



# Banque de données sur les propriétés des substances prioritaires

Rapport technique

Ministère de l'Ecologie et du Développement Durable  
Direction de l'Eau  
20, avenue de Ségur - 75302 PARIS 07 SP

Convention DE n°CV04000107 - Thème n°3

*F. LE GOFF*

*Unité d'évaluation des risques écotoxicologiques  
Direction des Risques Chroniques*

12 JANVIER 2005

# Banque de données sur les propriétés des substances prioritaires

## Rapport technique

Ministère de l'Ecologie et du Développement Durable

Direction de l'Eau

20, avenue de Ségur - 75302 PARIS 07 SP

Convention DE n° CV04000107 - Thème 3

12 janvier 2005

*F. LE GOFF*

*Unité d'évaluation des risques écotoxicologiques*

*Direction des Risques Chroniques*

Ce document comporte 9 pages (hors couverture et annexes)

	<b>Rédaction</b>	<b>Vérification</b>	<b>Approbation</b>
<b>NOM</b>	F. LE GOFF	V. BONNOMET	N. LAHOUTIFARD
<b>Qualité</b>	Ingénieur à l'Unité Evaluation des Risques Ecotoxicologiques	Ingénieur à l'Unité Evaluation des Risques Ecotoxicologiques	Ingénieur à l'Unité Chimie Analytique et Environnementale
<b>Visa</b>			

## TABLE DES MATIERES

1. PRÉAMBULE.....	3
2. INTRODUCTION.....	4
3. IMPLÉMENTATION DES DONNÉES .....	4
4. VERSION ANGLAISE DU SITE ET MISE À JOUR .....	5
5. PROMOTION ET RÉFÉRENCEMENT DU PORTAIL SUBSTANCES CHIMIQUES .....	6
6. CONCLUSION.....	8
7. LISTE DES ANNEXES .....	9

## 1. PREAMBULE

---

Depuis plusieurs années des démarches sont engagées, par différents pays ou organisations (Union Européenne, OCDE, France - INERIS etc.), pour évaluer les risques environnementaux posés par certaines substances chimiques. Le principe général de ces études consiste à se baser sur l'état des connaissances, au niveau de l'exposition et des effets des substances, pour caractériser le risque, après validation des données utilisées par des comités d'experts.

A l'heure actuelle, diverses bases de données consultables sur Internet proposent un accès à des documents d'évaluation des risques sur les substances. Cependant les données accessibles ne concernent qu'un nombre limité de substances, étudiées dans un cadre particulier. De plus, les informations sur les propriétés physico-chimiques et écotoxicologiques apparaissent soit dans des documents différents, sur des sites différents, soit, lorsqu'elles figurent dans un même document, ne sont pas clairement mises en évidence dans le texte.

La base de données mise au point par l'INERIS vise à la valorisation des informations concernant les propriétés physico-chimiques et écotoxicologiques des substances chimiques. En effet, il est important de diffuser à un large public des données sur les substances validées par différentes instances internationales. Cette base propose ainsi :

- Le regroupement d'un grand nombre de sources de données disponibles sur les substances chimiques (dans le domaine de l'évaluation des risques). Il n'est ainsi plus nécessaire de naviguer sur différents sites pour extraire des informations des documents disponibles,
- la compilation de données, si possible validées, est présentée sous une forme condensée : création de fiches synthétiques, pour chaque substance,
- la possibilité d'obtenir des informations sur une liste précise de substances utilisée, par exemple, dans un cadre réglementaire (e. g.  $\log K_{ow}$  et PNEC pour les substances inscrites à l'annexe X de la Directive Cadre sur l'Eau),

La base de données a été mise en ligne et rendue accessible au public début décembre 2003. Elle est consultable à l'adresse suivante :

<http://chimie.ineris.fr/fr/lien/basededonnees/environnementale/presentation.php>

Au cours de l'année 2003, 300 dossiers regroupant des informations sur les substances prioritaires ont été traités de manière à proposer, sur le site Internet, un nombre de "fiches substance" correspondant.

Cette première année, qui a vu la création et la mise en ligne de la base de données, a permis de mettre à disposition du public francophone un nombre conséquent d'informations sur les substances chimiques. Cependant un travail continu d'alimentation de la base accompagné d'une activité de mise à jour des données entrées antérieurement, qui s'amplifiera avec la taille de la base, doit être mené. Ceci afin de garantir, au cours du temps, pour les utilisateurs, un niveau de validité équivalent à celui proposé lors de la mise en ligne de la base.

## 2. INTRODUCTION

---

Le travail associé à la base de données environnementales pour 2004 a été axé sur les points suivants :

- Ajout de 300 dossiers à la base de données
- Traduction du site en anglais
- Promotion et référencement du site de la base de données
- Suivi de la fréquentation du site Internet

Le bilan au 31/12/2004 est présenté dans la suite de ce rapport annuel d'activités.

## 3. IMPLEMENTATION DES DONNEES

---

L'objectif de la base de données est de fournir à un maximum d'utilisateurs un accès à des fiches synthétiques réunissant des informations<sup>1</sup> sur les substances chimiques. Ces informations proviennent de différentes sources, e. g. dossiers d'évaluation des risques de l'Union Européenne, dossiers de caractérisation des dangers de l'OCDE, monographies sur les substances chimiques réalisées à l'INERIS ou dans le cadre de la mise en œuvre de la Directive Cadre sur l'Eau, etc. Le bilan des entrées dans la base est présenté dans le Tableau 1.

Tableau 1 : bilan des entrées dans la base de données au 31/12/2004

Nombre de dossiers entrés dans la base	600
Nombre de substances différentes	554
Nombre de fiches / substances disponibles sur Internet	502

Le terme de **dossier** est utilisé pour qualifier l'ensemble des données pour une substance entrée dans la base et issu d'un dossier « original » préparé par une instance nationale ou internationale. Parfois, différents dossiers sont disponibles pour une même **substance**. Le cas échéant, un ordre de préférences a été donné de manière à ne présenter qu'une seule fiche par substance sur Internet. Ceci explique que, dans la base de données, le nombre de dossiers est supérieur au nombre de substances. Lorsqu'un dossier jugé préférable (sur des critères de pertinence et de niveau de validation définis<sup>2</sup>) est disponible pour une substance déjà intégrée à la base de données, celui-ci est ajouté et rendu public à la place du dossier préexistant.

---

<sup>1</sup> Caractéristiques physico-chimiques et écotoxicologiques déterminant le danger intrinsèque d'une substance chimique et donnant des indications sur son devenir et son comportement dans l'environnement.

<sup>2</sup> L'ordre de priorité retenu pour les dossiers est le suivant, par ordre décroissant : dossiers d'évaluation des risques Union Européenne / monographies issues du groupe de travail sur la mise en œuvre de la Directive Cadre sur l'Eau, caractérisation des dangers OCDE, rapports INERIS, etc.

Par ailleurs, certains dossiers entrés dans la base précédemment ont été par la suite retirés du site Internet car ils ne présentaient pas un niveau de validation jugé suffisant. C'est par exemple le cas des fiches de données établies pour les substances « potentiellement préoccupantes » d'OSPAR. C'est pourquoi le nombre de substances disponibles sur Internet est inférieur au nombre total de substances différentes traitées dans la base. Les données provenant des dossiers non publiés sur le site demeurent néanmoins disponibles pour toute autre utilisation qui pourrait être faite de la base.

En conclusion, l'objectif de 300 dossiers ajoutés à la base de données environnementales en 2004 a été rempli : année 2003 → 300 dossiers ; année 2004 → 600 dossiers.

#### 4. VERSION ANGLAISE DU SITE ET MISE A JOUR

La version anglaise du « Portail Substances Chimiques » a été mise en ligne mi-septembre (voir Figure 1).

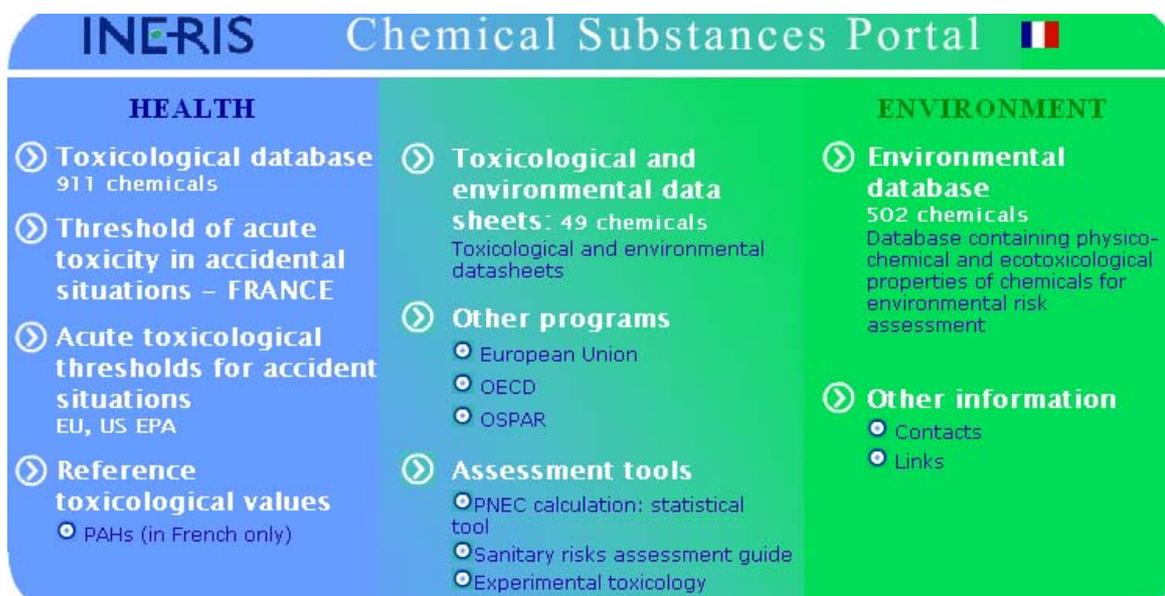


Figure 1 : page d'accueil de la version anglaise du Portail Substances Chimiques <http://chimie.ineris.fr/en/index.php>

Toutes les fiches synthétiques rassemblant les informations sur les substances chimiques sont désormais disponibles en anglais (voir un exemple de fiche en annexe).

Les pages du site Internet ainsi que la documentation de la base de données ont été traduites. Ces éléments ont également fait l'objet de mises à jour (voir documents guides de la base de données en annexe). On dénombre en effet, pour l'année 2004, plus de 70 modifications plus ou moins importantes d'éléments de la base de données et du site Internet de manière à répondre à des utilisations diverses de cet outil.

## 5. PROMOTION ET REFERENCEMENT DU PORTAIL SUBSTANCES CHIMIQUES

---

Le site <http://chimie.ineris.fr> a été mis en ligne en décembre 2003. Depuis, il a été référencé sur différents moteurs de recherche couramment utilisés par les internautes recherchant des informations sur un sujet précis, à l'aide de mots-clés. Le Tableau 2 présente la place occupée par le site de la base de données dans les réponses fournies par les moteurs de recherche après la saisie de mots-clés spécifiques.

Tableau 2 : position du site de la base de données environnementales lors de recherches sur Internet (bilan au 18/11/04)

Mots-clés	www.google.fr	www.free.fr	www.yahoo.fr
Base données écotoxicologie	3	3	-
Données substances chimiques	2	2	-
Environnement substances chimiques	5	5	-
Base données environnementales	1	1	-
Classification substances chimiques	7	8	-
Base données substances	4	5	-
PNEC substances chimiques	1	1	12

Même si la version anglaise du site n'a été mise en ligne qu'à la fin de l'année 2004, des recherches standards par mots-clés anglais sur les principaux moteurs de recherches fournissent des résultats aiguillant les utilisateurs vers ce site (voir Tableau 3).

Tableau 3 : position du site de la base de données environnementales lors de recherches en langue anglaise sur Internet (bilan au 18/11/04)

Mots-clés	www.google.fr	www.free.fr
PNEC chemical substances	3	3
Ecotoxicological properties chemicals	12	12

Un suivi de la **fréquentation** du site Internet a été mis en place dès sa mise en ligne de manière à quantifier les accès par les utilisateurs. Le graphique suivant (Figure 2) montre l'évolution du nombre de visites<sup>3</sup> mensuel depuis décembre 2003 (1<sup>ère</sup> mise en ligne du site).

---

<sup>3</sup> On entend par visite la connexion à une page du site Internet par un utilisateur. Un seul accès étant comptabilisé pour un même utilisateur, quel que soit le nombre d'accès réalisé dans la journée.

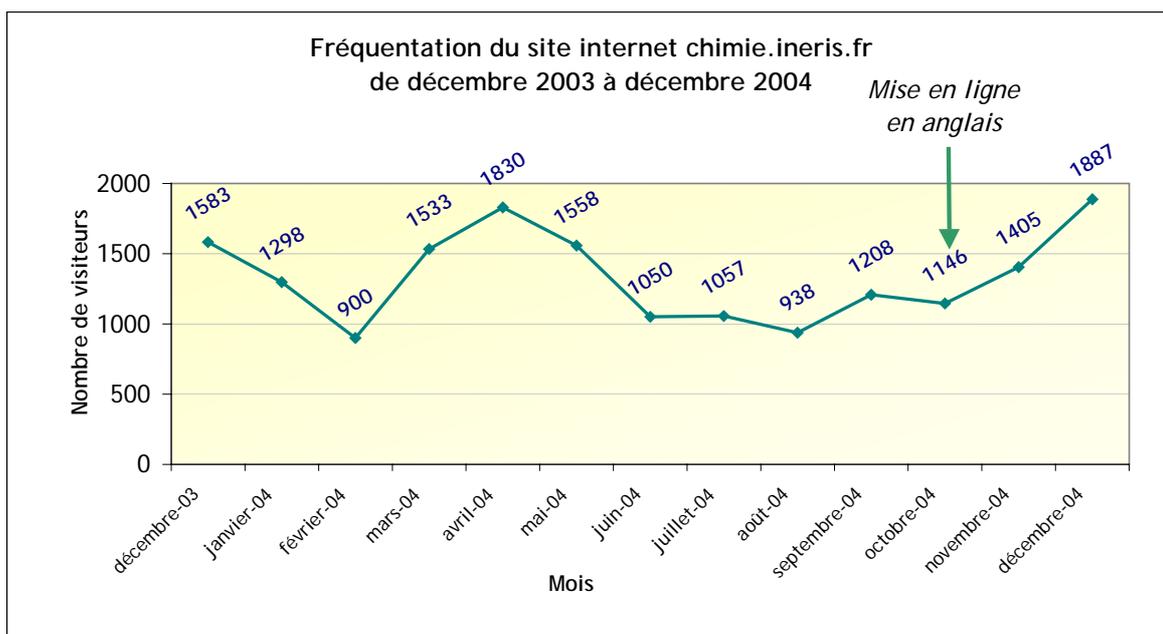


Figure 2 : fréquentation mensuelle du Portail Substances Chimiques

Le nombre de téléchargements du document guide de la base de données environnementales permet de quantifier l'intérêt des utilisateurs pour cette partie du Portail Substances Chimiques. La Figure 3 représente l'évolution du nombre de téléchargements du guide de la base de données environnementales de décembre 2003 à décembre 2004.

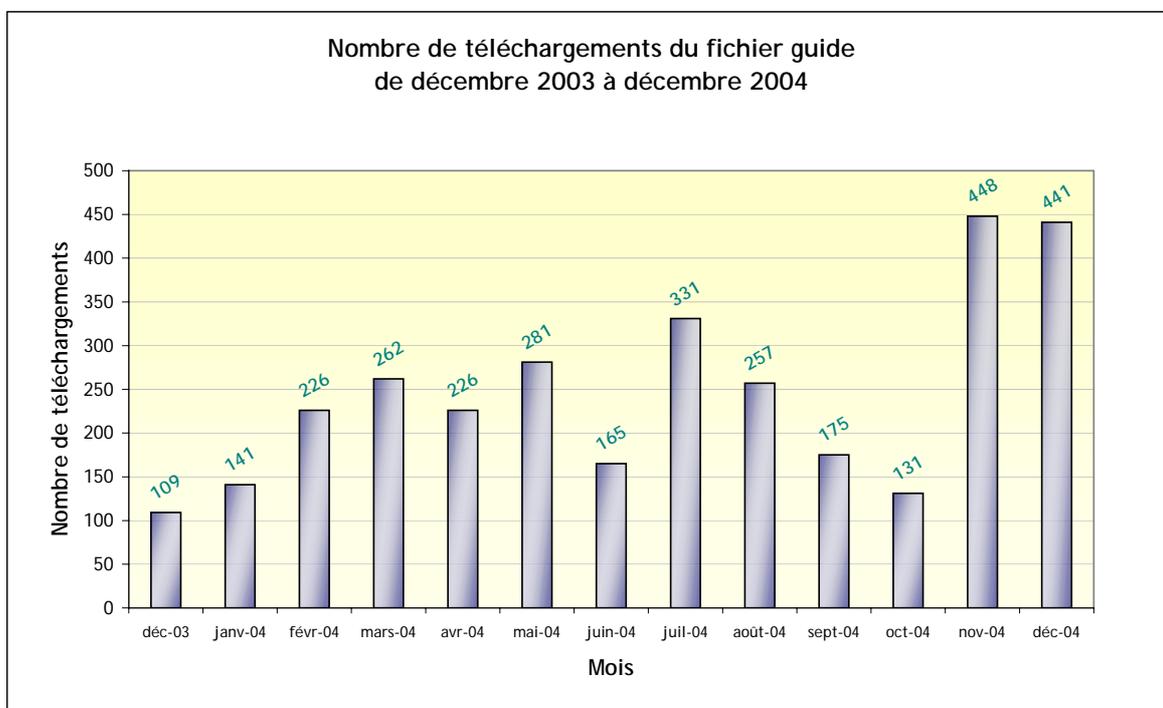


Figure 3 : téléchargements du document guide de la base de données environnementales

Cet indicateur reflète principalement le nombre d'utilisateurs total de la base de données. On peut en effet imaginer qu'un utilisateur téléchargera une fois pour toute ce guide. Si l'on suit ce raisonnement, on peut estimer à un peu plus de 3000 le nombre d'utilisateurs. Toutefois, il faut aussi considérer que le guide peut également être consulté régulièrement en ligne par un même utilisateur.

En outre, il faut noter que le guide de la base de données environnementales figure régulièrement dans les premiers documents les plus téléchargés à partir du Portail Substances Chimiques (1<sup>ère</sup> place en septembre et décembre 2004, 2<sup>ème</sup> place en mai, juillet et novembre 2004, 3<sup>ème</sup> place en mars, avril et août 2004).

Les mois de novembre et de décembre 2004 ont vu la fréquentation du site Portail Substances Chimiques s'accroître aussi bien en nombre de visites (+23% et +65% de visites en novembre et décembre par rapport au mois d'octobre) qu'en nombre de téléchargements du document guide (plus de 400 téléchargements mensuels pour les deux derniers mois de 2004). Ces augmentations coïncident avec la mise en ligne de la version anglaise du site et prouvent l'intérêt d'un public non francophone pour cet outil.

## 6. CONCLUSION

---

Après deux années d'alimentation de la base de données celle-ci rassemble désormais plus de 600 jeux de données écotoxicologiques extraits de rapports d'évaluation des risques. 502 fiches de données synthétiques ont ensuite été sélectionnées pour être mises en ligne sur le site Internet « Portail Substances Chimiques » de l'INERIS.

La particularité de cette deuxième année d'alimentation de la base réside dans le fait que la part de l'activité consacrée à la mise à jour des données entrées antérieurement devient de plus en plus importante. De nouveaux indicateurs seront donc mis en place de manière à rendre compte de ce travail de mise à jour et ainsi d'assurer aux utilisateurs de la base un contenu d'actualité :

- Indicateur 1 : nombre de nouveaux dossiers intégrés à la base.
- Indicateur 2 : nombre de dossiers mis à jour.

Les différentes activités engagées dans le but de promouvoir la base de données (référencement du site Internet) ainsi que sa mise à disposition en langue anglaise ont porté leurs fruits en entraînant une augmentation de la fréquentation du site (15 810 visites en 2004). D'autres actions (référencement, « publicité », lien avec d'autres bases de données) devront continuer à être menées de manière à augmenter encore le nombre d'utilisateurs de la base de données. De manière à rendre compte de l'activité du site, les indicateurs mis en place cette année seront maintenus.

## 7. LISTE DES ANNEXES

---

Repère	Désignation précise	Nb/N°pages
1-1 / 1-2	Exemples de la fiche du chloroforme (versions française et anglaise)	2x2 pages
2	Guide base de données environnementales : caractérisation des données (version du 14 juin 2004)	18 pages
3	Environmental database manual : data definition (14 <sup>th</sup> June 2004 version)	17 pages

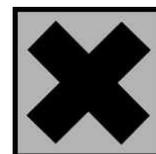
## Annexe 1-1

Exemples de la fiche du chloroforme  
(version française)

## Niveau de validation : Projet international

### Informations générales

- **Formule brute** : CHCl<sub>3</sub>
- **PBT** : ?
- **Perturbateur endocrinien** : ?
- **Classification environnementale** : NCE - **classification (suite)** : R22 R38 R40 R48/20/22 S2 S36/37 (substance inscrite à l'annexe 1 de la directive CE/67/548, 19th ATP, classification proposée : R52/53, S61.)
- **Couples catégories industrielles (IC) / catégories d'utilisation (UC)** : ?



Xn - Nocif

### Propriétés physico-chimiques

- **M (g/mol)** : 119.38
- **Densité** :
- **Pression de vapeur (Pa)** : 20900 (à 20°C)
- **log K<sub>ow</sub>** : 1.97
- **K<sub>p</sub>soil (L/kg)** : 3.7 (calculé à partir du K<sub>oc</sub> (TGD))
- **K<sub>p</sub>susp (L/kg)** : 18.5 (calculé à partir du K<sub>oc</sub> (TGD))
- **Biodégradabilité** : la substance est non biodégradable.
- **Persistance eau douce (T<sub>1/2</sub>, en j.)** :
- **Hydrolyse (T<sub>1/2</sub>, en j.)** : (le phénomène d'hydrolyse ne doit pas jouer un rôle important à pH neutre)
- **Persistance sol (T<sub>1/2</sub>, en j.)** :
- **Bioaccumulation BCF** : 13, poisson - pire cas
- **T<sub>fus</sub> (°C)** :
- **Solubilité (mg/L)** : 8700 (à 20°C)
- **Cste de Henry - H (Pa.m<sup>3</sup>/mol)** : 275 (à 20°C)
- **K<sub>oc</sub> (L/kg)** : 185
- **K<sub>p</sub>sed (L/kg)** : 9.25 (calculé à partir du K<sub>oc</sub> (TGD))
- **Persistance eau marine (T<sub>1/2</sub>, en j.)** :
- **Photolyse (T<sub>1/2</sub>, en j.)** : (le phénomène de photolyse n'est pas un processus de dégradation important)
- **Oxydation radicaux OH (T<sub>1/2</sub>, en j.)** :

## EAUX écotoxicologie

Unités, mg/L	Eau douce	Eau marine	Unités, mg/L	Eau douce	Eau marine
CL/CE50 algues	13.3	-	NOEC/CE10 algues	3.61	-
CL/CE50 invertébrés	29	0.385	NOEC/CE10 invertébrés	6.3	-
CL/CE50 poissons	18	-	NOEC/CE10 poissons	1.463	-

**Eau douce** : PNEC chronique, méthode du facteur d'extrapolation = 146 µg/L (facteur d'extrapolation = 10). Norme de qualité (NQ) pour l'eau douce (directive cadre eau). La norme de qualité environnementale globale = 12 µg/L pour la protection de l'Homme a été définie par la Directive Européenne 86/280/CEE.

**Eau marine** : PNEC chronique = 146 µg/L. Norme de qualité marine. La sensibilité des espèces marines et d'eau douce à cette substance est comparable. Aussi, NQ marine = NQ eaudouce.

## SEDIMENTS écotoxicologie

CL/CE50 organismes benthiques	-	mg/kg (pds sec)	NOEC/CE10 organismes benthiques	5.5	mg/kg (pds sec)
-------------------------------	---	-----------------	---------------------------------	-----	-----------------

**Sédiments** : PNEC chronique, méthode du facteur d'extrapolation = 55 µg/kg (pds sec) (facteur d'extrapolation = 100). Norme de qualité pour les communautés benthiques d'eau douce et d'eau de mer - directive cadre eau.

## SOL écotoxicologie

CL/CE50 µ-organismes	-	mg/kg (pds sec)	NOEC/CE10 µ-organismes	-	mg/kg (pds sec)
CL/CE50 invertébrés	-	mg/kg (pds sec)	NOEC/CE10 invertébrés	-	mg/kg (pds sec)
CL/CE50 plantes	-	mg/kg (pds sec)	NOEC/CE10 plantes	-	mg/kg (pds sec)

## MICRO-ORGANISMES écotoxicologie

Test de toxicité	-	mg/L
------------------	---	------

## Autres informations

- **Sources d'informations** : UE (non publié) - Quality Standards determination under the European Water Framework Directive. Substance Data Sheet for Chloroform, draft of 01/03/04, 16 p.

- **Date du rapport** : 01/03/2004

- **Lien(s) Internet** :

Pour information : [Fiche de données toxicologiques et environnementales \(INERIS\)](#)

## Annexe 1-2

Exemples de la fiche du chloroforme  
(version anglaise)

---

## Validation level: International draft

---

### General information

- **Chemical formula:** CHCl<sub>3</sub>
- **PBT:** ?
- **Endocrine disruptor:** ?
- **Environnemental classification: NCE - classification (continue):** R22 R38 R40 R48/20/22 S2 S36/37 (substance listed under annex 1 of the directive EC/67/548, 19th ATP ; classification proposed : R52/53, S61.)
- **Pairs industrial categories (IC) / use categories (UC):** ?



---

### Physical and chemical properties

- **M (g/mol):** 119.38
  - **Density:**
  - **Vapour pressure (Pa):** 20900 (at 20°C)
  - **log K<sub>ow</sub>:** 1.97
  - **K<sub>p soil</sub> (L/kg):** 3.7 (calculated from Koc value (TGD))
  - **K<sub>p susp</sub> (L/kg):** 18.5 (calculated from Koc value (TGD))
  - **Biodegradability:** the chemical is not biodegradable.
  - **Freshwater persistence (T<sub>1/2</sub>, in d.):**
  - **Hydrolysis (T<sub>1/2</sub>, in d.):** (hydrolysis is not an important fate process at neutral pH)
  - **Soil persistence (T<sub>1/2</sub>, in d.):**
  - **Bioaccumulation BCF:** 13, fish - worst case
  - **T<sub>fus</sub> (°C):**
  - **Solubility (mg/L):** 8700 (at 20°C)
  - **Henry's law constant H (Pa.m<sup>3</sup>/mol):** 275 (at 20°C)
  - **K<sub>oc</sub> (L/kg):** 185
  - **K<sub>p sed</sub> (L/kg):** 9.25 (calculated from Koc value (TGD))
  - **Seawater persistence (T<sub>1/2</sub>, in d.):**
  - **Photolysis (T<sub>1/2</sub>, in d.):** (photolysis is not an important removal process)
  - **Photo-oxydation with OH radicals (T<sub>1/2</sub>, in d.):**
-

---

## ***WATER ecotoxicology***

<i>Units, mg/L</i>	<b>Freshwater</b>	<b>Seawater</b>	<i>Units, mg/L</i>	<b>Freshwater</b>	<b>Seawater</b>
LC/EC50 algae	13.3	-	NOEC/EC10 algae	3.61	-
LC/EC50 invertebrates	29	0.385	NOEC/EC10 invertebrates	6.3	-
LC/EC50 fish	18	-	NOEC/EC10 fish	1.463	-

**Freshwater:** chronic PNEC, extrapolation factor method = 146 µg/L (extrapolation factor = 10). Quality standard (QS) for freshwater. The overall quality standard = 12 µg/L for the human protection was set in Council Directive 86/280/EEC.

**Seawater:** chronic PNEC = 146 µg/L. Quality Standard for seawater. Marine and freshwater species have comparable sensitivity at this substance. So, QS saltwater = QS freshwater.

---

## ***SEDIMENTS ecotoxicology***

LC/EC50 benthos organisms	-	mg/kg (dry weight)	NOEC/EC10 benthos organisms	5.5	mg/kg (dry weight)
---------------------------	---	--------------------	-----------------------------	-----	--------------------

**Sediments:** chronic PNEC, extrapolation factor method = 55 µg/kg (dry weight) (extrapolation factor = 100). Quality standard for freshwater and seawater sediment communities - Water Framework Directive.

---

## ***SOIL ecotoxicology***

LC/EC50 µ-organisms	-	mg/kg (dry weight)	NOEC/EC10 µ-organisms	-	mg/kg (dry weight)
LC/EC50 invertebrates	-	mg/kg (dry weight)	NOEC/EC10 invertebrates	-	mg/kg (dry weight)
LC/EC50 plants	-	mg/kg (dry weight)	NOEC/EC10 plants	-	mg/kg (dry weight)

---

## ***MICRO-ORGANISMS ecotoxicology***

Toxicity test	-	mg/L
---------------	---	------

---

## ***Other information***

- **Information source:** EU (unpublished) - Quality Standards determination under the European Water Framework Directive. Substance Data Sheet for Chloroform, draft of 01/03/04, 16 p.

- **Dossier's date:** 03/01/2004

- **Internet link(s):**

For information : [Toxicological and environmental data sheet \(INERIS\)](#) - in French only

---

## Annexe 2

Guide base de données environnementales :  
Caractérisation des données (version du 14 juin 2004)

# INERIS

## **Guide base de données environnementales : caractérisation des données**

François LE GOFF

*Unité « Evaluation des Risques Ecotoxicologiques »*

*Direction des Risques Chroniques*

**DERNIÈRE MISE À JOUR LE 14 JUIN 2004**

## Glossaire

BCF : BioConcentration Factor  
CAS : Chemicals Abstracts Services  
DCE : Directive Cadre Eau  
ECB : European Chemical Bureau  
EINECS : European Inventory of Existing Chemical Substances  
IC : Industrial Category  
INERIS : Institut National de l'Environnement industriel et des RISques  
JOCE : Journal Officiel de la Communauté Européenne  
MES : Matières En Suspension  
NCE : Non Classée pour l'Environnement  
NOEC : No Observed Effect Concentration / concentration sans effet observé  
OCDE : Organisation de Coopération et de Développement Economiques  
OSPAR : convention Oslo-Paris  
PBT : Persistent Bioaccumulable Toxic  
PE : Perturbateur Endocrinien  
PNEC : Predicted No Effect Concentration / concentration prédite sans effet  
PNUE : Programme des Nations Unies pour l'Environnement  
POP : Polluants Organiques Persistants  
QSAR : Quantitative Structure-Activity Relationship  
SIAR : SIDS Initial Assessment Report  
SIDS : Screening Information DataSet  
SMILES : Simplified Molecular Input Line Entry Specification  
SSD : Species Sensitivity Distribution  
STEP : stations d'épuration  
TGD : Technical Guidance Document [1]  
UC : Use Category  
UE : Union Européenne  
vPvB : very Persistent very Bioaccumulable

## Table des matières

<b>GLOSSAIRE</b>	<b>2</b>
<b>TABLE DES MATIÈRES</b>	<b>3</b>
<b>INTRODUCTION</b>	<b>4</b>
<b>1 IDENTIFICATION DE LA SUBSTANCE</b>	<b>4</b>
1.1 NOM COMMUN	4
1.2 N° CAS	4
1.3 N° EINECS	4
1.4 CODE SMILES	4
1.5 FORMULE BRUTE	4
1.6 CLASSIFICATION ENVIRONNEMENTALE	5
1.7 CLASSIFICATION	5
1.8 CLASSIFICATION PBT (PERSISTENT BIOACCUMULABLE TOXIC)	6
1.9 PERTURBATEURS ENDOCRINIENS	6
1.10 CATÉGORIES D'UTILISATION DES SUBSTANCES CHIMIQUES	6
1.10.1 Catégories industrielles (IC)	6
1.10.2 Catégories de fonctions ou d'usages (UC)	7
<b>2 RÉGLEMENTATION</b>	<b>7</b>
<b>3 PROPRIÉTÉS PHYSICO-CHIMIQUES</b>	<b>8</b>
3.1 MASSE MOLAIRE	8
3.2 POINT DE FUSION	8
3.3 DENSITÉ	8
3.4 LOG K <sub>ow</sub>	9
3.5 K <sub>oc</sub>	9
3.6 PRESSION DE VAPEUR	9
3.7 SOLUBILITÉ	9
3.8 CONSTANTE DE HENRY	9
3.9 BIODÉGRADATION	10
3.10 PERSISTANCE EAU DOUCE (ET EAU MARINE)	10
3.11 HYDROLYSE EN FONCTION DU pH	10
3.12 PHOTOLYSE (DANS L'EAU)	11
3.13 PERSISTANCE SOL	11
3.14 PHOTO OXYDATION	11
3.15 BIOCONCENTRATION (BCF)	11
3.16 COEFFICIENT DE PARTAGE EAU / SOL, SÉDIMENTS OU MATIÈRES EN SUSPENSION	12
<b>4 ECOTOXICOLOGIE : ÉVALUATION DES EFFETS</b>	<b>12</b>
4.1 INTRODUCTION	12
4.2 DÉTERMINATION DES PNEC À PARTIR DES TESTS ÉCOTOXICOLOGIQUES	12
4.3 MÉTHODE DU COEFFICIENT DE PARTAGE	13
4.4 MÉTHODE STATISTIQUE	13
4.5 DONNÉES ÉCOTOXICOLOGIQUES DE LA BASE	14
4.5.1 EAUX écotoxicologie	14
4.5.2 SEDIMENTS et SOL écotoxicologie	14
4.5.3 MICRO-ORGANISMES écotoxicologie	14
<b>5 AUTRES INFORMATIONS</b>	<b>14</b>
5.1 SOURCE D'INFORMATIONS	14
5.2 DEGRÉ DE FINALISATION	15
5.3 DATE	15
5.4 N° DE DOSSIER EUROPÉEN	15
5.5 LIENS INTERNET	15
5.6 NIVEAU DE VALIDATION	15
5.7 REMARQUES ÉVENTUELLES	15
5.8 MISE À JOUR	15
<b>RÉFÉRENCES</b>	<b>16</b>
<b>ANNEXES</b>	<b>18</b>

## Introduction

Ce document guide a été établi pour venir en appui à l'utilisation de la base de données environnementales disponible en ligne à l'adresse suivante :

<http://chimie.ineris.fr/lien/basededonnees/envirnementale/presentation.php>

Son principal objectif est d'explicitier le contenu des champs de données affichés suite à des requêtes sur la base. Ce guide est donc construit en reprenant point par point les différents types de données enregistrées et compilées.

(ce document est accessible en ligne : [http://chimie.ineris.fr/LesPDF/guide\\_fr\\_caracterisation\\_donnees.pdf](http://chimie.ineris.fr/LesPDF/guide_fr_caracterisation_donnees.pdf))

## 1 Identification de la substance

### 1.1 Nom commun

Le choix a été fait de n'identifier la substance chimique qu'avec un seul **nom**, en anglais. Il s'agit du nom couramment utilisé pour identifier la molécule.

Il faut cependant noter que, lors de la recherche sur les noms des substances, quelques synonymes entrés également dans la base de données sont passés en revue. Par contre, la liste n'étant pas exhaustive, ces synonymes n'apparaissent pas dans les résultats de recherche ni dans les fiches.

### 1.2 N° CAS

Numéro d'enregistrement des **Chemical Abstracts Services (CAS)** – [www.cas.org](http://www.cas.org).

### 1.3 N° EINECS

Numéro d'enregistrement des substances existantes au niveau européen (**European Inventory of Existing Chemical Substances**). 100 196 substances chimiques sont référencées dans cette liste.

Un outil de recherche de ces numéros d'identification est disponible sur le site de l'European Chemicals Bureau – ECB à l'adresse suivante : <http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/> sous la section EINECS Information System.

### 1.4 Code SMILES

**SMILES** est l'acronyme de Simplified Molecular Input Line Entry Specification. Ce code est utilisé comme outil de nomenclature chimique et comme format d'échange (par exemple pour renseigner des programmes informatiques) pour définir une structure moléculaire.

Pour plus d'information sur le code SMILES, se reporter au mode d'emploi en ligne (en anglais) :

<http://www.daylight.com/dayhtml/smiles/smiles-intro.html>

### 1.5 Formule brute

En chimie moléculaire, une **formule brute** est une formule qui renseigne sur la nature et le nombre des atomes qui composent une molécule. La nature des atomes est indiquée à l'aide des initiales issues du tableau périodique des éléments. On précise, en indice, le nombre de chacun de ces atomes.

## 1.6 Classification environnementale

La **classification environnementale** prise en compte est celle énoncée dans la directive du Conseil n°67/548/CE du 27 juin 1967 (et dans ses mises à jour) concernant le rapprochement des dispositions législatives, réglementaires et administratives relatives à la classification, l'emballage et l'étiquetage des substances dangereuses [7].

### Phrases de risque :

- R50 : très toxique pour les organismes aquatiques
- R51 : toxique pour les organismes aquatiques
- R52 : nocif pour les organismes aquatiques
- R53 : peut entraîner des effets néfastes à long terme pour l'environnement aquatique
- R54 : toxique pour la flore
- R55 : toxique pour la faune
- R56 : toxique pour les organismes du sol
- R57 : toxique pour les abeilles
- R58 : peut entraîner des effets néfastes à long terme pour l'environnement
- R59 : dangereux pour la couche d'ozone

### Phrases de sécurité (conseils de prudence) :

- S56 : éliminer ce produit et son récipient dans un centre de collecte des déchets dangereux ou spéciaux
- S57 : utiliser un récipient approprié pour éviter toute contamination du milieu ambiant
- S59 : consulter le fabricant/fournisseur pour des informations relatives à la récupération / au recyclage
- S60 : éliminer le produit et/ou son récipient comme un déchet dangereux
- S61 : éviter le rejet dans l'environnement : consulter les instructions spéciales / la fiche de données de sécurité

Et les indications et symboles suivants :

**N** : dangereux pour l'environnement (quand la substance est classée R50/53, R50, R51/53, R54, R55, R56, R57, R58 ou R59)



N - Dangereux pour l'environnement

**NCE** : non classée pour l'environnement

Cette indication apparaît seulement lorsque la dangerosité de la substance a été évaluée et qu'elle n'a pas entraîné la classification de la substance.

## 1.7 Classification

La base de données intègre également la classification globale d'une substance, en plus de sa classification environnementale qui fait l'objet d'une rubrique à part (Cf. rubrique précédente). La **classification** prise en compte est celle énoncée dans la directive du Conseil n°67/548/CEE du 27 juin 1967 concernant le rapprochement des dispositions législatives, réglementaires et administratives relatives à la classification, l'emballage et l'étiquetage des substances dangereuses [7].

Pour un descriptif des phrases de risque, de sécurité ainsi que de leurs combinaisons et les pictogrammes associés, se reporter au dossier en ligne de l'INRS :

[http://www.inrs.fr/htm/pictogrammes\\_pour\\_la\\_signalisation\\_sante\\_securite.html](http://www.inrs.fr/htm/pictogrammes_pour_la_signalisation_sante_securite.html).

### 1.8 Classification PBT (*Persistent Bioaccumulable Toxic*)

Les critères utilisés pour la **classification PBT** sont ceux repris par la Commission Européenne. Ils apparaissent dans le guide méthodologique européen d'évaluation des risques pour les substances chimiques [1].

**Tableau 1-1 : critères d'identification des substances PBT et vPvB**

Critères	Critères PBT	Critères very Persistent and very Bioaccumulable
<b>Persistant</b>	Demi-vie > 60 jours pour les eaux marines et > 40 jours pour les eaux douces ou demi-vie > 180 jours dans les sédiments marins ou > 120 jours dans les sédiments d'eaux douces	Demi-vie > 60 jours dans les eaux douces ou marines ou > 180 jours dans les sédiments marins ou d'eau douce
<b>Bioaccumulable</b>	BCF > 2000	BCF > 5000
<b>Toxic</b>	NOEC < 0.01 mg/L ou substance CMR (cancérogène, mutagène toxique pour la reproduction), substance à effet perturbateur endocrinien	Non applicable

### 1.9 *Perturbateurs endocriniens*

En ce qui concerne le caractère de **perturbateur endocrinien** d'une substance chimique, la classification établie au niveau européen est retenue. Plusieurs classes de substances sont avancées au sein d'une communication de la Commission Européenne [2] :

- Classe 1 : substances à effets Perturbateur Endocrinien (PE) démontrés ou potentiels, qui ne sont pas soumises à restriction et ne font pas actuellement l'objet d'un examen prévu par la législation communautaire en vigueur (9 substances).
- Classe 2 : substances à effets PE démontrés ou potentiels, qui sont déjà réglementées ou qui font actuellement l'objet d'un examen prévu par la législation en vigueur (115 substances).
- Classe 3 : substances pour lesquelles les informations sont insuffisantes pour juger du caractère PE (435 substances).
- Classe 4 : substances non considérées comme PE, d'après les informations disponibles (11 substances).

### 1.10 *Catégories d'utilisation des substances chimiques*

Ce champ reprend les différentes **catégories** définies dans le cadre de l'évaluation européenne des substances existantes. (TGD, chapitre 5 : catégories d'utilisation) – voir Annexe I.

#### 1.10.1 Catégories industrielles (IC)

Il existe 16 catégories de domaines industriels dans lesquels les substances peuvent être utilisées. Certaines substances peuvent appartenir à plusieurs catégories.

### 1.10.2 Catégories de fonctions ou d'usages (UC)

55 catégories d'utilisations des substances sont disponibles. Certaines d'entre-elles se divisent en sous-catégories. Il est bien entendu possible d'attribuer plusieurs fonctions ou usages à une même substance chimique.

Elles apparaissent sous la forme de couples IC / UC, de la manière suivante :

Exemple : 2 / 48 : *Chemical industry : basic chemicals / Solvents*

## 2 Réglementation

Les recherches sur les substances entrées dans la base peuvent être réalisées selon leur appartenance à des listes réglementaires nationales, européennes et internationales. Les différentes listes prises en compte sont explicitées dans le tableau suivant.

Tableau 2-1 : listes de substances issues de différents textes nationaux et internationaux

Intitulé	Intitulé complet	Instance	Plus d'informations
DCE annexe X	Annexe X, Directive cadre sur l'eau	Union Européenne	<a href="http://europa.eu.int/comm/environment/water/water-framework/index_en.html">http://europa.eu.int/comm/environment/water/water-framework/index_en.html</a>
dir. CE/793/93	Directive européenne sur l'évaluation des risques pour les substances existantes	Union Européenne	<a href="http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/">http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/</a>
POP	Programme des Nations Unies concernant les Polluants Organiques Persistants	Nations Unies	<a href="http://www.chem.unep.ch/pops/">http://www.chem.unep.ch/pops/</a>
dir. CE/76/464 ("132 substances")	Directive concernant la pollution causée par certaines substances dangereuses déversées dans le milieu aquatique	Union Européenne	<a href="http://europa.eu.int/comm/environment/water/water-dangersub/76_464.htm">http://europa.eu.int/comm/environment/water/water-dangersub/76_464.htm</a>
OSPAR (substances potentiellement préoccupantes)	Liste des substances potentiellement préoccupantes pour le milieu marin	Pays signataires de la Convention Oslo-Paris	<a href="http://www.ospar.org/fr/html/welcome.html">http://www.ospar.org/fr/html/welcome.html</a>
Pesticides prioritaires	Liste des substances relevant de la première phase du programme de travail prévu à l'art. 8, §2 dernier alinéa de la directive 91/414/CE	Union Européenne	<a href="http://europa.eu.int/comm/food/plant/protection/evaluation/index_en.htm">http://europa.eu.int/comm/food/plant/protection/evaluation/index_en.htm</a>
SIAR publiés	Liste des SIAR publiés par l'OCDE	OCDE	<a href="http://www.oecd.org/topic/0,2686,fr_2649_34373_1_1_1_1_37465,00.html">http://www.oecd.org/topic/0,2686,fr_2649_34373_1_1_1_1_37465,00.html</a>
SIDS	Liste des SIDS disponibles		

➤ Annexe X de la directive cadre sur l'eau : cette liste de substances prioritaires est citée dans la directive 2000/60/CE du parlement et du conseil du 23 octobre 2000 établissant une politique communautaire dans le domaine de l'eau [5]. Cette liste a été adoptée par la décision n°2455/2001/UE, parue au journal officiel de la communauté européenne (JOCE L 331, le 15/12/2001 [17]).

➤ Différentes listes de substances prioritaires pour l'évaluation des substances existantes sont établies dans le cadre de la législation ESR (Existing Substances Regulation) énoncée dans le règlement européen 793/93. Actuellement, quatre listes prioritaires sont publiées [13], [14], [15] et [16].

➤ Les Nations Unies, dans le cadre de leur programme environnement (PNUE : Programme des Nations Unies pour l'Environnement), ont élaboré une approche concernant la réduction des émissions des Polluants Organiques Persistants (POPs) [3].

➤ La Directive du Conseil n°76/464 du 4 mai 1976 [8] s'applique aux eaux de surface continentales et aux eaux littorales. Les Etats Membres doivent mettre en place des mesures visant à la réduction de la pollution causée par les substances figurant à cette annexe. Les articles de cette directive imposent une procédure d'autorisation pour tout rejet dans les eaux superficielles de substances présentées en annexe. Des valeurs limites d'émission sont mises en place. La circulaire d'application en France (circulaire n°90-55 du 18 mai 1990 relative aux rejets toxiques dans les eaux [9]) reprend une liste de 132 substances (annexe I). Cette liste est enregistrée dans la base de données.

➤ La réunion ministérielle de la Commission OSPAR, qui s'est tenue les 22 et 23 juillet 1998 à Sintra (Portugal), a notamment mis au point une stratégie visant à orienter les travaux futurs de la Commission concernant les substances dangereuses. L'objectif de cette stratégie est de limiter la pollution par ce type de substances dans le milieu marin. Cette commission a conduit à l'élaboration de plusieurs listes de substances dont, en 1998, la liste des substances potentiellement préoccupantes (substances candidates à la priorisation et à l'évaluation des risques).

➤ La directive communautaire n°91/414 [10] prévoit l'inclusion de toutes les substances actives phytosanitaires autorisées au sein de son annexe I (art. 4). Les substances actives candidates à l'autorisation, qui doivent donc être évaluées prioritairement apparaissent quand à elles à l'annexe I du règlement du conseil n°3600/92 (art. 1er).

➤ SIDS : Screening Information Data Set. Les dossiers SIDS regroupent le minimum d'informations nécessaires à une évaluation initiale des dangers des substances chimiques existantes. Ces évaluations des dangers sont gérées par l'OCDE<sup>1</sup>.

➤ SIAR : SIDS Initial Assessment Report. Les SIAR, publiés par l'OCDE, sont les rapports d'évaluation des dangers des substances existantes. Ces évaluations ont été menées à partir des informations réunies dans le SIDS.

### 3 Propriétés physico-chimiques

#### 3.1 Masse molaire

La **masse molaire** (M) d'une molécule s'exprime en  $\text{g.mol}^{-1}$ .

#### 3.2 Point de fusion

**Température** (en °C) de passage de la substance de l'état solide à l'état liquide, à la pression atmosphérique (1013 hPa).

La ligne directrice OCDE [6] retenue porte le n°102.

#### 3.3 Densité

La **densité** est le rapport de la masse d'un volume quelconque d'une substance à la masse d'un volume égal d'eau à la température de 4°C.

Ligne directrice OCDE n°109 [6].

---

<sup>1</sup> Organisation de Coopération et de Développement Economiques

### 3.4 Log $K_{ow}$

Le coefficient de partage entre l'octanol et l'eau ( $K_{ow}$ ) est défini comme le rapport des concentrations à l'équilibre d'une substance dissoute dans un système à deux phases constitué d'eau et d'octanol. Dans ce cas :

$$K_{ow} = \frac{C_{oc\ tan\ ol}}{C_{eau}}$$

Il est habituellement donné sous la forme de son logarithme à base dix (**log  $K_{ow}$** ).

Ligne Directrice OCDE n°107 [6].

### 3.5 $K_{oc}$

Le  $K_{oc}$  correspond au coefficient de partage entre la matière organique du sol ou des sédiments et l'eau. Il est exprimé en L.kg<sup>-1</sup>.

Il est égal au rapport entre la quantité adsorbée d'un composé par unité de masse de carbone organique du sol ou du sédiment et la concentration de ce même composé en solution aqueuse à l'équilibre. (Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Lyman et al, 1990) :

$$K_{oc} = \frac{C(mg/kg_{sol})}{C(mg/L)}$$

Le  $K_{oc}$  peut être déterminé :

- Expérimentalement (ligne directrice 106 de L'OCDE [6]) ;
- Par calcul en utilisant les relations de type Structures Activités quantitatives (QSAR) qui permettent d'estimer le  $K_{oc}$  à partir du  $K_{ow}$  (Commission Européenne, 1996).

La tendance d'un composé à s'adsorber sur un sol dépend de ses propriétés physico-chimiques et de la teneur en carbone organique du sol ou des sédiments. Le  $K_{oc}$  peut être utilisé pour déterminer la répartition d'un composé entre l'eau et le solide. Plus le  $K_{oc}$  est élevé, plus la substance se lira préférentiellement à la phase solide du sol (ou des sédiments) par rapport à la phase aqueuse.

### 3.6 Pression de vapeur

Exprimée en Pascal (Pa), la pression de vapeur est la pression de saturation au-dessus d'une substance liquide ou solide. A l'équilibre thermodynamique, la pression de vapeur est seulement fonction de la température.

Ligne directrice OCDE n°104 [6].

La **pression de vapeur** ( $P_{vap}$ ) caractérise l'aptitude d'une substance à se volatiliser.

### 3.7 Solubilité

La **solubilité** d'une substance (à température ambiante) est la concentration massique de la substance dans l'eau à saturation ; elle est fonction de la température. Elle est exprimée en unité de poids par volume de solution. L'unité SI est le kg/m<sup>3</sup>; on peut également utiliser le g/L ou le **mg/L**.

Ligne directrice OCDE n°105 [6].

### 3.8 Constante de Henry

Elle peut être déterminée expérimentalement ou grâce à l'équation suivante :

$$\text{Équation 1 : calcul de la constante de Henry } H = \frac{P_{vap} \times M}{\text{Solubilité}}$$

Son unité est le Pa.m<sup>3</sup>.mol<sup>-1</sup>.

La **constante de Henry (H)** caractérise le transfert de la substance de la phase aqueuse à la phase gazeuse.

### 3.9 Biodégradation

Pour estimer le potentiel de biodégradation d'une substance, il est possible de tester :

- sa biodégradabilité facile (lignes directrices 301 A-F de l'OCDE [6]),
- sa biodégradabilité inhérente (lignes directrices 302 A-C de l'OCDE [6]),
- sa biodégradabilité lors d'essais de simulation de traitement d'eaux usées en condition aérobie (ligne directrice 303 de l'OCDE [6]).

Les tests de biodégradation facile sont basés soit sur la mesure de la disparition du COD (carbone organique dissous), soit sur la mesure du dégagement de CO<sub>2</sub> ou sur la mesure de la consommation d'oxygène.

Selon la directive 67/548/CEE, une substance est considérée facilement biodégradable si les critères suivants sont vérifiés. Lors d'études de biodégradation sur 28 jours, les niveaux de dégradation ci-après doivent être atteints 10 jours après le début de la dégradation<sup>2</sup> pour respecter le critère de la fenêtre des 10 jours :

- 70 % de dégradation pour les essais basés sur le carbone organique dissous.
- 60 % de dégradation pour les essais basés sur la déperdition d'oxygène ou la production de gaz carbonique.

Dans la base de données, ce champ ne propose qu'une estimation de la **biodégradabilité** de la substance. Cinq niveaux sont proposés :

- Biodégradabilité facile
- Biodégradabilité facile (critère de la fenêtre des 10 jours non rempli)
- Biodégradabilité inhérente
- Non biodégradable
- ou le champ peut être laissé vide, en l'absence de donnée

Remarque : biodégradabilité facile : ligne directrice OCDE 301 ; biodégradabilité inhérente : lignes directrices OCDE n°302 [6].

### 3.10 Persistance eau douce (et eau marine)

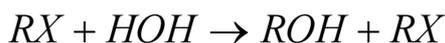
La persistance est souvent caractérisée par le temps de demi-vie (T<sub>1/2</sub>) de la substance (exprimé en jours). Tous les phénomènes de dégradation de la substance dans les eaux pris en compte ici : biodégradation, photolyse, hydrolyse.

### 3.11 Hydrolyse en fonction du pH

L'**hydrolyse** se traduit par la réaction d'un composé RX avec l'eau, selon l'équation suivante :

---

<sup>2</sup> Le début de la dégradation est considéré comme étant le moment où 10 % de la substance testée a été dégradée.



Cette réaction peut être influencée par les ions hydroniums (acides) ou hydroxyles (basiques). On parle alors de catalyse acide ou basique spécifique.

L'hydrolyse est représentée par le temps de ½ vie du composé étudié lors d'une réaction d'hydrolyse. Elle s'exprime en unité de temps (jour).

Ligne directrice OCDE n°111 [6].

### 3.12 Photolyse (dans l'eau)

Les processus photolytiques se limitent, la plupart du temps, aux zones supérieures des masses d'eau. En effet, les quantités de matières organiques dissoutes ne permettent généralement pas à ces phénomènes de s'exercer en profondeur.

Comme il n'existe pas de méthode valide pour déterminer la **photolyse**, on tient compte de l'absorption des UV par la substance. Les variations saisonnières du flux lumineux sont à prendre en compte pour appréhender ce phénomène.

Cette grandeur s'exprime en jours et est caractérisée par le temps de ½ vie de la molécule.

### 3.13 Persistance sol

La **persistance dans le sol** est indiquée par le temps de demi-vie ( $T_{1/2}$ ) de la substance dans ce milieu et est exprimée en jours.

### 3.14 Photo oxydation

Plus que la photolyse, la principale cause de dégradation des substances dans l'atmosphère (troposphère) est la **photo oxydation** causée par des espèces chimiques telles que les radicaux hydroxyles. Le temps de ½ vie de la substance est exprimé en jours.

### 3.15 Bioconcentration (BCF)

La bioconcentration se définit comme le résultat net de l'absorption, la distribution et l'élimination d'une substance dans un organisme dues à une exposition via l'eau.

La mesure d'un facteur de bioconcentration (BCF) peut se faire de deux manières différentes :

- La facteur de bioconcentration statique est le rapport de la concentration dans l'organisme et de la concentration dans l'eau, à l'équilibre.
- Lorsque les cinétiques d'absorption et d'élimination sont mesurées, le facteur de bioconcentration dynamique peut être calculé.

**Équation 2 : calcul du BCF** 
$$BCF_{poisson} = \frac{C_{poisson}}{C_{eau}} \text{ or } \frac{k_1}{k_2}$$

Avec  $C_{poisson}$ , la concentration dans le poisson (organisme test) en mg/kg,  $C_{eau}$ , la concentration mesurée dans l'eau, en mg/L,  $k_1$ , la constante cinétique d'absorption de la substance à partir de l'eau, en L/kg.j,  $k_2$ , la constante cinétique d'élimination, en  $j^{-1}$  et  $BCF_{poisson}$ , le facteur de bioconcentration de l'organisme test (ici le poisson).

Ligne directrice OCDE n°305 [6].

### 3.16 Coefficient de partage eau / sol, sédiments ou matières en suspension

Le  $K_p$  s'exprime en L/kg. Il s'agit du rapport entre la concentration en élément adsorbé sur le sol (ou sur les sédiments ou sur les Matières En Suspension - MES) et la concentration à l'état dissous dans l'eau, à l'équilibre :

$$K_{p\_comp} = \frac{C(mg/kg_{comp})}{C(mg/L)}$$

Le  $K_p$  peut être déterminé :

- Expérimentalement (ligne directrice 106 de L'OCDE) ;
- Par calcul (seulement pour les substances organiques) en utilisant les relations de type Structures Activités quantitatives (QSAR) qui permettent d'estimer le  $K_p$  à partir du  $K_{oc}$  ou à partir du  $K_{ow}$  [1].

Il permet de quantifier l'adsorption sur le sol (ou les sédiments ou les MES). L'intensité de l'adsorption dépend des propriétés de l'élément étudié et de celle du sol (ou des sédiments ou des MES). La valeur du  $K_p$  pouvant être très différente selon le type de sol utilisé pour faire la mesure, plusieurs valeurs (correspondant à différents types de sol) pourront être données. (Soil Transport and Fate Database and Model Management System, Environmental System and Technologies, 1991).

## 4 Ecotoxicologie : évaluation des effets

### 4.1 Introduction

Dans le processus d'évaluation des risques, l'évaluation des effets se décompose en deux étapes principales :

- L'identification du danger dont découle la classification environnementale (Cf. 1.6).
- L'évaluation des relations doses (concentrations) / réponses (effets) qui vise la détermination de concentrations prédites sans effets (PNEC : Predicted No Effect Concentration), pour chaque compartiment d'étude.

### 4.2 Détermination des PNEC à partir des tests écotoxicologiques

Dans la démarche de détermination des PNEC, pour chaque compartiment environnemental (eau douce, eau marine, sédiments, sol, stations d'épuration, etc.), il convient tout d'abord de parcourir l'ensemble des données écotoxicologiques concernant la substance et de vérifier leur validité.

La PNEC doit représenter la concentration en dessous de laquelle un risque inacceptable ne doit pas survenir. En général, elle est calculée en divisant le plus faible résultat de test de toxicité aiguë ( $CL^3/EC^4_{50}$ ) ou chronique ( $EC^4_{10}/NOEC^5$ ) par un **facteur d'extrapolation** approprié. Ce facteur d'extrapolation reflète le degré d'incertitude qui existe entre l'extrapolation de données de tests de toxicité conduits en laboratoire, pour un nombre limité d'espèces, et la réalité. Lors de l'utilisation de

---

<sup>3</sup> LC ou  $CL_{50}$  : concentrations létales (lethal concentration) 50%. A cette concentration, 50% des individus testés périssent.

<sup>4</sup> EC ou  $CE_x$  : concentration d'effet à x % (effect concentration). A cette concentration, x % des individus testés ont subi l'effet.

<sup>5</sup> NOEC : (No Observed Effect Concentration) concentration sans effet observé.

données de toxicité chronique, le degré d'incertitude étant plus faible, le facteur d'extrapolation est moins important. C'est pour cette raison que des tels résultats sont privilégiés.

Les méthodes utilisées pour la détermination des PNEC, par compartiment, seront précisées par la suite.

Il faut aussi noter que, le plus souvent, seules des informations concernant les organismes aquatiques sont disponibles pour l'évaluation des substances existantes.

### 4.3 Méthode du coefficient de partage

En l'absence de données d'écotoxicité sur les organismes des compartiments terrestres ou benthique (sédiments), la méthode de détermination par défaut utilise le coefficient de partage eau – matières en suspension ou sol pour dériver une  $PNEC_{\text{sédiment}}$  ou une  $PNEC_{\text{sol}}$  à partir de la  $PNEC_{\text{eau}}$ . Ce système permet d'ébaucher une PNEC et d'évaluer la nécessité (risque avéré) de conduire des tests sur les organismes.

La formule appliquée est la suivante :

**Équation 3 : calcul d'une PNEC à partir du coefficient de partage**

$$PNEC = \frac{K_{\text{comp-water}}}{RHO_{\text{comp}}} \cdot PNEC_{\text{water}} \cdot 1000$$

---

$PNEC_{\text{water}}$	PNEC pour l'eau	$[\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}]$	
$K_{\text{comp-water}}$	coefficient de partition sol ou sédiments / eau	$[\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}]$	éq. (24)
$RHO_{\text{comp}}$	densité du compartiment	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$	éq. (18)
$PNEC_{\text{comp}}$	PNEC pour le sol ou les sédiments	$[\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}]$	

---

### 4.4 Méthode statistique

Cette technique n'est présentée, dans le TGD, que pour les compartiments aquatiques et terrestres. En effet, la majorité des tests de toxicité concerne ces deux milieux et il est nécessaire de disposer d'un jeu de données assez important pour conduire une analyse statistique. Si toutefois un nombre de données adéquat pouvait être réuni pour un autre compartiment (e. g. compartiment marin), ces techniques pourraient s'appliquer.

Lorsque l'on est en présence d'un jeu de données de tests de toxicologie à long terme, l'utilisation d'une **méthode d'extrapolation statistique** est acceptée. La distribution des sensibilités des espèces (SSD : Species Sensitivity Distribution), doit posséder plusieurs caractéristiques :

- Elle doit suivre une loi de distribution théorique.
- Les groupes d'espèces testées en laboratoire doivent représenter un échantillon aléatoire de cette distribution.
- ...

Certaines conditions sont préalables à l'établissement du jeu de données de travail. (TGD 3.3.1.2.)

## 4.5 Données écotoxicologiques de la base

### 4.5.1 EAUX écotoxicologie

Les données écotoxicologiques pour les organismes des compartiments aquatiques (eau douce et eau de mer) sont indiquées dans un tableau récapitulatif. Seules les plus faibles données validées sont retenues pour trois niveaux trophiques : les algues, les invertébrés (il s'agit le plus souvent de tests conduits sur des daphnies), les poissons. Les résultats sont affichés en mg/L par défaut ; néanmoins des unités spécifiques pour certains tests peuvent être précisées dans les remarques, à la suite du tableau. Des précisions concernant les résultats des tests retenus peuvent également être ajoutées en remarque, sous le tableau.

Dans une deuxième partie, les valeurs des PNEC déterminées sont affichées, lorsqu'elles existent. Les facteurs d'extrapolation utilisés, la moyenne et l'écart type pour les PNEC statistiques sont également indiqués. Une remarque peut également être affichée si nécessaire.

### 4.5.2 SEDIMENTS et SOL écotoxicologie

De la même manière que pour les données écotoxicologiques concernant les organismes des eaux douces et marines, les plus faibles résultats de tests aigus et chroniques validés sont retranscrits dans un tableau. Les unités à appliquer par défaut y apparaissent également.

Dans une deuxième partie, la PNEC retenue pour le compartiment considéré est affichée accompagnée de la méthode utilisée pour la déterminer : méthode du facteur d'extrapolation, méthode du coefficient de partage ou méthode statistique. D'éventuelles remarques peuvent aussi être indiquées.

### 4.5.3 MICRO-ORGANISMES écotoxicologie

Cette rubrique permet l'affichage de données servant à l'évaluation des effets d'une substance sur les organismes des stations d'épuration (STEP). Le résultat du test validé le plus faible est indiqué. Les informations suivantes sont indiquées : critère d'effet mesuré, durée du test, type de test, organisme utilisé.

La PNEC pour la protection des micro-organismes des STEP est ensuite affichée accompagnée, le cas échéant, d'une remarque.

## 5 Autres informations

### 5.1 Source d'informations

Indication de la source d'information utilisée pour l'élaboration de la fiche.

- **Union Européenne** : rapports d'évaluation des risques pour les substances existantes, dans le cadre du règlement européen 793/93 [12]. Ces rapports sont disponibles sur les site de l'ECB : <http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/>.
- **OCDE** : données sur des substances compilées au sein de dossiers SIDS (Screening Information Data Set) qui recensent le minimum d'informations nécessaire à la conduite d'une évaluation des risques. (<http://cs3-hq.oecd.org/scripts/hpv/>). Les dossiers en cours (drafts) ne sont pas accessibles sur Internet.
- **INERIS** : données sur les substances chimiques provenant d'études spécifiquement traitées par l'INERIS. (<http://www.ineris.fr/>)

## **5.2 Degré de finalisation**

**Etat d'avancement** dans l'élaboration du dossier. Deux états sont différenciés : celui d'un dossier en cours de traitement ou « Draft » (brouillon) et celui d'un dossier « Finalisé ».

## **5.3 Date**

**Date d'élaboration** du dossier ayant servi de source d'informations pour renseigner la fiche.

## **5.4 N° de dossier européen**

Le cas échéant, un **numéro** faisant référence à un dossier européen peut être indiqué. C'est par exemple le cas pour la version du dossier de l'Union Européenne concernant l'évaluation des risques pour le chloroforme d'août 2002 : « R047\_env\_0208.doc ».

Ce numéro permet par exemple d'identifier un rapport disponible sur le site du Bureau Européen des Substances Chimiques : <http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/>.

## **5.5 Liens Internet**

**Lien** Internet vers le dossier contenant les informations recueillies ou lien vers le site de l'organisme qui l'héberge.

## **5.6 Niveau de validation**

Trois niveaux de **validation** des données de la fiche sont proposés :

- Consensus international
- Projet international
- Proposition INERIS

Un seul niveau de validation recouvre tous les éléments de la fiche d'une substance. Néanmoins, lorsque au sein d'un même dossier, plusieurs valeurs sont proposées pour un même champ, le symbole \* désigne celle sur laquelle le choix de l'INERIS se porte.

## **5.7 Remarques éventuelles**

Toute mention jugée utile.

## **5.8 Mise à jour**

Indique la date de la dernière **mise à jour** de la fiche.

## Références

- [1] **CE (2002)** – *European Commission. Technical Guidance Document in support of Commission Directive 93/67/EEC on risk assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) n° 1488/94 on risk assessment for existing substances and Directive 98/8/EC concerning the placing of biocidal products on the market*
- [2] **Communication de la Commission au Conseil et au Parlement Européen sur la mise en œuvre de la stratégie communautaire concernant les perturbateurs endocriniens, une série de substances suspectées d'influer sur le système hormonal des hommes et des animaux** – COM 706, 1999 (version finale du 14 juin 2001)
- [3] **Convention de Stockholm sur les Polluants Organiques Persistants (POP)**, Stockholm, le 22 mai 2001
- [4] **Convention OSPAR, Valeurs de coupure pour les critères de sélection appliqués à la procédure de sélection initiale du mécanisme dynamique OSPAR de sélection et de définition des priorités pour les substances dangereuses**, Annexe 6, § 4.12a, réunion de la convention OSPAR, Valence, 25-29 juin 2001
- [5] **Directive 2000/60/CE** du parlement européen et du Conseil du 23 octobre 2000 *établissant un cadre pour une politique communautaire dans le domaine de l'eau* – JOCE du 22/12/2000 | L327
- [6] **OECD Guidelines for the Testing of Chemicals**
- [7] **Directive du Conseil n° 67/548/CEE du 27 juin 1967** *concernant le rapprochement des dispositions législatives, réglementaires et administratives relatives à la classification, l'emballage et l'étiquetage des substances dangereuses* - JOCE n° L 196 du 16 août 1967
- [8] **Directive du Conseil n°76/464/CEE** du 4 mai 1976 *concernant la pollution causée par certaines substances dangereuses déversées dans le milieu aquatique de la Communauté* (JOCE L129 du 18 mai 1976)
- [9] **Circulaire n°90-55** du 18 mai 1990 *relative aux rejets toxiques dans les eaux* (BOMELT n°968-90/27 du 30 septembre 1990)
- [10] **Directive 91/414/CEE du Conseil, du 15 juillet 1991**, *concernant la mise sur le marché des produits phytopharmaceutiques*
- [11] **Règlement (CEE) n° 3600/92 de la Commission, du 11 décembre 1992**, *établissant les modalités de mise en œuvre de la première phase du programme de travail visé à l'article 8 paragraphe 2 de la directive 91/414/CEE du Conseil concernant la mise sur le marché des produits phytopharmaceutiques*
- [12] **Règlement (CEE) n° 793/93** du Conseil, du 23 mars 1993, *concernant l'évaluation et le contrôle des risques présentés par les substances existantes*. Journal officiel n° L 084 du 05/04/1993 p. 0001 - 0075
- [13] **Décision de la commission n°1179/94** du 25 mai 1994 *concernant la première liste de substances prioritaires* (JOCE du 26/05/1994 | L331/3)
- [14] **Décision de la commission n°2268/95** du 27 septembre 1995 *concernant la deuxième liste de substances prioritaires* (JOCE du 28/09/1995 | L231/18)

- [15] **Décision de la commission n°143/97** du 27 janvier 1997 *concernant la troisième liste de substances prioritaires* (JOCE du 28/01/1997 | L025/13)
- [16] **Décision de la commission n°2364/2000** du 25 octobre 2000 *concernant la quatrième liste de substances prioritaires* (JOCE du 26/10/2000 | L273/5)
- [17] **Décision n°2455/2001/CE** du parlement européen du 20 novembre 2001 *établissant la liste des substances prioritaires dans le domaine de l'eau et modifiant la directive 2000/60/CE – JOCE* du 15/12/2001 | L331
- [18] **HELCOM lists of priority substances**, HELCOM 12/18, annex 6, HELCOM 14/18, §6.40 and HELCOM recommandations 19/5, appendix 3

## Annexes

## Annexe I Catégories Industrielles et d'Utilisation des substances chimiques – EUSES

## MAIN CATEGORIES

I	Use in closed systems	- non-isolated intermediates - isolated intermediates stored on-site - isolated intermediates with controlled transport
II	Use resulting in inclusion into or onto a matrix	
III	Non-dispersive use	
IV	Wide dispersive use	

## INDUSTRIAL CATEGORIES

1	Agricultural industry	9	Mineral oil and fuel industry
2	Chemical industry: basic chemicals	10	Photographic industry
3	Chemical industry: chemicals used in synthesis	11	Polymers industry
4	Electrical/electronic industry	12	Pulp, paper and board industry
5	Personal/domestic	13	Textile processing industry
6	Public domain	14	Paints, lacquers and varnishes industry
7	Leather processing industry	16	Engineering industries: civil and mechanical
8	Metal extraction, refining and processing industry	15/0	Others

## USE CATEGORIES

1	Absorbents and adsorbents	30	Hydraulic fluids and additives
2	Adhesive, binding agents	31	Impregnation agents
3	Aerosol propellants	32	Insulating materials
4	Anti-condensation agents	33	Intermediates (monomers; pre-polymers)
5	Anti-freezing agents	34	Laboratory chemicals
6	Anti-set-off and anti-adhesive agents	35	Lubricants and additives
7	Anti-static agents	36	Odour agents
8	Bleaching agents	37	Oxidizing agents
9	Cleaning/washing agents and additives (detergents; soaps; dry cleaning solvents; optical brighteners in detergents)	38	Plant protection products, agricultural
10	Colouring agents (dyestuffs; pigments; colour forming agents; fluorescent brighteners)	39	Biocides, non-agricultural (disinfectants; preservative products; pest control products; specialist biocides)
11	Complexing agents	40	pH-regulating agents
12	Conductive agents (electrolytes; electrode materials)	41	Pharmaceuticals (veterinary medicines)
13	Construction materials and additives	42	Photochemicals (desensitisers; developers; fixing agents; photosensitive agents; sensitizers; anti-fogging agents; light stabilisers; intensifiers)
14	Corrosion inhibitors	43	Process regulators (accelerators; activators; catalysts; inhibitors; siccatives; anti-siccatives; cross-linking agents; initiators; photo-initiators; etc.)
15	Cosmetics	44	Reducing agents
16	Dust binding agents	45	Reprographic agents (toners for photocopying machines; toner additives)
17	Electroplating agents	46	Semiconductors (photovoltaic agents)
18	Explosives (blasting agents; detonators; incendiaries)	47	Softeners (coalescing agents; bates in leather technology; devulcanizing agents; emollients; swelling agents; water softeners; plasticisers)
19	Fertilizers	48	Solvents
20	Fillers	49	Stabilizers
21	Fixing agents	50	Surface-active agents
22	Flame retardants and fire preventing agents	51	Tanning agents
23	Flotation agents	52	Viscosity adjustors (pour-point depressants; thickeners; thixotropic agents; turbulence suppressors; viscosity index improvers)
24	Flux agents for casting	53	Vulcanizing agents
25	Foaming agents (chemical/physical blowing agents; frothers)	54	Welding and soldering agents
26	Food/feedstuff additives	55/0	Others
27	Fuels (gasoline; kerosine; gas oil; fuel oil; petroleum gas; non-mineral oil)		
28	Fuel additives (anti-fouling agents; anti-knock agents; deposit modifiers; fuel oxidizers)		
29	Heat transferring agents (cooling agents; heating agents)		

## Annexe 3

Environmental database manual : data definition  
(14<sup>th</sup> Jne 2004 version)



# **Environmental database manual: data definition**

François LE GOFF  
*Ecotoxicological Risk Assessment Unit*  
*Chronic Risks Division*

LAST UPDATE 14<sup>TH</sup> JUNE 2004

## Glossary

BCF : BioConcentration Factor

CAS : Chemicals Abstracts Services

ECB : European Chemical Bureau

ED : Endocrine Disruptor

EINECS : European Inventory of Existing Chemical Substances

EU : European Union

IC : Industrial Category

INERIS : Institut National de l'Environnement industriel et des RISques

NCE : Non Classified for the Environment

NOEC : No Observed Effect Concentration

OECD : Organisation for Economic Co-operation and Development

OSPAR : Oslo-Paris convention

PBT : Persistent Bioaccumulable Toxic

PNEC : Predicted No Effect Concentration

POP : Persistent Organic Pollutants

QSAR : Quantitative Structure-Activity Relationship

SIAR : SIDS Initial Assessment Report

SIDS : Screening Information Data Set

SMILES : Simplified Molecular Input Line Entry Specification

SSD : Species Sensitivity Distribution

STP : Sewage Treatment Plant

TGD : Technical Guidance Document [1]

UC : Use Category

UNEP : United Nations Program for the Environment

vPvB : very Persistent very Bioaccumulable

WFD : Water Framework Directive

## Table of contents

<b>GLOSSARY</b>	<b>2</b>
<b>TABLE OF CONTENTS</b>	<b>3</b>
<b>INTRODUCTION</b>	<b>4</b>
<b>1 SUBSTANCE IDENTIFICATION</b>	<b>4</b>
1.1 COMMON NAME	4
1.2 CAS NUMBER	4
1.3 EINECS NUMBER	4
1.4 SMILES CODE	4
1.5 CHEMICAL FORMULA	4
1.6 ENVIRONMENTAL CLASSIFICATION	5
1.7 CLASSIFICATION	5
1.8 PBT CLASSIFICATION (PERSISTENT BIOACCUMULABLE TOXIC)	5
1.9 ENDOCRINE DISRUPTORS	6
1.10 USES CATEGORIES OF CHEMICALS	6
1.10.1 Industrial Categories (IC)	6
1.10.2 Uses Categories (UC)	6
<b>2 LEGISLATION</b>	<b>6</b>
<b>3 PHYSICAL AND CHEMICAL PROPERTIES</b>	<b>8</b>
3.1 MOLECULAR WEIGHT	8
3.2 MELTING POINT	8
3.3 DENSITY	8
3.4 LOG K <sub>ow</sub>	8
3.5 K <sub>oc</sub>	8
3.6 VAPOUR PRESSURE	9
3.7 SOLUBILITY	9
3.8 HENRY'S LAW CONSTANT	9
3.9 BIODEGRADATION	9
3.10 FRESHWATER (AND SEAWATER) PERSISTENCE	10
3.11 HYDROLYSIS AS A FUNCTION OF PH	10
3.12 PHOTOLYSIS (IN WATER)	10
3.13 SOIL PERSISTENCE	10
3.14 PHOTO OXIDATION WITH OH RADICALS	10
3.15 BIOCONCENTRATION (BCF)	11
3.16 PARTITIONING COEFFICIENT WATER / SOIL, SEDIMENTS, SUSPENDED PARTICULATE MATTERS	11
<b>4 ECOTOXICOLOGY: EFFECT ASSESSMENT</b>	<b>11</b>
4.1 INTRODUCTION	11
4.2 DETERMINATION OF PNEC BASED ON ECOTOXICITY TESTS	12
4.3 EQUILIBRIUM METHOD	12
4.4 STATISTICAL METHOD	12
4.5 ECOTOXICOLOGICAL DATA IN THE ENVIRONMENTAL DATABASE	13
4.5.1 WATER ecotoxicology	13
4.5.2 SEDIMENTS and SOIL ecotoxicology	13
4.5.3 MICRO-ORGANISMS ecotoxicology	13
<b>5 OTHER INFORMATION</b>	<b>13</b>
5.1 INFORMATION SOURCES	13
5.2 FINALISATION STAGE	14
5.3 DATE	14
5.4 EUROPEAN DOSSIER NUMBER	14
5.5 INTERNET LINKS	14
5.6 VALIDATION LEVEL	14
5.7 REMARKS	14
5.8 UPDATE	14
<b>REFERENCES</b>	<b>15</b>

## Introduction

This guidance document has been developed to support the use of the environmental database which can be found online:

<http://chimie.ineris.fr/lien/basededonnees/envirnementale/presentation.php>

The main aim of this document is to provide to the database user some explanations on the data fields that are displayed after a database request. The plan of the document is based on the different kinds of data that are recorded and compiled.

(this document can be found online: [http://chimie.ineris.fr/LesPDF/guide\\_fr\\_caracterisation\\_donnees.pdf](http://chimie.ineris.fr/LesPDF/guide_fr_caracterisation_donnees.pdf))

## 1 Substance identification

### 1.1 Common name

In the environmental database, chemical substances are identified with only one **name**, in English. The chosen name corresponds to the usual one.

One should be aware that, when a search is made on the name of the chemicals, some synonyms included in the database are also taken into account. However, this synonyms appear neither in the search result nor in the chemical datasheets as the list is not exhaustive.

### 1.2 CAS number

Register number for the chemical, given by the **Chemical Abstracts Services (CAS)** – [www.cas.org](http://www.cas.org).

### 1.3 EINECS number

Register number for existing chemicals in the European Union (**European Inventory of Existing Chemical Substances**). 100 196 chemical substances are included in this inventory.

A search tool for this identifier is available on the European Chemicals Bureau web site – ECB: <http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/> in the EINECS Information System section.

### 1.4 SMILES code

**SMILES** is the acronym for Simplified Molecular Input Line Entry Specification. This code is used as a chemical nomenclature tool and as an exchange format (e. g. as input data for computer programs) in order to define the molecular structure of a chemical substance.

For more information on SMILES code, see the online tutorial:

<http://www.daylight.com/dayhtml/smiles/smiles-intro.html>

### 1.5 Chemical formula

The **chemical formula** gives information on the nature and number of atoms that belong to a molecule. The nature of atoms is indicated with initials from the periodic table of elements. The number of each atom appears in index.

## 1.6 Environmental classification

The **environmental classification** is given by the Council Directive 67/548/EEC of 27 June 1967 and its updates on the approximation of laws, regulations and administrative provisions relating to the classification, packaging and labelling of dangerous substances [7].

### Risk phrases:

- R50: very toxic for aquatic organisms
- R51: toxic for aquatic organisms
- R52: harmful to aquatic organisms
- R53: may cause long-term adverse effects in the aquatic environment
- R54: toxic to flora
- R55: toxic to fauna
- R56: toxic to soil organisms
- R57: toxic to bees
- R58: may cause long-term adverse effects in the environment
- R59: dangerous to ozone layer

### Safety phrases:

- S56: Dispose of this material and its container to hazardous or special waste collection point.
- S57: Use appropriate container to avoid environmental contamination.
- S59: Refer to manufacturer/supplier for information on recovery/ recycling.
- S60: This material and its container must be disposed of as hazardous waste.
- S61: Avoid release to the environment. Refer to special instructions/safety data sheets.

The substance is classified N, for “dangerous for the environment” when it is R50/53, R50, R51/53, R54, R55, R56, R57, R58 or R59. NCE stands for “non-classified for the environment” which means that hazardous properties of the substance have been assessed but classification was not retained.

## 1.7 Classification

In addition to the environmental classification (see previous point), the environmental database also includes the global classification of a chemical substance. This **classification** is given by the Council Directive 67/548/EEC of 27 June 1967 on the approximation of laws, regulations and administrative provisions relating to the classification, packaging and labelling of dangerous substances [7].

## 1.8 PBT classification (Persistent Bioaccumulable Toxic)

The criteria employed for the PBT classification are those defined by the European Commission. They appear in the European technical guidance document for the risk assessment of chemicals [1].

**Table 1-1 : PBT and vPvB substances identification criteria**

Criteria	PBT criteria	Very Persistent and very Bioaccumulable criteria
Persistent	Half life >60 days for seawater and >40 days for freshwater or half life >180 days for marine sediments or >120 days for freshwater sediments	Half life >60 days for freshwater or seawater or >180 days for marine or freshwater sediments
Bioaccumulable	BCF > 2000	BCF > 5000
Toxic	NOEC <0.01 mg/L or CMR substance (carcinogen, mutagenous, toxic for	Non applicable

	reproduction), endocrine disruptor	
--	------------------------------------	--

## 1.9 Endocrine disruptors

The European classification of endocrine disruptor chemicals is retained. Several lists of substances have been established [2]:

- List #1: substances with evidence of endocrine disruption which are neither restricted nor currently being addressed under existing Community legislation (9 substances).
- List #2: substances with evidence of endocrine disruption or evidence of potential endocrine disruption, already regulated or being addressed under existing legislation (115 substances).
- List #3: substances with insufficient data (435 substances).
- List #4 : substances which are deemed not to be endocrine disruptors, on the basis of available information (11 substances).

## 1.10 Uses categories of chemicals

This database field store the categories defined in the context of the European existing chemicals risk assessment (TGD, chapter 5: uses categories) – included in Annex I.

### 1.10.1 Industrial Categories (IC)

There are 16 industrial categories where chemical substances may be employed. Some substances may belong to several industrial categories.

### 1.10.2 Uses Categories (UC)

55 uses categories are listed. Some of them are subdivided in other categories. Some substances may belong to several uses categories.

Uses categories are displayed by pairs IC / UC:

Example: 2 / 48 = *Chemical industry : basic chemicals / Solvents*

## 2 Legislation

Data on chemical substances can be found using national, European and international legislative lists of chemicals. The different lists referenced in the database are shown in Table 2-1.

**Table 2-1: lists of chemical substances from several national and international legislations**

Heading	Complete heading	Legislation level	More information can be found at:
WFD annex X	Annex X, Water Framework Directive	European Union	<a href="http://europa.eu.int/comm/environment/water/water-framework/index_en.html">http://europa.eu.int/comm/environment/water/water-framework/index_en.html</a>
reg. EC/793/93	Council regulation on the evaluation and control of the risks of existing substances	European Union	<a href="http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/">http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/</a>
POP	United Nations Program for Persistent Organic Pollutants	United Nations	<a href="http://www.chem.unep.ch/pops/">http://www.chem.unep.ch/pops/</a>
dir. EC/76/464	Council Directive of 4 May 1976 on	European Union	<a href="http://europa.eu.int/comm/e">http://europa.eu.int/comm/e</a>

Heading	Complete heading	Legislation level	More information can be found at:
("132 substances")	pollution caused by certain dangerous substances discharged into the aquatic environment of the Community		<a href="http://environment/water/water-dangersub/76_464.htm">nvironment/water/water-dangersub/76_464.htm</a>
OSPAR (substances of possible concern)	List of substances of possible concern for the marine environment	Member states of Oslo-Paris Convention	<a href="http://www.ospar.org/eng/html/welcome.html">http://www.ospar.org/eng/html/welcome.html</a>
Priority pesticides	List of substances retained for the first step of the working program (art. 8, §2), directive 91/414/EC concerning the placing of plant protection products on the market	European Union	<a href="http://europa.eu.int/comm/food/plant/protection/evaluation/index_en.htm">http://europa.eu.int/comm/food/plant/protection/evaluation/index_en.htm</a>
SIAR published	List of published SIAR	OECD	<a href="http://www.oecd.org/topic/0_2686.fr_2649_34373_1_1_1_1_37465.00.html">http://www.oecd.org/topic/0_2686.fr_2649_34373_1_1_1_1_37465.00.html</a>
SIDS	List of available SIDS		

➤ Annex X of the Water Framework Directive: this list of priority chemical substances appears in Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council of 23 October 2000 establishing a framework for Community action in the field of water policy [5]. This list has been adopted by the Decision n°2455/2001/EU, published at the European Community Official Journal (L 331, 15/12/2001 [16]).

➤ Several lists of priority substances for the evaluation of existing chemicals have been established in the context of the ESR legislation (Existing Substances Regulation) from the European regulation 793/93. Actually, four priority lists have been published [12], [13], [14] and [15].

➤ The United Nations, in the framework of the environmental program (UNEP: United Nations Environmental Program), have elaborated an approach for the reduction of Persistent Organic Pollutants (POPs) emissions [3].

➤ The directive of the Council n°76/464 of May, 4<sup>th</sup> 1976 [8] applies to inland freshwater and coastal waters. Member states must take measures to reduce the pollution of chemical substances listed in the annex of the directive from stated waters. This directive lays down an authorisation procedure for the release of substances listed in the annex in superficial waters. Maximal emission values are defined. The annex of the directive contains a list of about 132 substances.

➤ The inter ministerial meeting of the OSPAR Commission, held in Sintran, Portugal, on July, 22<sup>nd</sup> and 23<sup>rd</sup>, 1998, has defined a strategy for the management of hazardous chemicals. The main purpose of this strategy is the limitation of chemical pollution in the marine environment. The OSPAR Commission has elaborated several lists of chemicals and, particularly, the list of substances of possible concern (chemical substances that are candidate to the prioritisation and risk assessment).

➤ The European Directive n°91/414 [9] in its annex I imposes that all active substances authorised to be used in plant protection products are listed (Cf. article 4). For inclusion in annex I of the Directive, the risk towards man and the environment of any active substance must be assessed. The active substances, candidates for assessment are listed in annex 1 of the Council regulation n°3600/92 (Cf. art. 1).

➤ SIDS : Screening Information Data Set. The SIDS dossier contains the minimum information necessary for an initial hazard assessment of an existing chemical. These hazard assessments are managed by OECD<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Organisation of Economic Co-operation and Development

➤ SIAR : SIDS Initial Assessment Report. The SIAR, published by OECD, are the hazard assessment reports of existing substances. These reports are based on the information recorded in the SIDS.

### 3 Physical and chemical properties

#### 3.1 Molecular weight

The **molecular weight** (M) of a chemical is given in g.mol<sup>-1</sup>.

#### 3.2 Melting point

The **melting point** (in °C) is the temperature at which a solid becomes a liquid at normal atmospheric pressure (1013 hPa).

Cf. OECD guideline number 102 [6].

#### 3.3 Density

The **density** is the ratio between the weight of a volume of a chemical substance and the weight of the same water volume, at a temperature of 4°C.

Cf. OECD guideline number 109 [6].

#### 3.4 Log K<sub>ow</sub>

The octanol/water partition coefficient (**K<sub>ow</sub>**) is defined as the ratio of the equilibrium concentrations of a dissolved substance in a two-phase system consisting of two largely immiscible solvents. In the case of octanol and water:

$$K_{ow} = \frac{C_{oc\ tan\ ol}}{C_{water}}$$

The partition coefficient, being the quotient of two concentrations, or the quotient of the fractions of the test substance in the two phases multiplied by a fixed volume ratio, is dimensionless and is usually given in the form of its logarithm to base ten.

Cf. OECD guideline number 107 [6].

#### 3.5 K<sub>oc</sub>

**K<sub>oc</sub>** is the partition coefficient between the organic matter of soil or sediments and water. It is expressed in L.kg<sup>-1</sup>.

This partition coefficient is defined as the ratio between the amount of substance adsorbed (expressed by mass unity of soil or sediment organic carbon) and the concentration of the same chemical, in aqueous solution, at equilibrium (Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Lyman *et al.*, 1990):

$$K_{oc} = \frac{C(mg/kg_{soil})}{C(mg/L)}$$

The K<sub>oc</sub> can be determined:

- By experience (OECD guideline number 106 [6]) ;

- By calculation from the  $K_{ow}$ , using quantitative structure activity relationships (QSAR).

The affinity of a chemical compound for soil depends mainly on  $K_{oc}$  and on the organic carbon content of soil or sediments.  $K_{oc}$  can be employed for the determination of the distribution of a chemical between the aqueous and the solid fractions. The higher the  $K_{oc}$ , the more the substance will be adsorbed on the solid phase.

### 3.6 Vapour pressure

Expressed in Pascal (Pa), the **vapour pressure** corresponds to the saturation pressure above a solid or a liquid chemical substance. At thermodynamic equilibrium, the vapour pressure is only a function of the temperature.

Cf. OECD guideline number 104 [6].

The **vapour pressure** ( $P_{vap}$ ) gives an indication on the volatilisation capacity of a substance.

### 3.7 Solubility

The **solubility** of a substance (at room temperature) is the maximum dissolved concentration of a substance in water. It is a function of the temperature. It is expressed in weight unit per solution volume. In the International System, its unit is the  $kg/m^3$ ;  $g/L$  and  $mg/L$  are also frequently used.

Cf. OECD guideline number 105 [6].

### 3.8 Henry's law constant

The **Henry's law constant** can be determined experimentally or using Equation 1:

$$\text{Equation 1: } H = \frac{P_{vap} \times M}{\text{Solubility}}$$

It is expressed in  $Pa \cdot m^3 \cdot mol^{-1}$ .

The **Henry's law constant** (H) characterises the passage of a substance from the aqueous to the gaseous phase.

### 3.9 Biodegradation

Several tests are available to estimate the biodegradation potential of a substance:

- Ready biodegradability test (OECD guidelines number 301 A-F [6]),
- Inherent biodegradability test (OECD guidelines 302 A-C [6]),
- Simulation-test: aerobic sewage treatment (OECD guideline 303 [6]).

Ready biodegradability tests are based on the measurement of the disappearance of the DOC (Dissolved Organic Carbon), on the measurement of  $CO_2$  degassing or on the measurement of  $O_2$  consumption.

According to the Directive 67/548/EC, a substance can be considered as readily biodegradable when criteria hereafter are fulfilled. During 28-day biodegradation studies, the following degradation levels must be reached at least 10 days after the beginning of degradation<sup>2</sup> if the substance fulfilled the 10-day criterion:

---

<sup>2</sup> The beginning of the degradation starts when 10% of the test substance has been degraded.

- 70 % of degradation for assays based on dissolved organic carbon measurement.
- 60 % of degradation for assays based on O<sub>2</sub> consumption or CO<sub>2</sub> production measurement.

In the database, the field corresponding to biodegradation only gives an indication of the biodegradability of the substance. Five levels are stated:

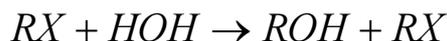
- Readily biodegradable
- Readily biodegradable (10-day criterion not fulfilled)
- Inherently biodegradable
- Not biodegradable
- or the field can be empty when no data is available

### **3.10 Freshwater (and seawater) persistence**

Persistence is often characterised with the half life (T<sub>1/2</sub>) of the substance (expressed in days). All ways of degradation of the chemical in freshwater are taken into account: biodegradation, photolysis, hydrolysis.

### **3.11 Hydrolysis as a function of pH**

The **hydrolysis** of a chemical compound (RX) is defined as its chemical reaction with water:



This reaction can be affected by hydronium (responsible for water acidity) and hydroxide ions (basic water). These species act as catalyst of the reaction (acid or basic catalysis).

The half life for the **hydrolysis** of a chemical compound is expressed in days.

OECD guideline number 111 [6].

### **3.12 Photolysis (in water)**

Photolytic processes mostly take place in the highest layers of water bodies. Indeed, suspended particulate matters do not enable such phenomenon to take place deeper.

In the absence of internationally recognised method for the determination of photolysis, the measurement is based on the UV absorption of the chemical substance. Consequently, seasonal variations in light fluxes must be taken into consideration.

**Photolysis** half life is expressed in days.

### **3.13 Soil persistence**

The **persistence** half life of a chemical compound in **soil** is expressed in days.

### **3.14 Photo oxidation with OH radicals**

More than photolysis, the main cause of substances degradation in the atmosphere (troposphere) is the **photo oxidation by OH radicals**. Half life of the substance is expressed in days.

### 3.15 Bioconcentration (BCF)

Bioconcentration is defined as the net result of the absorption, distribution and elimination of a substance in an organism, after an exposure *via* water.

The measurement of a bioconcentration factor (BCF) can be performed in two different ways:

- The static bioconcentration factor is the ratio between the chemical concentration in the organism and the chemical concentration in water, at equilibrium.
- When both absorption and elimination kinetics are measured, a dynamic bioconcentration factor can be calculated.

$$\text{Equation 2: } BCF_{fish} = \frac{C_{fish}}{C_{water}} \text{ or } \frac{k_1}{k_2}$$

With  $C_{fish}$ , the chemical concentration in fish (test organism) in mg/kg (preferably wet weight),  $C_{water}$ , the chemical concentration in water, in mg/L,  $k_1$ , the adsorption kinetic constant for the substance from water into fish, in L/kg.d,  $k_2$ , the elimination kinetic constant, in  $d^{-1}$  and  $BCF_{fish}$ , the bioconcentration factor for the test organism (here, the fish).

OECD guideline number 305 [6].

### 3.16 Partitioning coefficient water / soil, sediments, suspended particulate matters

$K_p$  is expressed in L/kg. It is defined as the ratio between the concentration of a substance adsorbed on soil (or on sediments, or on suspended particulate matters) and the concentration of the same substance, dissolved in water, at equilibrium:

$$K_{p\_comp} = \frac{C(mg/kg_{comp})}{C(mg/L)}$$

The  $K_p$  can be determined:

- Experimentally (OECD guideline number 106) ;
- By calculation (only for organic substances) using quantitative structure activity relationships (QSAR) with which  $K_p$  can be determined from  $K_{oc}$  or  $K_{ow}$  values [1].

The  $K_p$  enables the quantification of the adsorption of a substance on soil (or on sediments, or on suspended particulate matters). The intensity of the substance adsorption depends both on the chemical and on the solid phase properties.  $K_p$  values can be very different from soil to soil employed for the measure (Soil Transport and Fate Database and Model Management System, Environmental System and Technologies, 1991).

## 4 Ecotoxicology: effect assessment

### 4.1 Introduction

During the risk assessment process, effect assessment is divided in two major parts:

- The hazard identification. At this level, the environmental classification is also determined (Cf. 1.6).
- The assessment of dose (concentration) / response (effect). At this level, the Predicted No Effect Concentrations (PNECs) are determined, for each environmental compartment.

#### 4.2 Determination of PNEC based on ecotoxicity tests

During the PNEC determination process, for each environmental compartment (freshwater, seawater, sediments, soil, waste water treatment plants), the whole available ecotoxicological data is examined and the validity of each study is checked.

The PNEC represents the concentration below which an unacceptable risk should not occur. In general, the PNEC is calculated as the ratio between the smallest ecotoxicological test result ( $LC^3/EC^4_{50}$  or  $EC^4_{10}/NOEC^5$ ) and an adequate **assessment factor**. This assessment factor takes into account the uncertainty of the ecotoxicological test (extrapolation of data obtained in specific conditions of a laboratory to real environmental conditions, limited species number tested, etc.). The use of chronic toxicity test results reduce the uncertainty degree. Consequently, the assessment factor used is smaller. That is why such test results are preferred for the risk assessment.

#### 4.3 Equilibrium method

In the absence of ecotoxicity test results for terrestrial and benthic organisms (sediment compartment), the equilibrium method is used in order to derive a PNEC for soil or sediment from the PNEC determined for water. This method uses the partitioning coefficient of the chemical substance between water and solid matter (soil or suspended matter to derive  $PNEC_{soil}$  and  $PNEC_{sediment}$ , respectively).

Equation 3 is used.

**Equation 3: calculation of a PNEC with the equilibrium method**

$$PNEC = \frac{K_{comp-water}}{RHO_{comp}} \cdot PNEC_{water} \cdot 1000$$

---

$PNEC_{water}$	PNEC for water compartment	$[mg.L^{-1}]$	
$K_{comp-water}$	soil or suspended matter / water partitioning coefficient	$[m^3.m^{-3}]$	Eq. (24, TGD)
$RHO_{comp}$	density of compartment	$[kg.m^{-3}]$	Eq. (18, TGD)
PNEC	PNEC for soil or sediments	$[mg.kg^{-1}]$	

---

#### 4.4 Statistical method

In the TGD, the statistical method for the calculation of the PNEC is only proposed for the aqueous and the terrestrial compartments. Indeed, the majority of ecotoxicological tests are performed for these compartments and the statistical method can only be applied to a sufficiently large data set.

When a large set of chronic ecotoxicity data is available, the use of a statistical method for the PNEC determination is privileged. The species sensitivity distribution (SSD) made from the data set must present some characteristics:

- The data set has to follow a theoretical distribution law.

---

<sup>3</sup>  $LC_{50}$ : lethal concentration 50%. At this concentration, 50% of the tested organisms die.

<sup>4</sup>  $EC_x$ : effect concentration at x %. At this concentration, x % of the tested organisms are affected.

<sup>5</sup> NOEC: No Observed Effect Concentration.

- The groups of species tested in the laboratory must represent a random sample of this distribution.
- ...

Moreover, some conditions are necessary to constitute an adequate data set (TGD 3.3.1.2.).

## **4.5 Ecotoxicological data in the environmental database**

### **4.5.1 WATER ecotoxicology**

Ecotoxicological data concerning organisms living in aquatic compartments (freshwater and seawater) are reported in a summary table. Only the lowest validated ecotoxicological test results are retained for three trophic levels: algae, invertebrates (most of the time tests are conducted with daphnids species), fish. Results are expressed in mg/L by default ; nevertheless, other units can be mentioned in the remark field, at the bottom of the table. Some precision on the test results can be added as a remark, below the table.

A PNEC value is then given, when available. The extrapolation factors used, mean and standard deviation for statistical PNEC are also indicated. A remark can also be displayed when necessary.

### **4.5.2 SEDIMENTS and SOIL ecotoxicology**

In the same way as for ecotoxicological data for freshwater and seawater organisms, the lowest results of acute and chronic valid tests are summed-up in a table. The units that are used by default are also shown.

In the second part of sediments and soil ecotoxicological data, the PNEC retained for an environmental compartment is displayed with a mention of the method used for its determination: extrapolation factor method, partitioning method or statistical method. Remarks can also be displayed when necessary.

### **4.5.3 MICRO-ORGANISMS ecotoxicology**

In this chapter, data used for the assessment of the effects of a chemical substance on organisms living in sewage treatment plants (STP) are displayed. The lowest validated test result is indicated. The following information are also mentioned: measured endpoint, test duration, test organism.

The PNEC for the protection of STP micro-organisms is shown in a second part and a remark can be added if necessary.

## **5 Other information**

### **5.1 Information sources**

Indication of the source of information used to fill the datasheet.

- **European Union:** risk assessment reports for existing chemicals, in the context of the European regulation 793/93 [11]. This reports are available on the Internet, on the ECB web site: <http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/>.
- **OECD:** data on existing chemicals for which a SIDS has been elaborated (Screening Information Data Set). This report contains the minimum information required for hazard assessment of a substance (<http://cs3-hq.oecd.org/scripts/hpv/>). Draft reports are not available on the Internet.

- **INERIS**: data on chemical substances from specific studies performed by INERIS (<http://www.ineris.fr/>).

## **5.2 Finalisation stage**

**Elaboration state** of the dossier that has been used for the completion of the datasheet. Two states are possible: “draft” for dossiers still in development and “Finalised” for an achieved dossier.

## **5.3 Date**

**Elaboration date** of the dossier that has been used for the completion of the substance datasheet.

## **5.4 European dossier number**

The **European dossier number** is indicated. For example, the risk assessment report for the European substance “chloroform” is identified with the number “R047\_env\_0208.doc” (August 2002 version).

This number enable the identification of a risk assessment report on the ECB web site (<http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/>).

## **5.5 Internet links**

An **Internet link** which refers to the information source of the substance datasheet is indicated.

## **5.6 Validation level**

Three **validation levels** for the data of the datasheet are proposed:

- International consensus
- International project
- INERIS proposal

A unique validation level is applicable to all the elements of a datasheet. Nevertheless, when, in a same datasheet, several values are proposed for the same parameter, the symbol \* can be put to indicate the value that has been chosen or proposed by INERIS in order to complete the dossier.

## **5.7 Remarks**

All adequate mention.

## **5.8 Update**

Indication of the date of the **last update** of the datasheet.

## References

- [1] **CE (2002)** – *European Commission. Technical Guidance Document* in support of Commission Directive 93/67/EEC on risk assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) n° 1488/94 on risk assessment for existing substances and Directive 98/8/EC concerning the placing of biocidal products on the market
- [2] Communication from the Commission to the council and the European Parliament on the implementation of the Community Strategy for Endocrine Disrupters - a range of substances suspected of interfering with the hormone systems of humans and wildlife COM (2001)262
- [3] **Stockholm Convention on Persistent Organic Pollutants (POP)**, Stockholm, May, 22 **2001**
- [4] **OSPAR Convention**, Cut-off Values for the Selection Criteria Used in the Initial Selection Procedure of the OSPAR Dynamic Selection and Prioritisation Mechanism, Annex 6, § 4.12a, OSPAR convention meeting, Valencia, June, 25-29 **2001**
- [5] **Directive 2000/60/EC** of the European Parliament and of the Council, of 23 October 2000 establishing a framework for Community action in the field of water policy
- [6] **OECD Guidelines for the Testing of Chemicals**
- [7] **Council Directive 67/548/EEC** of 27 June 1967 on the approximation of laws, regulations and administrative provisions relating to the classification, packaging and labelling of dangerous substances
- [8] **Council Directive 76/464/EEC** of 4 May 1976 on pollution caused by certain dangerous substances discharged into the aquatic environment of the Community
- [9] **Council Directive 91/414/EEC** of 15 July 1991 concerning the placing of plant protection products on the market
- [10] **Commission Regulation (EEC) No 3600/92** of 11 December 1992 laying down the detailed rules for the implementation of the first stage of the programme of work referred to in Article 8 (2) of Council Directive 91/414/EEC concerning the placing of plant protection products on the market
- [11] **Council Regulation (EEC) No 793/93** of 23 March 1993 on the evaluation and control of the risks of existing substances
- [12] **Commission Regulation (EC) No 1179/94** of 25 May 1994 concerning the first list of priority substances as foreseen under Council Regulation (EEC) No 793/93
- [13] **Commission Regulation (EC) No 2268/95** of 27 September 1995 concerning the second list of priority substances as foreseen under Council Regulation (EEC) No 793/93
- [14] **Commission Regulation (EC) No 143/97** of 27 January 1997 concerning the third list of priority substances as foreseen under Council Regulation (EEC) No 793/93
- [15] **Commission Regulation (EC) No 2364/2000** of 25 October 2000 concerning the fourth list of priority substances as foreseen under Council Regulation (EEC) No 793/93
- [16] **Decision No 2455/2001/EC** of the European Parliament and of the Council of 20 November 2001 establishing the list of priority substances in the field of water policy and amending Directive 2000/60/EC (Text with EEA relevance)

- [17] **HELCOM** *lists of priority substances*, HELCOM 12/18, annex 6, HELCOM 14/18, §6.40 and HELCOM recommendations 19/5, appendix 3

## Annex

## Annex I : Industrial and Uses Categories of chemical substances – EUSES

## MAIN CATEGORIES

I	Use in closed systems	- non-isolated intermediates - isolated intermediates stored on-site - isolated intermediates with controlled transport
II	Use resulting in inclusion into or onto a matrix	
III	Non-dispersive use	
IV	Wide dispersive use	

## INDUSTRIAL CATEGORIES

1	Agricultural industry	9	Mineral oil and fuel industry
2	Chemical industry: basic chemicals	10	Photographic industry
3	Chemical industry: chemicals used in synthesis	11	Polymers industry
4	Electrical/electronic industry	12	Pulp, paper and board industry
5	Personal/domestic	13	Textile processing industry
6	Public domain	14	Paints, lacquers and varnishes industry
7	Leather processing industry	16	Engineering industries: civil and mechanical
8	Metal extraction, refining and processing industry	15/0	Others

## USE CATEGORIES

1	Absorbents and adsorbents	30	Hydraulic fluids and additives
2	Adhesive, binding agents	31	Impregnation agents
3	Aerosol propellants	32	Insulating materials
4	Anti-condensation agents	33	Intermediates (monomers; pre-polymers)
5	Anti-freezing agents	34	Laboratory chemicals
6	Anti-set-off and anti-adhesive agents	35	Lubricants and additives
7	Anti-static agents	36	Odour agents
8	Bleaching agents	37	Oxidizing agents
9	Cleaning/washing agents and additives (detergents; soaps; dry cleaning solvents; optical brighteners in detergents)	38	Plant protection products, agricultural
10	Colouring agents (dyestuffs; pigments; colour forming agents; fluorescent brighteners)	39	Biocides, non-agricultural (disinfectants; preservative products; pest control products; specialist biocides)
11	Complexing agents	40	pH-regulating agents
12	Conductive agents (electrolytes; electrode materials)	41	Pharmaceuticals (veterinary medicines)
13	Construction materials and additives	42	Photochemicals (desensitisers; developers; fixing agents; photosensitive agents; sensitisers; anti-fogging agents; light stabilisers; intensifiers)
14	Corrosion inhibitors	43	Process regulators (accelerators; activators; catalysts; inhibitors; siccatives; anti-siccatives; cross-linking agents; initiators; photo-initiators; etc.)
15	Cosmetics	44	Reducing agents
16	Dust binding agents	45	Reprographic agents (toners for photocopying machines; toner additives)
17	Electroplating agents	46	Semiconductors (photovoltaic agents)
18	Explosives (blasting agents; detonators; incendiaries)	47	Softeners (coalescing agents; bates in leather technology; devulcanizing agents; emollients; swelling agents; water softeners; plasticisers)
19	Fertilizers	48	Solvents
20	Fillers	49	Stabilizers
21	Fixing agents	50	Surface-active agents
22	Flame retardants and fire preventing agents	51	Tanning agents
23	Flotation agents	52	Viscosity adjustors (pour-point depressants; thickeners; thixotropic agents; turbulence suppressors; viscosity index improvers)
24	Flux agents for casting	53	Vulcanizing agents
25	Foaming agents (chemical/physical blowing agents; frothers)	54	Welding and soldering agents
26	Food/feedstuff additives	55/0	Others
27	Fuels (gasoline; kerosine; gas oil; fuel oil; petroleum gas; non-mineral oil)		
28	Fuel additives (anti-fouling agents; anti-knock agents; deposit modifiers; fuel oxidizers)		
29	Heat transferring agents (cooling agents; heating agents)		