUI/NON)	NON	NON	NON	NON	NON	NON	NON	NON
Effets sanitaires aigus ou chroniques ?	CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	CHRONIQUES	CHRONIQUES	CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES
Méthode(s) utilisée(s)	Méthode SIRIS	Score de risque	Score de risque	Score de risque	Score de risque	Score de risque	Score de danger	Score de risque (SCRAM)

Nom du rapport ou de l'article	Casado-Martinez et al. 2018	De Rosa et al. 1985	Gramatica et al. 2018	Hughes et al. 2009 - Canada	Jeong et An; 2011	Lerche et al.,2004 (POT/RLE)	Oltmanns et al. 2011	Pennington et Bare, 2001	
Objectif	Evaluer les impacts à long terme des activités humaines et de veiller à ce que les niveaux de contamination n'augmentent pas jusqu'au stade de menace pour l'environnement et la santé humaine.	Fournir à l'EPA le contexte technique requis pour ajuster les RQ des substances dangereuses désignées à l'article 101 (14) de la CERCLA	Utiliser des modèles basés sur des données QSAR sont utiles pour trier, classer et hiérarchiser les produits chimiques qui peuvent avoir un impact négatif sur la santé humaine et l'environnement.	Identifier systématiquement les substances les plus prioritaires par rapport à leur potentiel de provoquer des effets néfastes sur la population générale.	Construire un protocole pour cibler les contaminants prioritaires du sol à inclure dans l'expansion planifiée des normes de qualité des sols.	Regrouper ou classer les substances chimiques en fonction de leur impact sur la santé humaine et l'environnement.	Dans le cadre de ses activités, l'EFSA a lancé un projet d'étude et d'identification concernant les produits chimiques dépendants de la réglementation REACH et susceptibles d'entrer dans la chaîne alimentaire à travers l'environnement et de créer un risque émergent pour les consommateurs.	Comparaison de 2 méthodes de hiérarchisation utilisée par l'US EPA	
Compartiment atmosphérique (OUI/NON)	NON	NON	OUI ET NON	NON	NON	OUI ET NON	NON	OUI ET NON	
Effets sanitaires aigus ou chroniques ?	CHRONIQUES	CHRONIQUES	-	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	CHRONIQUES	CHRONIQUES	CHRONIQUES	
Méthode(s) utilisée(s)	Score de risque	Score basé sur une human MED (réalisée à partir de NOAEL, LOAEL, FEL) et du type d'effet	Utilisation de modèles QSAR	Outils : SimHaz et ComHaz	Score de risque	Partial order theory (Diagramme de Hasse)	Score de risque	Score de risque	Méthode "Toxic Equivalency Potentials" (TEP) avec l'outil CalTox

Nom du rapport ou de l'article	Sailaukhanuly et al., 2013	Shin et al., 2014	Swanson et al., 1997	Taxell et al., 2013	Wolf et al., 2015	Mitchell et al., 2013	van Asselt et al., 2018
Objectif	Comparaison de 3 méthodes de hiérarchisation, dans le but de hiérarchiser des polluants organiques persistants	Développer une méthode appropriée de sélection de substances nocives à contrôler spécialement dans les environnements professionnels.	Mettre en perspective les données de rejets chimiques en évaluant à la fois les effets toxiques des produits chimiques et l'exposition potentielle à ces substances.	Effectuer une revue systématique et une hiérarchisation des produits chimiques industriels dans le cadre de la préparation nationale en santé publique aux incidents chimiques.	Utiliser une matrice danger/exposition comme un outil de priorisation. Cette approche encourage une évaluation directe des données afin de juger si elles sont suffisantes pour mener une conclusion ou si des données supplémentaires peuvent être utiles.	Montrer comment les outils analytiques peuvent offrir une approche polyvalente et transparente de priorisation basée sur l'exposition en utilisant les résultats de plusieurs approches évalué dans "l'EPA ExpoCast model challenge".	Hiérarchiser les risques liés aux dangers chimiques des épices et herbes afin de mettre en place de programmes de surveillance.
Compartiment atmosphérique (OUI/NON)	NON	OUI ET NON	NON	NON	NON	OUI ET NON	NON
Effets sanitaires aigus ou chroniques ?	-	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	-	-	AIGUS ET CHRONIQUES
Méthode(s) utilisée(s)	Partial order theory (Diagramme de Hasse)	Score de risque	Score de risque	Score de risque	Matrice Danger/Exposition	Matrice propriétés chimiques/cycle de vie	Matrice Probabilité/Sévérité

Nom du rapport ou de l'article	ACC Prioritization Screening Approach	TSCA - US EPA	Winnebeck et al., 2012	Brüggemann et al., 2006	Sorensen et al., 1997
Objectif	Identifier les substances prioritaires une évaluation plus approfondie qui, une fois menées, pourraient mener à des mesures de gestion des risques.	Identifier les substances chimiques candidates potentielles à une évaluation dans un délai proche dans le cadre du "Toxic Substances Control Act (TSCA)." L'Agence a l'intention d'utiliser le plan de travail du TSCA pour aider à orienter et à diriger les activités du "Existing Chemicals Program" au Bureau de la prévention de la pollution et des toxiques (OPPT).	Réaliser une méthode systématique pour analyser le risque potentiel associé aux produits chimiques et quantifie ces risques pour faciliter la prise de décision.	Comparaison de 3 méthodes de hiérarchisation	Obtenir des résultats de classement relatifs à la fois pour les substances individuelles (principes actifs) et pour classer différents scénarios d'utilisation de pesticides totaux.
Compartment atmosphérique (OUI/NON)	NON	NON	NON	NON	NON
Effets sanitaires aigus ou chroniques ?	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	AIGUS ET CHRONIQUES	-	-
Méthode(s) utilisée(s)	Matrice Danger/Exposition	Score de risque	Score de risque	Partial order theory (Diagramme de Hasse) et méthode PROMETHEE	Partial order theory (Diagramme de Hasse)

2.2. Méthodes de hiérarchisation et critères identifiés

La synthèse bibliographique a permis d'identifier deux grands types de méthodes : les méthodes par score et les méthodes graphiques.

2.2.1. Les méthodes avec calcul d'un score

a) Score de risque :

De nombreuses publications utilisent une méthode de hiérarchisation basée sur un score de risque qui reprend l'équation : Danger \times Exposition, ou une variante assez similaire impliquant ces deux paramètres.

Pour traduire au mieux la composante de danger, les critères les plus fréquemment utilisés sont les suivants :

- La toxicité pour l'Homme : cancérogénicité, mutagénicité, reprotoxicité, perturbation endocrinienne, VTR... ;
- La toxicité pour les écosystèmes : concentration létale 50 (CL50), concentration prévisible sans effet (PNEC)...

Quant à la composante exposition, celle-ci est souvent dépendante du milieu considéré, de la population cible, et de la problématique initiale :

- Les concentrations en polluant mesurées dans les différents milieux ;
- Le tonnage et la quantité de polluant utilisé annuellement ;
- Les propriétés physico-chimiques du polluant (coefficient de partage octanol/eau, point d'ébullition, pression de vapeur ...)
- La persistance du polluant dans les différents milieux ainsi que leur bioaccumulation et leur biodégradabilité

En plus de ces critères quantitatifs, des critères qualitatifs peuvent entrer dans le calcul du score en leur attribuant des points en fonction de leur importance.

b) Score de danger

À la différence des scores de risque, les scores de dangers ne prennent pas en compte l'exposition. Ils sont basés uniquement sur le danger des substances chimiques. Les critères les plus fréquemment utilisés sont les mêmes que ceux cités pour le calcul du score de risque.

c) La méthode SIRIS

La méthode SIRIS (Système d'Intégration des Risques par Interaction des Scores) est une méthode multicritère d'aide à la décision. Il s'agit d'une méthode dite de déclassement car le calcul des pénalités se fait en partant d'une situation idéale à laquelle on attribue un score nul, pour ensuite déclasser les polluants en fonction des modalités apparaissant de plus en plus défavorables en leur attribuant des pénalités. Cette méthode a notamment pour avantage de pouvoir prendre en compte des critères aussi bien quantitatifs que qualitatifs.

Préalablement à son application, la méthode SIRIS nécessite la mise en place d'une démarche basée sur trois étapes :

- 1- La sélection des critères à prendre en compte ;
- 2- La hiérarchisation des critères entre eux par ordre d'importance, en fonction de l'objectif recherché ;
- 3- La définition des limites des modalités pour chaque critère.

Une fois ces étapes réalisées, la méthode peut être appliquée et aboutira au calcul d'un score pour chacune des molécules considérées. Celles-ci pourront ensuite être classées en fonction de leur score respectif (Afsset, 2007).

Exemple d'utilisation :

La méthode SIRIS a notamment été utilisée pour la création de l'outil SIRIS-Pesticides. Il s'agit d'un outil d'aide à la décision ayant pour but de définir les substances à surveiller de façon prioritaire dans les eaux. Cette méthode a été choisie car elle est particulièrement adaptée pour la classification des substances chimiques en utilisant des données de référence et sans avoir recours à de la modélisation. C'est une méthode qui permet de combiner des données concernant le danger d'une part et des données d'exposition d'autre part, exprimées sous forme de paramètres écotoxicologiques et physico-chimiques.

d) Autres méthodes

Plusieurs publications et rapports font état de méthodes de hiérarchisation basées sur des méthodes ne faisant pas intervenir directement des systèmes de scores.

Hughes et al. en 2009 décrivent dans leur article la méthode utilisée pour hiérarchiser les molécules de la Domestic substances list au Canada. Le classement de ces molécules a notamment été réalisé avec deux logiciels :

- SimHaz qui identifie les molécules présentes dans des listes de substances dangereuses (ex : la liste des molécules évaluées pour leur cancérogénicité par le Centre international de recherche sur le cancer (CIRC))
- ComHaz qui classe les molécules selon l'existence ou non de VTR et leurs valeurs pour différents effets critiques.

Dans leur publication en 2001, Pennington et Bare font quant à eux le choix d'utiliser le logiciel CalTox afin de déterminer par modélisation un taux de diffusion de la dose par unité. Ils divisent ensuite cette valeur par une dose journalière acceptable (DJA) où ils la multiplient par des facteurs de risques carcinogènes pour obtenir un potentiel d'équivalence toxique. La valeur de ce dernier permettra ensuite de classer les différentes molécules entre elles, comme lors du calcul d'un score.

2.2.2. Les méthodes visuelles ou graphiques

a) La matrice Danger/Exposition

Il s'agit ici d'une représentation visuelle de la combinaison de deux scores :

- Un score d'exposition représenté en abscisse ;
- Un score de danger représenté en ordonnée.

L'interprétation se fait ensuite en fonction de la distance vis-à-vis de l'origine du repère et des deux axes. Plus une substance s'en éloigne, plus elle présente un risque élevé. Des couleurs peuvent être ajoutées au graphique afin de permettre une meilleure visualisation du risque, comme sur la Figure 6.

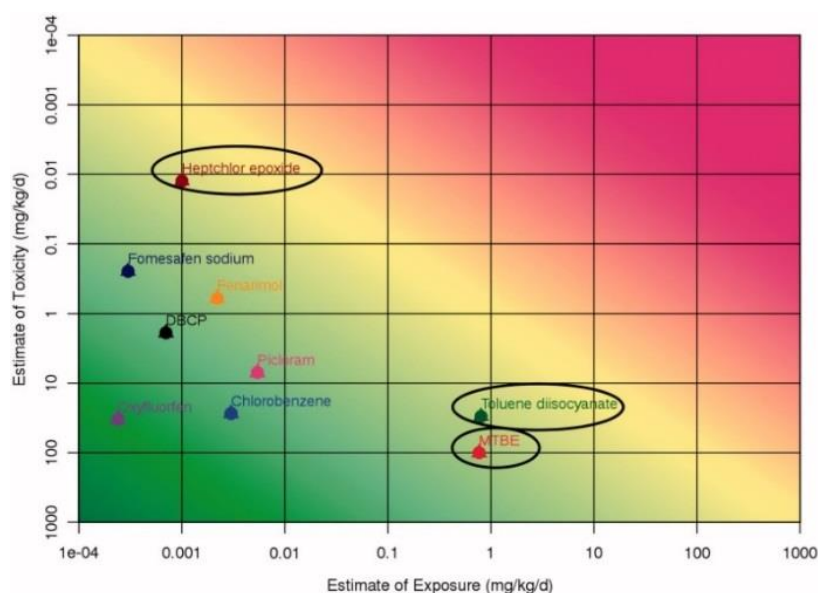


Figure 6: Exemple de matrice Danger/Exposition (Wolf et al., 2016)

b) La méthode ELECTRE

La méthode ELECTRE (ELimination Et Choix Traduisant la REalité) est une méthode multicritères dite « d'agrégation par surclassement de synthèse » basée sur l'approche « partial order theory » (POT). Il s'agit d'une méthode simple utilisant la relation mathématique « supérieur ou égal à » pour comparer les différents polluants. Il n'y a pas de calcul de score, les polluants sont comparés entre eux sur la base de plusieurs critères. Un polluant *a* aura un rang plus élevé qu'un polluant *b* si les valeurs que prend *a* pour chaque critère sont supérieures aux valeurs que prend *b*. Le résultat de cette hiérarchisation peut ensuite être représenté sous la forme d'un diagramme de Hasse.

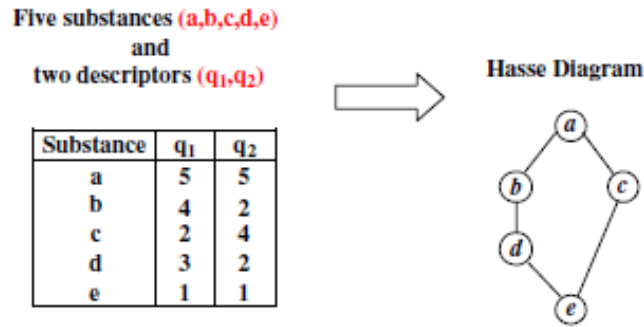


Figure 7 : Exemple de hiérarchisation basée sur l'approche "Partial Order Theory" (Lerche et al., 2004)

En prenant comme exemple la Figure 7, le polluant *a* possède des valeurs supérieures au polluant *b* pour les deux critères de comparaison, il est donc représenté visuellement au-dessus de *b* sur le diagramme de Hasse. Ainsi, chaque polluant est relié à celui qui lui est directement supérieur après comparaison, les polluants qui sont représentés au même niveau sont jugés égaux en termes de rang, et ne sont donc pas reliés entre eux.

Exemple d'utilisation :

Cette méthode de hiérarchisation a notamment été utilisée par l'INERIS pour développer l'outil Sph'Air. Cet outil a pour but de hiérarchiser des pesticides afin de déterminer ceux qui sont les plus préoccupants d'établir de façon systématique une liste de pesticides à surveiller dans l'air. Les auteurs de Sph'Air se sont tournés vers une méthode multicritère pour plusieurs raisons : l'évolutivité de la méthode, prise en compte de critères non quantitatifs, l'intégration d'un seuil d'indifférence lorsque deux valeurs sont proches et l'existence d'une large documentation concernant cette méthode, notamment pour des problématiques similaires. Les systèmes de scores et de notes ont été écartés car, bien que jugés simples à mettre en œuvre, ils sont également considérés comme peu rigoureux. Quant à la méthode SIRIS, elle a également été utilisée pour des problématiques similaires par le passé. Toutefois l'absence de logiciel rendait la réalisation de listes à intervalles réguliers trop laborieuse et compliquait la modification de la méthode, que ce soit lors de l'ajout d'un critère ou lors de la modification de l'ordre de chacun d'entre eux.

2.2.3. Critères identifiés

Le recensement des différentes méthodes de hiérarchisation a permis de faire l'inventaire des nombreux critères utilisés pour leur mise en œuvre dans le cadre de différentes expertises. Ces critères peuvent être classés dans trois grands groupes : danger, exposition et autres.

a) **Les critères de danger :**

Ce sont des critères traduisant la toxicité des polluants sur la santé humaine, animale ou pour l'environnement. Les plus fréquemment retrouvés sont les suivants :

Pour la santé humaine :

- La cancérogénicité : basée sur les classifications de plusieurs organisations : le Centre international de recherche sur le cancer (CIRC), la United States Environmental Protection Agency (US EPA), l'Agence européenne des produits chimiques (ECHA), l'American Conference of Governmental Industrial Hygienists (ACGIH®), le National Toxicology Program (NTP) ... ;
- La mutagénicité et reprotoxicité : principalement basées sur les classifications de l'ECHA ;
- La perturbation endocrinienne, en prenant en compte les classifications BKH-DHI, les listes de The endocrine disruption exchange (TEDX), SIN (Substitute It Now!) list ... ;
- La toxicité chronique, principalement basée sur les classifications de l'ECHA
- La toxicité aiguë en prenant en compte les données de l'ECHA ou des modèles de relation quantitative structure à activité (QSAR) ;
- L'existence de VTR pour différentes voies et de doses critiques (NOAEL/C, LOAEL/C, BMD/C) chez l'homme ou l'animal.

Pour les écosystèmes :

- La PNEC, la CL50, la CE50 ...

b) Les critères d'exposition :

Ce sont des critères qui permettent d'approcher ou d'estimer la quantité de polluants pouvant potentiellement entrer en contact avec la population. Les principaux critères d'exposition utilisés sont les suivants :

- Les données de mesure : concentrations moyennes mesurées, 95^{ème} percentile des concentrations mesurées (MEC95) ... ;
- Les métadonnées associées aux données de mesure : nombre de sites de mesure, nombre de pays ayant réalisé des campagnes de mesures ... ;
- Les paramètres physicochimiques : Log Kow, pression de vapeur, point d'ébullition, volatilité, point de fusion, stabilité chimique, persistance, bioaccumulation et biodégradation ;
- La quantité de polluants produite, utilisée, rejetée et son débit.

c) Les autres critères :

Ce sont les critères qui ne peuvent pas être classés dans l'une des deux catégories précédentes. Des exemples sont :

- Des critères de faisabilité technique et technico-économique de la réduction des expositions ;
- Un critère de perception sociétale des enjeux sanitaires et/ou environnementaux associés à un polluant. Ce critère, utilisé par l'Ineris, et principalement basé sur le nombre d'articles de presse mentionnant une substance, ou le nombre de résultats sur des moteurs de recherche (Ineris, 2013). La note totale est réalisée de la façon suivante :

$$Note_{\text{Perception Sociétale}} = Note_{\text{médias généraux}} + Note_{\text{Medias Environnement}} + Note_{\text{Google}} + Note_{\text{ONG}}$$

Pour les deux notes qui concernent la présence de la substance dans les médias, 0,5 points sont attribués par média généraux dans lesquels la substance apparait et 1 point pour les médias spécialisés dans l'actualité liée à la santé ou l'environnement. Les médias proposés par l'Ineris et pris en compte dans la dernière version de cet indicateur sont : France 2, Le Monde, Nouvel Observateur, Ouest France, Elle, Mediapart pour les médias « généralistes » ; et Actu-environnement et Doctissimo pour les médias spécialisés en santé et en environnement. Le résultat de cette note dépend entièrement du bon fonctionnement du moteur de recherche de chacun des sites internet, et notamment de sa capacité à pouvoir trouver des articles où la substance considérée a été mentionnée. Par ailleurs, de nombreuses substances possèdent plusieurs noms qu'il faudra prendre en compte pour effectuer cette

recherche. On peut également s'interroger sur la pertinence du poids attribués à certains médias, voire à la présence ou à l'absence de certains d'entre eux dans cette liste.

La note « Google », correspond au nombre de résultats renvoyé par le méta-moteur Google après avoir saisi le nom de la substance dans la barre de recherche. On attribue un score compris entre 0 et 4 en fonction du nombre de résultats renvoyés :

- Plus d'un million de résultats : 3 points
- Entre 100 000 et 1 000 000 de résultats : 2 points
- Entre 1 000 et 100 000 résultats : 1 points
- Moins de 1 000 résultats : 0 points

Outre la question de l'opacité de l'algorithme de recherche de Google, la manière dont ces tranches ont été décidées n'a pas été explicitée.

Enfin, une note « ONG » est attribuée en fonction de la présence d'au moins un article sur la substance considérée sur les sites de l'Alliance pour la planète ou de France Nature Environnement, et sur le site du Réseau Santé Environnement. Les mêmes problématiques se posent que pour les deux notes « médias » et le choix des ONG n'est, là non plus pas explicité.

Ces différentes notes sont ensuite additionnées pour former une note de « Perception Sociétale ». Toutefois, s'il est question de « Perception » dans le nom de cet indicateur, à aucun moment, dans l'attribution des notes, une différenciation entre les articles « négatifs » et « positifs » n'est réalisée. Il s'agit en réalité plus réellement d'un Indicateur de « Popularité » que de « Perception ».

2.3. Méthodes sélectionnées

2.3.1. Méthode retenue pour la hiérarchisation des polluants de Catégorie 2a

Les polluants de la catégorie 2a sont des polluants pour lesquels il existe des données d'exposition grâce aux informations fournies par les AASQA, les laboratoires de recherche, ou la bibliographie, mais pour lesquels les données sanitaires sont limitées. En effet, il s'agit de polluants qui n'ont pas été évalués ou classés CMR ou PE et pour lesquels il n'existe pas de VTR.

La méthode de hiérarchisation développée devra permettre de répartir les 66 polluants de cette catégorie dans l'une des trois types de recommandations mentionnées dans la partie 2.2.1.

La méthode retenue consiste à calculer un score de risque basé sur la construction d'une valeur toxicologique indicative (en l'absence de VTR) et le calcul d'une concentration moyenne d'exposition dans l'air ambiant fournie par les AASQA ou obtenue à travers la bibliographie.

L'utilisation de la moyenne permet d'avoir un exercice homogène pour les 66 polluants. Cette donnée est systématiquement fournie par les AASQA et renseignée dans la littérature, contrairement aux autres données de concentration (médiane, percentile 95 etc.).

a) **Construction des VTi**

« Une VTi est un repère toxicologique pouvant être utilisé pour l'évaluation d'un risque. Il s'agit d'une valeur indicative moins robuste que la VTR présentant ainsi un niveau de confiance plus faible. [...] Une VTi pourra être proposée lorsque les conditions nécessaires à l'élaboration d'une VTR ne sont pas remplies et qu'une EQRS est nécessaire dans un contexte d'exposition donné : en cas d'insuffisance des données [...] et en cas de contraintes de temps/ou de ressources » (Anses, 2018b).

Les VTi construites dans le cadre de cet exercice s'appliquent à la population générale. Leur construction suit les mêmes étapes que la construction des VTR (Anses, 2018b):

- Recensement et analyse des données de toxicité disponibles ;
- Identification du ou des organes cibles et de l'effet critique² ;
- Identification de l'hypothèse de construction, à seuil ou sans seuil de dose³ ;

² L'effet critique correspond à un effet néfaste, spécifique de la substance survenant aux doses ou concentrations les plus faibles. (Anses, 2018b)

³ Les effets à seuil sont ceux qui ne se produisent qu'au-dessus d'un certain niveau d'exposition. Les effets sans seuil l'effet peuvent apparaître quelle que soit la dose reçue et où la probabilité de survenue augmente avec la dose. (Anses, 2018b)

- Choix d'une (ou plusieurs) étude(s) clef(s) de bonne qualité la plus pertinente (épidémiologique ou toxicologique) ;
- Définition d'une dose critique ou point de départ (POD) chez l'Homme ou l'animal à partir de cette étude clef (NOAEL/C, LOAEL/C, BMD/C) ;
- Réalisation des ajustements temporels et allométriques ;
- Pour une VTR à seuil, application des facteurs d'incertitudes à cette dose de manière à dériver une VTR applicable à l'ensemble de la population visée ; pour une VTR sans seuil, réalisation d'une extrapolation linéaire à l'origine afin de déterminer un excès de risque.

Compte tenu des délais impartis et du nombre de polluants, la construction des VTi s'est appuyée sur des hypothèses par défaut conservatrices. Les données utilisées pour leur construction devront faire l'objet d'une analyse plus approfondie si la construction d'une VTR est jugée pertinente.

Le recensement des données disponibles a été effectué sur PUBMED et SCOPUS à partir du nom des 66 polluants, de leurs principaux synonymes, et des mots clefs présents sur la Figure 8

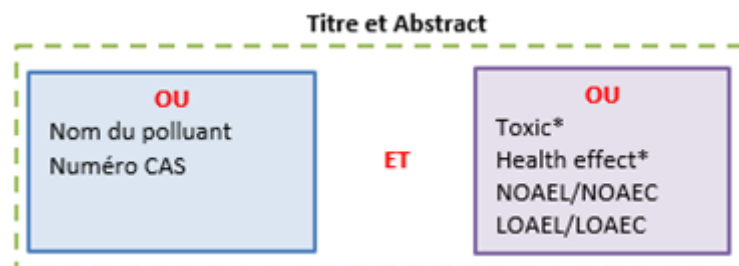


Figure 8 : Mots clés utilisés pour la recherche d'études toxicologiques

Cette recherche a été complétée par les profils toxicologiques réalisés par le NTP⁴, l'ATSDR⁵, l'US EPA⁶, l'ACGIH⁷, ainsi que par les données décrites par d'autres organismes, comme par exemple celle présentes dans les dossiers d'enregistrement des substances chimiques réalisés dans le cadre du règlement REACH⁸. Il s'agit pour la plupart d'études non publiées qui n'apparaissent donc pas lors des recherches bibliographiques sur PUBMED et SCOPUS. Ces études ont toutefois été réalisées en suivant les exigences du règlement REACH ainsi que les principes de l'OCDE concernant les bonnes pratiques de laboratoires ou toute autre méthode

⁴ NTP : <https://ntp.niehs.nih.gov/>

⁵ ATSDR : <https://www.atsdr.cdc.gov/>

⁶ US EPA : <https://www.epa.gov/iris>

⁷ ACGIH® : <https://www.acgih.org/>

⁸ ECHA : <https://echa.europa.eu/fr/home>

équivalente reconnue à l'échelle internationale. L'Anses considère que ces données peuvent être utilisées dans la mesure où les données sont suffisamment détaillées pour être expertisées (Anses, 2018b).

Par ailleurs, les études dont le niveau de confiance n'avait pas été indiqué par l'ECHA ont été évaluées à l'aide de l'outil ToxRtool. Il s'agit d'un fichier Excel® reprenant les principes du score de Klimisch, une méthode permettant d'évaluer la fiabilité des études toxicologiques, principalement à des fins réglementaires. Cette méthode a été proposée en 1997 par H.J. Klimisch, M. Andreae et U.Tillmann de la grande entreprise de chimie allemande BASF (Klimisch *et al.*, 1997). L'objectif était d'harmoniser les processus d'évaluation des données au niveau international, et d'offrir une documentation systématique de l'évaluation de la fiabilité des études lorsque celles-ci sont utilisées pour la base de données IUCLID qui recense des données sur les propriétés intrinsèques et les dangers des substances chimiques, et qui est notamment utilisée dans le cadre de la création des dossiers d'enregistrement REACH. Le score de Klimisch peut être appliqué à la fois aux études *in vivo* et aux études *in vitro*. Il consiste à attribuer des points à chaque fois qu'une information demandée est présente dans l'étude. L'addition de l'ensemble des points nous donne un score final qui permet de classer l'étude dans une des quatre catégories suivantes :

- 1- Fiable sans restriction : Ce sont les études les plus complètes, utiles, et pertinentes pour le but recherché. Elles comportent la plupart ou la totalité des informations qui sont attendues dans le cadre d'une étude scientifique.
- 2- Fiable avec restriction : Ce sont les études qui comportent un grand nombre d'informations demandées et qui peuvent potentiellement être pertinentes pour les problématiques considérées.
- 3- Non fiable : Ce sont les études qui ne pourront pas être utilisées comme études clés. Elles comportent plusieurs lacunes, parfois importantes, mais elles peuvent être pertinentes dans des approches concernant le poids de la preuve ou comme données complémentaires.
- 4- Inclassable : Ce sont des études qui comportent beaucoup trop de lacunes pour pouvoir être considérées et classées.

Pour pouvoir être classées en catégorie 1 ou 2, les études ne doivent pas seulement obtenir un nombre de points élevés, elles doivent également comporter certaines informations indispensables, par exemple : le nom de la substance utilisée dans l'étude, la voie d'administration, la ou les espèce(s) utilisée(s) ... Une étude qui accumulerait un très grand nombre de point mais qui ne comporterait pas une de ces informations primordiales serait classée en catégorie 3. L'outil ToxRtool reprend chacun des critères présents dans la

publication de Klimisch *et al.* En différenciant les informations obligatoires et celles qui sont facultatives et détermine automatiquement le score et le classement de l'étude une fois que chacune des cases a été complétée.

Dans un contexte de surveillance des polluants à long terme, le choix a été fait de ne considérer que les études subchroniques et chroniques par voie respiratoire. Les études portant sur le développement ont également été prises en compte dans la mesure où les effets surviennent sur des fenêtres d'exposition critiques délimitées dans le temps. Les études aiguës et celles portant sur des expositions accidentelles de très courte durée ont été écartées. Comme il n'existait pas d'études de bonne qualité « vie entière » (2 ans pour les rongeurs) un facteur d'incertitude (UF_s) a été appliqué pour prendre en compte l'existence possible d'effets chroniques au-delà de la durée des études sélectionnées.

En cas d'absence de données toxicologiques ou lorsqu'on considère comme effet critique un effet lié à une famille de substances, les études « Read-Across » ou « références croisées » portant sur des substances analogues et utilisées comme approche pour prédire les propriétés des substances ont également été évaluées. L'usage de références croisées dans les dossiers d'enregistrement est une approche qui doit être justifiée par les déclarants et qui fait l'objet d'une évaluation de l'ECHA. Ces études ont donc été jugées suffisamment pertinentes pour la construction de VT_i si aucune autre étude ne le permet.

En l'absence d'étude de bonne qualité par inhalation, les études subchroniques et chroniques par voie orale ont également été considérées sous réserve que l'effet soit transposable (effets systémiques et absence d'information indiquant des différences de biodisponibilité du polluant de voie à voie). Par défaut, il est recommandé par l'ECHA de considérer une biodisponibilité de 50% par voie orale et de 100% par voie respiratoire (Anses, 2018b). La transposition a été réalisée selon l'équation ci-dessous (Anses, 2018b) :

$$VTi_{voie\ respiratoire} = VTi_{voie\ orale} \times 70\ kg / 20\ m^3$$

Les 70 kg utilisés dans l'équation correspondent au poids moyen d'un adulte et les 20 m³ correspondent au volume d'air respiré sur 24 heures par un adulte.

Une fois l'effet critique identifié, il n'a pas été possible de construire de BMD/C dans les délais impartis. La construction des VT_i s'appuie donc sur la sélection d'un couple NOAEL/C – LOAEL/C ou à défaut d'une NOAEL/C.

Les ajustements dosimétriques (exposition par voie respiratoire) et allométriques (exposition par voie orale) ont été réalisés en considérant les hypothèses suivantes :

- Ajustement dosimétrique : application d'un facteur de 1 pour passer de la concentration animale à la concentration équivalente humaine (par défaut, pour les gaz de catégorie 3, en l'absence de données sur les coefficients de partage sang/air du polluant pour l'Homme et l'animal) ;
- Ajustement allométrique : la dose équivalente humaine est égale à la dose chez l'animal multipliée par le ratio (poids animal / poids Homme)^{1/4}.

Il n'a pas été possible d'avoir recours à la modélisation PBPK compte tenu des délais.

Le cas échéant, des ajustements temporels ont ensuite été réalisés pour calculer une dose critique correspondant à une exposition 24h/24h, 7j/7.

Enfin, des facteurs d'incertitudes ont été appliqués à la dose critique ajustée pour s'assurer que la VTi construite garantisse l'absence de danger pour l'Homme (cf. tableau 1).

Tableau IV: Facteurs d'incertitudes pour la construction de valeurs de référence (Anses, 2018)

Acronyme	Interprétation des UF
UF_A	Variabilité inter-espèce
UF_H	Variabilité interindividuelle
UF_{B/L}	Usage d'un LOAEL plutôt que d'un NOAEL ou une BMD
UF_S	Transposition d'une exposition subchronique à chronique
UF_D	Insuffisance des données (en qualité et en quantité) – Sévérité de l'effet.

La variabilité inter-espèces correspond à la transposition de l'animal à l'Homme de données expérimentales. Elle permet de prendre en compte les différences de toxicocinétique et de toxicodynamie entre l'animal et l'Homme. Lorsque des données sur l'une ou les deux composantes existent, il est possible de les utiliser afin de réduire la valeur de ce facteur d'incertitude. La variabilité intra-espèce ou interindividuelle quant à elle résulte des différences de sensibilités entre les individus d'une même espèce (sexe, âge, mode de vie ...).

La valeur de chaque facteur d'incertitude utilisé varie entre 1 et 10. Lorsqu'aucune donnée n'est disponible pour le facteur considéré, il est recommandé d'utiliser par défaut la valeur 10. Si une valeur plus basse est utilisée, elle doit être argumentée en fournissant des données scientifiques pertinentes.

b) Calcul des concentrations moyennes

Le calcul des concentrations moyennes a été réalisé en deux étapes. Dans un premier temps, les données de concentrations fournies par les laboratoires de recherche et les AASQA dans le cadre de l'expertise de l'Anses ont permis de calculer les concentrations moyennes d'une partie des polluants de la catégorie 2a. Dans un second temps, pour les polluants n'ayant pas été mesurés par les AASQA ou les laboratoires, les concentrations moyennes ont été calculées à partir de données présentes dans différentes publications identifiées dans la littérature scientifique dans le cadre de l'expertise de l'Anses. Les données de concentrations provenant d'études réalisées en Europe et en Amérique du Nord ont été prioritairement utilisées pour calculer les concentrations moyennes car jugées plus représentatives de la situation française.

c) Calcul du score de risque

Une fois les concentrations moyennes obtenues et les VTi construites, un score de risque a été calculé pour chacun des polluants selon l'équation suivante :

$$\text{Score de Risque} = \frac{\text{Concentration moyenne dans l'air ambiant}}{\text{VTi}}$$

Ce score peut s'apparenter au calcul d'un quotient de danger pour les polluants présentant des effets à seuil. Pour les effets sans seuil, une étape supplémentaire visant à calculer une VTi équivalente pour un excès de risque à 10^{-5} ou 10^{-6} est nécessaire. Une autre option serait de calculer un deuxième score correspondant au produit de la concentration moyenne dans l'air ambiant et de l'excès de risque unitaire (ERU).

Les polluants pour lesquels une VTi n'a pas pu être construite ne se sont pas vu attribuer de score de risque.

2.3.2. Méthode retenue pour la hiérarchisation des polluants de Catégorie 2b

Les polluants de la catégorie 2b sont des polluants peu ou pas recherchés en France ou à l'étranger, selon la définition de la fréquence de recherche définie dans le rapport d'expertise de l'Anses. Ce sont donc des polluants pour lesquels les données de concentrations dans l'air ambiant ne sont pas disponibles ou trop anciennes. Par ailleurs, ces polluants ayant été classés directement dans cette catégorie, les données sanitaires les concernant n'ont pas été recherchées.

Là encore le choix de la méthode de hiérarchisation a été conditionné par les données qui ont pu être recueillies sur ces polluants ou qui pouvaient être obtenues rapidement et facilement :

- Les données de classification de l'ECHA relatives au règlement sur la classification, l'étiquetage et l'emballage (CLP) : classification CMR, toxicité chronique (STOT RE)⁹ ... ;
- Les classifications sur la cancérogénicité du NTP, de l'US EPA, de l'ACGIH, et de la MAK ;
- La classification PE du BKH-DHI ;
- Les VTR établies par l'US EPA, l'OEHA, l'OMS CICAD et le RIVM ;
- Les données de tonnage de l'ECHA ;
- La pression de vapeur et la température d'ébullition ;
- La demi-vie dans l'atmosphère ;

Ces critères de dangers chroniques sont adaptés aux objectifs initiaux de la saisine de proposer une liste de polluants prioritaires pour une surveillance nationale.

Les autres critères identifiés n'ont pas été considérés, soit parce qu'ils ne répondent pas à la problématique (ne concernent pas le média air ou la santé humaine), soit parce que les données étaient peu accessibles ou indisponibles (c'est le cas par exemple des effets allergisants).

Si les deux méthodes multicritères identifiées présentent des avantages, c'est la méthode SIRIS qui a été retenue. Compte-tenu du nombre de critères discriminants et du nombre de polluants à hiérarchiser, il est apparu rapidement que le résultat d'une hiérarchisation effectuée avec une méthode de type ELECTRE serait assez peu lisible et compréhensible. En effet, dans son rapport en 2013, l'INERIS a effectué un travail de hiérarchisation sur 319 substances préoccupantes en utilisant cette méthode. Les différents diagrammes de Hasse

⁹ Toxicité spécifique pour certains organes cibles - Exposition répétée

obtenus s'étendaient sur plusieurs pages rendant les résultats peu lisibles et difficiles à interpréter. (Ineris, 2013)

La méthode SIRIS présente plusieurs avantages. D'une part, comme précisé précédemment, elle permet d'utiliser des critères à la fois quantitatifs et qualitatifs. D'autre part, à la différence des méthodes par score, elle ne nécessite pas d'établir de manière précise des facteurs de pondération pour chaque critère, puisqu'ils sont hiérarchisés entre eux selon l'ordre d'importance considéré en fonction de l'objectif. Enfin l'interprétation des résultats s'effectue facilement puisque les polluants sont hiérarchisés selon leur score respectif. (Vaillant et al. 1995 ; Dargere, 2013)

Comme indiqué dans la partie 3.2.2, une démarche en trois étapes doit être réalisée avant l'application de la méthode SIRIS.

a) Choix des critères

Les critères choisis doivent permettre de répondre à la problématique, c'est-à-dire qu'ils sont jugés comme ayant une responsabilité dans l'apparition du risque.

Parmi les critères cités au début de cette partie, cinq d'entre eux ont été conservés dans l'application de la méthode :

- La classification CMR ;
- La classification PE ;
- La toxicité chronique, via la classification STOT RE ;
- La demi-vie dans l'atmosphère ;
- La pression de vapeur et la volatilité.

Concernant la classification CMR, il a été décidé de considérer en priorité la classification réalisée par l'ECHA dans le cadre de la réglementation CLP. Pour la cancérogénicité, si les données de l'ECHA n'étaient pas disponibles pour certains polluants, les classifications du CIRC, de l'ACGIH, du NTP et l'US EPA ont été considérées. En effet, lors de précédents travaux, l'Anses a mis au point des règles d'équivalence entre ces quatre classifications et celle de l'ECHA. Pour chacune des situations où plusieurs classifications autres que celle de l'ECHA ont été considérées, il a été décidé de ne prendre en compte que la plus pénalisante après équivalence avec la classification CLP. Ces règles d'équivalence n'ayant été réalisées que pour les classifications de l'ECHA, du CIRC, de l'ACGIH et du NTP, seules celles-ci ont été prises en compte pour les travaux de hiérarchisation.

Tableau V: Règles d'équivalences (Farion, 2017)

CLP	CIRC	US EPA (2005)	ACGIH®	NTP
1A (Cancérogène avéré pour l'homme)	1 (Cancérogène avéré pour l'homme)	<i>Carcinogenic to Humans</i>	A1 (Cancérogène avéré pour l'homme)	<i>Known to be a Human carcinogen</i>
1B (Cancérogène supposé pour l'homme)	2A (Cancérogène probable) ou 2B (Cancérogène possible)	<i>Likely to be carcinogenic to Humans</i>	A2 (Cancérogène présumé chez l'homme) ou A3 (Cancérogène avéré pour les animaux)	<i>Reasonably anticipated to be carcinogenic to Humans</i>
2 (Cancérogène suspecté pour l'homme)	2B ou 3 (Inclassable quant à sa cancérogénicité)	<i>Suggestive evidence of Carcinogenic Potential</i>	A3	

La classification CLP de l'ECHA est le résultat de la transposition au niveau européen d'un système-cadre élaboré par l'ONU : le Système Général Harmonisé de classification et d'étiquetage des produits chimiques (SGH).

Les classifications du CIRC et l'US EPA sont des classifications antérieures au SGH. La première est constituée de 5 groupes pour classer le poids de la preuve pour les données humaines et sur les animaux. La seconde était initialement construite de manière similaire à celle du CIRC avec 6 groupes, avant d'être modifiée à plusieurs reprises au cours des décennies suivantes pour ne contenir plus que 3 groupes, moins discriminants que celle du CIRC mais ajoutant des considérations additionnelles.

L'ACGIH quant à elle utilisait initialement un système de classification avec 2 groupes. Lors d'une révision ultérieure, ils se sont inspiré des catégories établies par le CIRC et l'US EPA en essayant autant que possible de rendre leurs nouvelles catégories compatibles, non seulement avec ces deux classifications, mais aussi avec celle réalisée par la suite par l'ECHA dans le cadre du règlement CLP.

Enfin, la classification du NTP a été construite autour de deux groupes seulement, dont les lignes directrices sont inspirées de celles utilisées par le CIRC puis l'ECHA par la suite.

Concernant la classification PE, seules les classifications européennes BKH et DHI ont été considérées car il s'agit des plus complètes et des plus reconnues en France et au niveau Européen. De nouveaux critères ont depuis été établis par la commission européenne mais ne concernent, à l'heure actuelle, que les pesticides. La classification BKH-DHI résulte d'une

proposition, pour le compte de la Direction Générale de l'Environnement de la Commission Européenne, de classification des polluants présentant des effets PE. Elle a été réalisée initialement par l'entreprise néerlandaise RPS BKH Consulting Engineers et a fait l'objet de deux rapports : un premier rapport en 2000 centré sur 553 polluants chimiques de synthèse utilisés principalement l'industrie, l'agriculture et les produits de consommation, puis un second rapport en 2002 centré sur les 435 polluants du premier rapport pour lesquels les données étaient insuffisantes. Enfin l'entreprise Danoise DHI a réalisé un troisième rapport en 2006 portant sur 107 substances chimiques ayant un volume de production moins élevé, en utilisant les mêmes critères que ceux utilisés dans les deux précédents rapports : persistance dans l'environnement, les effets PE attestés dans la littérature scientifique, la pertinence de ces effets, la fiabilité des tests réalisés, la relation dose-réponse, le potentiel PE, et les relations structure-activité.

Les données utilisées pour évaluer la toxicité chronique proviennent de la classification STOT RE réalisée par l'ECHA dans le cadre de la réglementation CLP.

Les définitions des différentes catégories de chaque classification sont détaillées dans le Tableau VI.

Tableau VI: Définition des différentes catégories des classifications CMR, PE et STOT RE

Cancérogénicité (ECHA)	Mutagénicité (ECHA)	Reprotoxicité (ECHA)	STOT RE (ECHA)	PE (BKH-DHI)
1A : molécule cancérogène pour l'être humain avérée	1A : molécule dont la capacité d'induire des mutations héréditaires dans les cellules germinales des êtres humains avérée	1A : molécules dont la toxicité pour la reproduction humaine est avérée	1 : Risque avéré d'effets graves pour les organes à la suite d'expositions répétées ou d'une exposition prolongée	1 : Au moins une étude apportant des preuves d'une perturbation endocrinienne sur un organisme intact.
1B : molécule dont le potentiel cancérogène pour l'être humain supposée	1B : molécule dont la capacité d'induire des mutations héréditaires dans les cellules germinales des êtres humains supposée	1B : molécules présumées toxiques pour la reproduction humaine	2 : Risque présumé d'effets graves pour les organes à la suite d'expositions répétées ou d'une exposition prolongée	2 : Perturbation endocrinienne potentielle.
2 : molécule suspectée d'être cancérogène pour l'homme	2 : molécules préoccupantes du fait qu'elles pourraient induire des mutations héréditaires dans les cellules germinales des êtres humains	2 : molécules suspectées d'être toxiques pour la reproduction humaine		3a : Aucune base scientifique pour l'inclusion dans la liste (études disponibles mais aucune indication sur les effets PE)
				3b : Substances sans ou avec un nombre insuffisant de données collectées.

La demi-vie dans l'atmosphère et la pression de vapeur ont été obtenues en utilisant le logiciel EPI SUITE de l'US EPA. Il s'agit d'un logiciel utilisant plusieurs programmes d'estimation des propriétés physiques et chimiques ainsi que des modèles de devenir dans l'environnement. En accord avec la norme NF EN 13936 (AFNOR, 2014), la volatilité a ensuite été définie de la façon suivante :

- Polluant non volatil : pression de vapeur à température ambiante inférieure ou égale à 0,001 Pa
- Polluant semi-volatil : pression de vapeur à température ambiante comprise entre 0,001 Pa et 100 Pa
- Polluant volatil : pression de vapeur à température ambiante supérieure à 100 Pa

Les classes de demi-vies dans l'atmosphère correspondent aux quartiles de la distribution des valeurs modélisées

b) Hierarchisation des critères

Une fois définis, les critères doivent être classés par ordre d'importance. Il revient donc aux experts d'estimer cet ordre en fonction de la problématique et de l'objectif recherché. Des critères jugés de même importance peuvent être réunis pour former une même « classe ». Les critères ne seront plus hiérarchisés entre eux, seules les classes le seront. Il faut toutefois respecter deux règles majeures lors de la création des classes et leur hiérarchisation :

- Tous les critères ne peuvent pas être dans une seule et même classe. La méthode SIRIS repose sur la hiérarchisation des critères entre eux, cette méthode n'est donc pas adaptée pour des critères qui ont tous le même poids
- S'il existe une interaction entre deux critères, ceux-ci doivent être placés dans deux classes distinctes.

Pour la hiérarchisation des polluants de la catégorie 2b, trois classes ont été définies :

- La classe 1 contient la classification CMR. Parmi les trois critères de danger retenus, c'est celui qui est le plus important. Par ailleurs, les enjeux de la problématique étant essentiellement sanitaires, ce critère est considéré comme le plus important.
- La classe 2 contient un critère d' « exposition » et un critère de danger :
 - La toxicité chronique (classification STOT RE)
 - La demi-vie dans l'atmosphère
- la classe 3 contient également un critère d' « exposition » et un critère de danger :
 - La classification PE (BKH et DHI)
 - La volatilité

Le choix d'associer à chaque fois dans les deux dernières classes un critère de chaque type permet d'une part de séparer des critères de même type qui seraient en interaction, et d'autre part de garder un certain équilibre entre les composantes « exposition » et « danger ».

L'ordre des critères peut être sujet à débat. Des analyses de sensibilité ont donc été réalisées en permutant plusieurs critères et classes afin de tester différentes hypothèses.

c) Définition des modalités

Les modalités des différents critères sont à définir en partant d'une situation idéale, notée « o », puis de manière dégressive jusqu'à une situation jugée la plus défavorable, notée « d ». Les modalités intermédiaires sont dénommées de manière arbitraire par des lettres définies dans la méthode. (Tableau VII)

Tableau VII : Modalités définies pour les cinq critères choisis pour la hiérarchisation des polluants de la catégorie 2b

Classe 1	Classe 2		Classe 3	
Classification CMR	Toxicité chronique	Demi-vie dans l'atmosphère	Classification PE	Volatilité
o : non classé e : 1 catégorie 2 m : 2 catégorie 2 s : 1 catégorie 1A/1B + 1 catégorie 2 d : 2 catégorie 1A/1B	o : non classé m : STOT RE 2 d : STOT RE 1	o : 0 jours (n=65) g :] 0 ; Q1] (n=84) m :]Q1 ; Q2] (n=83) t :]Q2 ; Q3] (n=83) d :]Q3 ; Q4] (n = 83)	o : non classé g : catégorie 3B m : catégorie 3A t : catégorie 2 d : catégorie 1	o : non volatil m : semi-volatil d : volatil

Pour la classification CMR, seule la classification la plus pénalisante entre la classification mutagénicité et la classification cancérogénicité a été considérée. En effet, les polluants classés comme mutagène étant également classés comme cancérogène, considérer ces deux classifications reviendrait à appliquer une double pénalité à certains polluants.

Les polluants n'ayant pas été évalués pour être classés par les différentes institutions ont été considérés comme « non classés ». De la même manière les polluants pour lesquels le logiciel EPI-SUITE n'était pas capable de fournir une demi-vie dans l'atmosphère ou une pression de vapeur ont été classés respectivement dans les modalités « 0 jours » et « non volatil ».

Concernant les critères issus de la classification CLP de l'ECHA, certains polluants n'ont, à l'heure actuelle, pas de classification harmonisée répertoriée à l'annexe VI du règlement CLP. Toutefois il est demandé aux fabricants et aux importateurs de procéder à une auto-classification afin de déterminer si une substance chimique ou un mélange présente des dangers physiques, sanitaires et/ou environnementaux, et de la notifier à l'ECHA. En l'absence de classification harmonisée, ces auto-classifications sont disponibles sur le site internet de l'ECHA, sur la fiche de chaque substance, avec le nombre de fois où cette auto-classification a été proposée. Dans le cadre des travaux décrits ici, il a été choisi, en l'absence de classification harmonisée, de prendre en considération les auto-classifications réalisées par les fabricants et importateurs. Il s'agit d'une approche protectrice puisqu'elle nous amène à considérer que certaines substances présentent un danger (CMR ou STOT RE) sur les dires des industriels, alors même qu'elles auraient initialement été considérées comme « non classées ».

Enfin, concernant la classification PE, les polluants classés dans la catégorie 3B : « Substances with no or insufficient data gathered. » ont été classés à part entière puisqu'ils ont tout de même été considérés pour évaluation malgré le manque de données, à la différence des polluants non évalués qui eux se sont vu attribuer la modalité « o ».

d) Calcul des pénalités

Une fois les trois étapes préalables terminées, il faut procéder au calcul de pénalités en utilisant la méthode mathématique détaillée par Vaillant et al., dans leur article de 1995. Cette méthode mathématique repose sur quatre grandes règles (Figure 9) :

- 1- La règle d'initialisation : les modalités favorables (« o ») sont toutes définies avec une pénalité de 0 point. Une pénalité de 2 points est ensuite fixée arbitrairement pour la modalité « d » du dernier critère pour laquelle la modalité du premier critère est la plus favorable (« o ») ;
- 2- La règle d'interaction : Si un critère prend une modalité défavorable, les pénalités des modalités des critères qui lui succèdent augmentent ;
- 3- La règle de préférence : la pénalité est d'autant plus grande que le critère est considéré comme important ;
- 4- La règle de linéarité intra-modalités : les pénalités des modalités intermédiaires sont fixées de manière linéaire.

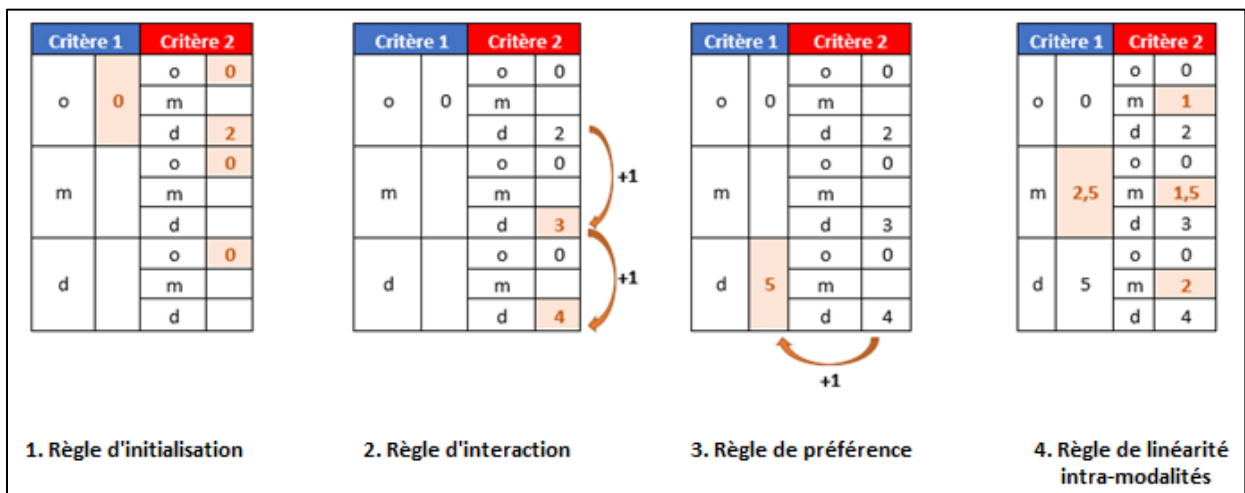


Figure 9: Attribution des pénalités aux différents critères - Méthode SIRIS

La Figure 9 montre comment sont attribuées les pénalités pour une situation comportant deux critères ayant chacun trois modalités. Cette construction mathématique se complexifie un peu dès lors que l'on introduit des critères ayant un même degré d'importance, et donc dès que l'on décide de définir des classes. Intervient alors la notion de « Somme » : lorsque deux critères sont dans une même classe, les pénalités attribuées aux mêmes modalités de deux critères sont égales. Par ailleurs, les combinaisons inverses de deux modalités (par exemple « o » + « d » et « d » + « o ») sont égales à la même somme. La Figure 10 présente la façon dont sont calculées les pénalités pour une situation comportant deux classes : la première

comportant un seul critère avec trois modalités et la seconde comportant deux critères avec trois modalités chacun.

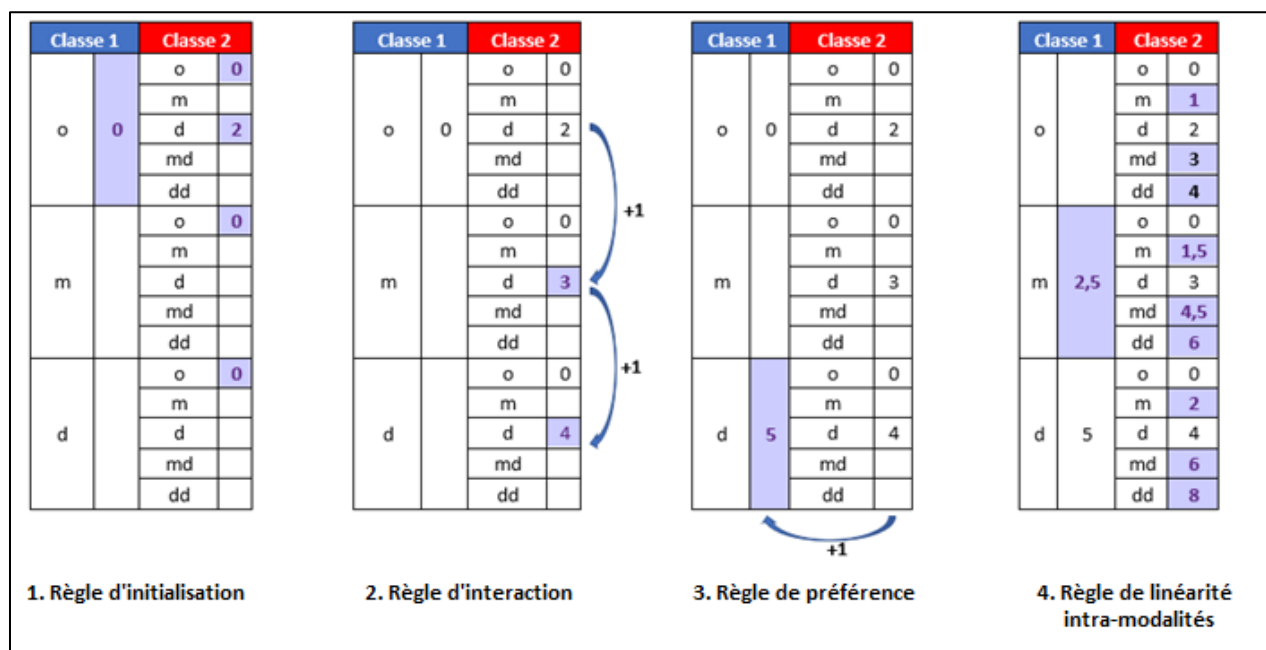


Figure 10: Attribution des pénalités à des classes de critères - Méthode SIRIS

Une fois les pénalités fixées pour chacune des modalités, il devient possible de calculer un score pour chaque polluant en additionnant les différentes pénalités. Plus le score final est élevé, plus le polluant sera classé comme « à risque ».

e) Traitement des égalités

Une fois les scores calculés, des égalités peuvent apparaître dans le classement. Or, pour le décideur, il est souvent nécessaire d'établir une liste limitée de polluants pour lesquelles une action comportant des moyens humains et/ou financiers est nécessaire. Il a donc fallu trouver une méthode pour départager les égalités, puisque les auteurs de la méthode SIRIS n'en proposent pas.

Le départage s'est donc fait en suivant les règles suivantes :

- 1- Classification de cancérogénicité la plus défavorable
- 2- Classification de mutagénicité la plus défavorable
- 3- Classification de reprotoxicité la plus défavorable
- 4- Classification STOT RE la plus défavorable
- 5- Classification PE la plus défavorable
- 6- Demi-vie dans l'atmosphère la plus longue
- 7- Pression de vapeur la plus élevée

Après calcul du score et départage, un rang est attribué à chacun des polluants : plus leur score est élevé, plus leur rang est faible, et donc plus haut ils seront dans la liste. Ainsi les polluants classés en tête de liste seront prioritaires pour la réalisation de campagnes d'occurrence dans l'air ou d'études de filières. Les polluants classés en bas de liste étant principalement des polluants pour lesquels les données ne sont pas disponibles, ils nécessiteront la mise en place d'une veille scientifique sur les données toxicologiques et d'exposition.

f) Réalisation de l'outil de calcul des pénalités

Le logiciel qui avait été réalisé pour l'application de la méthode SIRIS n'étant plus disponible, il a été choisi de créer un outil similaire sur Excel®, afin de pouvoir effectuer le calcul des pénalités automatiquement et non manuellement, et ainsi gagner un temps considérable lors de la réalisation des analyses de sensibilité. Le choix d'Excel® s'explique par la simplicité d'utilisation du logiciel et sa large connaissance au sein de l'Agence, ce qui permettra, si besoin, aux agents qui le souhaitent de l'utiliser et le modifier pour leurs problématiques sans avoir à apprendre un langage de programmation spécifique.

La réalisation de cet outil a d'abord nécessité de traduire mathématiquement les différentes règles de construction propres à la méthode SIRIS puis de convertir ces équations mathématiques en formules Excel®.

Pour cela j'ai choisi de calculer pas à pas le score de chaque classe, en commençant par la dernière, c'est-à-dire celle qui a été considérée comme la moins importante lors de la hiérarchisation.

$$S_{DC} = \left(\sum_{k=1}^n R_n - (C_n - 1) + 2 \right) \times \left(\frac{R_n - 1}{R_{nmax} - 1} \right)$$

Avec :

- S_{DC} : Score de la dernière classe
- R_n : Rang de la modalité combinée des critères pour la classe considérée
 - $R_n = R_{c1}$ si la classe contient un seul critère
 - $R_n = (R_{Cr1} + R_{Cr2}) - 1$ si la classe contient deux critères
 - R_{Cr1} et R_{Cr2} : Rang de la modalité de chaque critère de la classe
- C_n : Rang de la classe considérée (1 étant la plus importante)
- R_{nmax} : Rang maximal que peut atteindre une modalité
 - $R_{nmax} = \max([N_{Cr1}; N_{Cr2}])$
 - N_{Cr1} et N_{Cr2} : Nombre de modalités des critères 1 et 2

Le « +2 » dans l'équation correspond à la pénalité fixée lors de la règle d'initialisation.

On peut ensuite calculer pas à pas le score des classes antérieures, c'est-à-dire celles qui ont été considéré comme étant plus importantes lors de la hiérarchisation.

$$S_{C_n} = \left((S_{C_{n+1}} + 1) + (N_{nmax} - C_n) \right) \times \left(\frac{R_n - 1}{R_{nmax} - 1} \right)$$

Avec :

- S_{C_n} : Score de la classe considérée
- $S_{C_{n+1}}$: Score de la classe de rang inférieur.
Si S_{C_n} est l'avant dernière classe, alors $S_{C_{n+1}} = S_{DC}$
- N_{nmax} : Nombre maximum de modalités pour la classe considérée
 - $N_{nmax} = N_{Cr1}$ si la classe contient un seul critère
 - $N_{nmax} = (\max([N_{Cr1}; N_{Cr2}]) \times 2) - 1$ si la classe contient deux critères

Il est important de noter que ces équations ne sont valables que pour des classes contenant au maximum 2 critères.

Compte-tenu des limitations propres à Excel®, l'outil ne peut supporter que 10 critères et 10 classes différentes, avec 2 critères par classes au maximum et peut s'appliquer à 4000 substances chimiques, ce qui était plus que suffisant pour notre problématique. Des modifications plus ou moins importantes du classeur permettront d'outrepasser ces limitations au prix d'une augmentation considérable de la consommation en mémoire vive du logiciel. L'outil est actuellement disponible gratuitement sur le service d'hébergement et de gestion de développement de logiciels, GitHub, à l'adresse suivante : <https://github.com/TM-SIRIS/siris>

3. Résultats

3.1. Résultats de la hiérarchisation des polluants de la catégorie 2a

a) Construction des VTi

Sur les 66 polluants de la catégorie 2a, seuls 31 disposaient d'études toxicologiques d'une qualité suffisante pour construire des VTi. Pour les 35 polluants restants, il n'a donc pas été possible de calculer un score de risque. Par ailleurs, une VTR a été construite par l'agence pour le butyl acétate après l'expertise Anses, c'est donc cette VTR qui a été utilisée lors du calcul du score de risque.

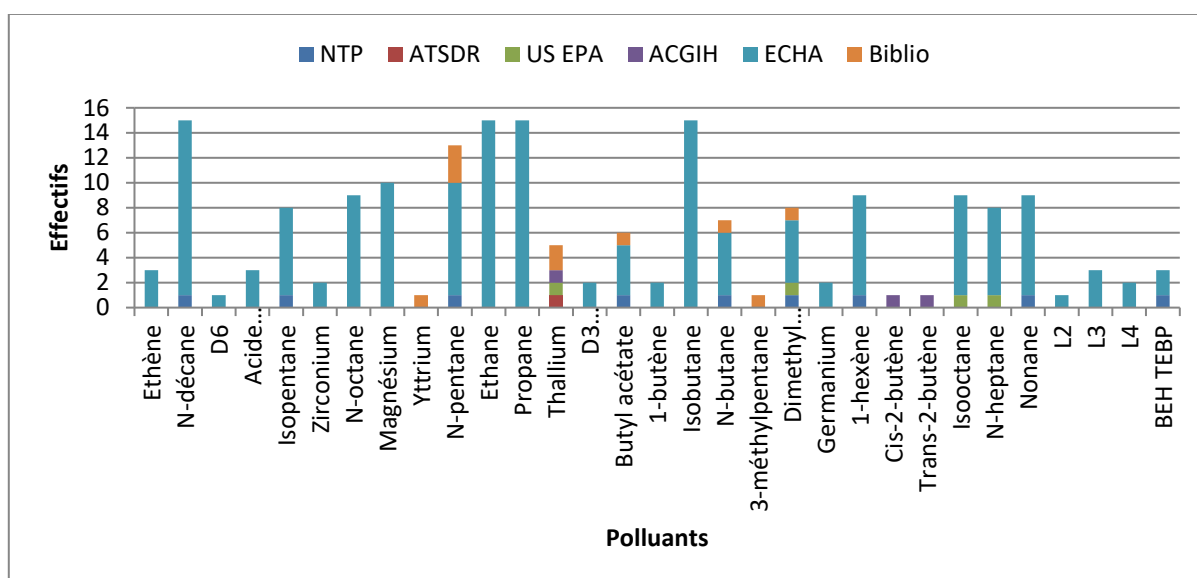


Figure 11 : Sources des différentes études toxicologiques pour chaque polluant de la catégorie 2a

Comme le montre la Figure 11, la majorité des études toxicologiques proviennent des dossiers d'enregistrement des différentes substances effectués dans le cadre du règlement REACH et disponibles sur le site de l'ECHA.

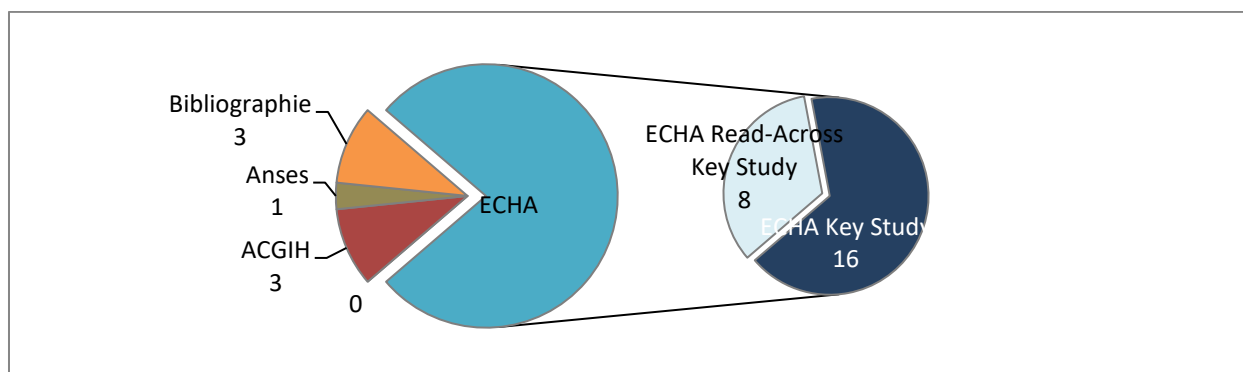


Figure 12 : Sources des études ayant permis la construction de VTi pour les polluants de la catégorie 2a

De la même manière, la Figure 12 montre que la grande majorité des VTi ont été construites à partir de d'études provenant des dossiers soumis à l'ECHA.

Par ailleurs sur les 30 VTi et la VTR, 26 ont été réalisées à partir d'études par inhalation, et cinq à partir d'études par ingestion (Figure 13).

Il s'agit uniquement d'études chez l'animal, 26 chez le rat, 4 chez la souris, et une chez de multiples espèces animales (Figure 14). Bien que des études chez l'homme fussent disponibles, celles-ci n'ont pas été utilisées puisqu'il s'agissait d'études réalisées à la suite d'une exposition accidentelle, ou d'études aiguës avec un niveau de confiance très faible (une seule dose testée, protocole inadapté ...).

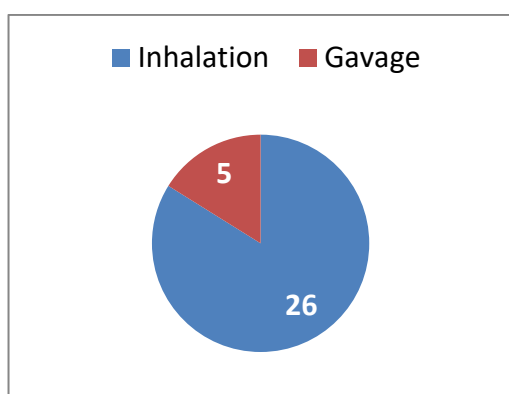


Figure 13 : Voies d'exposition des différentes études utilisées pour la construction de VTi ou VTR

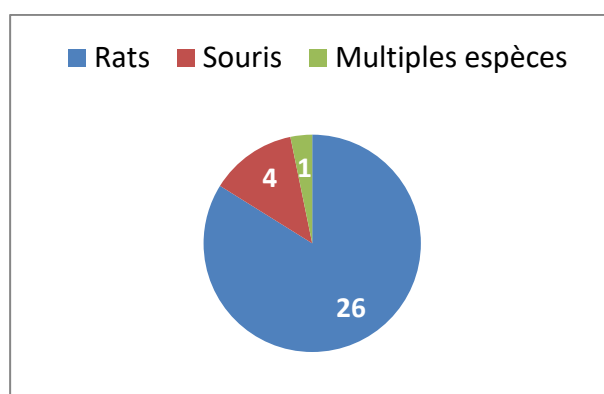


Figure 14 : Espèces utilisées dans les différentes études utilisées pour la construction de VTi ou VTR

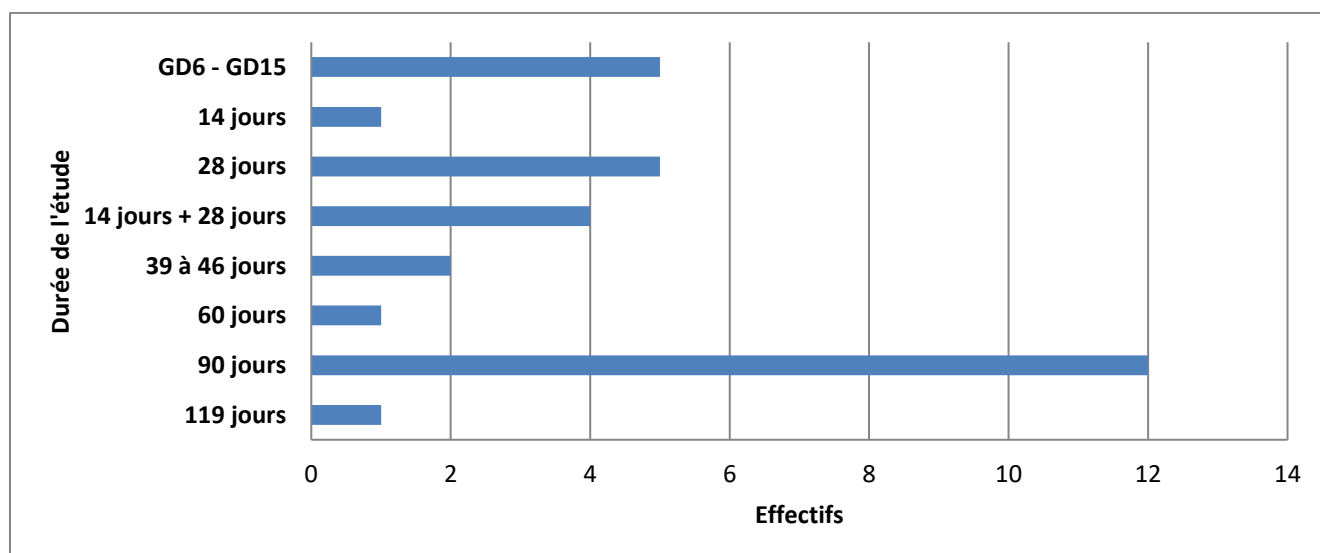


Figure 15 : Durée des études utilisées pour la construction de VTi

Hormis les cinq études sur le développement, les durées des études sélectionnées sont supérieures à deux semaines (Figure 15). En effet, l'objectif étant d'étudier le risque que présente ces polluants suite à une exposition chronique, les études aiguës et celles portant sur des expositions accidentelles de très courte durée ont été écartées. Pour quatre études portant sur la reprotoxicité, l'exposition a été réalisée durant les deux semaines qui ont précédé l'accouplement et les quatre semaines qui ont suivi.

Le tableau de synthèse des VTi est disponible en Annexe I, il reprend l'ensemble des données bibliographiques utilisées pour leur construction ainsi que les ajustements réalisés et les différents facteurs d'incertitude. A noter que les VTi ont été construites pour des effets à seuil uniquement.

b) Calcul des concentrations moyennes dans l'air ambiant

Le calcul des concentrations moyennes pour les 31 polluants disposant d'une VTi s'appuie sur (Figure 16) :

- Des données de mesures des AASQA et des laboratoires de recherche (71% des polluants) ;
- Des données publiées dans la littérature scientifique provenant : d'études réalisées en France (3% des polluants), d'études réalisées en Europe ou en Amérique du Nord (23% des polluants), et d'études réalisées dans d'autres pays (3% des polluants).

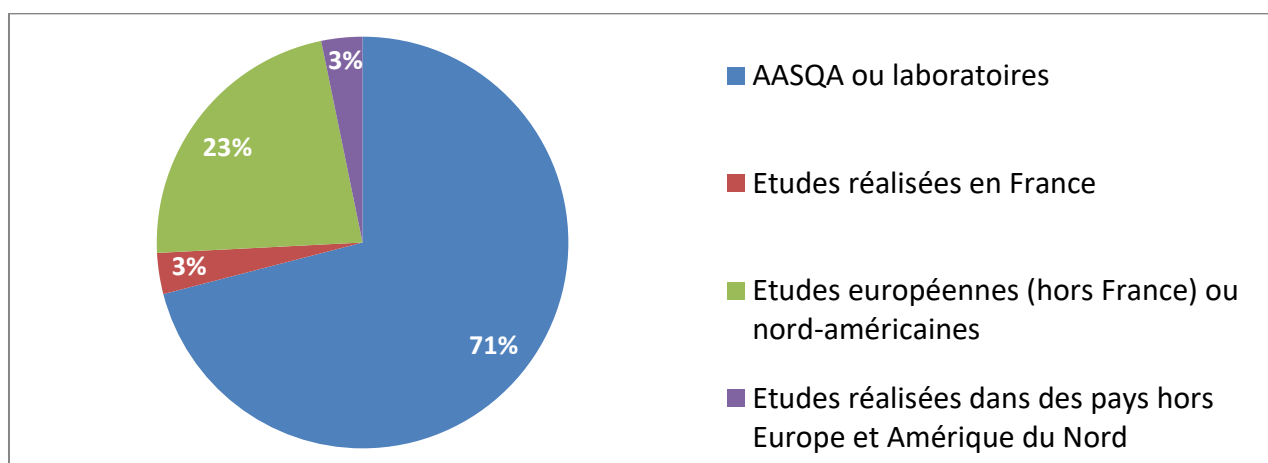


Figure 16 : Origines des données utilisées pour le calcul des concentrations moyennes dans l'air ambiant des polluants de la catégorie 2a

Le Tableau VIII présente les résultats de la hiérarchisation des 31 polluants pour lesquels la construction d'une VTi était possible selon la valeur de leur score de risque.

Tableau VIII : Résultats de la hiérarchisation des polluants de la catégorie 2a (Scores de risque)

CAS	Polluant	VTi (mg/m ³)	Concentration moyenne (mg/m ³)	SCORE	Robustesse du score de risque	
					Données utilisées pour la construction des VTi	Données utilisées pour le calcul des concentrations moyennes
74-85-1	Ethène	1,98E-01	2,63E-03	1,33E-02		
124-18-5	N-décane	9,20E-02	7,10E-04	7,72E-03		
540-97-6	D6	6,00E-03	2,99E-05 ¹⁰	4,98E-03		
75-75-2	Acide méthylsulfonique	6,19E-03	2,00E-05	3,23E-03		
7439-95-4	Magnésium	1,43E-01	3,30E-04	2,31E-03		
78-78-4	Isopentane	1,43E+00	2,82E-03	1,98E-03		
7440-67-7	Zirconium	8,73E-04	1,72E-06	1,97E-03		
7440-65-5	Yttrium	1,90E-02	2,90E-05	1,53E-03		
111-65-9	N-octane	4,22E+01	5,10E-02	1,21E-03		
7440-28-0	Thallium	1,51E-04	9,00E-08	5,98E-04		
74-84-0	Ethane	7,41E+00	3,94E-03	5,32E-04		
74-98-6	Propane	8,15E+00	3,38E-03	4,15E-04		
541-05-9	D3	1,10E+00	2,60E-04 ¹¹	2,36E-04		
109-66-0	N-pentane	7,13E+00	1,62E-03	2,27E-04		
123-86-4	Butyl acétate	4,80E+00	8,90E-04	1,85E-04		
106-98-9	1-butène	2,04E+00	3,40E-04	1,67E-04		
75-28-5	Isobutane	8,05E+00	1,20E-03	1,49E-04		
106-97-8	N-butane	2,38E+01	2,99E-03	1,26E-04		
131-11-3	Dimethyl phthalate	2,61E-01	2,65E-05 ¹²	1,02E-04		
96-14-0	3-méthylpentane	4,30E+00	3,00E-04	6,97E-05		
7440-56-4	Germanium	8,00E-03	4,05E-07 ¹³	5,06E-05		
592-41-6	1-hexène	2,78E+00	1,00E-04	3,60E-05		
590-18-1	Cis-2-butène	6,48E+00	1,50E-04	2,31E-05		
624-64-6	Trans-2-butène	6,48E+00	1,50E-04	2,31E-05		
540-84-1	Isooctane	4,22E+01	7,90E-04	1,87E-05		
142-82-5	N-heptane	4,22E+01	6,70E-04	1,59E-05		
111-84-2	Nonane	4,22E+01	2,60E-04	6,16E-06		
107-46-0	L2 ¹⁴	2,70E+00	1,64E-05	6,06E-06		
107-51-7	L3 ¹⁵	4,30E+00	6,41E-06	1,49E-06		
141-62-8	L4 ¹⁶	5,60E+00	6,80E-06	1,21E-06		
26040-51-7	BEH TEBP ¹⁷	1,43E-01	3,50E-10	2,451E-09		

Ces 31 scores sont compris entre 10⁻² et 10⁻⁹. Par ailleurs, deux codes couleurs leurs ont été attribués à des fins d'interprétation des résultats. La robustesse de la VTi a été évaluée au regard des données disponibles pour la construction de la VTi, reflétée en partie par la valeur attribuée à l' « UF_D ». Le rouge, l'orange et le vert sont pour les polluants dont la VTi a été construite avec des UF_D respectivement de 10, 3 et 1. Pour la colonne « concentrations

¹⁰ D6 : Gallego et al., 2017 ; Companioni-Damas et al., 2014 ; Ahrens et al., 2014 ; Krogseth et al., 2013 ; Buser et al., 2013

¹¹ D3 : Gallego et al., 2017 ; Companioni-Damas et al., 2014 ; Ahrens et al., 2014

¹² Dimethyl phthalate : Li et al., 2018 ; Ma et al., 2014 ; Jo et al., 2016

¹³ Germanium : Moreno et al., 2012

¹⁴ L2 : Gallego et al., 2017 ; Companioni-Damas et al., 2014

¹⁵ L3 : Gallego et al., 2017 ; Companioni-Damas et al., 2014 ; Ahrens et al., 2014

¹⁶ L4 : Gallego et al., 2017 ; Companioni-Damas et al., 2014 ; Ahrens et al., 2014

¹⁷ BEH TEBP : Shoeib et al., 2014

moyennes », les couleurs rouge, orange et verte sont pour les polluants dont les concentrations proviennent respectivement : d'études réalisées hors de l'Europe ou de l'Amérique du Nord ; d'études réalisées en Europe ou en Amérique du Nord ; de mesures réalisées par les laboratoires ou les AASQA en France ou d'études menées en France.

3.2. Résultats de la hiérarchisation des polluants de la catégorie 2b

Concernant les 394 polluants de la catégorie 2b, 18 d'entre eux ne possédaient pas de numéro CAS, soit parce qu'il n'était pas renseigné, soit parce qu'il s'agissait d'une famille ou d'un groupe de molécules (Tableau IX). Par conséquent, les données sanitaires ou d'exposition les concernant n'ont pas pu être collectées, ils ont donc été classés en bas de liste.

Tableau IX : Polluants sans numéro CAS

BB101
BPS
cannabinoid
opiate
amphétamines
UV filters
personal care products
Stéroïdes
Hormones
1+3-MethFluo
4/9-MethPhe
BPT(2,1)
Carbone totale
DNT(2,1)
Ethylterbutyléther 0,5 0,7
Ion oxalate
Méthylsyringol
Propenylsyringol

Sur l'ensemble des polluants restants, 26 sont classés mutagènes dans l'une des catégories, ceux-ci sont par ailleurs tous classés cancérigènes, 35 sont classés reprotoxiques, et 11 sont classés cancérigènes dans l'une des catégories d'au moins une des cinq classifications prises en compte. Enfin, 29 polluants ont été évalués et classés pour leur caractère PE par le BKH ou le DHI, et 50 ont été classés STOT RE 1 ou 2 par l'ECHA dans le cadre de la réglementation CLP (Figure 17). Au total, 44 polluants n'ont fait l'objet d'aucune évaluation pour l'ensemble des différents critères sanitaires retenus, auxquels s'ajoutent les 18 polluants sans numéro CAS.

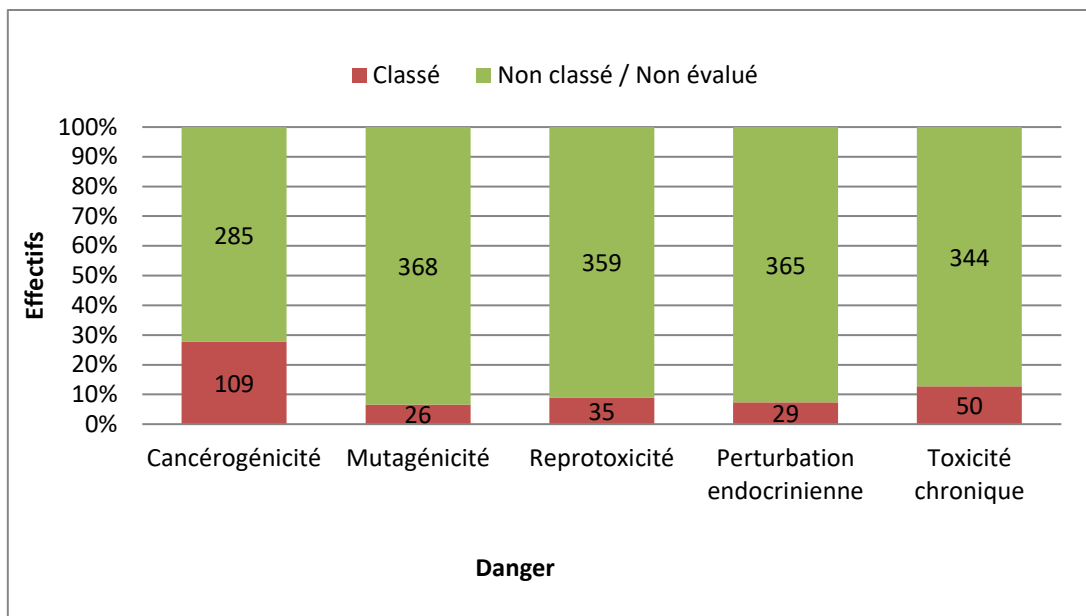


Figure 17 : Classification pour les différents dangers sanitaires des polluants de la catégorie 2b

La Figure 18 présente la distribution des différentes demi-vies dans l'atmosphère. On constate que 75% des polluants ont une demi-vie inférieure à 2,26 jours. La demi-vie la plus longue étant celle du charbon actif : 779,59 jours.

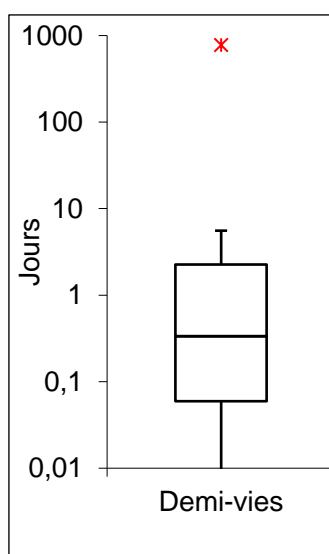


Figure 18 : Distribution des demi-vies des polluants de la catégorie 2b

Sur la Figure 19 est représentée la répartition des différents polluants en fonction de leur volatilité. Ainsi 146 polluants sont classés comme volatils, 124 comme semi-volatils, et 124 comme non volatils, selon la norme NF EN 13936.

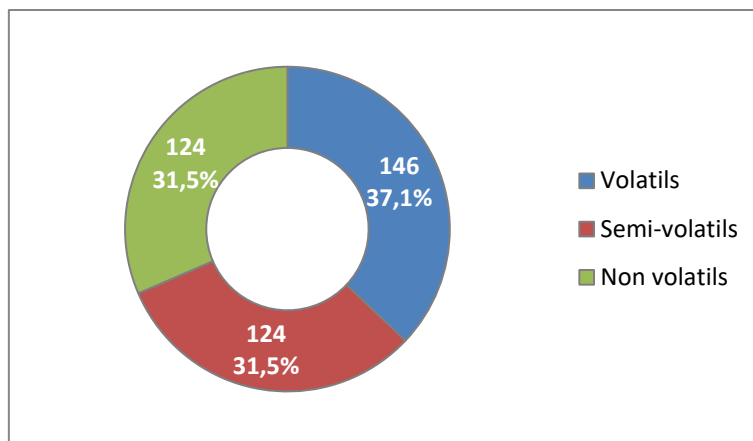


Figure 19: Répartition des polluants de la catégorie 2b selon leur volatilité

Après application de la méthode SIRIS, un départage des *ex-aequo* a été effectué. Les résultats concernant les 20 premiers polluants du classement sont présentés dans le Tableau X. Les données sanitaires et d'exposition de ces 20 polluants sont disponibles en Annexe II.

Tableau X: Résultats de la hiérarchisation des 20 premiers polluants de la catégorie 2b après application de la méthode SIRIS et départage des égalités.

CAS	Substance	Rang SIRIS	Rang après départage
96-12-8	1,2-dibromo-3-chloropropane	1	1
98-95-3	Nitrobenzène	2	2
62-75-9	N-nitrosodiméthylamine	3	3
67-66-3	Chloroforme	4	4
75-27-4	Bromodichloromethane	5	5
106-89-8	Épichlorohydrine	6	6
79-06-1	Acrylamide	7	7
121-14-2	2,4-dinitrotoluène	7	8
100-44-7	Chlorure de benzyle	9	9
4170-30-3	Aldéhyde crotonique	9	10
74-83-9	Bromométhane	11	11
68-12-2	N,n-diméthylformamide	12	12
1163-19-5	BDE 209	13	13
591-78-6	2-hexanone	14	14
684-93-5	N-méthyl-n-nitrosourée	15	15
542-88-1	Ether dichlorodiméthylique	16	16
126-99-8	Chloroprène	16	17
334-88-3	Diazométhane	16	18
57-57-8	Beta-propiolactone	16	19
75-56-9	Oxyde de propylène	16	20

4. Discussion, conclusion et perspectives

4.1. Polluants de la catégorie 2a

L'objectif principal de l'exercice de hiérarchisation concernant ces polluants est de permettre d'une part, leur recatégorisation dans les catégories 1 ou 3, d'autre part d'identifier les polluants pour lesquels les données sont insuffisantes pour procéder à cette recatégorisation et devront donc être acquises à l'avenir.

Le score de risque a pu être calculé pour 31 polluants. Ce score est assimilable à un quotient de danger. Autrement dit, pour présenter un risque, les polluants doivent avoir un score supérieur à 1, pour des effets à seuil, ce qui est le cas de l'ensemble des polluants de la catégorie 2a. Dans le cas présent l'intégralité des scores calculés sont très inférieurs à 1 : ils sont tous compris entre 10^{-2} et 10^{-9} .

Pour aider à l'interprétation des résultats, un double code couleur a été établi afin d'illustrer la robustesse des données utilisées pour la construction des VTi et la probabilité d'occurrence dans l'air ambiant de ces polluants. Pour ce dernier, il est à signaler que les données d'exposition proviennent très majoritairement de France ou d'Europe, seules les données du dimethyl phtalate proviennent de pays hors Europe et Amérique du Nord et sont donc moins comparables avec la situation française. Concernant la construction des VTi, la valeur de l'UF_D reflète en partie la qualité et la quantité de données toxicologiques disponibles pour la construction de ces valeurs. Seuls trois polluants ont un UF_D de 1, ce sont des polluants pour lesquels on estime qu'il existe des données toxicologiques en quantité suffisante et de bonne qualité et qui pourraient permettre l'élaboration d'une VTR.

Il est par ailleurs important de noter que la construction des VTi s'est appuyée sur une approche conservatrice. Les scores obtenus sont donc très faibles malgré des VTi construites avec des facteurs d'incertitude élevés.

La question de la construction d'une VTR pour les trois polluants ayant un UF_D égal à 1 peut donc se poser (le Butyl Acétate ayant déjà une VTR, il n'est pas concerné). Lors de la construction d'une VTR, les experts pourraient être amenés à revoir les différents facteurs d'incertitudes à la baisse augmentant ainsi la valeur de la VTR et diminuant donc un peu plus les scores de risque. Ceux-ci étant déjà très faibles, l'intérêt de recommander la construction d'une VTR, pour une problématique de qualité de l'air ambiant, semble très limité.

Par ailleurs, le GT, lors de son expertise, avait décidé de reclasser directement en catégorie 3 les polluants dont la moyenne des concentrations moyennes dans l'air ambiant était inférieure

à la VTR. Il serait donc logique de suivre la même démarche que le GT et de recatégoriser l'ensemble des polluants qui ont un score de risque inférieur à 1 dans la catégorie 3 : « polluants non prioritaires pour une surveillance dans l'air ambiant » tout en effectuant une veille scientifique sur ces polluants.

Concernant les 35 polluants pour lesquels aucun score de risque n'a été réalisé, s'ils disposent de données d'exposition suffisantes, les données sanitaires sont toutefois manquantes. En effet, aucun profil toxicologique les concernant n'a été réalisé par l'ATSDR, le NTP, l'US EPA ou l'INERIS. Par ailleurs il n'existe pas d'études de qualité suffisante dans les dossiers d'enregistrement d'ECHA ou publiées dans des revues scientifiques. Ces polluants ne se sont pas vu attribuer de score de risque et se retrouvent de manière indifférenciée en fin de liste. Ils deviennent par conséquent prioritaires pour l'acquisition de données toxicologiques. Ils ne sont par ailleurs pas classés entre eux, les valeurs de concentrations dans l'air à elles seules ne permettent pas de préjuger d'un éventuel risque.

4.2. Polluants de la catégorie 2b

La catégorie 2b est la catégorie qui comporte le plus de polluants : 394 sur les 557 polluants que compte la liste socle. Par ailleurs, il s'agit de polluants qui n'ont pas été catégorisés en fonction de leurs critères sanitaires. Ils ont été placés dans cette catégorie à l'issue de la première étape de catégorisation qui reposait sur l'existence de données d'occurrence dans l'air. La quantité de données sanitaires concernant ces polluants est donc très hétérogène.

L'objectif de l'exercice de hiérarchisation est donc d'identifier à la fois les polluants qui nécessitent l'acquisition de données d'exposition, et ceux qui nécessitent l'acquisition de données sanitaires. En raison du nombre important de polluants dans cette catégorie et du coût élevé que peut représenter la réalisation de campagnes d'occurrence dans l'air, la pertinence d'une telle recommandation ne sera étudiée que pour les 20 premiers polluants du classement.

a) Données disponibles et analyses de sensibilité

Dans un premier temps, on note que seule une minorité des molécules de la catégorie 2b est classée CMR, PE ou STOT RE. De plus, il est important de noter que les polluants classés mutagènes sont également classés cancérogènes. Pour cette raison il a été décidé lors de la mise en place de la méthode SIRIS de ne conserver que la classification la plus pénalisante entre « mutagénicité » et « cancérogénicité » afin d'éviter une double pénalisation de ces polluants et donc de leur donner un poids trop important.

La hiérarchie entre les différents critères a également été discutée. Si l'importance de la classification CMR par rapport aux autres critères est difficilement contestable, l'ordre entre la classification PE et la toxicité chronique, et entre la demi-vie dans l'atmosphère et la volatilité peuvent en revanche être sujet à débat. Pour cette raison, une nouvelle analyse de sensibilité a été réalisée. Toutes les permutations de critères possibles ont été réalisées, pour un total de 30 scénarii différents, ainsi que toutes les permutations de classes possibles. Une analyse superficielle des résultats permet de mettre en évidence le poids important que possède la cancérogénicité dans le classement des différentes substances comparé aux autres critères. C'est en effet la modification de sa place, lors des permutations de critères mais surtout lors des permutations de classes, qui semblent avoir le plus d'impact sur le classement final.

En conservant le critère CMR à la première place et seul dans sa classe, trois scénarii de permutations ont fait l'objet d'une attention particulière :

- La permutation entre les critères de la classe 2 et ceux de la classe 3
- La permutation de classe entre la volatilité et la demi-vie dans l'atmosphère
- La permutation de classe entre PE et STOT RE

Le résultat de ces permutations montre que 1,2-dibromo-3-chloropropane reste premier dans l'ensemble des scénarii. Par ailleurs, si les rangs changent, les polluants présents dans le TOP 20 restent en majorité les mêmes : 15 polluants du classement initial restent présents dans la première et la dernière permutation, et 18 dans la seconde (Tableau XI).

Tableau XI : Résultats des analyses de sensibilité conduites pour estimer l'impact de permutations de critères dans la méthode SIRIS

CAS	Substance	Rang initial	Permutation des classes 2 et 3	Permutation entre volatilité et demi-vie	Permutation entre PE et STOT RE
96-12-8	1,2-dibromo-3-chloropropane	1	1	1	1
98-95-3	Nitrobenzène	2	5	2	3
62-75-9	N-nitrosodiméthylamine	3	6	3	9
67-66-3	Chloroforme	4	9	8	11
75-27-4	Bromodichloromethane	5	3	4	4
106-89-8	Épichlorohydrine	6	2	5	2
79-06-1	Acrylamide	7	23	7	23
121-14-2	2,4-dinitrotoluène	8	24	9	7
100-44-7	Chlorure de benzyle	9	11	10	25
4170-30-3	Aldéhyde crotonique	10	12	11	26
74-83-9	Bromométhane	11	7	13	5
68-12-2	N,n-diméthylformamide	12	4	6	6
1163-19-5	BDE 209	13	56	34	13
591-78-6	2-hexanone	14	43	24	55
684-93-5	N-méthyl-n-nitrosourée	15	27	14	12
542-88-1	Ether dichlorodiméthylrique	16	13	15	14
126-99-8	Chloroprène	17	14	12	43
334-88-3	Diazométhane	18	15	16	15
57-57-8	Beta-propiolactone	19	16	17	16
75-56-9	Oxyde de propylène	20	17	18	17

Les polluants figurants en haut du classement sont pour la plupart classés CMR, et ce critère ayant un poids très fort, il est donc logique qu'ils y restent présents malgré les permutations. Le départage entre ces polluants s'effectue à partir des quatre critères restants, ce qui explique les variations de rangs selon l'importance donnée à ces différents critères.

Concernant les données des critères d'« exposition » (demi-vie dans l'atmosphère et volatilité), celles-ci ont pu être obtenues pour la plupart des polluants. Il est à noter toutefois que le logiciel EPI SUITE ne peut pas calculer les demi-vies dans l'atmosphère pour les polluants inorganiques. De la même manière, certaines pressions de vapeur n'ont pas pu être obtenues. Il a donc été décidé de ne pas faire de recherche bibliographique approfondie afin de trouver les données manquantes et d'attribuer la modalité la plus favorable pour ces critères lorsque la donnée était manquante, à l'instar de ce qui a été fait pour les critères de danger. Par ailleurs, le recours à cet outil permet d'avoir une approche homogène pour l'ensemble des polluants, il n'était pas possible de rechercher les données publiées dans les délais impartis. Il sera nécessaire de comparer les données modélisées à des données mesurées pour valider

l'utilisation du modèle. Une analyse de sensibilité a toutefois été effectuée en prenant en compte plusieurs hypothèses en cas d'absence de données pour la demi-vie dans l'atmosphère et la pression de vapeur :

- Considérer l'absence de données comme une modalité défavorable pour les deux critères ;
- Attribuer la modalité la plus défavorable pour la pression de vapeur, et la modalité la plus favorable pour la demi-vie en cas d'absence de données ;
- Attribuer la modalité la plus défavorable pour la demi-vie et la modalité la plus favorable pour la pression de vapeur en cas d'absence de données ;
- Considérer l'absence de données comme une modalité favorable pour les deux critères.

Les résultats de cette analyse de sensibilité (Annexe III) montrent peu de différences majeures dans le classement des polluants concernés et n'influencent que très peu le TOP 20.

Par ailleurs concernant la demi-vie dans l'atmosphère, il avait été envisagé au départ de fixer les modalités de manière linéaire. Toutefois, une telle répartition s'est avérée problématique puisque la majorité des polluants avaient, pour ce critère, une des deux modalités les plus favorables. Cela a notamment conduit à donner une trop grande pénalité à certains polluants avec une demi-vie dans l'atmosphère très élevée, comme le charbon actif, les faisant ainsi remonter dans le classement de manière trop importante. D'autres scénarii ont alors été envisagés :

- Fixer les modalités de manière logarithmique ;
- Répartir de manière homogène les polluants dans les différentes modalités, après avoir mis dans la modalité la plus favorable les polluants dont la demi-vie dans l'atmosphère est égale à 0 ou pour lesquels la donnée est manquante.

S'il était important de conserver une certaine discrimination pour ce critère, celui-ci ne devait pas avoir un impact plus important sur le classement que les autres critères de sa classe ou de la classe supérieure. Par ailleurs il était souhaitable de limiter autant que possible l'effet de seuil généré par la définition des différentes modalités. Après réalisation d'une analyse de sensibilité, c'est finalement la dernière répartition, en quatre quartiles avec une modalité supplémentaire pour polluants ayant une demi-vie égale à 0, qui s'est avérée être la plus convaincante. L'impact sur le TOP 20 entre les différentes répartitions s'est avéré plutôt limité : 15 des 20 polluants étaient présents dans le TOP 20 des trois scénarii testés.

b) Réalisation de fiches d'information

Une fois le TOP 20 arrêté, des fiches concernant ces différents polluants ont été réalisées. Elles reprennent les différentes données ayant permis leur hiérarchisation, ainsi que des informations supplémentaires :

- Des données d'identification : nom, synonymes, numéro CAS, formule chimique, famille chimique ;
- La raison de la présence dans la liste socle ;
- Les propriétés physico-chimiques : poids moléculaire, densité, solubilité dans l'eau, pression de vapeur, constante de Henry, température d'ébullition, coefficient de partage octanol/eau (log Kow), coefficient de partage avec le carbone organique (Koc), état physique à température ambiante ;
- Les principales sources d'exposition et les principaux usages ;
- L'existence de mesures du polluant dans l'air ambiant par les AASQA ou les laboratoires de recherche ;
- Les méthodes de mesures existantes ;
- Différentes données sanitaires : existence de VTR, classification CLP, CIRC, US EPA, NTP, MAK, ACGIH, BKH et DHI ;
- Le rang SIRIS et les données relatives aux cinq critères utilisés pour la hiérarchisation.

Les fiches des 20 premiers polluants sont disponibles en Annexe IV. Leur objectif est de fournir au décideur un ensemble d'informations concernant ces polluants lui permettant de pouvoir apprécier et, s'il le souhaite, appliquer au mieux les recommandations qui lui auront été faites.

c) Probabilité d'occurrence dans l'air ambiant

Afin de déterminer si les polluants en tête de classement nécessitent la réalisation d'une campagne d'occurrence, une estimation de leur probabilité d'occurrence dans l'air en France a été réalisée. Pour ce faire différentes informations ont été collectées et discutées : l'existence de sources naturelles, les informations mises à disposition par l'ECHA sur le tonnage ou l'utilisation comme intermédiaire de synthèse¹⁸, la consommation globale en France, ou encore la présence dans la bibliographie d'indications claires montrant l'absence d'utilisation de la substance en France.

Selon ces différentes informations, les polluants ont ensuite été répartis dans trois catégories : peu probable, probable, ou très probable, en suivant l'arbre décisionnel présenté sur la Figure 20.

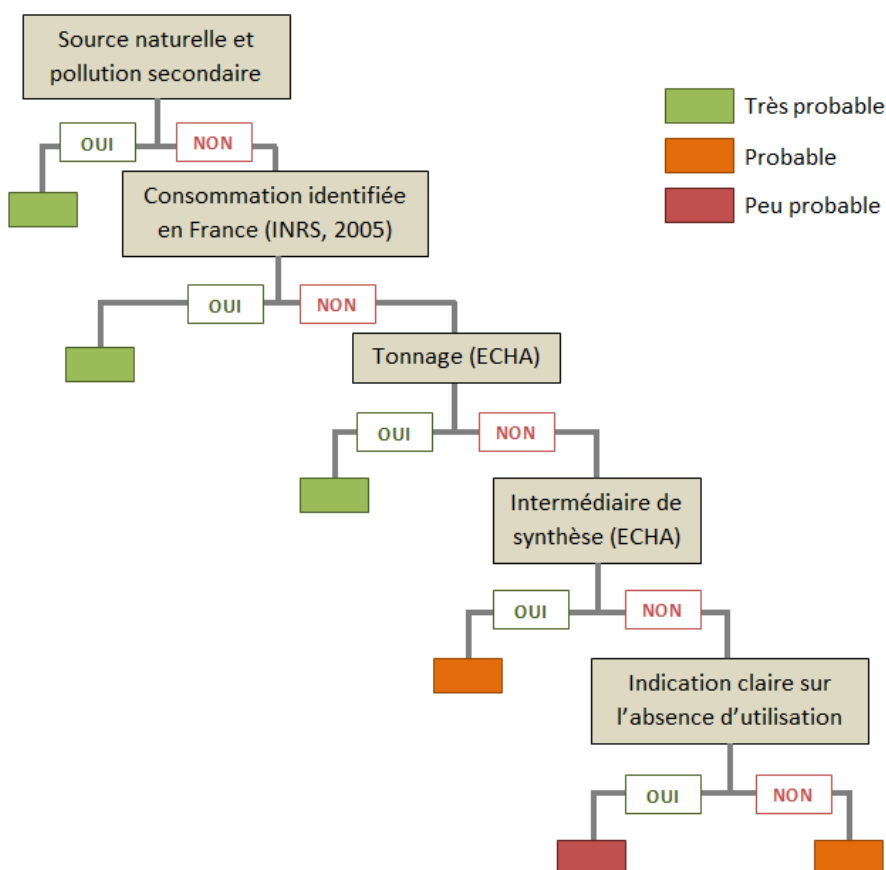


Figure 20 : Arbre décisionnel pour déterminer la probabilité d'occurrence dans l'air des polluants du TOP 20

¹⁸ « Le règlement REACH définit un intermédiaire comme une substance fabriquée en vue d'une transformation chimique et consommée ou utilisée dans le cadre de cette transformation en vue de faire l'objet d'une opération de transformation en une autre substance » (ECHA, 2010)

Une précision concernant l'origine des différents polluants a été ajoutée au classement afin de différencier les polluants ayant une source naturelle, ceux issus de réactions physicochimiques dans l'atmosphère (pollution dite « secondaire »), et ceux ayant une source anthropique (Tableau XII). Cette séparation a pour but d'orienter au mieux les différentes recommandations. En effet si des campagnes d'occurrence de fond peuvent être pertinentes pour certains polluants (polluants issus de réaction secondaires dans l'atmosphère ou ayant une source naturelle), ceux qui ont pour origine une source anthropique ciblée devrait plutôt faire l'objet, dans un premier temps, de campagnes de mesures proches des sources d'émission identifiées (ex. industrielles).

Tableau XII : Probabilité d'occurrence dans l'air et source des polluants du TOP 20

Rang	CAS	Substance	Source naturelle	Source anthropique	Pollution secondaire
1	96-12-8	1,2-dibromo-3-chloropropane		X	
2	98-95-3	Nitrobenzène		X	
3	62-75-9	N-nitrosodiméthylamine		X	X
4	67-66-3	Chloroforme	X	X	
5	75-27-4	Bromodichloromethane	X	X	
6	106-89-8	Épichlorohydrine		X	
7	79-06-1	Acrylamide		X	
8	121-14-2	2,4-dinitrotoluène		X	
9	100-44-7	Chlorure de benzyle		X	
10	4170-30-3	Aldéhyde crotonique		X	
11	74-83-9	Bromométhane	X	X	
12	68-12-2	N,n-diméthylformamide		X	
13	1163-19-5	BDE 209		X	
14	591-78-6	2-hexanone		X	
15	684-93-5	N-méthyl-n-nitrosourée		X	
16	542-88-1	Ether dichlorodiméthylque		X	
17	126-99-8	Chloroprène		X	
18	334-88-3	Diazométhane		X	
19	57-57-8	Beta-propiolactone		X	
20	75-56-9	Oxyde de propylène		X	

Une attention particulière doit être portée au BDE 209 qui est listé à l'annexe A de la Convention de Stockholm sur les polluants organiques persistants (POP), c'est-à-dire parmi les polluants qui ne doivent plus être produits ou utilisés.

Concernant les 14 polluants dont la probabilité d'occurrence dans l'air est jugée élevée, l'un est un polluant secondaire et trois ont des sources naturelles. Il est donc envisageable de recommander des campagnes de mesures de fond. Pour le BDE 209, celui-ci ne devant plus

être utilisé, une campagne de mesure de fond est elle aussi envisageable afin de déterminer son occurrence dans l'environnement depuis son interdiction. Les neufs polluants restants devraient quant à eux faire l'objet de campagnes de mesures plus ciblées, notamment dans des zones géographiques proches de leur lieu d'émission. Des études de filières afin de déterminer les sites de mesures pertinents devraient donc être réalisées au préalable.

Les six polluants ayant une probabilité d'occurrence dans l'air jugée moyennement ou peu probable devraient avant tout faire l'objet d'études de filières. Il n'existe en effet à ce jour que peu ou pas d'indices montrant une éventuelle utilisation ou production passée ou présente en France. Ces études devraient permettre d'évaluer la pertinence de la réalisation de campagnes de mesures ultérieures, et le cas échéant de définir les sites de mesures les plus appropriés. Si ces polluants ne sont pas utilisés ou produits en France, une recatégorisation en catégorie 3 pourra être envisagée.

d) Polluant non classés dans le TOP 20

Pour les 374 polluants ne figurant pas dans ce TOP 20, 18 n'ont pas de numéro CAS et se retrouvent par conséquent en bas de la liste. S'il s'agit de familles ou de sommes de molécules, il pourrait être intéressant :

- D'identifier plus précisément les polluants jugés problématiques ;
- De les évaluer individuellement ;
- Ou d'élaborer une méthode prenant en compte les « effets cocktail ».

S'il s'agit de polluant pour lesquels un numéro CAS n'a pas été attribué, il serait pertinent d'attendre l'attribution avant de se lancer dans une recherche bibliographique qui pourrait s'avérer fastidieuse et peu concluante.

Concernant les polluants qui possèdent un numéro CAS, il conviendra d'effectuer une veille scientifique sur les données toxicologiques et d'exposition. En effet de nombreux polluant figurent en bas de liste non pas parce qu'ils présentent un risque faible mais par manque de données et notamment sanitaires.

4.3. Perspectives

Les méthodes mises en œuvre pour la hiérarchisation des polluants des catégories 2a et 2b doivent pouvoir être appliquées à nouveau une fois les acquisitions de données réalisées. Par ailleurs si de nouveaux polluants viennent compléter la liste socle et se retrouvent dans ces deux catégories, ils devront pouvoir être hiérarchisés en suivant les mêmes étapes. Il s'agit donc de démarches pérennes qui devront être mises en œuvre régulièrement au gré de l'acquisition des données et de la veille scientifique réalisée.

Concernant les 35 polluants restant dans la catégorie 2a, une veille scientifique régulière, sur les données sanitaires notamment, ou la mise en place d'études toxicologiques, permettra à terme de les recatégoriser en catégorie 1 ou 3.

Pour les 374 polluants de la catégorie 2b pour lesquels aucune recommandation n'a été formulée sur l'acquisition de données d'exposition, il sera nécessaire, d'une part, d'évaluer la pertinence de la présence de certains polluants dans cette liste (charbon actif, sucres ...), et d'autre part, d'identifier plus précisément les polluants jugés problématiques dans les familles ou sommes de molécules figurant sur la liste. Une veille scientifique, notamment sur les données sanitaires, devra ensuite permettre de faire de nouveaux polluants. Ceux-ci pourront alors suivre les mêmes démarches de catégorisation nécessaires à l'élaboration de recommandations.

Il est également important de noter que les critères de dangers pris en compte pour les polluants se limitent aux critères CMR, PE et STOT RE. Ces critères de dangers chroniques ont été jugés pertinents pour un exercice de hiérarchisation dans un contexte de surveillance national de polluants au long cours. Cela ne présage pas des autres effets possibles des polluants, considérés individuellement ou en mélange.

5. Bibliographie

- AFNOR. 2014. « NF EN 13936 - Exposition sur les lieux de travail — Mesurage de l'agent chimique sous forme de mélange de particules aériennes et de vapeur — Exigences et méthodes d'essai ».
- Afsset. 2007. « Etude sur la substitution des agents chimiques cancérigènes, mutagènes et toxiques pour la reproduction (CMR) de catégories 1 et 2 (Classement de l'Union européenne) Identification des substances les plus problématiques à étudier prioritairement ».
- Ahrens, Lutz, Tom Harner, et Mahiba Shoeib. 2014. « Temporal Variations of Cyclic and Linear Volatile Methylsiloxanes in the Atmosphere Using Passive Samplers and High-Volume Air Samplers ». *Environmental Science & Technology* 48 (16): 9374-81. <https://doi.org/10.1021/es502081j>
- Anses. 2018a. « Polluants « émergents » dans l'air ambiant - Identification, catégorisation et hiérarchisation de polluants actuellement non réglementés pour la surveillance de la qualité de l'air ». Anses.
- Anses. 2018b. « Valeurs toxicologiques de référence - Guide d'élaboration de l'Anses00 ».
- Atmo France. « Missions et gouvernance des AASQA », 14 septembre 2018. <https://atmo-france.org/missions-et-gouvernance-des-aasqa/>.
- ATSDR. 2015. « 2015 ATSDR Substance Priority List ». consulté le 25 juillet 2018. https://www.atsdr.cdc.gov/spl/resources/2015_atsdr_substance_priority_list.html.
- Buser, Andreas M., Amelie Kierkegaard, Christian Bogdal, Matthew MacLeod, Martin Scheringer, et Konrad Hungerbühler. 2013. « Concentrations in Ambient Air and Emissions of Cyclic Volatile Methylsiloxanes in Zurich, Switzerland ». *Environmental Science & Technology* 47 (13): 7045-51. <https://doi.org/10.1021/es3046586>.
- Companioni-Damas, E.Y., F.J. Santos, et M.T. Galceran. 2014. « Linear and Cyclic Methylsiloxanes in Air by Concurrent Solvent Recondensation–large Volume Injection–gas Chromatography–mass Spectrometry ». *Talanta* 118 (janvier): 245-52. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2013.10.020>.
- Dargere, Jill. 2013. « Élaboration d'une méthode de hiérarchisation des substances chimiques dans le cadre des règlements REACH et CLP ». Thèse d'exercice, Université Paris-sud.
- ECHA. 2010. « Guide technique : Intermédiaires ».
- Farion, Nicolas. 2017. « Comparaison des différentes classifications des substances cancérigènes en vue de proposer des équivalences entre les classifications issues d'organismes internationaux et la classification européenne ». Rapport de stage, Université Paris-sud.
- Gallego, E., J.F. Perales, F.J. Roca, X. Guardino, et E. Gadea. 2017. « Volatile Methyl Siloxanes (VMS) Concentrations in Outdoor Air of Several Catalan Urban Areas ». *Atmospheric Environment* 155 (avril): 108-18. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2017.02.013>.
- Hughes, K., J. Paterson, et M. E. Meek. 2009. « Tools for the Prioritization of Substances on the Domestic Substances List in Canada on the Basis of Hazard ». *Regulatory Toxicology and Pharmacology: RTP* 55 (3): 382-93. <https://doi.org/10.1016/j.yrtph.2009.09.007>.
- Ineris. 2013. « Identification et hiérarchisation substances préoccupantes ».

- Jo, Sang-Hee, Ki-Hyun Kim, et Yong-Hyun Kim. 2016. « A Novel Quantitation Method for Phthalates in Air Using a Combined Thermal Desorption/Gas Chromatography/Mass Spectrometry Application ». *Analytica Chimica Acta* 944 (novembre): 29-36. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2016.09.037>.
- Klimisch, H.-J, M Andreae, et U Tillmann. « A Systematic Approach for Evaluating the Quality of Experimental Toxicological and Ecotoxicological Data ». *Regulatory Toxicology and Pharmacology* 25, n° 1 (1 février 1997): 1-5. <https://doi.org/10.1006/rtph.1996.1076>.
- Krogseth, Ingjerd S., Xianming Zhang, Ying D. Lei, Frank Wania, et Knut Breivik. 2013. « Calibration and Application of a Passive Air Sampler (XAD-PAS) for Volatile Methyl Siloxanes ». *Environmental Science & Technology* 47 (9): 4463-70. <https://doi.org/10.1021/es400427h>.
- Lerche, Dorte, Sanae Y. Matsuzaki, Peter B. Sørensen, Lars Carlsen, et Ole John Nielsen. 2004. « Ranking of Chemical Substances Based on the Japanese Pollutant Release and Transfer Register Using Partial Order Theory and Random Linear Extensions ». *Chemosphere* 55 (7): 1005-25. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2004.01.023>.
- Li, Yingjie, Jiahui Wang, Bainian Ren, Hongli Wang, Liping Qiao, Jiping Zhu, et Li Li. 2018. « The Characteristics of Atmospheric Phthalates in Shanghai: A Haze Case Study and Human Exposure Assessment ». *Atmospheric Environment* 178 (avril): 80-86. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2018.01.042>.
- Ma, Jing, Liu-lu Chen, Ying Guo, Qian Wu, Ming Yang, Ming-hong Wu, et Kurunthachalam Kannan. 2014. « Phthalate Diesters in Airborne PM 2.5 and PM 10 in a Suburban Area of Shanghai: Seasonal Distribution and Risk Assessment ». *Science of The Total Environment* 497-498 (novembre): 467-74. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2014.08.012>.
- Moreno, Teresa, Tomoko Kojima, Xavier Querol, Andrés Alastuey, Fulvio Amato, et Wes Gibbons. 2012. « Natural versus Anthropogenic Inhalable Aerosol Chemistry of Transboundary East Asian Atmospheric Outflows into Western Japan ». *Science of The Total Environment* 424 (mai): 182-92. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2012.02.060>.
- OMS. 2013. « Health Risks of Air Pollution in Europe – HRAPIE Project ».
- OMS. 2016. « WHO Expert Consultation: Available Evidence for the Future Update of the WHO Global Air Quality Guidelines (AQGs) ».
- Pennington, D. W., et J. C. Bare. 2001. « Comparison of Chemical Screening and Ranking Approaches: The Waste Minimization Prioritization Tool versus Toxic Equivalency Potentials ». *Risk Analysis: An Official Publication of the Society for Risk Analysis* 21 (5): 897-912.
- Shoeib, Mahiba, Lutz Ahrens, Liisa Jantunen, et Tom Harner. 2014. « Concentrations in Air of Organobromine, Organochlorine and Organophosphate Flame Retardants in Toronto, Canada ». *Atmospheric Environment* 99 (décembre): 140-47. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.09.040>.
- US EPA, OAR. 2015. « Initial List of Hazardous Air Pollutants with Modifications ». Reports and Assessments. US EPA. 16 décembre 2015. <https://www.epa.gov/haps/initial-list-hazardous-air-pollutants-modifications>.
- Vaillant, M, J.M. Jouany, et J Devillers. 1995. « A multicriteria estimation of the environmental risk of chemicals with the SIRIS method ». *Toxicology Modeling* 1 (1): 57-71.

Wolf, Douglas C., Ammie Bachman, Gordon Barrett, Cheryl Bellin, Jay I. Goodman, Elke Jensen, Angelo Moretto, et al. 2016. « Illustrative Case Using the RISK21 Roadmap and Matrix: Prioritization for Evaluation of Chemicals Found in Drinking Water ». *Critical Reviews in Toxicology* 46 (1): 43-53. <https://doi.org/10.3109/10408444.2015.1082973>.

Annexes

Annexe I : Tableau de synthèse des VTi

Polluant	étude clef	Niveau de confiance (ToxRTool)	Effet critique	Espèce, durée et voie	Dose critique	Ajustements	Facteurs d'incertitudes						VTi
							UFA	UFH	UFB/L	UFS	UFD	Total	
nonane isooctane n-octane n-heptane	ECHA - Unnamed Key Study, 1989	1	Malformations squelettiques au niveau embryonnaire	Souris GD6 – GD15 Inhalation	NOAEC : 10 560 mg/m ³ LOAEC : 31680 mg/m ³	NOAEC HEC ADJ : 10 560 mg/m ³	2,5	10	1	1	10	250	4,22 x 10 ¹ mg/m ³
n-pentane	Stadler et al., 2001	1	Augmentation de la calcémie	Rat 2 semaines Inhalation	NOAEC : 1000 ppm LOAEC : 3000 ppm	NOAEC HEC ADJ : 178,57 ppm	2,5	10	1	3	1	75	7,13 x 10 ⁰ mg/m ³
D3	ECHA - Unnamed Key Study, 1990	1	Perturbations hématologiques	Rat 46 jours Inhalation	NOAEC : 150 ppm LOAEC : 600 ppm	NOAEC HEC ADJ : 26,79 ppm	2,5	10	1	3	3	225	1,10 x 10 ⁰ mg/m ³
n-décane	ECHA - Unnamed Key Study, 1982	1	Aucun effet critique	Rat 13 semaines Inhalation	NOAEC : 1160 mg/m ³	NOAEC HEC ADJ : 207,14 mg/m ³ air	2,5	10	3	3	10	2250	9,20 x 10 ⁻² mg/m ³
1-butène	ECHA - Unnamed Key Study, 2003	1	Aucun effet critique	Rat 4 semaines Inhalation	NOAEC : 18 359 mg/m ³	NOAEC HEC ADJ : 4589,75 mg/m ³	2,5	10	3	3	10	2250	2,04 x 10 ⁰ mg/m ³
Propane	ECHA - Unnamed Key Study, 2009	1	Réduction du gain de masse corporelle chez le mâle	Rat 14+28 jours Inhalation	NOAEC : 12 000 ppm	NOAEC HEC ADJ : 1000 mg/m ³	2,5	10	1	3	3	225	8,15 x 10 ⁰ mg/m ³ (4,44 x 10 ⁰ ppm)
Zirconium	Spiegl et al., 1956	2	Aucun effet critique	Chat, chien, cochon d'Inde 60 jours Inhalation	NOAEC : 11 mg/m ³	NOAEC HEC ADJ : 1,96 mg/m ³	2,5	10	3	3	10	2250	8,73 x 10 ⁻⁴ mg/m ³
Acide méthylsulfonique	ECHA - Unnamed Key Study, 1996	1	Lésions histopathologiques au niveau des cornets nasaux	Rat 4 semaines Inhalation	LOAEC : 26 mg/m ³	NOAEC HEC ADJ : 4,643 mg/m ³	2,5	10	10	3	1	750	6,19 x 10 ⁻³ mg/m ³
Isopentane	ECHA - Unnamed Key Study, 2000	1	Réduction du gain de masse corporelle	Rat GD6 – GD15 Inhalation	NOAEC : 2000 ppm LOAEC : 7000 ppm	NOAEC HEC ADJ : 357,14 ppm	2,5	10	1	3	10	750	1,43 x 10 ⁰ mg/m ³ (4,80 x 10 ⁻¹ ppm)
Ethane	ECHA - Unnamed Key Study, 2000	1	Pas d'effet critique	Rat 14+28 jours Inhalation	NOAEC : 16 000 ppm	NOAEC HEC ADJ : 4000 ppm	2,5	10	3	3	3	675	7,41 x 10 ⁰ mg/m ³ (5,93 x 10 ⁰ ppm)
Ethène	ECHA - Unnamed Key Study, 2010	1	Altération des voies nasales	Rat 13 semaines Inhalation	BMDL : 21,3 ppm	NOAEC HEC ADJ : 3,8 ppm	2,5	10	1	3	3	225	1,98 x 10 ⁻¹ mg/m ³ (1,70 x 10 ⁻² ppm)

Polluant	étude clef	Niveau de confiance (ToxRTool)	Effet critique	Espèce, durée et voie	Dose critique	Ajustements	Facteurs d'incertitudes					VTi	
							UFA	UFH	UFB/L	UFS	UFD		Total
Isobutane	ECHA - Unnamed Key Study, 2000	1	Diminution de la fertilité	Rat 14+28 jours Inhalation	NOAEC: 3000 ppm LOAEC: 9000 ppm	NOAEC HEC ADJ : 750 ppm	2,5	10	1	3	3	225	8,05 x 10 ⁰ mg/m ³ (3,33 x 10 ⁰ ppm)
n-butane	ECHA - Unnamed Key Study, 2009	1	Réduction du gain de masse corporelle chez le mâle	Rat 14+28 jours Inhalation	NOAEC: 21 394 mg/m ³	NOAEC HEC ADJ : 5348,5mg/m ³	2,5	10	3	3	1	225	2,38 x 10 ¹ mg/m ³
Cis-2-butène Trans-2-butène	ACGIH, 2008	1	Diminution la consommation de nourriture et de la masse corporelle	Rat 39 à 46 jours Inhalation	NOAEC: 2500 ppm LOAEC: 5000 ppm	NOAEC HEC ADJ : 625 ppm	2,5	10	1	3	3	225	6,48 x 10 ⁰ mg/m ³ (2,78 x 10 ⁰ ppm)
Thallium	ACGIH, 2010	1	Aucun effet critique	Rat 13 semaines Ingestion	NOAEL: 0,25 mg/kg/j	NOAEL HED ADJ : 0,058 mg/kg/j	2,5	10	3	3	3	675	VTi orale : 0,000086 mg/kg Transposition voie à voie : VTi = 1,51 x 10 ⁻⁴ mg/m ³
3-methylpentane	Chung et al., 2016	1	Aucun effet critique	Rat 4 semaines Inhalation	NOAEC: 4540 ppm	NOAEC HEC ADJ : 810,71 ppm	2,5	10	3	3	3	675	4,30 x 10 ⁰ mg/m ³ (1,20 x 10 ⁰ ppm)
Dimethyl phtalate	ECHA - Unnamed Key Study, 2005	1	Réduction du gain de masse corporelle	Rat 17 semaines Ingestion	NOAEL : 222 mg/kg/j LOAEL : 1150 mg/kg/j	NOAEL HED : 37,336 mg/kg/j	2,5	10	1	1	3	75	VTi orale : 0,15 mg/kg Transposition voie à voie : VTi = 2,61 x 10 ⁻¹ mg/m ³
Germanium	ECHA - Unnamed Key Study, 1990	1	Altération rénale, et lésions histopathologiques des poumons	Rat 4 semaines Inhalation	NOAEC : 9,9 mg/m ³ LOAEC : 65,1 mg/m ³	NOAEC HEC ADJ : 1,768 mg/m ³	2,5	10	1	3	3	225	8,00 x 10 ⁻³ mg/m ³
Yttrium	Wang et al., 2017	1	Aucun effet critique	Rat 13 semaines Ingestion	NOAEL: 29,1 mg/kg/j	NOAEL HED : 7,36 mg/kg/j	2,5	10	3	3	3	675	VTi orale : 0,01 mg/kg Transposition voie à voie : VTi = 1,90 x 10 ⁻² mg/m ³
Magnésium	Takizawa et al., 2000	2	Selles molles transitoires et diminution du gain de masse corporelle	Rat 13 semaines Ingestion	NOAEL: 299 mg/kg/j LOAEL: 1531 mg/kg/j	NOAEL HED : 61,341 mg/kg/j	2,5	10	1	3	10	750	VTi orale : 0,08 mg/kg Transposition voie à voie : VTi = 1,43 x 10 ⁻¹ mg/m ³
1-hexène	ECHA - Unnamed Key Study, 1983	1	Aucun effet critique	Rat 13 semaines Inhalation	NOAEC: 3000 ppm	NOAEC HEC ADJ: 535,715 mg/kg/j	2,5	10	3	3	3	675	2,78 x 10 ⁰ mg/m ³ (7,94 x 10 ⁻¹ ppm)
BEH TEBP	ECHA - Unnamed Key Study, 1988	1	Changement mineurs, pas de preuve de toxicité	Rat 4 semaines Ingestion	NOAEL 2000 ppm	NOAEL HED : 61,4 mg/kg/j	2,5	10	1	3	10	750	VTi orale : 0,082 mg/kg Transposition voie à voie : VTi = 1,43 x 10 ⁻¹ mg/m ³
D6	ECHA - Unnamed Key Study, 2013	1	Hyperplasie du tissu nasal	Rat 13 semaines Inhalation	NOAEC 18,2 mg/m ³ air LOAELC 182 mg/m ³ air	NOAEC HEC ADJ: 4,55 mg/kg/j	2,5	10	1	3	10	750	6,00 x 10 ⁻³ mg/m ³
L2	ECHA - Unnamed Key Study, 2008	1	Altérations hépatiques	Rat 13 semaines Inhalation	NOAEC: 500 ppm LOAEC: 1600 ppm	NOAEC HEC ADJ: 664 mg/m ³	2,5	10	1	1	10	250	2,70 x 10 ⁰ mg/m ³

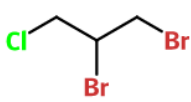
Polluant	étude clef	Niveau de confiance (ToxRTool)	Effet critique	Espèce, durée et voie	Dose critique	Ajustements	Facteurs d'incertitudes						VTi
							UFA	UFH	UFB/L	UFS	UFD	Total	
L3	ECHA - Unnamed Key Study, 2011	1	Accumulation de protoporphyrine et inflammation périportale	Rat 13 semaines Inhalation	NOAEC : 400 ppm LOAEL: 3200 ppm	NOAEC HEC ADJ: 968 mg/m ³	2,5	10	1	3	3	225	4,30 x 10 ⁰ mg/m ³
L4	ECHA - Unnamed Key Study, 2010	1	Aucun effet critique	Rat 13 semaines Inhalation	NOAEC: 5083 mg/m ³	NOAEC HEC ADJ: 1270,8 mg/m ³	2,5	10	1	3	3	225	5,60 x 10 ⁰ mg/m ³

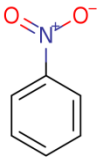
Annexe II: Données sanitaires et d'exposition du TOP 20

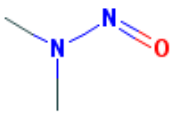
Rang	Nom	CMR	Cancérogénicité			Mutagenicité	Reprotoxicité	PE		STOT RE	Demi-vie (jours)	Pression de vapeur (Pa) à 25°C
			Correspondance ECHA	Classification initiale				Classif.	Année			
1	1,2-dibromo-3-chloropropane	2 cat. 1A ou 1B	1B	1B	ECHA	1B	1A	CAT1	DHI 2006	STOT RE 2	14,318	58,7
2	Nitrobenzène	1 cat. 1A ou 1B +1 cat. 2	2	2	ECHA	Non classé	1B	Non éval/class		STOT RE 1	21,946	27,9
3	Acrylamide	1 cat. 1A ou 1B +1 cat. 2	1B	1B	ECHA	1B	2	Non éval/class		STOT RE 1	0,477	17,1
4	N-nitrosodiméthylamine	1 cat 1A ou 1B	1B	1B	ECHA	Non classé	Non classé	Non éval/class		STOT RE 1	2,114	573
5	Chloroforme	2 cat. 2	2	2	ECHA	Non classé	2	Non éval/class		STOT RE 1	50,239	25100
6	Bromodichloromethane	2 cat. 1A ou 1B	1B	1B	ECHA	1B	1A	Non éval/class		Non classé	68,181	7650
7	Épichlorohydrine	1 cat. 1A ou 1B	1B	1B	ECHA	Non classé	Non classé	CAT1	BKH 2002	Non classé	9,477	2380
8	2,4-dinitrotoluène	1 cat. 1A ou 1B +1 cat. 2	1B	1B	ECHA	2	2	Non éval/class		STOT RE 2	24,816	0,0958
9	Chlorure de benzyle	1 cat. 1A ou 1B	1B	1B	ECHA	Non classé	Non classé	Non éval/class		STOT RE 2	2,26	135
10	Aldéhyde crotonique	1 cat. 1A ou 1B	1B	A3	ACGIH	2	Non classé	Non éval/class		STOT RE 2	0,148	4200
11	Bromométhane	1 cat. 2	2	3	CIRC	2	Non classé	CAT2	EM 1999	STOT RE 2	140,441	212000
12	N,n-diméthylformamide	2 cat. 1A ou 1B	1B	2A	CIRC	Non classé	1B	CAT3b	BKH 2002	Non classé	0,305	465
13	BDE 209	1 cat. 1A ou 1B +1 cat. 2	2	3	CIRC	2	1B	Non éval/class		STOT RE 2	158,767	6,23E-10
14	2-hexanone	1 cat. 2	Non classé	Non classé	ECHA	Non classé	2	Non éval/class		STOT RE 1	0,791	1810
15	N-méthyl-n-nitrosourée	2 cat. 1A ou 1B	1B	2A	CIRC	Non classé	1B	Non éval/class		Non classé	3,433	3,9
16	Ether dichlorodiméthylque	1 cat. 1A ou 1B	1A	1A	ECHA	Non classé	Non classé	Non éval/class		Non classé	7,534	3850
17	Chloroprène	1 cat. 1A ou 1B	1B	1B	ECHA	Non classé	Non classé	Non éval/class		STOT RE 2	0,243	28600
18	Diazométhane	1 cat. 1A ou 1B	1B	1B	ECHA	Non classé	Non classé	Non éval/class		Non classé	5,726	526000
19	Beta-propiolactone	1 cat. 1A ou 1B	1B	1B	ECHA	Non classé	Non classé	Non éval/class		Non classé	8,705	305
20	Oxyde de propylène	1 cat. 1A ou 1B	1B	1B	ECHA	1B	Non classé	Non éval/class		Non classé	8,935	70900

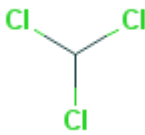
Annexe III : Analyse de sensibilité : Demi-vies dans l'atmosphère et volatilité

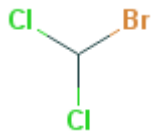
CAS	Polluant	« o » pour les deux critères	« o » pour la demi-vie et « d » pour la volatilité	« o » pour la volatilité et « d » pour la demi-vie	« d » pour les deux critères
96-12-8	1,2-dibromo-3-chloropropane	1	1	1	1
98-95-3	Nitrobenzène	2	2	2	2
62-75-9	N-nitrosodiméthylamine	3	3	3	3
67-66-3	Chloroforme	4	4	4	4
75-27-4	Bromodichloromethane	5	5	5	5
106-89-8	Épichlorohydrine	6	6	6	6
79-06-1	Acrylamide	7	7	7	7
121-14-2	2,4-dinitrotoluène	8	8	8	8
100-44-7	Chlorure de benzyle	9	9	9	9
4170-30-3	Aldéhyde crotonique	10	10	30	30
74-83-9	Bromométhane	11	11	10	10
68-12-2	N,n-diméthylformamide	12	12	11	11
1163-19-5	BDE 209	13	13	12	12
591-78-6	2-hexanone	14	14	13	13
684-93-5	N-méthyl-n-nitrosourée	15	15	14	14
542-88-1	Ether dichlorodiméthylrique	16	16	15	15
126-99-8	Chloroprène	17	17	16	16
334-88-3	Diazométhane	18	18	17	17
57-57-8	Beta-propiolactone	19	19	18	18
75-56-9	Oxyde de propylène	20	20	19	19
1332-21-4	Asbestos	220	129	219	129
156-62-7	Cyanamide calcique	387	387	387	387
302-01-2	Hydrazine	129	131	129	131
463-58-1	Oxysulfure de carbone	351	380	351	380
67-72-1	Hexachloroéthane	182	184	180	182
7440-21-3	Silicium	301	301	302	302
7440-22-4	Argent	189	191	187	189
7440-57-5	Or	355	384	355	384
7440-74-6	Indium	190	192	188	190
75-44-5	Phosgène	349	378	349	378
7726-95-6	Dibrome	347	376	347	376
7550-45-0	Titanium tetrachloride	346	375	346	375
13494-80-9	Tellure	222	222	221	221
7439-91-0	Lanthane	390	390	390	390
7440-55-3	Gallium	390	390	390	390
76-13-1	1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoroéthane	348	377	348	377
7647-01-0	Hydrochloric acid	327	327	327	327
7664-39-3	Acide fluorhydrique	398	398	398	398
7782-50-5	Dichlore	350	379	350	379
99717-56-3	TBP BAE	355	346	355	346
155613-93-7	OBTMPI	355	346	355	346
7440-33-7	Tungsten	355	384	355	384
1336-21-6	Ammoniaque	388	388	388	388
7782-41-4	Fluor	353	382	353	382
54352-50-0	17 α (H)-21 β (H)-22R-bishomohopane	355	346	355	346
81600-07-9	17 α (H)-21 β (H)-norhopane	355	346	355	346
189084-64-8	BDE 100	355	346	355	346
19037-58-2	SyringylAcetone	355	346	355	346
24581-03-1	1,5-heptadien-4-ol	355	346	355	346
28664-02-0	Acide pinique	355	346	355	346
62016-26-6	2,2,3-triméthyloctane	355	346	355	346
62183-79-3	2,2,4,4-tétraméthyloctane	355	346	355	346
68631-49-2	BDE 153	355	346	355	346
7314-30-9	Dimethylpropiothetin	354	383	354	383
7439-88-5	Iridium	390	390	390	390
7439-93-2	Lithium	389	389	389	389
7440-04-2	Osmium	390	390	390	390
7440-16-6	Rhodium	390	390	390	390
7440-18-8	Ruthénium	390	390	390	390
7440-20-2	Scandium	390	390	390	390
7440-37-1	Argon	352	381	352	381
7440-45-1	Cérium	390	390	390	390
7440-46-2	Césium	328	328	328	328
7440-58-6	Hafnium	300	300	301	301
7440-69-9	Bismuth	386	386	386	386
90989-38-1	Xylènes + C8 aromatics	221	130	220	130

1		1,2-DIBROMO-3-CHLOROPROPANE	
 <chem>C3H5Br2Cl</chem>		PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (PUBCHEM, INERIS)	USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (US EPA)
IDENTITE		<u>Poids moléculaire</u> : 236,331 g/mol <u>Densité</u> : 2,08 à 20°C <u>Solubilité dans l'eau</u> : 1230mg/L à 20°C <u>Pression de vapeur</u> : 58.70 Pa <u>Constante de Henry</u> : 1,5.10 ⁻⁴ atm.m ³ /mol <u>Température d'ébullition</u> : 196°C <u>Koc</u> : 70,79 L/kg <u>Log Kow</u> : 2,96 <u>Etat physique à température ambiante</u> : liquide	<u>Usages</u> : Pesticide autrefois utilisé pour la fumigation des sols grâce à son action nématocide. Il est également utilisé comme intermédiaire dans la synthèse de composés organiques. <u>Sources</u> : Origine anthropique. Obtenu par addition en phase liquide de brome au chlorure d'allyle.
N°CAS : 96-12-8 <u>Synonymes</u> : - DBCP - Fumazone - Nemagon <u>Famille chimique</u> : Composé organique volatil		CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)	
PRESENCE SUR LA LISTE SOCLE		0 tonnes	
Liste commune ATSDR/OMS/US EPA			
MESURES DU POLLUANT		METHODES DE MESURES EXISTANTES	
<u>Mesuré par des AASQA</u> : Non <u>Mesuré par des laboratoires</u> : Non		Plusieurs méthodes de mesures existent pour l'analyse du 1,2-dibromo-3-chloropropane dans l'eau, les déchets solides ou les tissus biologiques. Aucune méthode de mesure dans l'air n'a cependant été recensée pour ce polluant.	
DONNEES SANITAIRES			
<u>VTR disponible(s)</u> : Subchronique: MRL : 0,0002 ppm (ATSDR, 1992) Chronique: RfC: 0,0002 mg/m ³ (US EPA, 1991) Inhalation Unit Risk : • 0,002 (µg/m ³) ⁻¹ (OEHHA, 1999)		• <u>Cancérogénicité</u> : 1B (ECHA), 2B (CIRC), Non évalué (US EPA), Non évalué (ACGIH), 2 (MAK), Reasonably anticipated to be a human carcinogen (NTP) • <u>Mutagénicité</u> : 1B (ECHA) • <u>Reprotoxicité</u> : 1A (ECHA) • <u>Perturbateur endocrinien</u> : 1 (DHI 2006) • <u>Autres classifications CLP</u> : Acute Tox. 3 ; STOT RE 2	
SIRIS			
<u>Rang SIRIS</u> : 1 <u>Critères</u> :			
Classe 1	Classification CMR	2 catégories 1A ou 1B	
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	14,32 jours	
Classe 2	Toxicité chronique	STOT RE 2	
Classe 3	Volatilité	Polluant semi-volatil	
Classe 3	Classification PE	Catégorie 1 (DHI 2006)	

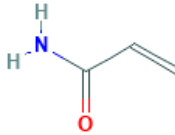
2		NITROBENZENE	
 <chem>C6H5NO2</chem>	PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (INERIS, PUBCHEM)		USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (PUBCHEM, OMS)
	IDENTITE N°CAS : 98-95-3 Synonymes : - Essence de mirbane - Nitrophène - Nitrobenzol Famille chimique : Composé organique volatil		Poids moléculaire : 123.111 g/mol Densité : 1,2 Solubilité dans l'eau : 1900 mg/L à 20°C Pression de vapeur : 27,90 Pa à 20°C Constante de Henry : 1,3 Pa.m ³ /mol à 20°C Température d'ébullition : 211°C Koc : 118 L/kg Log Kow : 1,86 Etat physique à température ambiante : liquide
PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE Liste commune ATSDR/OMS/US EPA		CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS) 0 tonnes (La production d'aniline a lieu principalement en Belgique et en Allemagne)	
MESURES DU POLLUANT		METHODES DE MESURES EXISTANTES (NIOSH)	
Mesuré par des AASQA : Non Mesuré par des laboratoires : Non		Méthode 2005, Issue 3 : chromatographie en phase gazeuse avec détecteur à ionisation de flamme	
DONNEES SANITAIRES			
VTR disponible(s) : Chronique : RfC: 9E-3 mg/m3 (US EPA, 2009) Inhalation Unit Risk : • 4E-5 (µg/m3) ⁻¹ (US EPA, 2009)		<ul style="list-style-type: none"> • Cancérogénicité : 2 (ECHA), 2B (CIRC), Likely to be carcinogenic to humans (US EPA), A3 (ACGIH), 3B (MAK), Reasonably anticipated to be a human carcinogen (NTP) • Mutagénicité : non classé (ECHA) • Reprotoxicité : 1B (ECHA) • Perturbateur endocrinien : Non évalué (BKH, DHI) • Autres classifications CLP : Acute Tox. 1 ; STOT RE 1 	
SIRIS			
Rang SIRIS : 2 Critères :			
Classe 1	Classification CMR	2 catégorie 1A ou 1B	
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	21,95 jours	
	Toxicité chronique	STOT RE 1	
Classe 3	Volatilité	Polluant semi-volatil	
	Classification PE	Non évalué	

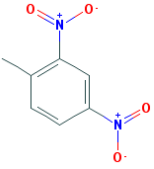
		PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (INERIS, PUBCHEM)	USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (ENVIRONMENT CANADA, US EPA)													
 <chem>C2H6N2O</chem>		<u>Poids moléculaire</u> : 74.083 g/mol <u>Densité</u> : 1.0048 à 20°C <u>Solubilité dans l'eau</u> : 1000mg/mL à 24°C <u>Pression de vapeur</u> : 360 Pa à 20°C <u>Constante de Henry</u> : $1,08 \cdot 10^{-6}$ atm.m ³ /mole <u>Température d'ébullition</u> : 151°C <u>Koc</u> : 22.79 L/Kg <u>Log Kow</u> : -0,57 <u>Etat physique à température ambiante</u> : liquide	<u>Usages</u> : Le N-nitrosodiméthylamine est principalement utilisé à des fins de recherche. Il était autrefois utilisé dans la production de carburants de fusées, d'antioxydants, d'additifs pour lubrifiants et d'adoucisateurs pour des copolymères. <u>Sources</u> : Le N-nitrosodiméthylamine peut être formé suite à des processus biologiques et chimiques ou photochimiques. Il peut se former dans l'air durant la nuit par une réaction entre le diméthylamine et les NOx. Il peut être également être fabriqué industriellement en faisant réagir des amines et des nitrites. Il est souvent produit de manière non intentionnelle.													
IDENTITE N°CAS : 62-75-9 <u>Synonymes</u> : - Diméthylnitrosamine - NDMA - DMNA <u>Famille chimique</u> : Nitrosamine																
Présence sur la liste socle Liste commune ATSDR/OMS/US EPA			CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS) 0 tonnes Cette nitrosamine, n'est pas utilisée comme telle dans l'industrie mais elle est émise en très faible quantité lors de la mise en œuvre d'agents précurseurs dans différents procédés													
MESURES DU POLLUANT		METHODES DE MESURES EXISTANTES (NIOSH, OSHA)														
<u>Mesuré par des AASQA</u> : Non <u>Mesuré par des laboratoires</u> : Non		<ul style="list-style-type: none"> • <u>Méthode NIOSH 2522, Issue 2</u> : chromatographie en phase gazeuse avec analyseur d'énergie thermique. • <u>Méthode OSHA 06</u> : chromatographie en phase gazeuse avec détection par chimioluminescence • <u>Méthode OSHA 27</u> : chromatographie en phase gazeuse avec analyseur d'énergie thermique. 														
DONNEES SANITAIRES																
<u>VTR disponible(s)</u> : Chronique: Inhalation Unit Risk : <ul style="list-style-type: none"> • 0,002 (µg/m³)⁻¹ (US EPA, 1987) • 0,0046 (µg/m³)⁻¹ (OEHHA, 1999) 		<ul style="list-style-type: none"> • <u>Cancérogénicité</u> : 1B (ECHA), 2A (CIRC), B2 (US EPA, 1986), A3 (ACGIH), 2 (MAK), Reasonably anticipated to be a human carcinogen (NTP) • <u>Mutagénicité</u> : non classé (ECHA) • <u>Reprotoxicité</u> : non classé (ECHA) • <u>Perturbateur endocrinien</u> : non évalué (BKH, DHI) • <u>Autres classifications CLP</u> : Acute Tox. 2 ; STOT RE 1 														
SIRIS																
<u>Rang SIRIS</u> : 3 <u>Critères</u> :																
	<table border="1"> <tr> <td>Classe 1</td> <td>Classification CMR</td> <td>1 Catégorie 1A ou 1B</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 2</td> <td>Demi-vie dans l'atmosphère</td> <td>2,11 jours</td> </tr> <tr> <td>Toxicité chronique</td> <td>STOT RE 1</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 3</td> <td>Volatilité</td> <td>Polluant volatil</td> </tr> <tr> <td>Classification PE</td> <td>Non évalué</td> </tr> </table>	Classe 1	Classification CMR	1 Catégorie 1A ou 1B	Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	2,11 jours	Toxicité chronique	STOT RE 1	Classe 3	Volatilité	Polluant volatil	Classification PE	Non évalué		
Classe 1	Classification CMR	1 Catégorie 1A ou 1B														
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	2,11 jours														
	Toxicité chronique	STOT RE 1														
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil														
	Classification PE	Non évalué														

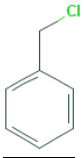
4		CHLOROFORME	
 <chem>CHCl3</chem>		PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (INERIS, PUBCHEM)	
IDENTITE		USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (INERIS)	
<p><u>N°CAS</u> : 67-66-3 <u>Synonymes</u> :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Trichlorométhane - Methyl trichloride - TCM <p><u>Famille chimique</u> : Composé organique volatil</p>		<p><u>Usages</u> :</p> <p>Le chloroforme est principalement utilisé dans la fabrication du HCFC-22. Il sert également de solvant dans la préparation de médicaments, pesticides et arômes, mais aussi comme solvant d'extraction de la quinine, de la nicotine, et du caprolactame.</p> <p><u>Sources</u> :</p> <p>Le chloroforme est présent naturellement dans l'environnement. Il pourrait être produit par l'oxydation du chlorure de méthyle produit par l'activité des algues dans l'eau de mer. Il peut être produit involontairement lors de la désinfection de l'eau, et peut être présent dans les effluents de papeterie. Il peut être produit industriellement par chloration directe du méthane.</p>	
PRESENCE SUR LA LISTE SOCLE		CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)	
<ul style="list-style-type: none"> • Mesuré par les AASQA • Liste commune ATSDR/OMS/US EPA 		Environ 30 000 tonnes	
MESURES DU POLLUANT		METHODES DE MESURES EXISTANTES (NIOSH, OSHA)	
<p><u>Mesuré par des AASQA</u> : Oui <u>Mesuré par des laboratoires</u> : Non</p>		<ul style="list-style-type: none"> • <u>Méthode OSHA 05</u> : chromatographie en phase gazeuse avec détecteur à ionisation de flamme • <u>Méthode NIOSH 1003</u> : chromatographie en phase gazeuse avec détecteur à ionisation de flamme 	
DONNEES SANITAIRES			
<p><u>VTR disponible(s)</u> :</p> <p>VTR : 0,63 µg/m³ (Anses, 2009) MRL : 0,02 ppm (ATSDR, 1997) REL : 300 µg/m³ (OEHHA, 2000) TCA : 100 µg/m³ (RIVM, 2001) CT: 0,14 mg/m³ (OMS CICAD, 2004)</p> <p>Inhalation Unit Risk : 5,3E-6 (µg/m³)-1 (OEHHA, 1990) 2,3E-5 (µg/m³)-1 (US EPA, 2001)</p>		<ul style="list-style-type: none"> • <u>Cancérogénicité</u> : 2 (ECHA), Non évalué (CIRC), Likely to be carcinogenic to humans (US EPA, 1999), A3 (ACGIH), 4 (MAK), Reasonably anticipated to be a human carcinogen (NTP) • <u>Mutagénicité</u> : non classé (ECHA) • <u>Reprotoxicité</u> : 2 (ECHA) • <u>Perturbateur endocrinien</u> : non évalué (BKH, DHI) • <u>Autres classifications CLP</u> : Skin Irrit. 2 ; Eye Irrit. 2 ; Acute Tox. 3 ; STOT RE 1 	
SIRIS			
<p><u>Rang SIRIS</u> : 4 <u>Critères</u> :</p>			
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B + 1 catégorie 2	
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	50,24 jours	
Classe 2	Toxicité chronique	STOT RE 1	
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil	
Classe 3	Classification PE	Non évalué	

5		BROMODICHLOROMETHANE														
 <chem>CHBrCl2</chem>		PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (INERIS, PUBCHEM)														
IDENTITE		USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (PUBCHEM, ICS, ATSDR)														
<p>N°CAS : 75-27-4</p> <p>Synonymes :</p> <ul style="list-style-type: none"> - BDCM - Dichlorobromométhane - Monobromodichlorométhane <p>Famille chimique : Composé organique volatil</p>		<p>Usages : Il était autrefois utilisé comme retardateur de flamme et comme solvant. Il est désormais utilisé uniquement comme réactif ou comme intermédiaire de réaction.</p> <p>Sources : Il est principalement formé de manière non intentionnelle lors de la chloration de l'eau. Une faible quantité est formée naturellement par les algues dans les océans.</p>														
PRESENCE SUR LA LISTE SOCLE		CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)														
Liste commune ATSDR/OMS/US EPA		Aucune donnée disponible														
MESURES DU POLLUANT		METHODES DE MESURES EXISTANTES (SOURCE)														
Mesuré par des AASQA : Mesuré par des laboratoires :		Plusieurs méthodes de mesures existent pour l'analyse du bromodichlorométhane dans l'eau, les déchets solides ou les tissus biologiques. Aucune méthode de mesure dans l'air n'a cependant été recensée pour ce polluant.														
DONNEES SANITAIRES																
VTR disponible(s) : <ul style="list-style-type: none"> • Aucune VTR disponible 		<ul style="list-style-type: none"> • Cancérogénicité : 1B (Notification, ECHA), non évalué (CIRC), B2 (US EPA, 1986), non évalué (ACGIH), 2 (MAK), reasonably anticipated to be a human carcinogen (NTP) • Mutagénicité : 1B (Notification, ECHA) • Reprotoxicité : 1A (Notification, ECHA) • Perturbateur endocrinien : Non évalué (BKH, DHI) • Autres classifications CLP (Notifications): Skin Irrit2. ; Eye Dam. 1 ; Acute Tox. 4 ; STOT SE 3 														
SIRIS																
Rang SIRIS : 5 Critères :																
<table border="1"> <tbody> <tr> <td>Classe 1</td> <td>Classification CMR</td> <td>2 catégories 1A ou 1B</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 2</td> <td>Demi-vie dans l'atmosphère</td> <td>68,18 jours</td> </tr> <tr> <td>Toxicité chronique</td> <td>Non classé</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 3</td> <td>Volatilité</td> <td>Polluant volatil</td> </tr> <tr> <td>Classification PE</td> <td>Non évalué</td> </tr> </tbody> </table>				Classe 1	Classification CMR	2 catégories 1A ou 1B	Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	68,18 jours	Toxicité chronique	Non classé	Classe 3	Volatilité	Polluant volatil	Classification PE	Non évalué
Classe 1	Classification CMR	2 catégories 1A ou 1B														
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	68,18 jours														
	Toxicité chronique	Non classé														
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil														
	Classification PE	Non évalué														

6			EPICHLOROHYDRINE															
 <chem>C3H5ClO</chem>		PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (INERIS, PUBCHEM)		USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (US EPA, PUBCHEM)														
IDENTITE		<p><u>N°CAS</u> : 106-89-8</p> <p><u>Synonymes</u> :</p> <ul style="list-style-type: none"> - 1-chloro-2,3-époxypropane - Chlorure de glycidyl - 2-(chloromethyl)oxirane <p><u>Famille chimique</u> : Composé organochloré</p>		<p><u>Usages</u> :</p> <p>L'épichlorohydrine est principalement utilisée dans la production de résines époxy. Elle est également utilisée dans la synthèse de la glycérine, de textiles, du papier, d'encre ...</p> <p><u>Sources</u> :</p> <p>L'épichlorohydrine est préparée industriellement par chloration à haute température du propylène en chlorure d'allyle, suivie d'une chlorohydratation avec de l'acide hypochloreux pour former des isomères de dichlorohydrines glycérol. Le mélange est ensuite déshydrochloré avec un alcali pour donner l'épichlorohydrine.</p>														
PRESENCE SUR LA LISTE SOCLE		<p><u>Poids moléculaire</u> : 92,522 g/mol</p> <p><u>Densité</u> : 1,175 à 25°C</p> <p><u>Solubilité dans l'eau</u> : $6,59 \cdot 10^{-4}$ mg/L à 25°C</p> <p><u>Pression de vapeur</u> : 10 mmHg à 25°C</p> <p><u>Constante de Henry</u> : $3,0 \cdot 10^{-5}$ atm/m³/mol</p> <p><u>Température d'ébullition</u> : 117,9°C</p> <p><u>Koc</u> : 1 L/kg</p> <p><u>Log Kow</u> : 0,45</p> <p><u>Etat physique à température ambiante</u> : liquide</p>		CONSUMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS) Aucune donnée disponible														
Liste commune ATSDR/OMS/US EPA																		
MESURES DU POLLUANT		METHODES DE MESURES EXISTANTES (CIRC)																
<p><u>Mesuré par des AASQA</u> : Non</p> <p><u>Mesuré par des laboratoires</u> : Non</p>		Une méthode de détermination colorimétrique dans des échantillons d'air utilisant de l'acide chromotropique après oxydation au periodate a été décrite dans la littérature.																
DONNEES SANITAIRES																		
<p><u>VTR disponible(s)</u> :</p> <p>Chronique: RfC: 0,001 mg/m³ (US EPA, 1992) REL: 3µg/m³ (OEHHA, 2001)</p> <p>Inhalation Unit Risk :</p> <ul style="list-style-type: none"> • 2,3e-05 (µg/m³)⁻¹ (OEHHA, 1999) • 1,2e-06 (µg/m³)⁻¹ (US EPA, 1988) 		<ul style="list-style-type: none"> • <u>Cancérogénicité</u> : 1B (ECHA), 2A (CIRC), B2 (US EPA, 1986), A3 (ACGIH), 2 (MAK), reasonably anticipated to be a human carcinogen (NTP) • <u>Mutagénicité</u> : non classé (ECHA) • <u>Reprotoxicité</u> : non classé (ECHA) • <u>Perturbateur endocrinien</u> : Catégorie 1 (BKH, 2002) • <u>Autres classifications CLP</u> : Skin Corr. 1B ; Skin Sens. 1 ; Acute Tox. 3 																
SIRIS																		
<p><u>Rang SIRIS</u> : 6</p> <p><u>Critères</u> :</p>																		
<table border="1"> <tbody> <tr> <td>Classe 1</td> <td>Classification CMR</td> <td>1 catégorie 1A ou 1B</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 2</td> <td>Demi-vie dans l'atmosphère</td> <td>9,477 jours</td> </tr> <tr> <td>Toxicité chronique</td> <td>Non classé</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 3</td> <td>Volatilité</td> <td>Polluant volatil</td> </tr> <tr> <td>Classification PE</td> <td>Catégorie 1 (BKH, 2002)</td> </tr> </tbody> </table>		Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B	Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	9,477 jours	Toxicité chronique	Non classé	Classe 3	Volatilité	Polluant volatil	Classification PE	Catégorie 1 (BKH, 2002)				
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B																
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	9,477 jours																
	Toxicité chronique	Non classé																
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil																
	Classification PE	Catégorie 1 (BKH, 2002)																

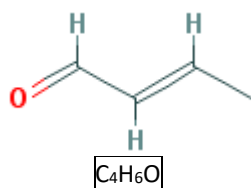
7		ACRYLAMIDE														
 <chem>C3H5NO</chem>	PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (INERIS)		USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (PUBCHEM, SANTE CANADA)													
	IDENTITE N°CAS : 79-06-1 Synonymes : - 2-Propenamamide - prop-2-enamide - Amide acrylique Famille chimique : Composé organique semi-volatil		Poids moléculaire : 71,09 g/mol Densité : 1,13 Solubilité dans l'eau : 2155 mg/L Pression de vapeur : 0,9 PA Constante de Henry : 2.97e-05 Pa.m3/mol Température d'ébullition : 196.38°C Koc : 0,2 L/kg Log Kow : -0,67 Etat physique à température ambiante : solide	Usages : Intermédiaire de réaction dans la synthèse de composés organiques et de polyacrylamides. Egalement utilisé comme floculant pour le traitement des eaux usées, dans l'industrie du papier, du textile, ... Sources : Formation à partir d'ingrédients naturels de certains aliments cuits à haute température, comme les frites et les croustilles. Egalement présent dans la fumée de cigarette.												
PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE		CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)														
Liste commune ATSDR/OMS/US EPA		Environ 13 000 tonnes														
MESURES DU POLLUANT		METHODES DE MESURES EXISTANTES (INRS, 2007)														
Mesuré par des AASQA : NON Mesuré par des laboratoires : NON		<ul style="list-style-type: none"> Prélèvement par barbotage dans l'eau. Dosage par chromatographie en phase liquide avec détection UV. Prélèvement au travers d'un échantillonne comprenant un filtre en fibre de verre et deux plages de résine XAD-7. Désorption dans un mélange de méthanol et d'eau. Dosage par chromatographie en phase liquide avec détection UV. Prélèvement au travers d'un tube rempli de deux plages de résine XAD-2 étuvée. Désorption par un mélange de méthanol et de toluène. Dosage par chromatographie en phase gazeuse avec détection thermo-ionique. 														
DONNEES SANITAIRES																
VTR disponible(s) : RfC : 0,006 mg/m ³ (US EPA, 2010) Inhalation Unit Risk : <ul style="list-style-type: none"> 0,0013 (µg/m³)⁻¹ (OEHHA, 1999) 0,0001 (µg/m³)⁻¹ (US EPA, 2010) 		<ul style="list-style-type: none"> Cancérogénicité : 1B (ECHA), 2A (CIRC), Likely to be carcinogenic to humans (US EPA), A3 (ACGIH), 2 (MAK), RAHC (NTP) Mutagénicité : 1B (ECHA) Reprotoxicité : 2 (ECHA) Perturbateur endocrinien : Non évalué (BKH, DHI) Autres classifications CLP : Skin Irrit. 2 ; Eye Irrit. 2 ; Skin Sens. 1 ; Acute Tox. 3 ; STOT RE 1 														
SIRIS																
Rang SIRIS : 7 Critères :																
<table border="1"> <tbody> <tr> <td>Classe 1</td> <td>Classification CMR</td> <td>1 catégorie 1A ou 1B + 1 catégorie 2</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 2</td> <td>Demi-vie dans l'atmosphère</td> <td>0,477 jours</td> </tr> <tr> <td>Toxicité chronique</td> <td>STOT RE 1</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 3</td> <td>Volatilité</td> <td>Polluant semi-volatil</td> </tr> <tr> <td>Classification PE</td> <td>Non évalué</td> </tr> </tbody> </table>		Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B + 1 catégorie 2	Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	0,477 jours	Toxicité chronique	STOT RE 1	Classe 3	Volatilité	Polluant semi-volatil	Classification PE	Non évalué		
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B + 1 catégorie 2														
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	0,477 jours														
	Toxicité chronique	STOT RE 1														
Classe 3	Volatilité	Polluant semi-volatil														
	Classification PE	Non évalué														

8		2,4-DINITROTOLUENE	
 <chem>C7H6N2O4</chem>	PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (INERIS, PUBCHEM)		USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (PUBCHEM, US EPA)
	IDENTITE N°CAS : 121-14-2 Synonymes : - 2,4-DNT - 2,4-dinitrométhylbenzène - 2,4-dinitrotoluol Famille chimique : Composé explosif		Poids moléculaire : 182,135 g/mol Densité : 1,52 g/cm ³ Solubilité dans l'eau : 200 mg/L à 25°C Pression de vapeur : 0,10 Pa à 25°C Constante de Henry : 5,4.10 ⁻⁸ atm.m ³ /mol à 25°C Température d'ébullition : 300°C Koc : 118,74 L/kg Log Kow : 1,98 Etat physique à température ambiante : Solide (cristaux jaunes)
PRESENCE SUR LA LISTE SOCLE Liste commune ATSDR/OMS/US EPA		CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS) Environ 100 000 tonnes	
MESURES DU POLLUANT		METHODES DE MESURES EXISTANTES (OSHA)	
Mesuré par des AASQA : Non Mesuré par des laboratoires : Non		Méthode OSHA 44 : chromatographie en phase gazeuse à l'aide d'un analyseur d'énergie thermique (TEA) équipé d'un logiciel d'analyse des explosifs (EAP).	
DONNEES SANITAIRES			
VTR disponible(s) : Chronique: Inhalation Unit Risk : • 8,9 (µg/m ³) ⁻¹ (OEHHA, 1999)		<ul style="list-style-type: none"> • Cancérogénicité : 1B (ECHA), 2B (CIRC), Non évalué (US EPA), Non évalué (ACGIH), Non évalué (MAK), Non classé(NTP) • Mutagénicité : 2 (ECHA) • Reprotoxicité : 2 (ECHA) • Perturbateur endocrinien : Non évalué (BKH, DHI) • Autres classifications CLP : Acute Tox.3 ; STOT RE 2 	
SIRIS			
Rang SIRIS : 8 Critères :			
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B + 1 catégorie 2	
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	24,816 jours	
	Toxicité chronique	STOT RE 2	
Classe 3	Volatilité	Polluant semi-volatil	
	Classification PE	STOT RE 2	

9		CHLORURE DE BENZYLE	
 <chem>C7H7Cl</chem>		PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (PUBCHEM, INERIS)	USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (PUBCHEM)
IDENTITE		<u>Poids moléculaire</u> : 126,583 g/mol <u>Densité</u> : 1,10 à 20°C <u>Solubilité dans l'eau</u> : 525mg/L à 25°C <u>Pression de vapeur</u> : 135 Pa à 25°C <u>Constante de Henry</u> : 4,1.10 ⁻⁴ atm.m ³ /mol <u>Température d'ébullition</u> : 174°C <u>Koc</u> : 100 L/kg <u>Log Kow</u> : 2,30 <u>Etat physique à température ambiante</u> : Liquide	<u>Usages</u> : Le chlorure de benzyle est utilisé comme intermédiaire de réaction dans la fabrication de colorant, de médicaments, de parfums et d'arômes. Il est également comme révélateur photographique.
<u>N°CAS</u> : 100-44-7 <u>Synonymes</u> : - 2-Propenamamide - alpha-Chlorotoluène - Amide acrylique <u>Famille chimique</u> : halogénure aromatique			<u>Sources</u> : Fabriqué industriellement par la chloration thermique ou photochimique du toluène à 65-100°C
PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE			CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)
Liste commune ATSDR/OMS/US EPA		Environ 8000 tonnes	
MESURES DU POLLUANT		METHODES DE MESURES EXISTANTES (NIOSH, OSHA)	
<u>Mesuré par des AASQA</u> : Non <u>Mesuré par des laboratoires</u> : Non		<ul style="list-style-type: none"> <u>Méthode NIOSH 1003, Issue 3</u> : chromatographie en phase gazeuse avec détecteur à ionisation de flamme <u>Méthode OSHA 07</u> : chromatographie en phase gazeuse avec détecteur à ionisation de flamme 	
DONNEES SANITAIRES			
<u>VTR disponible(s)</u> : Aucune VTR disponible		<ul style="list-style-type: none"> <u>Cancérogénicité</u> : 1B (ECHA), 2A (CIRC), B2 (US EPA, 1986), A3 (ACGIH), 1 (MAK), non classé (NTP) <u>Mutagénicité</u> : non classé (ECHA) <u>Reprotoxicité</u> : non classé (ECHA) <u>Perturbateur endocrinien</u> : non évalué (BKH, DHI) <u>Autres classifications CLP</u> : Skin Irrit. 2 ; Eye Dam. 1 ; Acute Tox. 3 ; STOT SE 3 ; STOT RE 2 	
SIRIS			
<u>Rang SIRIS</u> : 9 <u>Critères</u> :			
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B	
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	2,26 jours	
	Toxicité chronique	STOT RE 2	
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil	
	Classification PE	Non évalué	

10

ALDEHYDE CROTONIQUE



IDENTITE

N°CAS : 4170-30-3

Synonymes :

- 1-formylpropene
- 2-butenaldehyde
- crotonaldehyde

Famille chimique : composé organique volatil

PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE

Mesuré par des AASQUA

MESURES DU POLLUANT

Mesuré par des AASQA : Oui

Mesuré par des laboratoires : Non

PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES
(PUCHEM, INERIS)

Poids moléculaire : 70,091 g/mol

Densité : 0,869 à 20°C

Solubilité dans l'eau : 1,81.10⁵ mg/L à 20°C

Pression de vapeur :

Constante de Henry : 1,96.10⁻⁵ atm.m³/mol

Température d'ébullition : 102,2°C

Koc : 6

Log Kow : 0,6

Etat physique à température ambiante :

Liquide

USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION
(PUBCHEM)

Usages : Intermédiaire de synthèse

Sources :

Production industrielle par réaction aldolique de l'acétaldéhyde suivie de la déshydratation de l'acétaldol et distillation.

CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005
(INRS)

0 tonne

Aucune consommation identifiée en France.

METHODES DE MESURES EXISTANTES (US EPA, NIOSH)

- Méthode NIOSH 2539 : Chromatographie en phase gazeuse, détecteur à ionisation de flamme et chromatographie en phase gazeuse / spectrométrie de masse
- Méthode NIOSH 3516 : polarographie impulsionnelle différentielle
- Méthode OSHA 81 : Chromatographie en phase liquide à haute performance avec détection ultraviolette

DONNEES SANITAIRES

VTR disponible(s) :

- Absence de VTR par inhalation


- Cancérogénicité : non classé (ECHA), 3 (CIRC), non évalué (US EPA), A3 (ACGIH), 3B (MAK), non évalué (NTP)
- Mutagénicité : 2 (ECHA)
- Reprotoxicité : non classé (ECHA)
- Perturbateur endocrinien : non évalué (BKH, DHI)
- Autres classifications CLP : Skin irrit. 2 ; Eye Dam. 1 ; Acute Tox. 2 ; STOT SE 3 ; STOT RE 2

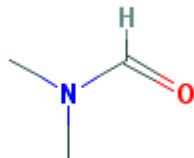
SIRIS

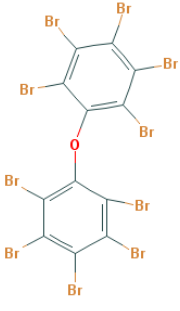
Rang SIRIS : 10

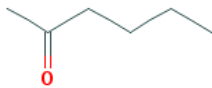
Critères :

Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	3,547 jours
	Toxicité chronique	STOT RE 2
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil
	Classification PE	STOT RE 2

11		BROMOMETHANE	
		PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (INERIS, PUBCHEM)	USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (PUBCHEM, INRS)
IDENTITE		<u>Poids moléculaire</u> : 94,939 g/mol <u>Densité</u> : 1,73 <u>Solubilité dans l'eau</u> : 15,200 mg/mL à 25°C <u>Pression de vapeur</u> : 212 000 Pa à 25°C <u>Constante de Henry</u> : 7,34.10 ⁻³ atm.m3/mol <u>Température d'ébullition</u> : 3,5°C <u>Koc</u> : 158,5 L/kg <u>Log Kow</u> : 1,94 <u>Etat physique à température ambiante</u> : Gazeux	<u>Usages</u> : Utilisation comme fongicide, insecticide, nématocide, herbicide et rodenticide. Il est utilisé en France comme agent de fumigation pour le traitement de certaines cultures et le traitement de certaines denrées <u>Sources</u> : Fabriqué industriellement par estérification du bromure d'hydrogène.
PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE			CONSUMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)
Liste commune ATSDR/OMS/US EPA			Environ 100 tonnes
MESURES DU POLLUANT			METHODES DE MESURES EXISTANTES (NIOSH, OSHA)
<u>Mesuré par des AASQA</u> : Non <u>Mesuré par des laboratoires</u> : Non		<ul style="list-style-type: none"> <u>Méthode NIOSH 2520, issue 2</u> : chromatographie en phase gazeuse couplée à un détecteur d'émission atomique <u>Méthode OSHA PV2040</u> : chromatographie en phase gazeuse utilisant un détecteur à ionisation de flamme 	
DONNEES SANITAIRES			
<u>VTR disponible(s)</u> : Chronique: <ul style="list-style-type: none"> MRL : 0,005 ppm (ATSDR, 1992) REL: 5mg/m3 (OEHHA, 2000) RfC : 0,005 mg/m3 (US EPA, 1992) 		<ul style="list-style-type: none"> <u>Cancérogénicité</u> : non classé (ECHA), 3 (CIRC), D (US EPA, 1986), A4 (ACGIH), 3B (MAK), non classé (NTP) <u>Mutagénicité</u> : 2 (ECHA) <u>Reprotoxicité</u> : non classé (ECHA) <u>Perturbateur endocrinien</u> : Catégorie 2 (BKH, DHI, 1999) <u>Autres classifications CLP</u> : Skin Irrit. 2 ; Eye Irrit. 2 ; Acute Tox. ; STOT RE 2 	
SIRIS			
<u>Rang SIRIS</u> : 11 <u>Critères</u> :			
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 2	
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	140,441 jours	
	Toxicité chronique	STOT RE 2	
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil	
	Classification PE	Catégorie 2	

PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (PUCBHEM, INERIS)		USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (SOURCE)													
 <p><chem>C3H7NO</chem></p> <p>IDENTITE</p> <p>N°CAS : 68-12-2 Synonymes : - Dimethyl formamide - DMFA - N-Formyldiméthylamine</p> <p>Famille chimique : formamides</p> <p>PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE</p> <p>Liste commune ATSDR/OMS/US EPA</p> <p>MESURES DU POLLUANT</p> <p>Mesuré par des AASQA : Non Mesuré par des laboratoires : Non</p>	<p>Poids moléculaire : 73,095 g/mol Densité : 0,9445 à 25°C Solubilité dans l'eau : 1000000 mg/L Pression de vapeur : 465 Pa à 25°C Constante de Henry : 7.39X10-8 atm.m3/mol Température d'ébullition : 153°C Koc : 3,78 L/kg Log Kow : -0,85 Etat physique à température ambiante : liquide</p>	<p>Usages : Principalement utilisé comme solvant.</p> <p>Sources : Produit industriellement par la réaction du CO et du diméthylamine dans des conditions de pression et de température appropriées.</p> <p>CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)</p> <p>Environ 4000 tonnes</p>													
	METHODES DE MESURES EXISTANTES (SOURCE)														
<p>Méthode NIOSH 2004, Issue 2 : chromatographie en phase gazeuse avec détecteur à ionisation de flamme</p>															
DONNEES SANITAIRES															
<p>VTR disponible(s) :</p> <p>Chronique:</p> <ul style="list-style-type: none"> REL: 15mg/m3 (OEHHA, 2001) RfC : 0,03 mg/m3 (US EPA, 1990) CT : 0,1 mg/m3 (OMS CICAD, 2001) 	<ul style="list-style-type: none"> Cancérogénicité : non classé (ECHA), 2A (CIRC), non évalué (US EPA), A4 (ACGIH), non évalué (MAK), non évalué (NTP) Mutagénicité : non classé (ECHA) Reprotoxicité : 1B (ECHA) Perturbateur endocrinien : Catégorie 3B (BKH, 2002) Autres classifications CLP : Eye Irrit. 2 ; Acute Tox. 4 														
SIRIS															
<p>Rang SIRIS : 12</p> <p>Critères :</p> <table border="1"> <tbody> <tr> <td>Classe 1</td> <td>Classification CMR</td> <td>2 catégorie 1A ou 1B</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 2</td> <td>Demi-vie dans l'atmosphère</td> <td>0,305 jours</td> </tr> <tr> <td>Toxicité chronique</td> <td>Non classé</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 3</td> <td>Volatilité</td> <td>Polluant volatil</td> </tr> <tr> <td>Classification PE</td> <td>Catégorie 3B</td> </tr> </tbody> </table>			Classe 1	Classification CMR	2 catégorie 1A ou 1B	Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	0,305 jours	Toxicité chronique	Non classé	Classe 3	Volatilité	Polluant volatil	Classification PE	Catégorie 3B
Classe 1	Classification CMR	2 catégorie 1A ou 1B													
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	0,305 jours													
	Toxicité chronique	Non classé													
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil													
	Classification PE	Catégorie 3B													

13	BDE 209														
 <p style="text-align: center;">C₁₂Br₁₀O</p>	<p style="text-align: center;">PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (SOURCE)</p> <p>Poids moléculaire : 959,171 g/mol Densité : 3,4 Solubilité dans l'eau : <math>< 1,0 \cdot 10^{-4}</math> mg/L à 25°C Pression de vapeur : 0,00 PA Constante de Henry : 1,2.10-8 atm.m3/mol Température d'ébullition : 425°C Koc : 150 900L/kg Log Kow : 6,27 Etat physique à température ambiante : solide</p>	<p style="text-align: center;">USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (SOURCE)</p> <p><u>Usages :</u> Utilisé dans la fabrication de textiles, de cuir, de plastique et de caoutchouc</p> <p><u>Sources :</u> Le décabromobiphényl'éther peut être préparé à pression atmosphérique en faisant réagir du brome avec de l'éther phénylique dans un solvant de dibromure d'éthylène et en présence de bromure d'aluminium.</p> <p style="text-align: center;">CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)</p> <p>Aucune donnée disponible</p>													
IDENTITE															
<p>N°CAS : 1163-19-5 <u>Synonymes :</u> - Decabromodiphenyl ether - 1,1'-Oxybis(2,3,4,5,6-pentabromobenzene) - Bis(pentabromophenyl)ether - <u>Famille chimique :</u> retardateur de flamme</p>															
PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE															
Mesuré par des laboratoires															
MESURES DU POLLUANT															
METHODES DE MESURES EXISTANTES (NIOSH)															
<p>Mesuré par des AASQA : Non <u>Mesuré par des laboratoires :</u> Oui</p>															
DONNEES SANITAIRES															
<p><u>VTR disponible(s) :</u></p> <ul style="list-style-type: none"> Absence de VTR par inhalation 	<ul style="list-style-type: none"> <u>Cancérogénicité :</u> non classé (ECHA, notification), 3 (CIRC), Suggestive of carcinogenic potential (US EPA, 2005), non évalué (ACGIH), non évalué (MAK), non classé (NTP) <u>Mutagénicité :</u> 2 (ECHA, notification) <u>Reprotoxicité :</u> 1B (ECHA, notification) <u>Perturbateur endocrinien :</u> non évalué (BKH, DHI) <u>Autres classifications CLP (notification):</u> Skin irrit. 2 ; Eye irrit. 2 ; Acute tox. 4 ; STOT RE 2 														
SIRIS															
<p><u>Rang SIRIS :</u> 13 <u>Critères :</u></p> <table border="1" data-bbox="327 1760 1270 1944"> <tbody> <tr> <td style="background-color: #d9534f; color: white;">Classe 1</td> <td>Classification CMR</td> <td>1 catégorie 1A ou 1B + 1 Catégorie 2</td> </tr> <tr> <td rowspan="2" style="background-color: #d9534f; color: white;">Classe 2</td> <td>Demi-vie dans l'atmosphère</td> <td>158,77 jours</td> </tr> <tr> <td>Toxicité chronique</td> <td>STOT RE 2</td> </tr> <tr> <td rowspan="2" style="background-color: #d9534f; color: white;">Classe 3</td> <td>Volatilité</td> <td>Polluant non volatil</td> </tr> <tr> <td>Classification PE</td> <td>Non évalué</td> </tr> </tbody> </table>			Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B + 1 Catégorie 2	Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	158,77 jours	Toxicité chronique	STOT RE 2	Classe 3	Volatilité	Polluant non volatil	Classification PE	Non évalué
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B + 1 Catégorie 2													
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	158,77 jours													
	Toxicité chronique	STOT RE 2													
Classe 3	Volatilité	Polluant non volatil													
	Classification PE	Non évalué													

C₆H₁₂O

IDENTITE

N°CAS : 591-78-6

Synonymes :

- Hexan-2-one
- Butyl-methyl ketone
- Propylacétone

Famille chimique : composé organique volatil

PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE

Liste commune ATSDR/OMS/US EPA

PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES
(PUBCHEM, INERIS)

Poids moléculaire : 100,161 g/mol
 Densité : 0,81
 Solubilité dans l'eau : 1,72.10⁴ mg/L à 20°C
 Pression de vapeur : 1810 Pa à 25°C
 Constante de Henry : 9,3.10⁻⁵ atm.m³/mole
 Température d'ébullition : 127,2°C
 Koc : 134
 Log Kow : 1,38
 Etat physique à température ambiante : liquide

USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION
(INRS, PUBCHEM)

Usages : solvant de laboratoire

Sources : Le 2-hexanone peut être fabriqué avec un rendement de 75%, par réaction du chlorure d'acétyle avec le butylmagnésium.

CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005
(INRS)

Moins d'une tonne

MESURES DU POLLUANT

METHODES DE MESURES EXISTANTES (NIOSH)

Mesuré par des AASQA : Non
 Mesuré par des laboratoires : Non

- Méthode NIOSH 1300 : chromatographie en phase gazeuse couplée à un détecteur à ionisation de flamme

DONNEES SANITAIRES

VTR disponible(s) :

Chronique:

RfC: 0,03 mg/m³ (US EPA, 2009)

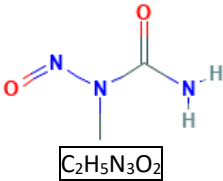
- Cancérogénicité : non classé (ECHA), non évalué (CIRC), Inadequate information to assess carcinogenic potential (US EPA, 2005), non classé (ACGIH), non évalué (MAK), non évalué (NTP)
- Mutagénicité : non classé (ECHA)
- Reprotoxicité : 2 (ECHA)
- Perturbateur endocrinien : non évalué (BKH, DHI)
- Autres classifications CLP : STOT SE 3 ; STOT RE 1

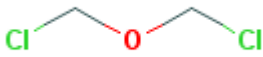
SIRIS

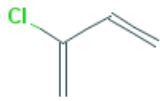
Rang SIRIS : 14

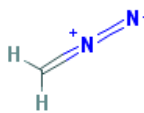
Critères :

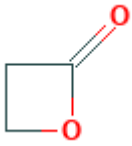
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 2
	Demi-vie dans l'atmosphère	0,791 jours
Classe 2	Toxicité chronique	STOT RE 1
	Volatilité	Polluant volatil
Classe 3	Classification PE	Non évalué

PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (PUBCHEM)		USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (PUBCHEM)
 <p><chem>C2H5N3O2</chem></p>		<p><u>Usages :</u> Auparavant utilisé pour la synthèse du diazométhane dans les laboratoires.</p> <p><u>Sources :</u> Produit industriellement en faisant réagir l'acide nitrique avec une solution de nitratede méthylurée.</p>
<p>IDENTITE</p> <p>N°CAS : 684-93-5 <u>Synonymes :</u> - 2-Propenamidine - prop-2-enamide - Amide acrylique</p> <p>Famille chimique : Nitrosourees</p>		
<p>PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE</p> <p>Liste commune ATSDR/OMS/US EPA</p>		<p>CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)</p> <p>Aucune donnée disponible</p>
MESURES DU POLLUANT	METHODES DE MESURES EXISTANTES (US EPA)	
<p><u>Mesuré par des AASQA :</u> Non <u>Mesuré par des laboratoires :</u> Non</p>	<ul style="list-style-type: none"> Chromatographie en phase liquide haute performance 	
DONNEES SANITAIRES		
<p><u>VTR disponible(s) :</u></p> <p>Chronique: Absence de VTR par inhalation</p>	<ul style="list-style-type: none"> <u>Cancérogénicité :</u> 1B (ECHA, notification), 2A (CIRC), Non évalué (US EPA), non évalué (ACGIH), non évalué (MAK), reasonably anticipated to be a human carcinogen (NTP) <u>Mutagénicité :</u> non classé (ECHA, notification) <u>Reprotoxicité :</u> 1B (ECHA, notification) <u>Perturbateur endocrinien :</u> non évalué (BKH, DHI) <u>Autres classifications CLP :</u> Acute Tox. 3 	
SIRIS		
<p><u>Rang SIRIS :</u> 15 <u>Critères :</u></p>		
Classe 1	Classification CMR	2 Catégorie 1A ou 1B
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	3,433 jours
	Toxicité chronique	Non classé
Classe 3	Volatilité	Polluant Semi-volatil
	Classification PE	Non évalué

ETHER DICHLORODIMETHYLIQUE		
 <chem>C2H4Cl2O</chem>	PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (PUBCHEM, INERIS)	
IDENTITE	USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (PUBCHEM, US EPA) <u>Usages</u> : Utilisé dans le passé pour la chlorométhylation et comme agent d'alkylation dans la fabrication de polymère. IL est encore utilisé comme réactif dans les laboratoires de recherche. <u>Sources</u> : Peut être produit en saturant une solution de paraformaldehyde dans l'acide sulfurique froid avec du chlorure d'hydrogène.	
N°CAS : 542-88-1 <u>Synonymes</u> : - bis(chloromethyl) ether - BCME - Oxybis(chlorométhane) <u>Famille chimique</u> : Nitrosamine	Poids moléculaire : 114,953 g/mol Densité : 1,32 Solubilité dans l'eau : 1020 mg/L à 25°C Pression de vapeur : 3850 Pa à 25°C Constante de Henry : ----- Température d'ébullition : 106°C Koc : ----- Log Kow : 10,04 Etat physique à température ambiante : liquide	
PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE	CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)	
Liste commune ATSDR/OMS/US EPA	0 tonne Aucune consommation identifiée en France	
MESURES DU POLLUANT	METHODES DE MESURES EXISTANTES (CIRC, NIOSH, US CDC)	
<u>Mesuré par des AASQA</u> : Non <u>Mesuré par des laboratoires</u> : Non	<ul style="list-style-type: none"> • Spectrométrie de masse haute résolution (CIRC) • Désorption avec de l'hélium à travers la colonne de chromatographie gazeuse. Mesure par spectroscopie de masse (NIOSH, US EPA) 	
DONNEES SANITAIRES		
<u>VTR disponible(s)</u> : Subchronique: MRL : 0,0003 ppm (ATSDR, 1989) Chronique: Inhalation Unit Risk : <ul style="list-style-type: none"> • 9,4 (mg/m³)⁻¹ (Santé Canada, 2010) • 0,062 (µg/m³)⁻¹ (US EPA, 1988) • 0,013 (µg/m³)⁻¹ (OEHHA, 1999) 	<ul style="list-style-type: none"> • <u>Cancérogénicité</u> : 1A (ECHA), 1 (CIRC), A (US EPA, 1986), A1 (ACGIH), 1 (MAK), known (NTP) • <u>Mutagénicité</u> : non classé (ECHA) • <u>Reprotoxicité</u> : non classé (ECHA) • <u>Perturbateur endocrinien</u> : non évalué (BKH, DHI) • <u>Autres classifications CLP</u> : Acute tox. 2 	
SIRIS		
<u>Rang SIRIS</u> : 16 <u>Critères</u> :		
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	7,53 jours
Classe 2	Toxicité chronique	Non classé
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil
Classe 3	Classification PE	Non évalué

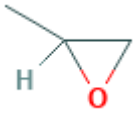
PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (PUBCHEM, INERIS)		USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (INERIS)													
 <chem>C4H5Cl</chem>		<p><u>Usages :</u> Utilisé comme intermédiaire chimique (production de polychloroprène, d'adhésifs, de caoutchoucs ...)</p> <p><u>Sources :</u> Le butadiène est converti en monomère 2-chloro 1,3-butadiène (chloroprène) par l'intermédiaire du 3.4-dichloro1-butène. Il est ensuite possible de le polymériser par des techniques de catalyse anionique, cationique et de Ziegler-Natta.</p>													
<p>IDENTITE</p> <p>N°CAS : 126-99-8 <u>Synonymes :</u> - Chlorobutadiene; - 2-Cloro-1,3-butadiene</p>															
<p>PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE</p> <p>Liste commune ATSDR/OMS/US EPA</p>		<p>CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)</p> <p>Environ 40 000 tonnes</p>													
MESURES DU POLLUANT		METHODES DE MESURES EXISTANTES (US EPA, NIOSH)													
<p><u>Mesuré par des AASQA :</u> Non <u>Mesuré par des laboratoires :</u> Non</p>		<ul style="list-style-type: none"> <u>Méthode OSW 0031 et 8240B :</u> Méthode d'échantillonnage pour les composés organiques volatils. Détermination des composés organiques volatils par chromatographie en phase gazeuse / spectrométrie de masse (GC / MS) <u>Méthode NIOSH 1005 :</u> Chromatographie en phase gazeuse avec détecteur à ionisation de flamme. 													
DONNEES SANITAIRES															
<p><u>VTR disponible(s) :</u></p> <p>Chronique: RfC: 0,02 mg/m³ (US EPA, 2010)</p> <p>Inhalation Unit Risk :</p> <ul style="list-style-type: none"> 0,0003 (µg/m³)⁻¹ (US EPA, 2010) 		<ul style="list-style-type: none"> <u>Cancérogénicité :</u> 1B (ECHA), 2B (CIRC), Likely to be carcinogenic to humans (US EPA, 2005), non classé (ACGIH), 2 (MAK), RAHC (NTP) <u>Mutagénicité :</u> non classé (ECHA) <u>Reprotoxicité :</u> non classé (ECHA) <u>Perturbateur endocrinien :</u> non évalué (BKH, DHI) <u>Autres classifications CLP :</u> Skin irrit. 2 ; Eye irrit. 2 ; Acute tox. 4 ; STOT SE 3; STOT RE 2 													
SIRIS															
<p><u>Rang SIRIS :</u> 17 <u>Critères :</u></p> <table border="1"> <tbody> <tr> <td>Classe 1</td> <td>Classification CMR</td> <td>1 catégorie 1A ou 1B</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 2</td> <td>Demi-vie dans l'atmosphère</td> <td>0,243 jours</td> </tr> <tr> <td>Toxicité chronique</td> <td>STOT RE 2</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 3</td> <td>Volatilité</td> <td>Polluant volatil</td> </tr> <tr> <td>Classification PE</td> <td>Non évalué</td> </tr> </tbody> </table>			Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B	Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	0,243 jours	Toxicité chronique	STOT RE 2	Classe 3	Volatilité	Polluant volatil	Classification PE	Non évalué
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B													
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	0,243 jours													
	Toxicité chronique	STOT RE 2													
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil													
	Classification PE	Non évalué													

PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (INERIS, PUBCHEM)		USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (PUBCHEM)													
 <p>CH₂N₂</p>		<p><u>Usages</u> : Le diazométhane est utilisé comme agent de méthylation pour les composés acides tels que les acides carboxyliques, les phénols et les énols.</p> <p><u>Sources</u> : Réaction du n-nitrosométhyl-p-toluènesulfonamide avec un alcali tel que l'hydroxyde de potassium ou le carbonate de potassium.</p>													
<p>IDENTITE</p> <p>N°CAS : 334-88-3</p> <p><u>Synonymes</u> :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aziméthylène - Diazirine - Diazonium méthylide - <p>Famille chimique : composés organiques volatils</p>															
<p>PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE</p> <p>Liste commune ATSDR/OMS/US EPA</p>		<p>CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)</p> <p>0 tonne Aucune consommation identifiée en France</p>													
<p>MESURES DU POLLUANT</p> <p>Mesuré par des AASQA : Non Mesuré par des laboratoires : Non</p>		<p>METHODES DE MESURES EXISTANTES (SOURCE)</p> <ul style="list-style-type: none"> • <u>Méthode NIOSH 2515</u> : Chromatographie en phase gazeuse avec détecteur à ionisation de flamme 													
<p>DONNEES SANITAIRES</p>															
<p><u>VTR disponible(s)</u> :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Absence de VTR par inhalation 		<ul style="list-style-type: none"> • <u>Cancérogénicité</u> : 1B (ECHA), 3 (CIRC), non évalué (US EPA), A2 (ACGIH), 2 (MAK), non évalué (NTP) • <u>Mutagénicité</u> : non classé (ECHA) • <u>Reprotoxicité</u> : non classé (ECHA) • <u>Perturbateur endocrinien</u> : non évalué (BKH, DHI) • <u>Autres classifications CLP</u> : non classé 													
<p>SIRIS</p>															
<p><u>Rang SIRIS</u> : 18</p> <p><u>Critères</u> :</p> <table border="1"> <tbody> <tr> <td>Classe 1</td> <td>Classification CMR</td> <td>1 catégorie 1A ou 1B</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 2</td> <td>Demi-vie dans l'atmosphère</td> <td>5,726 jours</td> </tr> <tr> <td>Toxicité chronique</td> <td>Non classé</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">Classe 3</td> <td>Volatilité</td> <td>Polluant volatil</td> </tr> <tr> <td>Classification PE</td> <td>Non évalué</td> </tr> </tbody> </table>			Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B	Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	5,726 jours	Toxicité chronique	Non classé	Classe 3	Volatilité	Polluant volatil	Classification PE	Non évalué
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B													
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	5,726 jours													
	Toxicité chronique	Non classé													
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil													
	Classification PE	Non évalué													

19 BETA-PROPIOLACTONE		
 <chem>C3H4O2</chem>	PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (PUBCHEM, INERIS)	USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (PUBCHEM)
IDENTITE	<u>Poids moléculaire</u> : 72,063 g/mol <u>Densité</u> : 1,146 <u>Solubilité dans l'eau</u> : 390 g/L à 25°C <u>Pression de vapeur</u> : 305 Pa à 25°C <u>Constante de Henry</u> : --- <u>Température d'ébullition</u> : 155°C <u>Koc</u> : --- <u>Log Kow</u> : 0,462 <u>Etat physique à température ambiante</u> : liquide	<u>Usages</u> : La bêta-propiolactone est utilisée pour les vaccins, les greffes de tissus, les instruments chirurgicaux et les enzymes, comme stérilisant du plasma sanguin, de l'eau, du lait et du bouillon nutritif, et comme désinfectant en phase vapeur dans les espaces fermés. Son action sporicide est utilisée contre les bactéries végétatives, les champignons pathologiques et les virus. La bêta-propiolactone est également utilisée comme intermédiaire chimique. <u>Sources</u> : Préparer par la consensation du ketene avec du formaldéhyde
N°CAS : 57-57-8 <u>Synonymes</u> : - 1,3-Propiolactone - prop-2-enamide - Beta-BPL <u>Famille chimique</u> : lactones		
PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE		CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)
Liste commune ATSDR/OMS/US EPA		Moins de 0,1 tonne
MESURES DU POLLUANT	METHODES DE MESURES EXISTANTES (ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY)	
<u>Mesuré par des AASQA</u> : Non <u>Mesuré par des laboratoires</u> : Non	Propanolide est déterminé dans l'air en utilisant la chromatographie en phase gazeuse / détection d'ionisation de flamme	
DONNEES SANITAIRES		
<u>VTR disponible(s)</u> : <ul style="list-style-type: none"> Absence de VTR par inhalation 	<ul style="list-style-type: none"> <u>Cancérogénicité</u> : 1B (ECHA), non évalué (CIRC), non évalué (US EPA), A3 (ACGIH), 2 (MAK), RAHC (NTP) <u>Mutagénicité</u> : non classé (ECHA) <u>Reprotoxicité</u> : non classé (ECHA) <u>Perturbateur endocrinien</u> : non évalué (BKH, DHI) <u>Autres classifications CLP</u> : Skin irrit. 2 ; Eye Irrit. 2 ; Acute Tox. 2 	
SIRIS		
<u>Rang SIRIS</u> : 19 <u>Critères</u> :		
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	8,705 jours
	Toxicité chronique	Non classé
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil
	Classification PE	Non évalué

20

OXYDE DE PROPYLENE

		PROPRIETES PHYSICOCHIMIQUES (SOURCE)	USAGES ET SOURCES D'EXPOSITION (SOURCE)	
 <chem>C3H6O</chem>		<p>Poids moléculaire : 58,08 g/mol Densité : 0,83 Solubilité dans l'eau : 590 000 mg/L à 25°C Pression de vapeur : 70900 Pa à 25°C Constante de Henry : $6,96 \cdot 10^{-5}$ atm.m³/mol Température d'ébullition : 34°C Koc : 25 Log Kow : 0,06 Etat physique à température ambiante : Liquide</p>	<p><u>Usages</u> : L'utilisation principale de l'oxyde de propylène est dans la production de polyéthers et de propylène glycol. Il est également dans la fumigation des aliments et des instruments médicaux en plastique.</p> <p><u>Sources</u> : Fabrication industrielle par action du KOH sur la chlorhydrine du propylène.</p>	
IDENTITE			CONSOMMATION GLOBALE EN FRANCE EN 2005 (INRS)	
<p>N°CAS : 75-56-9 Synonymes : - 1,2-Epoxypropane - Methyloxirane</p> <p>Famille chimique : Composés organiques volatils</p>			<p>Environ 75 000 tonnes</p>	
PRESENCE DANS LA LISTE SOCLE				
Liste commune ATSDR/OMS/US EPA				
MESURES DU POLLUANT		METHODES DE MESURES EXISTANTES (SOURCE)		
<p>Mesuré par des AASQA : Non Mesuré par des laboratoires : Non</p>		<p><u>Méthode NIOSH 1612</u> : Chromatographie en phase gazeuse, détecteur d'ionisation de flamme hydrogène-air</p>		
DONNEES SANITAIRES				
<p>VTR disponible(s) :</p> <p>Chronique: RfC: 0,03 mg/m³ (US EPA, 1991) REL : 30 µg/m³ (OEHHA, 2000)</p> <p>Inhalation Unit Risk :</p> <ul style="list-style-type: none"> • 3,7e-06 (µg/m³)⁻¹ (OEHHA, 1999) • 3,7e-06 (µg/m³)-1 (US EPA, 1999) 		<ul style="list-style-type: none"> • <u>Cancérogénicité</u> : 1B (ECHA), 2B (CIRC), B2 (US EPA, 1986), A3 (ACGIH), 4 (MAK), RAHC (NTP) • <u>Mutagénicité</u> : 1B (ECHA) • <u>Reprotoxicité</u> : non classé (ECHA) • <u>Perturbateur endocrinien</u> : non évalué (BKH, DHI) • <u>Autres classifications CLP</u> : Eye Irrit. 2 ; Acute Tox. 3 ; STOT SE 3 		
SIRIS				
<p>Rang SIRIS : 20 Critères :</p>				
Classe 1	Classification CMR	1 catégorie 1A ou 1B		
Classe 2	Demi-vie dans l'atmosphère	8,935 jours		
	Toxicité chronique	Non classé		
Classe 3	Volatilité	Polluant volatil		
	Classification PE	Non évalué		

La pollution de l'air ambiant est une problématique majeure de santé publique. Elle contribuerait chaque année à plusieurs centaines de milliers de décès prématurés. La mise en œuvre de politiques publiques en faveur de l'amélioration de la qualité de l'air pour la protection de la santé des populations est une priorité, en témoigne le récent communiqué du Ministre de l'Environnement suite à la publication de l'avis de l'Anses sur l'identification et la priorisation des polluants atmosphériques non réglementés.

Saisie par la DGS, la DGEC et la DGPR, l'Anses a publié en juin 2018 un rapport visant à dresser un état des lieux des polluants chimiques de l'air ambiant non réglementés à ce jour par les directives 2004/107/CE et 2008/50/CE mais constituant un intérêt au regard de leur impact potentiel sur la santé ou l'environnement. Cette expertise souligne l'intérêt de surveiller certains polluants, et le besoin d'acquisition de données concernant un large nombre de polluants. Le stage s'inscrit dans la suite des recommandations établies par le CES « Air » dans ce rapport. L'objectif est de proposer une méthode de hiérarchisation pour les polluants des catégories 2a et 2b, catégories qui n'ont pas pu être traitées par le GT dans le cadre de ses travaux.

Les polluants de la catégorie 2a sont des polluants pour lesquels des données d'exposition sont disponibles mais qui ne sont classés ni CMR, ni PE et qui ne possèdent pas de VTR. Pour 31 d'entre eux, il a été possible de construire une VTi, pour ensuite les hiérarchiser en calculant un score de risque. Ces scores étant tous très inférieurs à 1, il est préconisé de recatégoriser ces 31 polluants dans la catégorie 3 : « polluants non prioritaires pour une surveillance ». Trois polluants bénéficient de données toxicologiques suffisantes pour la construction de VTR, toutefois les scores de risques étant très faibles, l'intérêt de cette construction semble très limité pour une problématique de qualité de l'air ambiant. Pour les 35 polluants ne disposant pas de données sanitaires de qualité suffisante à l'élaboration d'une VTi, il est recommandé d'effectuer une veille scientifique et de conduire des études toxicologiques.

Les polluants de la catégorie 2b sont des polluants peu ou pas recherchés en France ou à l'étranger et donc pour lesquels il n'existe pas suffisamment de données de concentrations dans l'air ambiant. Ces polluants ont été hiérarchisés en utilisant la méthode SIRIS sur la base de trois critères sanitaires et de deux critères d'exposition : la classification CMR, la classification PE, la toxicité chronique, la demi-vie dans l'atmosphère et la volatilité. À l'issue de la hiérarchisation, les 20 premiers polluants ont été sélectionnés pour une étude plus approfondie. Des fiches d'information sur ces polluants ont été réalisées et leur probabilité d'occurrence dans l'air a été estimée. Il en résulte les recommandations suivantes :

- Le chloroforme, le bromodichlorométhane et le bromométhane ayant des sources naturelles, et le N-nitrosodiméthylamine étant un polluant secondaire, des campagnes de mesures de fond peuvent être envisagées ;
- Une attention particulière devra être portée au BDE 209, listé à l'annexe A de la Convention de Stockholm sur les POP, la réalisation d'une campagne de mesure de fond peut également être envisagée afin de déterminer son occurrence depuis son interdiction ;
- L'épichlorohydrine, l'acrylamide, le 2,4-dinitroluène, le chlorure de benzyle, le N,N-diméthylformamide, le 2-hexanone, le chloroprène, le beta-propiolactone et l'oxyde de propylène

n'ayant que des sources anthropiques, des études de filières devraient être réalisées pour identifier les sites les plus pertinents pour une campagne de mesure ;

- Le 1,2-dibromo-3-chloropropane, le nitrobenzène, l'aldéhyde crotonique, le N-méthyl-n-nitrosourée, l'éther dichlorométhylique et le diazométhane ayant une probabilité d'occurrence moyenne ou faible dans l'air, des études de filières devraient être réalisées afin de déterminer leurs usages et lieux de production en France.

Un travail similaire devrait être conduit sur les autres polluants de la catégorie 2b à l'issue des études menées sur les 20 premiers polluants. Celui-ci devra intégrer les nouvelles données disponibles issues de la veille scientifique afin de mettre à jour le classement.

N° d'identification :

TITRE

Hierarchisation de polluants non réglementés dans l'air ambiant

Thèse soutenue le mardi 30 juin 2020

Par Thibault MANSUY

6. RESUME :

La pollution atmosphérique étant une problématique majeure de santé publique, l'Anses a été saisie par la DGS, la DGEC et la DGPR pour dresser un état des lieux des polluants chimiques de l'air ambiant non réglementés. Ce stage s'inscrit dans les suites des recommandations établies par le CES « air » et a pour objectif de proposer une méthode de hiérarchisation pour les polluants des catégories 2a et 2b. Pour la catégorie 2a, les polluants ne sont pas classés CMR ou PE mais disposent de données de mesure dans l'air ambiant. Trente et un d'entre eux bénéficient de données suffisantes à la construction de VTi et ont pu être hiérarchisés après calcul d'un score de risque. Compte-tenu de la faible valeur de celui-ci, une recatégorisation de ces 31 polluant en catégorie 3 peut être envisagée. Les 35 polluants pour lesquels la construction d'une VTi n'a pas été possible devraient quant à eux faire l'objet d'une veille scientifique et d'études toxicologiques. Les polluants de la catégorie 2b quant à eux sont peu ou pas recherchés en France et à l'étranger. Il n'existe donc pas suffisamment de données de concentrations dans l'air ambiant les concernant. Ils ont été hiérarchisés en utilisant la méthode SIRIS : il s'agit d'une méthode multicritères basée sur le calcul de pénalités en partant d'une situation idéale. Les critères utilisés pour la hiérarchisation sont les suivants : les classifications CMR, PE et STOT RE, la demi-vie dans l'atmosphère et la volatilité. Les 20 premiers polluants du classement ont fait l'objet d'une analyse approfondie concernant notamment leurs sources et utilisations. En résulte différentes recommandations selon leur probabilité d'occurrence dans l'air : la réalisation de campagnes de mesures de fond ou la réalisation d'études de filières pour préciser l'origine de ces polluants. Un exercice similaire devra être réalisé sur les autres polluants une fois les études sur le TOP 20 terminées. Celui-ci devra intégrer les nouvelles données disponibles issues de la veille scientifique.

MOTS CLES : Hierarchisation, pollution atmosphérique, polluants non réglementés, santé publique

Directeur de thèse	Intitulé du laboratoire	Nature
M. Luc FERRARI		Expérimentale <input type="checkbox"/> Bibliographique <input checked="" type="checkbox"/> Thème <input type="checkbox"/>

Thèmes
1 – Sciences fondamentales
3 – Médicament
5 - Biologie

2 – Hygiène/Environnement
4 – Alimentation – Nutrition
6 – Pratique professionnelle

DEMANDE D'IMPRIMATUR

Date de soutenance : 30/06/2020

DIPLOME D'ETAT DE DOCTEUR EN PHARMACIE

présenté par : M. THIBAUT MANSUY

Sujet : Hiérarchisation de polluant non réglementés dans
l'air ambiant

Jury :

Président : M. BERTRAND RIHN, Professeur des Universités,
Médecin

Directeur : M. LUC FERRARI, Professeur des Universités

Juges : MME. EMMANUELLE DURAND, Pharmacien
M. OLIVIER BLANCHARD, Enseignant Chercheur

Vu,

Nancy, le 26-05-2020

Le Président du Jury

Directeur de Thèse

Professeur B. RIHN

M. FERRARI LUC

Vu et approuvé,

Nancy, le 2 juin 2020

Doyen de la Faculté de Pharmacie
de l'Université de Lorraine,



Vu,

Nancy, le 10.06.2020

Le Président de l'Université de Lorraine,



N° d'enregistrement : 11181 C MANSUY