

Rapport till Naturvårdsverket

UV-FILTER I SOLSKYDDSPRODUKTER – ETT MILJÖPROBLEM?

Litteraturinventering och QSAR analys

Göteborg 21 December 2008
Ann-Sofie Wernersson (asw@fbe.se)

FB Engineering AB
Skärgårdsgatan 1, Göteborg
Postadress: Box 12076, 402 41 Göteborg
Tel 010-850 1153
www.fbe.se

AKRONYMER

AKRONYM	BETYDELSE	LÄNKAR
BCF	Bioconcentration Factor	
CAS	Chemical Abstracts Service	http://www.cas.org/
ChV	Chronic Value	
ECB	European Chemicals Bureau; numera CPS&Q (Consumer Products Safety and Quality)	http://ecb.jrc.ec.europa.eu/
ESIS	European Chemical Substances Information System	http://ecb.jrc.ec.europa.eu/esis/
INCI	International Nomenclature of Cosmetic Ingredients	
INN	International Non-Proprietary Name	
IUCLID	International Uniform Chemical Information Database	
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry	www.iupac.org
K _{ow}	Oktanol vattenkoefficient	
LC50	Lethal Concentration 50%; den koncentration som dödar hälften av testorganismerna	
LOD	Level of Detection; detektionsgräns	
LOQ	Level of Quantification; kvantifieringsgräns	
MW	Molekylvikt	
PEC	Predicted Environmental Concentration	
PNEC	Predicted No Effect Concentration	
PBT	Persistent, Bioackumulerbar och Toxisk	
QSAR	Quantitative Structure Activity Relationship	
SAR	Structure Activity Relationship	
SCCNFP	The Scientific Committee on Cosmetic Products and Non-Food Products intended for Consumers	http://ec.europa.eu/health/ph_risk/committees/committees_en.htm
SCCP	Scientific Committee on Consumer Products	http://ec.europa.eu/health/ph_risk/committees/committees_en.htm
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry System	
SRC	Syracuse Research Corporation	www.syrres.com/esc
TGD	Technical Guidance Document on Risk Assessment	

AKRONYM	BETYDELSE	LÄNKAR
USAN	United States Adopted Name	
USEPA	United States Environmental Protection Agency	www.epa.gov
vPvB	Mycket (very) persistent och mycket bioackumulerbar	

SAMMANFATTNING PÅ SVENSKA

Det finns mer än 600 olika solskyddsprodukter på den svenska marknaden. Vilka UV filter som får användas, och i vilka halter de får tillsättas i dessa sammanhang, regleras av Kosmetikadirektivet och Läkemedelsverkets föreskrifter. Bedömningen baseras på enbart hälsorelaterade effekter och de miljörelaterade effekterna är dåligt kända. UV filter i solskyddsprodukter kan i hög omfattning förväntas nå den yttre miljön direkt vid bad men även via reningsverk. Internationell forskning visar att vissa UV filter förekommer i detekterbara halter i ytvatten, fiskvävnader, reningsverksslam och bröstmjölk. Syftet med denna rapport är därför att kartlägga deras inneboende egenskaper, förekomsten av organiska UV filter i olika matriser samt uppskatta halter som inte förväntas ge effekter på vattenlevande organismer.

Utifrån UV filtrens kemiska strukturer beräknas vilka halter som ger effekter i vattenlevande organismer och deras fördelning mellan olika matriser som vatten, sediment och biota. Dessa beräkningar kompletteras med en litteraturstudie av hittills uppmätta halter internationellt och observerade effekter i försök på celler, däggdjur och akvatiska organismer. Utifrån beräkningarna görs en bedömning av huruvida substanserna besitter särskilt farliga egenskaper så att de utgör en risk för miljön på längre sikt.

Kartläggningen visar att tjugo av filtren beräknas vara ej biologiskt lättnedbrytbara, och deras bioackumulationspotential (BCF värdet) varierar mellan 3 och 40 000. Flera filter har därtill uppmätts i fiskvävnader i upp till 3 mg/g fett vilket antyder att en bioackumulation kan ske under naturliga förhållanden. Fem av substanserna kan betecknas som potentiella PBT ämnen och tre av dessa som potentiella vPvB ämnen.

De högsta koncentrationer under vilka man troligen inte får effekter varierar mellan 0,00000013 mg/l och 12 mg/l. Därtill kan man i den vetenskapliga litteraturen konstatera att åtminstone tolv av UV filtren kan ge upphov till hormonell påverkan, och för tre av dessa har resultaten kunnat bekräftas även för akvatiska organismer vid *in vivo* studier.

I nio fall av tio befinner sig maximalt uppmätta halter högre än de halter som tros vara säkra för vattenlevande organismer. Tre av UV filtren har dessutom uppmätts i halter som befinner sig mer än 10 000 gånger högre än de säkra koncentrationerna och i ytterligare tre fall mer än 100 gånger högre.

Ämnernas inneboende egenskaper, framräknade riskkvoter och deras fördelning i miljön ligger till grund för rekommendationer om vilka ämnen som bör mätas nationellt samt i vilka matriser.

SUMMARY IN ENGLISH

There are more than 600 different sunscreen products on the Swedish market. The type of UV filters that are allowed in this context, and in what percentage, is regulated by the Cosmetics Directive. The assessment is based only on health effects and environmental effects are poorly known.

A substantial fraction of used UV filters in sunscreens can reach the external environment directly during beach activities, but also indirectly through Sewage Treatment Plants. Some UV filters have been detected in surface waters, fish tissues, sewage sludge and breast milk in scientific international studies. The purpose of this report is to characterize the inherent properties of these substances in the environment, the occurrence of organic UV filters in different compartments based on current data and to estimate at what concentrations above which no negative effects can be expected to occur in aquatic organisms.

From the chemical structures, the levels of effects in aquatic organisms and their distribution among different matrices such as water, sediment, and biota can be calculated. These calculations are complemented by a literature review of international monitoring data and observed effects in experiments on cells, mammals and aquatic organisms. Based on their structures, whether the substances possess properties that could pose a risk to the environment in the longer term is assessed.

The results show that twenty of the filters cannot be considered ready biodegradable, and their BCF values vary between 3 and 40 000. Several UV filters have been detected in fish tissues in concentrations of up to 3 mg/g fat, suggesting that bioaccumulation can occur also under natural conditions. Five of the substances can be considered potential PBT substances and three of them potential vPvB substances.

The lowest concentrations under which negative effects probably will not occur, varies between 0,00000013 mg/l and 12 mg/l. In addition, scientific literature shows that at least twelve of the UV filters can be suspected to cause endocrine disruption. For three of the filters endocrine disruption has also been confirmed in *in vivo* studies on aquatic organisms.

Measured concentrations are compared to estimated effect levels. In nine out of ten cases, maximum measured concentrations are higher than concentrations that can be considered safe to aquatic organisms. Three of the substances have been measured at concentrations more than 10 000 times higher than safe concentrations and in another three cases concentrations are more than 100 times higher.

Based on the inherent properties, calculated risk ratios and distribution in the environment, recommendations are made regarding what substances should be monitored nationally and in what compartment.

INNEHÅLLSFÖRTECKNING

1	BAKGRUND	8
2	METODIK.....	9
2.1	QSAR beräkningar.....	9
2.2	Empiriska data.....	11
2.2.1	Sökningar i databaser	11
2.2.2	Internationellt publicerade och vetenskapligt granskade forskningsresultat	11
3	RESULTAT	11
3.1	Beräknade data.....	11
3.2	Empiriska data.....	12
3.2.1	Observerade effekter.....	12
3.2.2	Uppmätta halter	20
4	RISKBEDÖMNING.....	26
4.1	PEC beräkning.....	26
4.2	PNEC beräkning	27
4.3	Riskkvoter	28
4.4	PBT bedömning.....	29
5	SCREENING AV UV FILTER – REKOMMENDERADE ÄMNINGAR RESPEKTIVE MATRISER	30
6	ANALYSMETODIK	32
7	NEDBRYTNINGSPRODUKTER OCH OORGANISKA UV-FILTER	33
8	SLUTSATSER.....	35
9	REFERENSER	36
9.1	Publikationer, rapporter och lagtexter	36
9.2	Länkar	40

10	BILAGA A. UV FILTER SOM ÄR TILLÅTNA I KOSMETISKA PRODUKTER.....	42
11	BILAGA B. QSAR RESULTAT	52
12	BILAGA C: PBT OCH VPVB KRITERIER ENLIGT REACH	60

1 BAKGRUND

Användningen av solskyddsprodukter är stor och ökar. Enbart i Sverige såldes under 2006 solvårdsprodukter för över 300 miljoner kronor och det finns mer än 600 solskyddsprodukter på den svenska marknaden (KTF; Läkemedelsverket 2004). Användningen av UV filter i solskydds- och kosmetiska produkter uppmuntras eftersom de utgör ett skydd för att minska hälsorisker vid vistelse i solen.

UV filter i solskyddsprodukter regleras i dagsläget av Kosmetikadirektivet (76/768/EEG) och Läkemedelsverkets föreskrifter relaterade till ämnen som ingår i kosmetiska produkter (LVFS 2007:4). I dessa anges vilka UV filter som är tillåtna att använda i kosmetiska och hygieniska solskyddsprodukter, se bilaga A till denna rapport. UV filter definieras i detta sammanhang som en substans som är "speciellt avsedd att filtrera vissa UV-strålar för att skydda huden från vissa skadliga effekter av dessa strålar". De får även tillsättas andra kosmetiska och hygieniska produkter, inom de gränser och enligt de villkor som anges. Det är värt att notera att UV-absorbenter, vilka används i kosmetiska och hygieniska produkter endast för att skydda själva produkten mot UV-strålar, inte omfattas av denna lista.

Kosmetikadirektivet beaktar enbart hälsorelaterade aspekter. UV-filtrens eventuella negativa effekter i miljösammanhang har därför hittills inte undersökts i någon större utsträckning av myndigheter. Internationell forskning visar emellertid att flera UV filter har förmågan att inducera hormonella effekter i både däggdjur och vattenlevande organismer (Kunz *et al* 2006a). UV filter kan i hög omfattning nå den yttre miljön genom direkta utsläpp till ytvatten i samband med bad utomhus. Danovaro *et al* (2008) observerade att en fjärdedel av den mängd som applicerats på huden nådde omgivande vatten inom 20 minuter. En stor andel hamnar även i avloppsvattnet, och kan således nå den yttre miljön indirekt, vid otillräcklig rening. Vissa UV filter har detekterats i miljörelaterade matriser såsom ytvatten (Balmer *et al* 2005), fiskvävnader (Nagtegaal *et al* 1997), reningsverksslam (Plagellat *et al* 2006) och i bröstmjolk (Schlumpf *et al* 2008b). Frågan har uppmärksamats internationellt och användningen av solskyddsprodukter är av försiktighetsskäl förbjuden vid vistelse i vissa marina reservat (Danovaro *et al* 2008).

Eftersom de substanser som används som UV filter kan ha mycket varierande egenskaper och används i olika omfattning är det motiverat att göra en systematisk genomgång av vilka miljörelaterade risker som kan tänkas vara förknippade med användningen av de UV filter som är godkända inom EU. Syftet med denna rapport är därför att kartlägga UV filtrens inneboende egenskaper ur miljösynpunkt och hur höga hittills detekterade halter befinner sig i förhållande till de som kan tänkas ge negativa effekter i miljön. Rapporten är avsedd att utgöra ett underlag för att utvärdera vilka behov det finns att genomföra en nationell screening av dessa ämnen i olika matriser, såsom ytvatten, sediment, avloppsslam och biota.

2 METODIK

UV filtrens inneboende egenskaper undersöks främst med hjälp av QSAR (Quantitative Structure Activity Relationship)¹ beräkningar, och genom att söka i den vetenskapliga forskningslitteraturen. En bedömning görs av huruvida vissa av UV filtren med stor sannolikhet har särskilt farliga egenskaper vilka medför att de kan ge långsiktiga effekter i miljön. De aspekter som bedöms är deras PBT och vPvB egenskaper, dvs persistens (stabilitet), bioackumulerbarhet och toxicitet².

Hittills detekterade halter i vatten, sediment, biologiska vävnader, avloppsvatten och slam samt bröstmjölk sammanställs. Maximalt uppmätta halter i vatten (worst case PEC; Predicted Environmental Concentration) och uppskattningar av motsvarande halter i sediment jämförs sedan med de halter som inte beräknas ge effekter, PNEC (Predicted No Effect Concentration). PNEC för vatten- och sedimentlevande organismer räknas fram enligt det tillvägagångssätt som beskrivs i EU kommissionens vägledningsdokument för riskbedömning, TGD (Technical Guidance Document, ECB 2003).

Utifrån riskkvoter (PEC/PNEC) för vatten och sediment samt substansernas inneboende egenskaper görs en sammanställning av substanser att prioritera vid en eventuell nationell screening. Förslag ges även på vilka matriser som kan vara mest angelägna att undersöka för dessa substanser.

De 27 UV-filter som i dagsläget är tillåtna i kosmetiska produkter inom EU återfinns i bilaga A, tillsammans med ämnesnamn (inkl synonymer), CAS nummer, maximal koncentration som får användas i solskyddsprodukter samt deras kemiska struktur. Fokus har legat på de organiska filtren, vilka utgör 26 av dessa 27 substanser.

2.1 QSAR beräkningar

QSAR beräkningar görs med hjälp av Episuite (USEPA 2007). De egenskaper som beräknats är relaterade till effekter på vattenlevande organismer, fördelning mellan vatten/luft/biota/organiskt kol samt biologisk nedbrytbarhet. Några relevanta beräknade värden redovisas i tabellen i bilaga B. För ekvationer som använts hänvisas till hjälpmanualen för programmet.

För att kunna räkna fram de flesta QSAR data krävs att strukturens utseende uttrycks med hjälp av SMILES³ notation. SMILES genereras i de flesta fall automatiskt av programmet (via en separat databas) efter inmatning av CAS. I de fall då Episuite ej har kunnat hitta CAS numret i databasen har SMILES istället sökts via PubChem alternativt räknats fram utifrån strukturen med hjälp av Online SMILES translator alternativt Sparc On-line Calculator (se länklistan).

¹ Utifrån ämnets struktur modelleras data fram som beskriver molekylens aktivitet, såsom förväntade effekter på organismer och nedbrytbarhet.

² vPvB står för att ämnet både är mycket stabilt och kan lagras upp i mycket höga halter inuti levande organismer. Även om halterna idag således inte är särskilt höga kan man på sikt få negativa effekter i miljön.

³ Notationssystem särskilt utvecklat för användning inom kemoinformatik

I de flesta fall har av programmet förvalda värden (defaultvärden) använts. Detta gäller t ex antaganden för att beräkna halveringstid ($t_{1/2}$) i luft (OH hastighetskonstant $40,37E-12$ $cm^3/molekyl\cdot sekund$, $1,5E6$ OH/cm^3 samt 12 h dag).

Huruvida substansen antas vara lätt bionedbrytbar uppskattas utifrån dess predikterade nedbrytning i ett så kallat MITI test⁴. Detta test mäter substansens inneboende förmåga att brytas ner fullständigt (mineraliseras) i en viss grad och inom en viss tid och under förutsättningar som anses relativt stränga map tillgång till t ex näringssubstrat.

K_{ow} (oktanol-vatten-koefficienten) anger hur mycket av substansen som skulle lösa sig i respektive fas. Detta värde ger en uppskattning av substansens förmåga att lösa sig i fett. BCF (Bioconcentration Factor) anger hur mycket av substansen som beräknas kunna lagras upp inuti levande organismer i förhållande till hur mycket som återfinns i omgivande vatten. Denna uppskattning baseras främst på ämnets K_{ow} , och generellt antas att ju högre K_{ow} desto högre BCF. Det finns dock en övre gräns för när BCF ökar med ökande K_{ow} , eftersom tillräckligt stora molekyler har svårt att ta sig in genom biologiska membran.

Henrys lags konstant ger en indikation på hur benägen substansen är att avdunsta från våta och fuktiga ytor. Den räknas ut genom att multiplicera ångtrycket med molekylvikten (MW) samt vattenlösligheten. Ju högre värde, desto mer benägen är substansen att avdunsta från dessa ytor. Som tumregel kan man utgå från att en Henrys lags konstant på över $0,1 Pa\cdot m^3/mol$ antyder att en signifikant avdunstning från grunda vatten kan ske och ett värde på över 100 antyder att avdunstningen är snabb.

Vattenlöslighet kan beräknas på olika sätt av Episuite, och beroende på beräkningssätt kan man få mycket varierande värden. Värdet beaktas ej vid beräkning av effektdata, men i de fall ett framräknat värde antas överskrida vattenlösligheten markeras detta med kursiv stil i bilaga B.

Giftigheten uttrycks i form av LC50 värden (Median Lethal Concentration), dvs den koncentration som förväntas döda hälften av testorganismerna, alternativt ChV (Chronic Value), dvs den högsta koncentration under vilken man ej förväntar sig effekter. Effekter på vattenlevande organismer räknas fram dels med en QSAR metod utvecklad för icke reaktiva föreningar (14d LC50 för fisk; "non polar organics SAR"), dels med ekvationer för specifika kemiska klasser, vars funktionella grupper ofta bidrar till ökad toxicitet.

Dessutom uppskattas ämnets initiala fördelning i olika miljömatriser (sediment, vatten, jord och luft) genom s k fugacitetsmodellering enligt Mackay. När dessa gjordes har en ändring av programmets grundinställningar gjorts och alla utsläpp (100%) antas istället ske till vattnet (och inget till luft eller jord), eftersom man kan anta att de flesta utsläpp till miljön av UV filter sker till antingen vattnet direkt eller via reningsverken. De mindre mängder som eventuellt når miljön via andra utsläppsvägar beaktas således ej i detta sammanhang.

⁴ Se OECD 301C. OECD guideline for testing of chemicals: Modified MITI test

2.2 Empiriska data

Litteraturstudien baseras främst på internationellt publicerade och granskade vetenskapliga artiklar men även sökningar i databaser.

2.2.1 Sökningar i databaser

Följande databaser (se länklistan) har undersökts genom inmatning av respektive CAS nummer för substanserna:

- Klassificeringsdatabasen (Kemikalieinspektionen)
- ECOTOXdatabasen (USEPA)
- ESIS (European Chemical Substance Information System; EU)
- HSDB (Hazardous Substances Data Bank; National Library of Medicine, USA)
- BIODEG (SRC)

2.2.2 Internationellt publicerade och vetenskapligt granskade forskningsresultat

Publikationer i den internationella vetenskapliga litteraturen har sökts via universitetsbibliotek och internationella sökmotorer. De sökord som givit flest relevanta träffar omfattar bl a:

Benzophenone and fish
UV-filter* and fish*
UV-filter* and environ*
sunscreen* and environ*
UV-filter* and environ*
UV-screen* and environ*
Personal care product* and environ*

Flera referenser har även inhämtats genom kontakt med enskilda forskare och genom sökningar i referenslistor för nyligen publicerade artiklar.

3 RESULTAT

3.1 Beräknade data

Resultaten av QSAR beräkningarna presenteras i bilaga B. De genomfördes för alla 27 UV filter förutom #11, #26 och #27. De två förstnämnda är polymerer och den sistnämnda är ett mineralbaserat oorganiskt filter (Titanium dioxide).

Enligt QSAR beräkningarna är det tydligt att UV filtren har oerhört varierande inneboende egenskaper m a p effekter, bioackumulerbarhet och persistens. Detta är inte förvånande då de tillhör vitt skilda klasser av föreningar, såsom ketoner, fenoler, och estrar. Olika funktionella grupper och molekylstorlek påverkar jämviktsfaktorer, nedbrytbarhet och

effekter. Log K_{ow} varierar mellan -4,15 och 17,05 och BCF⁵ mellan 3,16 och 39 700. De lägsta koncentrationer över vilka man kan tänkas få effekter varierar mellan 4,4E-12 och 120 mg/l. De mest giftiga substanserna har dock mycket höga log K_{ow} värden och ligger utanför QSAR modellens giltighetsgränser, varför ett mer realistiskt lägsta ChV värde torde vara 1,3E-6 mg/l. Av de undersökta substanserna beräknas 20 (av totalt 24 bedömda) vara ej biologiskt lättnedbrytbara.

3.2 Empiriska data

Få data återfanns i Klassificeringsdatabasen (KIFS 2005:5), ESIS och ECOTOX. Endast substans #15 och # 23 hade en harmoniserad klassificering enligt KIFS 2005:5 (R53; "Kan orsaka skadliga långtidseffekter i vattenmiljön").

De flesta UV filter fanns med i ESIS, men enbart med information om producerande företag. Endast två av substanserna tillverkades i Sverige: #1, #21. Information om följande substanser saknades: #7, #9, #11, #16, #17; #24-26 och #28. För # 23 saknades information om producerande länder.

I ECOTOX databasen återfanns data enbart för TiO₂, ett oorganiskt filter, men inga data fanns för de organiska filter som ingick i denna studie.

Ett femtiotal vetenskapliga artiklar relaterade till uppmätta halter och effekter hos UV filter återfanns, och resultaten sammanfattas kort i tabell 1 och 2. Sökningarna gjordes främst med utgångspunkt från effekter på vattenlevande organismer samt uppmätta halter i olika miljömatriser såsom vatten, sediment och fiskvävnader. Vissa typer av effekter som observeras *in vitro* och på däggdjur kan dock vara relevanta även för vattenmiljön, varför dessa också har tagits med i sammanställningen.

Det är tydligt att det enbart är vissa UV filter som undersökts i någon större utsträckning map deras miljörelaterade egenskaper. För följande filter återfanns ingen vetenskaplig publicerad information om effekter eller spridning/omvandling: #2, #6, #9, #11, #13, #15, #16, #17, #24, #26, #28. För följande återfanns ingen information om uppmätta halter i miljön, avloppsvatten eller biologiska matriser: #1, #2, #6, #7, #9, #11, #13, #16, #17, #23-28. För flera filter saknas således empirisk information om både effekter och halter.

3.2.1 Observerade effekter

Empiriska effektdata som hittills publicerats i forskningslitteraturen är främst relaterade till hormonella effekter och då särskilt estrogen och androgen respons observerad på cellnivå (*in vitro*). Även om däggdjur är mer undersökta än fiskar och ryggradslösa djur kan resultaten vara relevanta även i den akvatiska miljön eftersom samma typer av receptorer många gånger kan återfinnas hos båda organismgrupperna. Därför tas även resultat från *in vitro* tester och tester på däggdjur med i sammanställningen i tabell 1.

Utifrån *in vitro* studier kan man misstänka att åtminstone tolv av UV filtren är hormonstörande (#1, #3, #4, #8, #10, #12, #14, #18, #19, #20, #21, #22). Kunz & Fent (2006b) kunde dessutom påvisa synergistisk samverkan mellan flera av dessa. Ett positivt svar vid *in vitro* tester behöver dock inte innebära att man även får motsvarande effekter

⁵ I de fall log K_{ow} är större än 7,0 antas att BCF är 3,16

in vivo, och resultaten är inte alltid samstämmiga. Schreurs *et al* (2002) observerade t ex estrogena effekter vid *in vitro* studier av #3, #4, #8, #12, #18 och #21 medan *in vivo* tester på transgena zebrafiskar inte gav någon estrogen aktivitet vid test av motsvarande substanser. För #4, #19, #20 och #22 har *in vitro* studier på akvatiska organismer bekräftat en hormonell verkningsmekanism och för # 12 har andra forskare kunnat observera en hormonell påverkan på vattenlevande organismer vid *in vivo* studier (Inui *et al* 2003). För #18 och #19 upptäcktes hormonella effekter vid *in vivo* studier både på däggdjur och vattenlevande organismer.

Schlenk *et al* (2005) undersökte sediment som hämtats nedströms reningsverk och uppvisade endokrina effekter på fisk. Genom att fraktionera upp sedimenten mha HPLC och sedan testa aktiviteten hos dessa fraktioner kunde de bl a observera att #4 förekom i en av de sedimentfraktioner som uppvisade endokrina effekter. Ytterligare några oidentifierade substanser förekom dock också i denna fraktion. En sammanställning av hormonella effekter av UV filter publicerades 2004 av Schlumpf *et al* 2004. I denna ingår dock även filter som inte är godkända inom EU.

Några studier påvisar även andra typer av effekter. I en undersökning av Danovaro *et al* (2008) påvisades att vissa filter kan påverka korallrev negativt, troligen genom att aktivera virus inne i de organismer som lever i korallerna, se tabell 1. Mest potent av de undersökta filtren var #12 som observerade blekningseffekter i laboratoriestudier. Under *in situ* studier av #4, #8, #10, #12, #18, #20 observerades blekningseffekter av #4, #12, och #18, och inom 96h kunde blekningsgrader på 84-95% observeras relativt kontrollerna (se även tabell 1 för procentuell grad av frisläppta zooxanthellae⁶).

Scheil *et al* (2008) observerade en induktion av stressproteiner (Hsp70) i en evertebrat (*Gammarus fossarum*) vid exponering av adulta organismer i 4 dagar för #19. Maximala nivåer uppnåddes vid en exponering för 3,3 µg/l . Högre halter (330 µg/l) gav lägre Hsp70 nivåer, vilket troligen berodde på att Hsp70 syntesen upphörde till följd av skador på cellerna i bl a hepatopancreas.

Andra hälsomässiga aspekter, såsom fototoxicitet vid hudkontakt har inte beaktats i denna rapport. Dessa aspekter är ofta undersökta av de vetenskapliga komitéerna, såsom SCCP (Scientific Committee on Consumer Products). Det kan dock nämnas att vissa filter även misstänks kunna ge upphov till mutagena effekter. Denna typ av effekter brukar traditionellt sett beaktas främst vid en bedömning av risker för människor, men det är naturligtvis möjligt att mutationer och cancerogena effekter även kan uppstå på vattenlevande organismer. Den ekologiska relevansen är dock omdiskuterad.

⁶ Zooxanthellae: symbiotisk alg som lever inuti cellerna hos vissa marina evertebrater och förser dem med näringsämnen. När zooxanthellerna är färglösa eller lämnar korallen syns bara det kalkhaltiga skalet – vilket förklarar att man kallar fenomenet för korallblekning.

Tabell 1. Sammanfattning av observerade miljörelaterade egenskaper hos UV filtren.

Nr	Nedbrytbarhet, Elimineringsgrad i reningsverk	Bioackumulerbarhet, akvatisk	Effekter <i>in vivo</i>	Endrogena effekter <i>in vitro</i>
1	Lätt bionedbrytbar (BIODEG; HSDB)			JA (antiestrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)
2				
3			Inga estrogena effekter (transgen zebrafisk; Schreurs <i>et al</i> 2002)	JA (antiandrogen; humana celler; Ma <i>et al</i> 2003) JA (androgen; jästceller; Kunz & Fent 2006a) JA (antiestrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a) JA (antiandrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a) JA (estrogen; Schreurs <i>et al</i> 2002)
4	Ej biologiskt lättnedbrytbar (HSDB, BIODEG) 68-96% eliminering i avloppsreningsverk (Schweiz, Balmer <i>et al</i> 2005) 28-31% eliminering i återvinningsanläggning för avloppsvatten (Kina; Li <i>et al</i> 2007)	BCF uppmätts till 33-160 (HSDB)	Inga estrogena effekter (transgen zebrafisk; Schreurs <i>et al</i> 2002) Frisläppande av zooxanthellae hos koraller: 83 resp 84% vid <i>in situ</i> test av 33 ul/l i Röda Havet, Egypten resp 50 ul/l i Andamanska Havet, Thailand (Danovaro <i>et al</i> 2008) Misstänks bidra till observerade endokrina effekter i fisk efter exponering för sediment nedströms avloppsreningsverk (Schlenk <i>et al</i> 2005)	JA (antiandrogen; humana celler; Ma <i>et al</i> 2003) JA (estrogen; Heneweer <i>et al</i> 2005) JA (estrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a) JA (antiestrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a) JA (antiandrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a) JA (estrogen; Schreurs <i>et al</i> 2002)

Nr	Nedbrytbarhet, Elimineringsgrad i reningsverk	Bioackumulerbarhet, akvatisk	Effekter <i>in vivo</i>	Endrogena effekter <i>in vitro</i>
6				
7	Fotolyseras i icke polärt lösningsmedel (Huong <i>et al</i> 2008)			
8			Inga estrogena effekter (transgen zebrafisk; Schreurs <i>et al</i> 2002) Frisläppande av zooxanthellae hos koraller: 13% vid <i>in situ</i> test av 33 ul/l i Röda Havet, Egypten; Ingen blekningseffekt observerades (Danovaro <i>et al</i> 2008)	JA (estrogen; Schreurs <i>et al</i> 2002)
9				
10	88-99% eliminering i avloppsreningsverk (Schweiz, Balmer <i>et al</i> 2005) 36-38% eliminering i återvinningsanläggning för avloppsvatten (Kina; Li <i>et al</i> 2007)	380 ng/SPMD; (Semipermeabla membran; ytvatten; Schweiz; Poiger <i>et al</i> 2004)	Frisläppande av zooxanthellae hos koraller: 3% vid <i>in situ</i> test av 33 ul/l i Röda Havet, Egypten; Ingen blekningseffekt observerades (Danovaro <i>et al</i> 2008)	JA (antiestrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a) JA (androgen; jästceller; Kunz & Fent 2006a) JA (antiandrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)
11				
12	97->99% eliminering i avloppsreningsverk (Schweiz, Balmer <i>et al</i> 2005) 40-43% eliminering i återvinningsanläggning för	360 ng/SPMD; (Semipermeabla membran; ytvatten; konc i blank: 57 ng/SPMD; Schweiz; Poiger <i>et al</i> 2004)	Inga estrogena effekter (transgen zebrafisk; Schreurs <i>et al</i> 2002) Estrogena effekter (fisk; Inui <i>et al</i> 2003). Signifikant vitellogenin och choriogenin-induktion vid lägsta testkoncentrationen:	JA (estrogen; Heneweer <i>et al</i> 2005) JA (antiestrogen; Kunz & Fent 2006a)

Nr	Nedbrytbarhet, Elimineringsgrad i reningsverk	Bioackumulerbarhet, akvatisk	Effekter <i>in vivo</i>	Endrogena effekter <i>in vitro</i>
	avloppsvatten (Kina; Li <i>et al</i> 2007)		0,034 mM (=9,8 mg/l). Frisläppande av zooxanthellae hos koraller: 86 resp 90% vid <i>in situ</i> test av 33 ul/l i Röda Havet, Egypten resp 50 ul/l i Andamanska Havet, Thailand (Danovaro <i>et al</i> 2008)	JA (androgen; Kunz & Fent 2006a) JA (antiandrogen; Kunz & Fent 2006a) JA (estrogen; Schreurs <i>et al</i> 2002)
13				
14			Ingen påverkan på könskvot eller metamorfos (amfibier; Kunz <i>et al</i> 2004)	JA (antiestrogen; Kunz & Fent 2006a) JA (androgen; Kunz & Fent 2006a) JA (antiandrogen; Kunz & Fent 2006a)
15				
16				
17				
18	18-82% eliminering i avloppsreningsverk (Schweiz, Balmer <i>et al</i> 2005) 37-40% eliminering i återvinningsanläggning för avloppsvatten (Kina; Li <i>et al</i> 2007)	BCF vildfångad fisk 9700-23000 (Schweiz; Balmer <i>et al</i> 2005) BCF vildfångad fisk 5200 (Tyskland Nagtegaal <i>et al</i> 1997) 950 ng/SPMD; (Semipermeabla membran; ytvatten; Schweiz; Poiger <i>et al</i> 2004)	Inga estrogena effekter (transgen zebrafisk; Schreurs <i>et al</i> 2002) Estrogena effekter (fisk; Inui <i>et al</i> 2003). Signifikant vitellogenin och choriogenin-induktion vid lägsta testkoncentrationen: 0,039 mM (=9,4 mg/l). Effekter på tillväxt (fisk; Kunz <i>et al</i> 2006a). 415 resp 753 µg/l gav signifikant effekt Effekter på reproduktion (sedimentlevande evertebrater, Schmitt <i>et al</i> 2008). EC50: 1,17 mg/kg torrvikt	JA (estrogen; Heneweere <i>et al</i> 2005) JA (estrogen; Klann <i>et al</i> 2005) JA (antiestrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a) JA (antiandrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a) JA (estrogen; Schreurs <i>et al</i> 2002)

Nr	Nedbrytbarhet, Elimineringsgrad i reningsverk	Bioackumulerbarhet, akvatisk	Effekter <i>in vivo</i>	Endrogena effekter <i>in vitro</i>
19		BCF: 313 (fisk) (Kunz et al 2006b)	<p>Frisläppande av zooxanthellae hos koraller: 10 resp 95% vid <i>in situ</i> test av 33 ul/l i Röda Havet, Egypten resp 50 ul/l i Andamanska Havet, Thailand (Danovaro et al 2008)</p> <p>Estrogeniska tillväxteffekter i rätta (Hofkamp et al 2008). 7,0 mg/kg kroppsvikt per dag</p> <p>Reproduktionsstörningar hos rätta (Schlumpf et al 2008a, b). LOAEL och NOAEL: 7 resp 0,7 mg/kg.</p> <p>Ingen påverkan på könskvot eller metamorfos (amfibier; Kunz et al 2004)</p> <p>Vitellogenin induktion (fisk; Holbech et al 2002) 6d ED50: 16 mg/kg (injicerats)</p> <p>Induktion av stressproteiner och cellskador på hepatopancreas (amfipoder; Scheil et al 2008) Maximal Hsp70 induktion vid 3,3 µg/l ; cellskador vid 330 µg/l</p> <p>Effekter på reproduktion (sedimentlevande evertebrater, Schmitt et al 2008). EC50: 1,43 resp 6,46 mg/kg torrsvikt</p> <p>Vitellogenin induktion och påverkan på tillväxt (fisk; Kunz et al 2006a). Signifikant påverkan vid 435 resp 953 µg/l .</p> <p>Reproduktionseffekter (fisk; Kunz et al 2006b). Vitellogenininduktion, demaskulinisering, inhibition av oocyte och spermatocytutveckling samt fekunditet vid 74µg/l ; reproduktion upphörde vid 285µg/l</p>	<p>JA (estrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (antiestrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (antiandrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (estrogen; jästceller med fiskreceptor; Kunz et al 2006a). EC50: 2,9 mg/l</p>

Nr	Nedbrytbarhet, Elimineringsgrad i reningsverk	Bioackumulerbarhet, akvatisk	Effekter <i>in vivo</i>	Endrogena effekter <i>in vitro</i>
20			<p>Inga estrogenrelaterade tillväxteffekter (råtta; Hofkamp et al 2008)</p> <p>Reproduktionsstörningar hos råttor (Schlumpf et al 2008a, b). LOAEL och NOAEL: 0,24 resp 0,07 mg/kg</p> <p>Frösläppande av zooxanthellae hos koraller: 3% vid <i>in situ</i> test av 33 u/l i Röda Havet, Egypten. Ingen blekningsseffekt observerades (Danovaro et al 2008)</p>	<p>JA (antiestrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (androgen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (antiandrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (estrogen; jästceller med fiskreceptor; Kunz et al 2006a). EC50: 964 mg/l</p>
21	Fotolyseras i naturligt solljus; t½: 27h (dest vatten) - 39h (havsvatten) (Sakkas et al 2003)		Inga estrogena effekter (transgen zebrafisk; Schreurs et al 2002)	<p>JA (antiestrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (antiandrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (estrogen; Schreurs et al 2002)</p> <p>JA (estrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (antiestrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (antiandrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p>
22				<p>JA (estrogen; Schreurs et al 2002)</p> <p>JA (estrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (antiestrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (antiandrogen; jästceller; Kunz & Fent 2006a)</p> <p>JA (estrogen; jästceller med fiskreceptor; Kunz et al 2006a).</p>

Nr	Nedbrytbarhet, Elimineringsgrad i reningsverk	Bioackumulerbarhet, akvatisk	Effekter <i>in vivo</i>	Endrogena effekter <i>in vitro</i>
				EC50: 91 mg/l
23			Variken androgen eller estrogen (råtta; Ashby <i>et al</i> 2001)	NEJ (variken androgen eller estrogen; råttceller; Ashby <i>et al</i> 2001)
24				
25			Variken androgen eller estrogen (råtta; Ashby <i>et al</i> 2001)	NEJ (variken androgen eller estrogen; råttceller; Ashby <i>et al</i> 2001)
26				
27				
28				

3.2.2 Uppmätta halter

Giokas *et al* (2007) har gjort en omfattande sammanfattning av hittills rapporterade halter av UV filter i kroppsvätskor, celler, vävnader, vatten, sediment, jord, avloppsvatten och slam. Dessa tyder på att 0,1-4% av dosen tas upp genom huden. Vävnadskoncentrationer (råtta) av #4 och #19 ligger på 10-380 respektive 0,05-36 µg/g vävnad vid en dos på 100 resp 60-540 mg/kg kroppsvikt och dag. Halten av #4 i urin har uppmätts till 260 ng/ml (Felix *et al* 1998).

Tabell 2 är en sammanställning av maximalt uppmätta halter i olika matriser i de studier som återfunnits. Resultaten antyder att en betydande andel av UV filtren i solskyddsprodukter når ytvattnet (sjöar och hav). Detta sker antingen direkt eftersom produkterna används i samband med bad utomhus, eller via avloppsnätet, efter dusch, tvätt av kläder och handdukar, samt via urin och faeces.

Langford & Thomas (2008) har undersökt förekomst av UV filter i ytvatten på olika platser i Norge. Uppmätta halter antyder att direkta utsläpp är omfattande och allra högst halter under juli uppmättes i vattnet vid badstränder, och särskilt där barn dominerade bland de badande. Under maj var det däremot högst halter (#18, #12) i ytvatten nära utsläppspunkten från ett reningsverk respektive i marinor (#10, #4), och samtidigt låg halterna under detektionsgränsen vid badstränderna. Även Poiger *et al* (2004) kunde uppmäta generellt högre halter i badsjöar under sommarmånaderna.

Li *et al* (2007) mätte halter av #4, #10, #12 samt #18 i ingående avloppsvatten samt efter olika reningssteg i en återvinningsanläggning för avloppsvatten i Kina under tre olika månader (februari, juli respektive september 2005). Halterna varierade i ingående vatten mellan de olika provtagningstillfällena men reningseffektiviteten varierade inte signifikant. Total reningseffektivitet varierade mellan 28 och 43%, vilket antyder att betydande mängder kan passera genom anläggningen. Det är dock värt att notera att den undersökta anläggningen i studien av Li *et al* (2007) inte hade något biologiskt reningssteg. Däremot ingick koagulation-flockulering, ozonering samt CMF (Continuous Microfiltration). Det första steget gav bäst rening för #10 medan de övriga bäst renades bort med hjälp av ozonering, även om reningsgraden är lägre än vad man kan förvänta sig med denna metod (se t ex reveiw artikel av Ternes 2007). Eventuellt var ozondosen och uppehållstiden för låg i förhållande till förekommande föroreningshalter i avloppsvattnet.

Den reningseffektivitet som beräknats av Li *et al* (2007) skiljer sig ibland avsevärt från den som uppskattats av Balmer *et al* (2005) för konventionella avloppsreningsverk, se tabell 2. Även Kupper *et al* (2006) observerade en hög reningseffektivitet på 92 – >99% för #10, #12, #15 samt #18. Att substanserna i vissa fall renas effektivt är naturligtvis mycket positivt ur miljösynpunkt. Problemet flyttas dock till viss del från vattenfasen till slammet, eftersom många substanser inte är lättnedbrytbara utan snarare binder till partiklar istället för att brytas ner i reningsverken.

Plagellat *et al* (2006) observerade att mängden UV filter i avloppsslam uttryckt per capita var generellt lägst i slam som kom från avloppsreningsverk med anslutning till huvudsakligen hushåll och inte industrier. Det är därmed troligt att även andra utsläppskällor kan vara betydelsefulla, såsom tillverkning och diffus spridning från behandlade produkter. Genomsnittliga halter i slammet var 1780 (#18); 4840 (#10); 5510 (#15) respektive 110 (#12) µg/kg torrsvikt.

Halter i fiskvävnader varierar mellan arter och levnadsmiljöer. Nagtegaal *et al* (1997) uppmätte generellt högre halter (uttryckt som ng/g fett) i abborre än i mört. Halterna varierade även mellan olika organ (filét, inälvor och rest), men förhållandet varierade mellan olika typer av substanser och arter. För abborre var halterna i genomsnitt högst i filéerna, men för mört uppmättes istället högre halter i inälvorna. Utifrån uppmätta halter i vatten och fiskvävnader uppskattades BCF för #18 till 9700-23000 (Balmer *et al* 2005). Detta kan jämföras med ett beräknat värde på BCF om ca 3000-7000 (se bilaga B). Resultaten antyder att en omfattande bioackumulation kan ske även under naturliga förhållanden.

Schlumpf *et al* (2008b) analyserade bl a halter av UV-filter i bröstmjolk. Deltagarna redovisade även sin användning av solskyddsprodukter och användningen av UV-filter och koncentrationen i bröstmjölken av motsvarande substans korrelerade signifikant.

Tabell 2. Uppmätta /maximala/ halter av UV filtrerande substanser i miljön, reningsverk samt vävnader. Högsta uppmätta haltnivå i ytvatten markeras med fet stil. Dessa värden ligger till grund för beräkning av worst case PEC, se tabell 3.

Nr	Vatten, sediment, jord	Avloppsvatten /slam	Biologiska matriser
1			
2			
3	345 ng/l (flodvatten i Slovenien; Cuderman & Heath 2007) 5 ng/l (ytvatten; badsjöar i Tyskland; Rodil & Moeder 2008)	9 ng/l (behandlat avloppsvatten; Rodil & Moeder 2008)	791; 185 resp 3100 ng/g fett (hel fisk, inälvor resp filet; Tyskland Nagtegaal et al 1997) Detekterades ej i bröstmjölk (Schlumpf et al 2008b)
4	114 ng/l (flodvatten i Slovenien; Cuderman & Heath 2007) 1,8 ng/l i havsvatten (Medelhavet) resp 5,7 i simbassäng (Giokas et al 2004) 3880 ng/kg urban jord (Korea; Jeon et al 2006) 35 ng/l ytvatten (Schweiz; Balmer et al 2005) 44 ng/l ytvatten (River Taff UK; Kasprzyk-Hordern et al 2008) Ytvatten i maj resp juli: 37 resp 439 ng/l (Norge; Langford & Thomas 2008) 4 resp 125 ng/l ytvatten (Lake Zürich resp Hüttnersee; Schweiz; Poiger et al 2004) 55 ng/l (ytvatten; badsjöar i Tyskland; Rodil & Moeder 2008)	10 ng/l avloppsvatten (Grekland; hotellavloppsvatten från WC, dusch och pool; Giokas et al 2004) 7800 ng/l i orenat avloppsvatten (Schweiz; Balmer et al 2005) Ingående avloppsvatten återvinningsanläggning för avloppsvatten i februari, juli resp september: 148; 722 resp 343 ng/l (Kina; Li et al 2007) 54 ng/l (behandlat avloppsvatten; Rodil & Moeder 2008)	123 ng/g lipid (fiskvävnad; Schweiz; Balmer et al 2005) 150; 283 resp 298 ng/g fett (hel fisk, inälvor resp filet; Tyskland Nagtegaal et al 1997) 1,24 ng/ml resp 1,28 ng/ml bröstmjölk map fri resp total halt (inkl konjurerad form; Ye et al 2008) 121,4 ng/g lipid i bröstmjölk (Schlumpf et al 2008b)
6			
7			
8	24 ng/l ytvatten (Hüttnersee; Schweiz; Poiger et al 2004)		44 resp 210 ng/g fett (hel fisk resp inälvor; Tyskland Nagtegaal et al 1997)
9			
10	35 ng/l (flodvatten i Slovenien; Cuderman & Heath 2007) 5 ng/l i ytvatten (Schweiz; Balmer et al 2005)	12000 ng/l i orenat avloppsvatten (Schweiz; Balmer et al 2005) Ingående avloppsvatten i	2400 ng/g lipid (<i>Salmo trutta fario</i> i småfloder i Schweiz; Buser et al 2006) 25 ng/g lipid (perch) i sjö i Schweiz (Balmer et al 2005)

Nr	Vatten, sediment, jord	Avloppsvatten /slam	Biologiska matriser
	<p>Uppmätta halter i ytvatten i maj resp juli: 24,8 resp 7301 ng/l (Norge; Langford & Thomas 2008)</p> <p>27 ng/l ytvatten (Hüttnersee; Schweiz; Poiger <i>et al</i> 2004)</p> <p>250 ng/l (ytvatten; badsjöar i Tyskland; Rodil & Moeder 2008)</p>	<p>återvinningsanläggning för avloppsvatten februari, juli resp september: 56; 153 resp 95 ng/l (Kina; Li <i>et al</i> 2007)</p> <p>18 740 µg/kg torrvikt (Avloppsslam; Schweiz; Plagellat <i>et al</i> 2006)</p> <p>18 ng/l (behandlat avloppsvatten; Rodil & Moeder 2008)</p> <p>960 ng/l (ingående avloppsvatten; Kupper <i>et al</i> 2006)</p>	<p>77,5 ng/g lipid i bröstmjölk (Schlumpf <i>et al</i> 2008b)</p>
11			
12	<p>92 ng/l (sjövattnen i Slovenien; Cuderman & Heath 2007)</p> <p>4,5 ng/l (simbassäng; Giokas <i>et al</i> 2004)</p> <p>7 ng/l i ytvatten (Schweiz; Balmer <i>et al</i> 2005)</p> <p>Ytvatten i maj resp juli: 32,6 resp 389,9 ng/l (Norge; Langford & Thomas 2008)</p> <p>963 ng/l ytvatten (San Francisco North Bay; Oros <i>et al</i> 2003)</p> <p>26 resp 19 ng/l ytvatten (Lake Zürich resp Hüttnersee; Schweiz; Poiger <i>et al</i> 2004)</p> <p>33 ng/l (ytvatten; badsjöar i Tyskland; Rodil & Moeder 2008)</p>	<p>4,1 ng/l (hotellavloppsvatten från WC, dusch och pool i Grekland; Giokas <i>et al</i> 2004)</p> <p>19000 ng/l i orenat avloppsvatten (Schweiz; Balmer <i>et al</i> 2005)</p> <p>Ingående avloppsvatten i återvinningsanläggning för avloppsvatten februari, juli resp september: 62; 116 resp 79 ng/l (Kina; Li <i>et al</i> 2007)</p> <p>Orenat dricksvatten: 5600 ng/l (USA; Loraine & Pettigrove 2006)</p> <p>390 µg/kg torrvikt (Avloppsslam; Schweiz; Plagellat <i>et al</i> 2006)</p> <p>23 ng/l (behandlat avloppsvatten; Rodil & Moeder 2008)</p> <p>1680 ng/l (ingående avloppsvatten; Kupper <i>et al</i> 2006)</p> <p>99 percentil för Rhen: 33,5 ng/l (Straub 2002)</p>	<p>72 ng/g lipid (whitefish) i sjö i Schweiz (Balmer <i>et al</i> 2005)</p> <p>120 resp 310 ng/g fett (hel fisk resp filet; Tyskland Nagtegaal <i>et al</i> 1997)</p> <p>78,1 ng/g lipid i bröstmjölk (Schlumpf <i>et al</i> 2008b)</p>

Nr	Vatten, sediment, jord	Avloppsvatten /slam	Biologiska matriser
13			
14	51 ng/l (ytvatten; badsjöar i Tyskland; Rodil & Moeder 2008) Detekterades i sediment från Tyska Bukten (Schwarzbauer <i>et al</i> 2000). 4 µg/kg i sediment från floden Havel (Ricking <i>et al</i> 2003)	3 ng/l (behandlat avloppsvatten; Rodil & Moeder 2008)	
15		27 700 µg/kg torrvikt (Avloppsslam; Schweiz; Plagellat <i>et al</i> 2006) 720 ng/l (ingående avloppsvatten; Kupper <i>et al</i> 2006)	
16			
17			
18	330 ng/l (simbassäng i Slovenien; Cuderman & Heath 2007) 6,9 ng/l (simbassäng i Grekland; Giokas <i>et al</i> 2004) 28 ng/l ytvatten (Schweiz; Balmer <i>et al</i> 2005) Uppmäta halter i ytvatten i maj resp juli: 2,6 resp 798,7 ng/l (Norge; Langford & Thomas 2008) 22 resp 82 ng/l ytvatten (Lake Zürich resp Hüttnersee; Schweiz; Poiger <i>et al</i> 2004) 148 ng/l (ytvatten; badsjöar i Tyskland; Rodil & Moeder 2008)	3,8 ng/l (hotellavloppsvatten från WC, dusch och pool i Grekland; Giokas <i>et al</i> 2004) 6500 ng/l i orenat avloppsvatten (Schweiz; Balmer <i>et al</i> 2005) Ingående avloppsvatten i återvinningsanläggning för avloppsvatten februari, juli resp september: 638; 2128 resp 1154 ng/l (Kina; Li <i>et al</i> 2007) 4980 µg/kg torrvikt (Avloppsslam; Schweiz; Plagellat <i>et al</i> 2006) 38 ng/l (behandlat avloppsvatten; Rodil & Moeder 2008) 20 070 ng/l (ingående avloppsvatten; Kupper <i>et al</i> 2006)	1800 ng/g lipid (<i>Salmo trutta fario</i> i småfloder i Schweiz; Buser <i>et al</i> 2006) 166 ng/g lipid (perch) i sjö i Schweiz (Balmer <i>et al</i> 2005) 930; 880 resp 810 ng/g fett (hel fisk, inålvor resp filé; Tyskland; Nagtegaal <i>et al</i> 1997) 19,0 ng/g lipid i bröstmjölk (Schlumpf <i>et al</i> 2008b)
19			Detekterades ej i bröstmjölk (Schlumpf <i>et al</i> 2008b)

Nr	Vatten, sediment, jord	Avloppsvatten /slam	Biologiska matriser
20	51 ng/l (ytvatten; badsjöar i Tyskland; Rodil & Moeder 2008)		
21	47 ng/l (flodvatten i Slovenien; Cuderman & Heath 2007)	7 ng/l (behandlat avloppsvatten; Rodil & Moeder 2008)	50,0 ng/g lipid i bröstmjölk (Schlumpf et al/2008b)
22	5 ng/l (ytvatten; badsjöar i Tyskland; Rodil & Moeder 2008) 371 ng/l ytvatten (River Taff UK; Kasprzyk-Hordern et al/2008) 323 ng/l ytvatten (River Ely UK; Kasprzyk-Hordern et al/2008)		
23			
24			
25			
26			
27			
28			

4 RISKBEDÖMNING

Riskbedömning för kemiska substanser kan göras på flera sätt. Vanligt är att man dividerar de halter som kan tänkas uppstå i miljön (PEC, Predicted Environmental Concentration) med de halter som troligen inte ger några effekter (PNEC, Predicted No Effect Concentration), se TGD (ECB 2003).

PNEC uppskattas oftast utifrån laboratoriedata på substansen. Beroende på tillgången till data divideras värdet ofta med en säkerhetsmarginal ("bedömningsfaktor"). I detta fall är tillgången till /tillförlitliga/ effektdata bristfällig varför QSAR beräknade värden används. PNEC_{SAR} värden beräknas på liknande sätt (med samma säkerhetsfaktorer) som PNEC som baseras på empiriska data (se TGD del III, kap 2; ECB 2003).

PEC baseras på uppmätta halter av substansen och/eller modellerade halter i olika matriser. Optimalt jämförs modellerade PEC värden med uppmätta halter, varefter ett slutligt värde på PEC baseras på en sammanvägning av dessa värden. I detta fall är kunskaperna om hanterade mängder av enskilda substanser mycket bristfällig, varför PEC enbart baseras på maximalt uppmätta halter. PEC värdena ska således betraktas som "worst case local PEC" enligt TGD.

Generellt gäller enligt TGD (del II, kap 5.2 s 173; ECB 2003) att om kvoten PEC/PNEC överskrider 1 bör först en mer detaljerad riskbedömning göras för att undersöka huruvida kvoten sänks. Om PEC/PNEC fortsatt är över ett brukar man utgå från att risken bör beaktas. Exakt förfarande varierar emellertid mellan olika EU direktiv och förordningar. En oacceptabel risk kan föranleda att man helt förbjuder användning av en viss substans, men ofta kan man istället föreskriva särskilda begränsningar eller riskhanteringsåtgärder för att på så sätt minska riskerna till en acceptabel nivå.

Man bör även göra en bedömning av huruvida ämnena besitter särskilt farliga egenskaper så att de utgör en risk på längre sikt. Ämnets särskilt farliga egenskaper i miljösammanhang undersöks därför i förhållande till PBT (Persistent, Bioackumulerbar och Toxisk) respektive vPvB (mycket Persistent, mycket Bioackumulerbar) kriterier enligt REACH (EG 1907/2006), se bilaga C.

4.1 PEC beräkning

I föreliggande rapport uppskattas ett "worst case" PEC utifrån maximalt uppmätta halter i olika matriser (se tabell 2 och tabell 3). Med undantag av #14 har några uppmätta halter av UV filter i sediment inte återfunnits. I bilaga B anges resultat från fugacitetsmodellering enligt Mackay III. Uppmätta halter i vatten har därför använts som utgångspunkt för att göra en grov uppskattning av tänkbara halter i sediment på följande sätt:

(Maximalt uppmätt koncentration i vatten) x [(% i sediment)/(% i vatten)]

Straub (2002) beräknade PEC för #12 med hjälp av modellering i USES⁷ till 7,6 ng/l (årsgenomsnitt) och worst case PEC med Mackay level III till 81,3 ng/l genom att ange platsspecifika hydrologiska data. 99 percentilen för Rhen uppmättes till 33,5 ng/l vilket antyder att deras beräknade PEC värden stämmer relativt väl överens med uppmätta halter.

För vissa substanser saknas mätvärden helt. Någon modellering utifrån använda mängder har inte gjorts i denna studie eftersom information om vilka mängder som hanteras av de enskilda substanserna är mycket knapphändig och inte registreras för kosmetika på samma sätt som för allmätkemikalier och bekämpningsmedel.

4.2 PNEC beräkning

Tillgången till laboriebaserade värden är för bristfällig för att kunna utgöra beräkningsunderlag för PNECvatten. I inget fall finns t ex data för organismer från tre trofinivåer, vilket är en förutsättning för att kunna använda en säkerhetsfaktor på 1000. PNEC baseras därför i denna rapport på QSAR uppskattningar.

PNEC värden redovisas i tabell 3. Säkerhetsmarginalen är för de flesta substanser 10, eftersom beräknade data oftast finns för tre kroniska effektvärden från tre trofinivåer (ChV från fisk, Daphnia och alger). För vissa substanser har dock högre säkerhetsfaktorer tillämpats, i enlighet med TGD del II, kap 3.3.1.1. sid 101 (ECB 2003), se tabell 3.

Vissa effektrelaterade värden i bilaga B är eventuellt ogiltiga eftersom log K_{ow} värdena för substanserna hamnar utanför den aktuella modellens domän. Uppskattningen av PNEC för fyra av substanserna är därför att anse som osäkra (#15-17 och #23).

För sedimentlevande organismer har inga effektrelaterade värden tagits fram vid beräkningarna men man kan räkna om PNECvatten till PNECsediment med hjälp av jämviktsteori. Enligt TGD (ECB 2003) är:

$$\text{PNECsediment (mg/kg)} = (\text{K}_{\text{susp-vatten}} / \text{RHO}_{\text{susp}}) * \text{PNECvatten (mg/l)} * 1000$$

där

$$\text{K}_{\text{susp-vatten}} = \text{F}_{\text{vatten}}_{\text{susp}} + \text{F}_{\text{solid}}_{\text{susp}} * \text{K}_{\text{p}}_{\text{susp}} / 1000 * \text{RHO}_{\text{solid}}$$

$$\text{Där } \text{K}_{\text{p}}_{\text{susp}} = \text{F}_{\text{oc}}_{\text{susp}} * \text{K}_{\text{oc}}$$

Defaultvärden enligt TGD antas; dvs

$\text{F}_{\text{oc}}_{\text{susp}} = 0,1$ (fraktion organiskt kol i suspenderat material)

$\text{RHO}_{\text{susp}} = 1150$ (densitet hos suspenderat material)

$\text{F}_{\text{water}}_{\text{susp}} = 0,9$ (fraktion vatten i suspenderat material)

$\text{F}_{\text{solid}}_{\text{susp}} = 0,1$ (fraktion fasta partiklar i suspenderat material)

$\text{RHO}_{\text{solid}} = 2500$ (densitet hos det fasta materialet)

Således blir PNECsediment:

⁷ Tidigare version av EUSES, European Union System for the Evaluation of Substances; ett modelleringsprogram för riskbedömning av kemikalier, baserat på de antaganden som görs i TGD (ECB 2003).

$$[(0,9 + 0,025K_{oc})/1150] \times \text{PNEC}_{\text{vatten}} \times 1000$$

Någon åtskillnad görs ej mellan marin och sötvattensmiljö eftersom de flesta QSAR ekvationer enbart baseras på laboratoriedata från sötvattensorganismer. Det är dock värt att betona att man ofta lägger till ytterligare en säkerhetsmarginal på 10 för marina PNEC värden. Detta har ej gjorts i denna rapport.

För två av substanserna kan PNEC_{sediment} jämföras med empiriska data. En studie av Schmitt *et al* (2008) av #18 resp #19 observerade reproduktionspåverkan på sedimentlevande evertebrater, och EC50 värdena hamnade på 1,17 resp 1,43 mg/kg torr vikt som lägst. Eftersom man bara har tillgång till effektdata från en trofinivå behövs en säkerhetsmarginal på 100 om ett PNEC värde ska uppskattas utifrån dessa värden, vilket ger 0,012 resp 0,014. De uppskattade PNEC värdena, baserade på beräknade effekter, hamnar således på ungefär samma nivå i detta fall (0,013 resp 0,049 mg/kg).

Även om PNEC_{vatten} inte kan beräknas utifrån det empiriska underlaget, kan enskilda empiriska värden användas som jämförelser för att uppskatta träffsäkerheten hos QSAR uppskattade data. Uppskattade ChV värden för fisk (bilaga B) och enskilda mätvärden (tabell 1) finns särskilt för substans #18 och #19. För #19 påverkas reproduktionen vid 0,074 mg/l, att jämföra med ett uppskattat ChV för fisk på 0,02-0,06 mg/l. Här hamnar således uppskattade värden och empiriska värden på ungefär samma nivå. För #18 är det emellertid något annorlunda, då man observerat tillväxteffekter i fisk vid 0,415 mg/l. ChV för fisk uppskattas mha QSAR till mellan 0,008 – 0,05 mg/l för denna substans, vilket är åtminstone en tiopotens lägre än vad som kunnat observeras laborativt.

För mikroorganismer i reningsverk är den effekterelaterade informationen obefintlig varför en bedömning inte går att göra.

4.3 Riskkvoter

Uträknade riskkvoter (PEC/PNEC) redovisas i tabell 3. Ju högre kvot desto större är sannolikheten att de halter som kan förekomma i miljön överskrider de halter som kan ge effekter i en viss matris. Eftersom PNEC_{sediment} baseras på jämviktsfördelningsteori bör ett upptag direkt från sedimentet beaktas i de fall då $\log K_{ow}$ överskrider 5. I dessa fall multipliceras PEC_{sediment}/PNEC_{sediment} med 10 för att få fram riskkvoten.

Riskkvoten för vatten överskrider ett för följande filter: #3, #4, #8, #10, #12, #14, #18, #20 och #21. Riskkvoten för sediment överskrider ett för följande substanser: #3, #10, #12, #14, #18, #20 och #21.

Tabell 3. PEC, PNEC och riskkvoter för de undersökta substanserna, för vatten och sediment. Riskkvoter över 1 har markerats med fet stil. I de fall inget annat anges har en säkerhetsfaktor på 10 använts för att beräkna PNECvatten.

NR	PEC VATTEN (MG/L)	PEC SEDIMENT (MG/KG)	PNEC VATTEN (MG/L)	PNEC SEDIMENT (MG/KG)	RISKKVOT (PEC/PNEC) VATTEN	RISKKVOT (PEC/PNEC) SEDIMENT
1			0,047	0,047		
2			0,24	29		
3	0,35	6,3	0,0004	0,094	880	670^a
4	0,44	0,063	0,0057	0,16	77	0,4
6			0,12 ^c	0,85		
7			0,59	2900		
8	0,02	0,02	0,0006 ^e	0,022	33	0,9
9			6,9	86		
10	7,3	110	0,0000089 ^d	0,080	820 000	14 000^a
11						
12	0,96	5,2	0,00003 ^d	0,0080	32 000	6400^a
13			0,1 ^e	0,1		
14	0,05	0,025	0,00013 ^d	0,005	380	5
15			4,35E-13 ^b	9,4E-05 ^b		
16			2,3E-6 ^b	23,5 ^b		
17			2,5E-10 ^b	0,015 ^b		
18	0,8	14	0,00005	0,013	16 000	10 600^a
19			0,0003	0,049		
20	0,05	0,35	0,0014	0,26	36	13^a
21	0,05	0,26	0,00024 ^e	0,0128	210	200^a
22	0,37	0,00073	1,33	3,7	0,3	0,0002
23			1,8E-08 ^b	1,4E-08 ^b		
24			0,000193 ^c	1400		
25			1,3E-07	0,0065		
26						
27						
28			0,0004	0,28		

a) Den framräknade kvoten mellan PEC och PNEC har multiplicerats med 10 eftersom substansen har ett beräknat log K_{ow} på över 5.

b) Osäkert värde eftersom log K_{ow} är mycket högt och egentligen utanför SAR modellens domän. För #15 och #17 överskrids dessutom löslighetsgränsen och det är osäkert om man får några effekter i en mättad lösning.

c) En säkerhetsfaktor på 1000 har använts

d) En säkerhetsfaktor på 100 har använts

e) En säkerhetsfaktor på 50 har använts

4.4 PBT bedömning

Substanserna bedöms även enligt de kriterier som numera gäller under REACH, se bilaga C i denna rapport. Enligt QSAR beräkningarna är det tydligt att UV filtren har oerhört varierande inneboende egenskaper m a p effekter, bioackumulerbarhet och persistens. Utifrån beräknade värden kan följande fem filter anses utgöra potentiella PBT substanser: #10, #18, #19, #21 och #28. Alla substanser som uppfyllde kriterierna för P och B enligt PBT bedömningen uppfyllde även T kriteriet.

Av dessa fem substanser är följande även att anse som potentiella vPvB substanser eftersom BCF uppskattas till högre än 5000: #10, #18⁸ och #21.

Denna bedömning baseras på deras uppskattade kroniska toxicitet för akvatiska organismer, BCF i vattenmiljön samt att de ej beräknas vara lätt nedbrytbara. Egentligen bör en bedömning av P kriteriet baseras på halveringstiden i olika medier. I QSAR bedömningen finns det även uppskattningar av "Ultimate biodegradation" och om denna bedöms till veckor-månader så räknar man med att ämnet är så pass persistent att det uppfyller kriterierna. För de identifierade substanserna ovan har följande värden erhållits: #10: "veckor"; #18: "månader" resp "veckor-månader"; #19: "månader"; #28: "veckor-månader". Substans #10 uppfyller därmed inte helt kraven, eftersom en nedbrytning kan väntas inom några veckor. Eftersom substansen har ett så pass högt beräknat BCF värde (39 700) och dessutom kan ge effekter vid mycket låga koncentrationer (ChV är som lägst 0,00089 mg/l) bedöms den ändå kunna utgöra en potentiell PBT och vPvB substans i detta sammanhang.

5 SCREENING AV UV FILTER – REKOMMENDERADE ÄMNER RESPEKTIVE MATRISER

Det är förvånansvärt många UV filter vars riskkvoter (PEC/PNEC) överskrider 1 och beräknade värden antyder att flera UV filter är potentiella PBT och/eller vPvB substanser. Att de även visat sig förekomma i fiskvävnader och bröstmjolk är tecken på att dessa ämnen kan ackumuleras i levande organismer och en screening av deras förekomst i miljön är därmed motiverad.

Urvalet av vilka ämnen som bör mätas baseras dels på huruvida de uppfyller PBT/vPvB kriterier och dels på huruvida någon av deras beräknade riskkvoter överskrider 1 (tabell 4). Elva filter står med på denna lista, varvid vissa uppfyller båda kriterierna.

Endast två UV-filter hade en harmoniserad klassificering och har av myndigheterna bedömts kunna orsaka skadliga långtidseffekter i miljön (R53). Dessa två substanser är dock inte med i tabell 4 eftersom de ej kan klassas som potentiella PBT/vPvB substanser och eftersom internationella mätdata saknas. Det går därför ej att utifrån underlaget bedöma huruvida halterna i miljön överstiger de som kan tänkas ge effekter. Detta illustrerar att listan över ämnen som bör prioriteras i en nationell screening eventuellt kan komma att behöva utökas.

Vatten ingår genomgående som förslag på matris att övervaka och för de ämnen som är med i tabell 4 och som ej är biologiskt lättnedbrytbara föreslås en övervakning av deras förekomst i reningsverk (vatten och slam) för att bedöma reningseffektiviteten. Övervakning av biota föreslås för de ämnen i tabell 4 som har höga BCF värden (>2000) eller som har kunnat uppmätas i fiskvävnader. Huruvida en övervakning av sediment rekommenderas baseras på om riskkvoten för sediment överskrider 1. I de fall någon riskkvot ej har kunnat beräknas eftersom analysdata saknas, bedöms detta istället utifrån ämnets beräknade fördelning i miljön (se bilaga B).

Förekomst i bröstmjolk är troligen främst kopplad till den enskilde individens användningsmönster snarare än intag via den yttre miljön (Schlumpf *et al* 2008b), varför någon allmän rekommendation inte ges.

⁸ Detta gäller dock enbart den ena strukturen, se bilaga B

Tabell 4. Följande ämnen kan tänkas förekomma i höga halter i förhållande till de halter som misstänks kunna ge effekter (PEC/PNEC>1), och/eller har sådana egenskaper som gör att de på längre sikt kan tänkas utgöra ett hot (potentiell PBT och/eller vPvB enligt QSAR). Även miljömatriser som särskilt bör undersökas föreslås.

INCI NAMN; # I LISTAN (BILAGA A)	CAS	SÄRSKILT FARLIGA EGENSKAPER? (PBT OCH/ELLER vPvB)	PEC/PNEC >1?	FÖRSLAG PÅ MATRISER ATT UNDERSÖKA
Homosalate; #3	118-56-9	Nej, men BCF>5000 och 90dChV=0,004 mg/l	JA, för både vatten och sediment; har uppmätts i fisk (3100 ng/g fett)	Vatten, sediment, biota
Benzophenone-3; #4	131-57-7	Nej, men ej biologiskt lättnedbrytbar	JA, för vatten; har uppmätts i fisk (300 ng/g fett)	Vatten, reningsverk, biota
Butylmethoxydibenzoylmethane; #8	70356-09-1	Nej, men ej biologiskt lättnedbrytbar	JA, för vatten; har uppmätts i fisk (200 ng/g fett)	Vatten, reningsverk, biota
Octocrylene; #10	6197-30-4	JA (potentiell PBT och vPvB)	JA, för både vatten och sediment; har uppmätts i fisk (2400 ng/g fett)	Vatten, sediment, reningsverk, biota
Ethylhexyl methoxycinnamate; #12	5466-77-3	Nej, men BCF>5000 och ChV=0,003 mg/l. Endokrin påverkan konstaterats hos vattenlevande organismer vid <i>in vivo</i> studier.	JA, för både vatten och sediment; har uppmätts i fisk (310 ng/g fett)	Vatten, sediment, biota
Isoamyl p-methoxycinnamate; #14	71617-10-2	Nej	JA, för vatten	Vatten, sediment
4-Methyl benzylidene camphor; #18	36861-47-9 och 38102-62-4	JA (potentiell PBT och vPvB). Endokrin påverkan konstaterats hos vattenlevande organismer vid <i>in vivo</i> studier.	JA, för både vatten och sediment; har uppmätts i fisk (1800 ng/g fett)	Vatten, sediment, reningsverk, biota
3-Benzylidene camphor; #19	15087-24-8	JA (potentiell PBT). Endokrin påverkan konstaterats hos vattenlevande organismer vid <i>in vivo</i> studier.	Kunde ej beräknas	Vatten, sediment, reningsverk, biota
Ethylhexyl salicylate; #20	118-60-5	Nej, men BCF>5000	JA, för både vatten och sediment	Vatten, sediment, biota
Ethylhexyl dimethyl PABA; #21	21245-02-3	JA (potentiell PBT och vPvB)	JA, för både vatten och sediment	Vatten, sediment, reningsverk, biota
Diethylamino Hydroxybenzoyl Hexyl Benzoate; #28	302776-68-7	JA (potentiell PBT)	Kunde ej beräknas	Vatten, sediment, reningsverk, biota

Observera att en bedömning av huruvida ämnet förekommer i produkter på den svenska marknaden i någon större omfattning ej har beaktats i detta sammanhang. Istället antas att de halter som uppmätts i olika matriser internationellt även är relevanta för svenska förhållanden och att substanser med särskilt farliga egenskaper överlag bör övervakas. Det är dock inte självklart att så är fallet eftersom en del av substanserna i tabell 4 eventuellt inte förekommer i produkter på den svenska marknaden. Kosmetiska produkter regleras av Läkemedelsverket men någon motsvarighet till produktregistret (använda mängder av enskilda substanser) finns inte för ingående substanser i kosmetika.

Grova uppskattningar av flödet har gjorts för produkterna (Läkemedelsverket 2004) men dessa baseras på ekonomiska redovisningar från branschen och inte på enskilda substanser. Naturskyddsföreningen undersökte dock våren 2008 innehållsförteckningen på 16 slumpvist valda produkter som såldes i butiker i Västsverige (Naturskyddsföreningen 2008). Det framkom att en del producenter inte använde INCI namnen i ingrediensförteckningarna vilket försvårade bedömningen, men följande tretton godkända UV-filter kunde identifieras i innehållsförteckningen för de undersökta produkterna: #6, #7, #8, #10, #12, #15, #16, #17, #20, #23, #25, #27, #28. Av de substanser som är med i tabell 4 kunde således användningen av följande substanser INTE bekräftas gälla för produkter på den svenska marknaden: #3, #4, #14, #18, #19, #21. Den sistnämnda substansen produceras dock i Sverige, vilket gör att man kan anta att den även förekommer i svenska produkter, även om det är oklart huruvida den då förekommer i solskyddsprodukter.

Följande substanser förekommer i SPIN databasen, för Sverige och år 2006: #1 (0,0 ton), #4 (110 ton, varav 4 ton används som råmaterial för produktion av kosmetika), #6, #8 (10 ton, som råmaterial för produktion av kosmetika), #10 (9 ton), #12 (21 ton, som råmaterial för produktion av kosmetika), #15, #17, #18, #20, #21 (59 ton), #22, #25, #27 (52 624 ton, varav 3 ton som råmaterial för produktion av kosmetika), #28. I de fall några mängder ej anges är denna information konfidentiell, och i de fall då inget anges är det inte säkert att ämnet används för produktion av kosmetika. Informationen antyder emellertid att även #4 torde finnas i kosmetiska produkter på den svenska marknaden, samt okänd mängd av #18.

6 ANALYSMETODIK

Innan en nationell kemisk-analytisk screening av UV filter i olika matriser initieras bör lämplig analysmetodik beaktas. Vissa metoder kan analysera fler substanser men har å andra sidan högre detektionsgränser och vice versa. Giokas *et al* (2007) har nyligen presenterat en omfattande sammanfattning av hittills rapporterade halter och vilken metodik som använts i många olika typer av matriser (kroppsvätskor, celler, vävnader, vatten, sediment, jord, avloppsvatten respektive slam). En sammanställning av analysmetoder för ämnen i hygienprodukter, därav flera UV filter, har gjorts även av Peck (2006).

Följande detektionsgränser observerades för några av de studier som citeras i tabell 7:

LOD: 1 resp 5 för #22 resp #4; samt LOQ: 3 resp 15 ng/l (flodvatten; Kasprzyk-hordern *et al* 2008) vid analys med Ultra performance Liquid chromatography-tandem MS

LOD: 13-266 ng/l (havsvatten, poolvatten, flodvatten, sjövatten, avloppsvatten; substanserna #3, #4, #10, #12, #18, #21; Cuderman & Heath 2007) vid analys med GC-MSD

LOQ: 0,9-1,4 ng/l (havsvatten, poolvatten, hotellavloppsvatten; substanserna #4, #12, #18; Giokas *et al* 2004) vid analys med GC-MS.

LOQ: 8-24 ng/l (havsvatten, poolvatten, hotellavloppsvatten; substanserna #4, #8, #12, #18; Giokas *et al* 2004) vid analys med LC-UV-DAD

LOD: 5 ng/l resp 100 ng/kg (flodvatten resp jord; substans #4; Jeon *et al* 2006) vid analys med GC-MS

LOQ: 25 ng/l resp 500 ng/kg (flodvatten resp jord; substans #4; Jeon *et al* 2006) vid analys med GC-MS

LOD: 5-20 ng/g lipid (fiskvävnad; substans #10, #18; Buser *et al* 2006) vid analys med GC-MS

LOD: 50-90 ng/kg filét (substans #3, #4, #8, #12, #18; Nagtegaal *et al* 1997) vid analys med GC-MS

LOD: 0,4 ng/ml i bröstmjök (#4) vid analys med SPE-HPLC-MS/MS (Ye *et al* 2008)

7 NEDBRYTNINGSPRODUKTER OCH OORGANISKA UV-FILTER

I denna rapport har fokus legat på de ursprungliga substanserna och inte eventuella nedbrytningsprodukter. Det bör dock påpekas att vissa av dessa omvandlingsprodukter av UV filter har påträffats i miljön och kunnat ses ge effekter. Det kan röra sig om både abiotiska och biotiska nedbrytningsprodukter och metaboliter som uppstår efter kanske framför allt upptag genom huden. Nedbrytningsprodukten Benzophenone-1 (CAS 131-56-6) har t ex uppvisat hormonella effekter *in vitro* (Heneweer *et al* 2005). På sikt kan det därmed vara intressant att undersöka förekomst av nedbrytningsprodukter i t ex reningsverk, eftersom en "god reningseffektivitet" kan dölja förekomsten av stabila omvandlingsprodukter.

Denna rapport är främst en sammanställning av kunskapsläget när det gäller organiska UV filter. Det finns dock även ett godkänt oorganiskt filter (#27; titanium dioxide). LC50 för *Daphnia* är 5,5 mg/l (ECOTOX databasen), och ca 300 mg/l för fisk (IUCLID databasen) för denna substans. Ämnets användning som UV filter är mycket liten i jämförelse med andra användningsområden. En miljöövervakning av TiO₂ pga dess användning i kosmetika skulle dock ändå kunna vara relevant eftersom det i detta sammanhang ofta förekommer i nanoform. I dagsläget är kunskapsluckorna stora när det gäller effekterna av nanopartiklar, men i en nyligen publicerad rapport från Kemikalieinspektionen om kunskapsläget när det gäller hälso- och miljörisker med nanopartiklar nämns att nano-TiO₂ har antimikrobiella effekter – dvs kan påverka processerna i avloppsreningsverken negativt och det misstänks kunna vara cancerframkallande för människa (KemI 2007). I egna sökningar återfanns några vetenskapliga artiklar relaterade till titanium dioxide. Serpone *et al* (2007) påvisade att det kan bilda fria radikaler och därmed ge upphov till skador på celler och DNA vid exponering för sol. Fotokatalys av DNA observerades vid *in vitro* studier av titandioxid (Dunford *et al* 1997). Eftersom det handlar om mineral så har

ingen bedömning av ämnets nedbrytbarhet gjorts och information om bioackumulation (BCF data) för nanomaterial har inte kunnat hittas. En ny utvärdering av de hälsomässiga egenskaperna hos nanoformen av TiO₂ är dock att vänta av SCCP.

Zinkoxid är ett UV filter som också är vanligt förekommande i detta sammanhang men det står inte med på listan över godkända filter (Naturskyddsföreningen 2008). Ämnets användning som UV filter är också mycket liten i jämförelse med andra användningsområden. Det förekommer emellertid också i nanoform i dessa sammanhang varför en eventuell miljöövervakning av denna substans bör beakta detta.

8 SLUTSATSER

Användningen av solskyddsprodukter är stor och UV filter kan nå den yttre miljön både direkt vid bad och indirekt via framför allt reningsverk. En uppskattning av deras miljörelaterade egenskaper har därför gjorts utifrån QSAR beräkningar och inventering av internationell vetenskaplig litteratur.

Beräkningarna för 24 av de 27 godkända UV filtren visar en enorm variation i uppskattade inneboende egenskaper. Tjugo av filtren beräknas vara ej biologiskt lättnedbrytbara och bioackumulationspotentialen (BCF värdet) varierar mellan 3 och 40 000. Flera filter har uppmätts i fiskvävnader i upp till 3 mg/g fett.

De högsta koncentrationer (PNEC) under vilka man troligen inte får effekter varierar mellan 0,00000013 mg/l och 12 mg/l. Fem av substanserna kan betecknas som potentiella PBT ämnen och tre av dessa är potentiella vPvB ämnen. Därtill kan man i den vetenskapliga litteraturen konstatera att åtminstone tolv av UV filtren kan ge upphov till hormonell påverkan, och för tre av dessa har resultaten kunnat bekräftas även för akvatiska organismer vid *in vivo* studier.

Genom jämförelser mellan de halter som kan ge effekter och de högsta halter som hittills uppmätts i miljön har riskkvoter beräknats. Riskkvoten för nio av tio bedömda substanser överskrider ett och är som högst 820 000.

Baserat på deras inneboende egenskaper och/eller relativt höga halter i miljön enligt internationella studier bör i första hand följande substanser prioriteras i en screeningstudie:

Homosalate (#3)
Benzophenone-3 (#4)
Butylmethoxydibenzoylmethane (#8)
Octocrylene (#10)
Ethylhexyl methoxycinnamate (#12)
Isoamyl p-methoxycinnamate (#14)
4-methyl benzylidene camphor (#18)
3-benzylidene camphor (#19)
Ethylhexyl salicylate (#20)
Ethylhexyl dimethyl PABA (#21)
Diethylamino hydroxybenzoyl hexyl benzoate (#28).

Det bör emellertid först fastställas huruvida följande ämnen verkligen förekommer i solskyddsprodukter på den svenska marknaden: #3, #4, #14, #18, #19, #21.

9 REFERENSER

9.1 Publikationer, rapporter och lagtexter

76/768/EEG. Rådets direktiv av den 27 juli 1976 om tillnärmning av medlemsstaternas lagstiftning om kosmetiska produkter.

Ashby J, Tinwell H, Plautz J, Twomey K, Lefevre PA. 2001. Lack of binding to isolated estrogen or androgen receptors, and inactivity in the immature rat uterotrophic assay, of the ultraviolet sunscreen filters Tinosorb M-active and Tinosorb S. *Regulatory Toxicology and Pharmacology* 34: 287-291

Balmer ME, Buser H-R, Miller MD, Poiger T. 2005. Occurrence of Some Organic UV Filters in Wastewater, in Surface Waters, and in Fish from Swiss Lakes. *Environ. Sci. Technol.*, 2005, 39: 953-962

Buser HR, Balmer ME, Schmid P, Kohler M. 2006. Occurrence of UV filters 4-methylbenzylidene camphor and octocrylene in fish from various Swiss rivers with inputs from wastewater treatment plants. *Environ. Sci. Technol.*, 2006, 40 (5), 1427-1431

Cuderman P, Heath E. 2007. Determination of UV filters and antimicrobial agents in environmental water samples. *Anal Bioanal Chem* 387: 1343-1350

Danovaro R, Bongiorno L, Corinaldesi C, Gionavelli D, Damiani E, Astolfi P, Greci L, Pusceddu A. 2008. Sunscreens cause coral bleaching by promoting viral infections. *Environmental Health Perspectives* 116: 441-447

Dunford R, Salinaro A, Cai L, Serpone N, Horikoshi S, Hidaka H, Knowland J. 1997. Chemical oxidation and DNA damage catalyzed by unorganic sunscreen ingredients. *FEBS letters* 418: 87-90

ECB 2003. Technical Guidance Document on Risk Assessment in support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) No 1488/94 on Risk Assessment for existing substances, Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market. European Chemicals Bureau. Institute for Health and Consumer Protection. EC 2003.

EG 1907/2006. Europaparlamentets och rådets förordning (EG) nr 1907/2006 av den 18 december 2006 om registrering, utvärdering, godkännande och begränsning av kemikalier (REACH), inrättande av en europeisk kemikaliemyndighet, ändring av direktiv 1999/45/EG och upphävande av rådets förordning (EEG) nr 793/93 och kommissionens förordning (EG) nr 1488/94 samt rådets direktiv 76/769/EEG och kommissionens direktiv 91/155/EEG, 93/105/EG och 2000/21/EG

Felix T, Hall BJ, Brodbelt JS. 1998. Determination of benzophenone-3 and metabolites in water and human urine by solid-phase microextraction and quadrupole ion trap GC/MS. *Analytica Chimica Acta* 371: 195-203

Giokas DL, Salvador A, Chisvert A. 2007. UV filters: From sunscreens to human body and the environment. *Trends in Analytical Chemistry* 26: 360-374

- Giokas DL, Sakkas VA, Albanis TA. 2004. Determination of residues of UV filters in natural waters by solid-phase extraction coupled to liquid chromatography-photodiode array detection and gas chromatography – mass spectrometry. *J Chromatography A*, 1026: 289-293
- Heneweer M, Muusse M, van den Berg M, Sanderson T. 2005. Additive estrogenic effects of mixtures of frequently used UV filters on pS2-gene transcription in MCF-7 cells. *Toxicology and Applied Pharmacology* 208: 170-177
- Hofkamp L, Bradley S, Tresguerres J, Lichtensteiger W, Schlumpf M, Timms B. 2008. Region-specific growth effects in the developing rat prostate following fetal exposure to estrogenic ultraviolet filters. *Environmental Health Perspectives* 116: 867-872
- Holbech H, Norum U, Korsgaard B, Bjerregaard P. 2002. The chemical UV-filter 3-benzylidene camphor causes an oestrogenic effect in an *in vivo* fish assay. *Pharmacology and Toxicology* 91: 204-208
- Huong SP, Rocher E, Fourneron J-D, Charles L, Monnieer V, Bun H, Andrieu V. 2008. Photoreactivity of the sunscreen butylmethoxydibenzoylmethane (DBM) under various experimental conditions. *J Photochemistry Photobiology* 196: 106-112
- Inui M, Adachi T, Takenaka S, Inui H, Nakazawa M, Ueda M, Watanabe H, Mori C, Iguchi T, Miyatake K. 2003. Effect of UV screens and preservatives on vitellogenin and choriogenin production in male medaka (*Oryzias latipes*). *Toxicology* 194: 43-50
- Jeon H-K, Chungb Y, Ryua J-C. 2006. Simultaneous determination of benzophenone-type UV filters in water and soil by gas chromatography–mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*, 1131: 192–202
- Kasprzyk-Hordern B, Dinsdale RM, Guwy AJ. 2008. The occurrence of pharmaceuticals, personal care products, endocrine disruptors and illicit drugs in surface water in South Wales, UK. *Water Research* 42: 3498-3518
- Keml (Kemikalieinspektionen) 2007. Nanoteknik – stora risker med små partiklar? En kunskapssammanställning om risker med nanoteknik för hälsa och miljö, samt förslag till hur identifierade kunskapsluckor bör åtgärdas. Rapport Nr 6/07
- KIFS 2005:5. Kemikalieinspektionens föreskrifter (KIFS 2005:5) med EG-harmoniserad bindande klassificering och märkning (Klassificeringslistan)
- Klann A, Levy G, Lutz I, Müller C, Kloas W, Hildebrandt J-P. 2005. Estrogen-like effects of ultraviolet screen 3-(4-methylbenzylidene)-camphor (Eusolex 6300) on cell proliferation and gene induction in mammalian and amphibian cells. *Environmental Research*, 97: 274-281
- Kunz PY, Fent K. 2006a. Multiple hormonal activities of UV filters and comparison of *in vivo* and *in vitro* estrogenic activity of ethyl-4-aminobenzoate in fish. *Aquatic Toxicology* 79: 305-324
- Kunz PY, Fent K. 2006b. Estrogenic activity of UV filter mixtures. *Toxicology and Applied Pharmacology* 217: 86–99

- Kunz PY, Galicia HF, Fent K. 2004. Assessment of hormonal activity of UV filters in tadpoles of frog *Xenopus laevis* at environmental concentrations. *Marine Environmental Research* 58: 431-435
- Kunz PY, Galicia HF, Fent K. 2006a. Comparison of *in vitro* and *in vivo* estrogenic activity of UV filters in fish. *Toxicological sciences* 90: 349-361
- Kunz PY, Gries T, Fent K. 2006b. The ultraviolet filter 3-benzylidene camphor adversely affects reproduction in fathead minnow (*Pimephales promelas*). *Toxicological sciences* 93: 311-323
- Kupper T, Plagellat RC, Brändli RC, Alencastro LF de, Grandjean D, Tarradellas J. 2006. Fate and removal of polycyclic musks, UV filters and biocides during wastewater treatment. *Water Research* 40; 2603-2612
- Langford KH, Thomas KV. 2008. Inputs from chemicals from recreational activities into the Norwegian coastal zone. *J Environm Monitoring* 10: 894-898
- Li W, Ma Y, Guo C, Hu W, Liu K, Wang Y, Zhu T. 2007. Occurrence and behaviour of four of the most used sunscreen UV filters in a wastewater reclamation plant. *Water Research* 41: 3506-312
- Loraine GA, Pettigrove ME. 2006. Seasonal Variations in Concentrations of Pharmaceuticals and Personal Care Products in Drinking Water and Reclaimed Wastewater in Southern California. *Environ. Sci. Technol.* 40: 687-695
- LVFS 2007:4. Läkemedelsverkets föreskrifter om förbud och begränsningar för vissa ämnen att ingå i kosmetiska eller hygieniska produkter.
- Läkemedelsverket 2004. Miljöpåverkan från läkemedel samt kosmetiska och hygieniska produkter. Rapport från Läkemedelsverket, Augusti 2004
- Ma R, Cotton B, Lichtensteiger W, Schlumpf M. 2003. UV filters with antagonistic action at androgen receptors in the MDA-kb2 cell transcriptional activation assay. *Toxicological sciences* 74: 43-50
- Naturskyddsföreningen 2008. Ljusskyggt solskydd - miljögifter i solkrämer. ISBN 91 558 0751 8
- Nagtegaal M, Ternes TA, Baumann W. 1997. UV-filtersubstanzen in Wasser und Fischen. *Ökotox* 9: 79-86
- Oros DR, Jarman WM, Lowe T, David N, Lowe S, Davis JA. 2003. Surveillance for previously unmonitored organic contaminants in the San Francisco Estuary. *Marine Pollution Bulletin* 46: 1102-1110
- Peck AM. 2006. Analytical methods for the determination of persistent ingredients of personal care products in environmental matrices. *Anal Bioanal Chem* 386: 907-939
- Plagellat C, Kupper T, Furrer R, Alencastro LF de, Grandjean D, Tarradellas J. 2006. Concentrations and specific loads of UV filters in sewage sludge originating from a monitoring network in Switzerland. *Chemosphere* 62: 915-925

Poiger T, Buser H-R, Balmer ME, Bergqvist P-A, Müller M. 2004. Occurrence of UV filter compounds from sunscreens in surface waters: regional mass balance in two Swiss lakes. *Chemosphere* 55: 951-963.

Ricking M, Schwarzbauer J, Franke S. 2003. Molecular markers of anthropogenic activity in sediments of the Havel and Spree Rivers (Germany). *Water Research* 37: 2607–2617

Rodil R, Moeder M. 2008. Development of a method for the determination of UV filters in water samples using stir bar sorptive extraction and thermal desorption-gas chromatography-mass spectrometry. *J Chromatography A* 1179: 81-88

Sakkas VA, Giokas DL, Lambropoulou DA, Albanis TA. 2003. Aqueous photolysis of the sunscreen agent octyl-dimethyl-p-aminobenzoic acid. Formation of disinfection byproducts in chlorinated swimming pool water. *Journal of Chromatography A*, 1016 (2003) 211–222

Scheil V, Triebkorn R, Köhler HR. 2008. Cellular and stress protein responses to the UV filter 3-benzylidene camphor in the amphipod crustacean *Gammarus fossarum* (Koch 1835). *Arch Environ Contam Toxicol* 54: 684-689

Schlenk D, Sapozhnikova Y, Irwin Ma, Xie L, Hwang W, Reddy S, Brownawell Bj, Armstrong J, Kelly M, Montagne De, Kolodziej Ep, Sedlak D, Snyder S. 2005. *In vivo* bioassay-guided fractionation of marine sediment extracts from the southern California bight, usa, for estrogenic activity. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 24: 2820-2826

Schlumpf M, Schmid P, Durrer S, Conscience M, Maerkel K, Henseler M, Gruetter M, Herzog I, Reolon S, Ceccatelli R, Faass O, Stutz E, Jarry H, Wuttke W, Lichtensteiger W. 2004. Endocrine activity and developmental toxicity of cosmetic UV filters – an update. *Toxicology* 205: 113-122

Schlumpf M, Durrer S, Faass O, Ehnes C, Fuetsch M, Gaille C, Henseler M, Hofkamp L, Maerkel K, Reolon S, Timms B, Tresguerres JAF, Lichtensteiger W. 2008a. Developmental toxicity of UV filters and environmental exposure: a review. *Int J Andrology* 31: 144-151

Schlumpf M, Kypke K, Vökt CC, Birchler M, Durrer S, Faass O, Ehnes C, fuetsch M, Gaille C, Henseler M, Hofkamp L, Maerkel K, Reolon S, Zenker A, Timms B, Tresguerres JAF, Lichtensteiger W. 2008b. Endocrine active Uv filters: developmental toxicity and exposure through breast milk. *Chimia* 62: 345-351

Schmitt C, Oetken M, Dittberner O, Wagner M, Oehlmann J. 2008. Endocrine modulation and toxic effects of two commonly used UV screens on the aquatic invertebrates *Potamopyrgus antipodarum* and *Lumbriculus variegatus*. *Environmental Pollution* 152: 322-329

Schreurs R, Lanser P, Seinen W, van der Burg B. 2002. Estrogenic activity of UV filters determined by an *in vitro* reporter gene assay and an *in vitro* transgenic zebrafish assay. *Arch Toxicol* 76: 257-261

Schwarzbauer J, Littke R, Weigelt V. 2000. Identification of specific organic contaminants for estimating the contribution of the Elbe river to the pollution of the German Bight. *Organic Geochemistry* 31: 1713-1731

Serpone N, Dondi D, Albin A. 2007. Inorganic and organic UV filters: Their role and efficacy in sunscreens and sun care products. *Inorganica Chimica Acta* 360: 794-802.

Straub JO. 2002. Concentrations of the UV filter ethylhexyl methoxycinnamate in the aquatic compartment: comparison of modelled concentrations for Swiss surface waters with empirical monitoring data. *Toxicol Letters* 131: 29-37

Ternes T. 2007. The occurrence of micropollutants in the aquatic environment: a new challenge for water management. *Water Science and Technology* 55: 327-332

US EPA 2007. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v3.20. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA

Ye X, Bishop AM, Needham LL, Calafat AM. 2008. Automated on-line column-switching HPLC-MS/MS method with peak focusing for measuring parabens, triclosan, and other environmental phenols in human milk. *Analytica Chimica Acta* 622: 150-156

9.2 Länkar

BIODEG databasen, Syracuse Research Corporation (SRC):

<http://www.syrres.com/esc/biodeg.htm>

ECOTOX databasen, USEPA:

http://cfpub.epa.gov/ecotox/quick_query.htm

ESIS databasen (European Chemical Substance Information System):

<http://ecb.jrc.it/esis/>

HSDB (Hazardous Substances Data Base):

<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>

KTF (Kemisk Tekniska Leverantörsförbundet): <http://www.ktf.se/statistik.html>

Online SMILES translator, ett beräkningsverktyg för att omvandla kemiska strukturer till SMILES notation:

<http://cactus.nci.nih.gov/services/translate>

SCCP - Utlåtande från vetenskapliga kommittéer om ämnen i kosmetiska produkter

http://ec.europa.eu/health/ph_risk/committees/04_sccp/sccp_opinions_en.htm

Sparc On-line Calculator, ett beräkningsverktyg för att omvandla kemiska strukturer till SMILES notation:

<http://ibmlc2.chem.uga.edu/sparc/smiles/Smiles.cfm>

SPIN databasen: Substances in Products In Nordic countries. Baseras på produktregistren för de nordiska länderna.

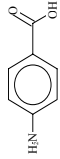
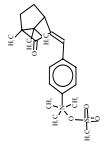
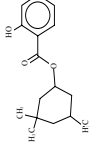
<http://195.215.251.229/DotNetNuke/default.aspx>

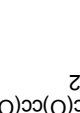
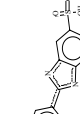
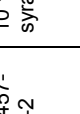
PubChem (National Center for Biotechnology Information):

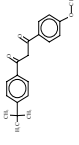
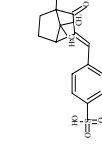
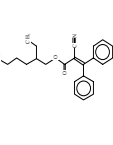
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

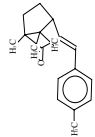

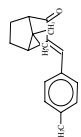
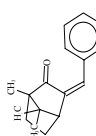
10 BILAGA A. UV FILTER SOM ÄR TILLÅTNA I KOSMETISKA PRODUKTER

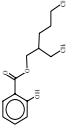
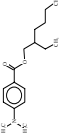
Tabell A1. Lista på godkända UV filter på Läkemedels lista (LVFS 2007:4) och Kosmetika direktivet. Ämnesnamn anges enligt INCI, IUPAC och flera olika typer av synonymer. Dessutom anges CAS nr, maximal koncentration som ämnet får förekomma i kosmetiska produkter samt strukturformler. Observera att ämne nr 5 saknas.

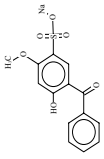
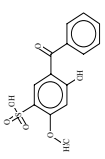
#	ÄMNESNAMN ENLIGT INCI	SYNONYMER	CAS NR	MAXIMALT TILLÅTEN KONC	STRUKTUR	SMILES
1	PABA	4-Aminobensoesyra p-aminobenzoate 4-aminobenzoate IUPAC: 4-aminobenzoic acid	150-13-0	5 %		<chem>O=C(O)c1ccc(N)cc1</chem>
2	Camphor benzalkonium methosulfate	N,N,N-Trimetyl-4-(2-oxoborn-3-ylidenmetyl)anilimetylsulfat 4-(2-Oxo-3-bornylidenemetyl)phenyl trimethylammonium methylsulphate Benzenaminiium, N,N,N-trimetyl-4-((4,7,7-trimetyl-3-oxobicyclo(2.2.1)hept-2-ylidene)metyl)-, methyl sulfate Metyl N,N,N-trimetyl-4-((4,7,7-trimetyl-3-oxobicyclo(2.2.1)hept-2-ylidene)metyl)aniliniium sulphate IUPAC: methanesulfonate; trimetyl-[4-[(Z)-(1,7,7-trimetyl-2-oxo-3-bicyclo[2.2.1]heptanylidene)metyl]phenyl]lazaniium	52793-97-2	5 %		<chem>O=C3C2(CCC(C2)C)C3=Cc1c(ccc1N)(OS(=O)(=O)C)C(C)C</chem>
3	Homosalate	Homosalat Eusolex (TN) Homosalate (USP/INN) IUPAC: (3,3,5-trimetyl(cyclohexyl) 2-hydroxybenzoate	118-56-9	10 %		<chem>O=C(Oc1ccc(O)cc1)C2(C)C(C)C(C)C2</chem>

#	ÄMNESNAMN ENLIGT INCI	SYNONYMER	CAS NR	MAXIMALT TILLÄTEN KONC	STRUKTUR	SMILES
4	Benzophenone-3	Oxibenson (INN) Oxybenzone Methanone [2-hydroxy-4-methoxyphenyl]phenyl-] Uvinul 40 (TN) IUPAC: (2-hydroxy-4-methoxyphenyl)-phenylmethanone	131-57-7	10 %		<chem>O=C(c1ccc(OC)c1)c2ccccc2</chem>
6	Phenylbenzimidazole sulfonic acid	2-Fenylbenzimidazol-5-sulfonsyra och dess kalium-, natrium- och trietanolaminsalter Ensulizole [INN] Phenylbenzimidazole sulfonic acid [USAN] 2-Phenyl-1H-benzimidazole-5-sulphonic acid 2-phenylbenzimidazole-5-sulfonic acid 1H-Benzimidazole-5-sulfonic acid, 2-phenyl- IUPAC: 2-phenyl-3H-benzimidazole-5-sulfonic acid	27503-81-7	8 % (uttryckt som syra)		<chem>O=S(=O)(O)c1ccc(nc1-c2ccccc2)c3ccccc3</chem>
7	Terephthalylidene dicamphor sulfonic acid	3,3'-(1,4-Fenylendimetylidyn)bis(7,7-dimetyl-2-oxobicyklo-(2,2,1) heptan-1-metansulfonsyra) och dess salter Terephthalylidene dicamphor sulfonic acid 3,3'-(1,4-Phenylendimetylidene)bis(7,7-dimetyl-2-oxobicyklo(2.-2.1)heptane-1-methanesulfonic acid 3,3'-(1,4-Phenylendimetylidene)bis(7,7-dimetyl-2-oxo-bicyclo(2.2.1)heptane-1-methanesulfonic acid Bicyclo (2.2.1) heptane-1-methanesulfonic acid, 3,3'-(1,4-phenylendimetylidene) bis(7,7-dimetyl-2-oxo- IUPAC: [(3Z)-3-[4-[(Z)-[7,7-dimethyl-2-oxo-1-(sulfomethyl)-3-bicyclo[2.2.1]heptanylidene]methyl]phenyl]methylidene]-7,7-dimethyl-2-oxo-1-bicyclo[2.2.1]heptanyl]methanesulfonic acid	90457-82-2	10 % (uttryckt som syra)		<chem>CC1(C2CC1(C=O)C2=CC3=CC=C(C=C3)C=C4C5CC(C4=O)(C5(C)C)CS(=O)(=O)CS(=O)=O)C</chem>

#	ÄMNESNAMN ENLIGT INCI	SYNONYMER	CAS NR	MAXIMALT TILLÅTEN KONC	STRUKTUR	SMILES
8	Butylmethoxydibenzoylmethane	1-(4-tert-Butylfenyl)-3-(4-metoxifenyl) propan-1,3-dion 4-tert-butyl-4'-methoxydibenzoylmethane Avobenzone (USP/INN) IUPAC: 1-(4-tert-butylphenyl)-3-(4-methoxyphenyl)propane-1,3-dione	70356-09-1	5 %		<chem>O=C(c1ccc(cc1)C(C)C)c1ccc(cc1)C(C)C</chem>
9	Benzylidene camphor sulfonic acid	α-(2-Oxoborn-3-yliden)-toluen-4-sulfonsyra och dess salter 4-(4,7,7-Trimethyl-3-oxo-bicyclo(2.2.2)hept-2-ylidene)methylbenzenesulfonic acid 4-(4,7,7-Trimethyl-3-oxobicyclo(2.2.1)hept-2-ylidene)methylbenzenesulfonic acid Benzenesulfonic acid, 4-((4,7,7-trimethyl-3-oxobicyclo(2.2.1)hept-2-ylidene)methyl)-	56039-58-8	6 % (uttryckt som syra)		<chem>CC1(C2CC(C1)C(=O)C2=O)C(=O)S(=O)(=O)C</chem>
10	Octocrylene	2-Cyano-3,3-difenylakrylsyra, 2-ethylhexylester (Oktokrylen) Octocriene (INN) Octocrylene (USP) IUPAC: 2-ethylhexyl 2-cyano-3,3-di(phenyl)prop-2-enoate	6197-30-4	10 % (uttryckt som syra)		<chem>O=C(OC(C)C(C)C)C(C#N)C(C)C(C)C</chem>
11	POLYACRYLAMIDOMETHYL BENZYLIDENE CAMPHOR	N-((2 och 4)-[2-oxoborn-3-yliden)methyl]bensyl)akrylamidpolymer Polymer of N-((2 and 4)-[2-oxoborn-3-ylidene)methyl]benzyl)acrylamide	113783-61-2	6 %		

#	ÄMNESNAMN ENLIGT INCI	SYNONYMER	CAS NR	MAXIMALT TILLÅTEN KONC	STRUKTUR	SMILES
18	4-Methyl benzyldene camphor	3-(4'-Metylbensyliden)-d,1-kamfer Enzacamene Neo Heliopan MBC Eusolex 6300 3-(4'-methylbenzylidene)camphor Uvinul MBC 95 Patsol 5000 3-(p-Methylbenzylidene)camphor 3-(p-Methylbenzylidene)borman-2-one (+)-3-(p-Methylbenzylidene)camphor 1,7,7-Trimethyl-3-(4-methylbenzylidene)bicyclo(2.2.1)heptan-2-one Bicyclo(2.2.1)heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-3-((4-methylphenyl)methylene)- IUPAC: (3E)-1,7,7-trimethyl-3-((4-methylphenyl)methylidene)bicyclo[2.2.1]heptan-2-one	36861-47-9 och 38102-62-4	4 %	 36861-47-9  38102-62-4 	<chem>O=C(C(C1(C)C)C)C2=C(C(C(C3)C)C3)C12C</chem> 36861-47-9 <chem>CC3(C2CC3C(=O)C2=Cc1ccc(cc1)C)C</chem> 38102-62-4
19	3-Benzylidene camphor	3-Benzylidenkamfer 1,7,7-Trimethylbicyclo(2.2.1)heptan-2-one-3-benzylidene 1,7,7-Trimethyl-3-(phenylmethylene)bicyclo(2.2.1)heptan-2-one Bicyclo(2.2.1)heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-3-(phenylmethylene)- IUPAC: (3E)-1,7,7-trimethyl-3-(phenylmethylidene)bicyclo[2.2.1]heptan-2-one	15087-24-8	2 %		<chem>O=C(C(C1(C)C)C)C2=C(C(C(C3)C)C3)C12C</chem>

#	ÄMNESNAMN ENLIGT INCI	SYNONYMER	CAS NR	MAXIMALT TILLÅTEN KONC	STRUKTUR	SMILES
20	Ethylhexyl salicylate	2-Ethylhexylsalicylat (Octyl Salicylate) Sunarome O Octisalate [USAN] 2-ethylhexyl salicylate Ethyl hexyl salicylate Uvinul (TN) IUPAC: 2-ethylhexyl 2-hydroxybenzoate	118-60-5	5 %		<chem>O=C(OCC(CCC)CC)c(O)cc1c1</chem>
21	Ethylhexyl dimethyl PABA	2-Ethylhexyl-4-dimethylaminobensoat (oktyldimetyl-PABA) padimate-O Photoplex Arlatone UVB Radiacare Lip Balm Escalol 507 Octyl dimethyl PABA PreSun 15 PreSun 46 IUPAC: 2-ethylhexyl 4-dimethylaminobenzoate	21245-02-3	8 %		<chem>O=C(OCC(CCC)CC)c(NC)C(C)C1C1</chem>

#	ÄMNESNAMN ENLIGT INCI	SYNONYMER	CAS NR	MAXIMALT TILLÅTEN KONC	STRUKTUR	SMILES
22	Benzophenone-4 och Benzophenone-5	<p>2-Hydroxi-4-metoxibenzofenon-5-sulfonsyra (Bensofenon-5) och dess natriumsalt</p> <p>MW330: Benzophenone-5 2-Hydroxy-4-methoxybenzophenone-5-sodium sulfonate Benzenesulfonic acid, 5-benzoyl-4-hydroxy-2-methoxy-, monosodium salt</p> <p>IUPAC: sodium 5-(benzoyl)-4-hydroxy-2-methoxybenzenesulfonate</p> <p>MW308: Sulisobenzone Sungard Sulisobenzona Sulisobenzonum Uvinul Uval Benzophenone 4 Uval sodium salt Uvinuc ms 40</p> <p>IUPAC: 5-(benzoyl)-4-hydroxy-2-methoxybenzenesulfonic acid</p>	4065-45-6 och 6628-37-1	5 % (uttryckt som syra)	<p>6628-37-1</p>  <p>4065-45-6</p> 	<p>4065-45-6 <chem>O=C(c1ccc1)c1c(O)cc(OC)c2S(=O)(=O)O)c2</chem></p> <p>6628-37-1 <chem>O=S(=O)(c1ccc2c(O)c(O)c1)O([Na])=O</chem></p>

11 BILAGA B. QSAR RESULTAT

Tabell 2. Sammanställning av resultat från QSAR beräkningar med Episuite (US EPA 2007). Värden inom parentes anger ev databasmatch (dvs värden som tagits fram experimentellt och ingår i databasen). Lägsta effektrelaterade värden har markerats med fet stil. Värden som överskrider vattenlösligheten markeras med kursiv stil. HENRY=Henry's lagskonstant ($\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)

NR	CAS	EFFEKTER I FISK (MG/L)	EFFEKTER I DAPHNIA (MG/L)	EFFEKTER I ALGER (MG/L) OCH EV MYSID	FYSIKALISK-KEMISKA DATA	FÖRDELNING VATTEN-BIOTA/LUFT/ORG KOL	NEDBRYTBARHET	INITIAL FÖRDELNING I OLIKA MATRISER (%)
1	150-13-0	14d LC50: 1482 ^a 1616 ^b 96h LC50: 2419 ^b ChV: 10,50 ^b	48h LC50: 17,95 ^b ChV: 0,469 ^b	ALGER ChV: 145,1 ^b	MW: 137,14 Log Kow: 0,96 (0,83)	BCF: 3,16 HENRY: 3,88E-6 ^c 1,88E-6 ^d Koc: 10 ^f	Lätt bionedbrytbar t½ i luft: 0,265 d	Luft: 1,46E-10 Vatten: 99,8 Jord: 1,04E-5 Sediment: 0,194
2	52793-97-2	14d LC50: 57,041 ^a 96h LC50: 50,059 ^{kl} 81,028 ^{km} 10,344 ^{kh} ChV: 3,071 ^{kl} 2,651 ^{kl} 4,914 ^{km} 2,425 ^{kh}	48h LC50: 23,416 ^{kl} 36,516 ^{km} ChV: 3,071 ^{kl} 5,443 ^{km}	ALGER 96h EC50: 11,159 ^{kl} 17,857 ^{km} ChV: 5,022 ^{kl} 7,899 ^{km} MYSID 96h LC50: 3,094 ^{kl} 7,432 ^{km}	MW: 393,55 Log Kow: 3,11	BCF: 3,162 HENRY: 6,01E-15 ^c Koc: 5,43E3	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,121 d	Luft: 3,4E-22 Vatten: 96,8 Jord: 2,03E-13 Sediment: 3,16

NR	CAS	EFFEKTER I FISK (MG/L)	EFFEKTER I DAPHNIA (MG/L)	EFFEKTER I ALGER (MG/L) OCH EV MYSID	FYSIKALISK-KEMISKA DATA	FÖRDELNING VATTEN-BIOTA/LUFT/ORG KOL	NEDBRYTBARHET	INITIAL FÖRDELNING I OLIKA MATRISER (%)
3	118-56-9	96h LC50: 0,236 ^g 0,106 ^g 14d LC50: 0,084 ^a 30d ChV: 0,015 ^e 90d ChV: 0,004^e ChV: 0,005 ^g	48h LC50: 0,034 ^g 0,287 ^e 21d ChV: 0,012 ^e	ALGER 96h EC50: 0,022 ^g 0,027 ^e ChV: 0,019 ^g 96h ChV: 0,030 ^e	MW: 262,35 Log Kow: 6,16	BCF: 11 080 HENRY: 1,96 ^c 9,42E-4 ^d Koc: 1,08E4 ^f	Lätt bionedbrytbar ^g t½ i luft: 0,249 d	Luft: 0,00384 Vatten: 5,25 Jord: 0,0109 Sediment: 94,7
4	131-57-7	96h LC50: 3,882 ^e 14d LC50: 14,538 ^a 30d ChV: 0,572 ^e 90d ChV: 0,057^e	48h LC50: 2,936 ^e 21d ChV: 0,421 ^e	ALGER 96h EC50: 5,119 ^e 96h ChV: 1,232 ^e	MW: 228,25 Log Kow: 3,52 (3,79)	BCF: 23,89 HENRY: 1,52E-3 ^c Koc: 1,27E3 ^f	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,053d	Luft: 1,86E-5 Vatten: 87,4 Jord: 0,0071 Sediment : 12,6
6	27503-81-7	14d LC50: 28027 ^a 96h LC50: 18223 ⁿ	48h LC50: 1017,8 ⁱ	ALGER 96h EC50: 911,296 ⁿ 96h ChV: 123,8ⁿ	MW: 274,30 Log Kow: -0,16	BCF: 3,162 HENRY: 1,33E-9 ^c Koc: 291 ^f	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,884 d	Luft: 4,58E-11 Vatten: 99,8 Jord: 5,79E-9 Sediment: 0,184
7	90457-82-2	14d LC50: 19,2 ^a 96h LC50: 247,31 ^{q,l} 377,74 ^{q,m} 44,094 ^{q,h} ChV: 13,003 ^{q,l} 9,687 ^{q,l} 16,388 ^{q,m} 12,593 ^{q,h}	48h LC50: 95,127 ^{q,l} 129,493 ^{q,h} ChV: 21,251 ^{q,h}	ALGER 96h EC50: 44,075 ^{q,l} 63,641 ^{q,m} ChV: 24,199 ^{q,l} 35,680 ^{q,m} MYSID ^j 96h LC50: 5,911^{q,l} 10,143 ^{q,m}	MW: 562,70 Log Kow: 3,83	BCF: 3,16 HENRY: 2,09E-18 ^c Koc: 2,25E5 ^f	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,061d	Luft: 1,6E-21 Vatten: 78,6 Jord: 1,57E-16 Sediment: 21,4

⁹ Enbart enligt MITI linjär modell (och på gränsen till icke biologiskt lättnedbrytbar) men ej enligt MITI icke linjär modell.

NR	CAS	EFFEKTER I FISK (MG/L)	EFFEKTER I DAPHNIA (MG/L)	EFFEKTER I ALGER (MGL) OCH EV MYSID	FYSIKALISK-KEMISKA DATA	FÖRDELNING VATTEN-BIOTA/LUFT/ORG KOL	NEDBRYT-BARHET	INITIAL FÖRDELNING I OLIKA MATRISER (%)
8	70356-09-1	14d LC50: 2,715 ^a 96h LC50: 2,444 ^f	48h LC50: 0,831 ^f ChV: 0,030^f	ALGER ChV: 0,067 ^f	MW: 310,40 Log Kow: 4,51	BCF: 84,9 HENRY: 2,03E-5 ^c Koc: 1,7E3	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,422 d	Luft: 8,38E-9 Vatten: 49,7 Jord: 0,000369 Sediment: 50,3
9	56039-58-8	14d LC50: 276,7 ^a 96h LC50: 1516 ^{g,f} 2636 ^{g,m} 375,9 ^{q,h} ChV: 117 ^{q,l} 241 ^{q,m} 69,1^{q,h}	48h LC50: 903 ^{g,l} 1666 ^{g,m} ChV: 112 ^{q,l} 220 ^{q,m}	ALGER 96h EC50: 446 ^{q,l} 810 ^{q,m} ChV: 157 ^{q,l} 267 ^{q,m} MYSID: 303 ^{q,l} 1103 ^{q,m}	MW: 320,41 Log Kow: 2,22	BCF: 3,16 HENRY: 9,23E-8 Koc: 538	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,126d	Luft: 2,55E-10 Vatten: 99,5 Jord: 1,89E-6 Sediment: 0,529
10	6197-30-4	14d LC50: 0,027 ^a 96h LC50: 0,724 ^f 0,333 ^o 32d ChV: 0,00089^f	48h LC50: 0,112 ^f	ALGER 96h EC50: 0,015 ^f	MW: 361,49 Log Kow: 6,88	BCF: 39 700 HENRY: 3,04E-4 ^c Koc: 4,11E5	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,516 d	Luft: 1,47E-7 Vatten: 6,17 Jord: 1,59E-5 Sediment: 93,8
12	5466-77-3	FISK 96h LC50: 0,910 ^f 14d LC50: 0,191 ^a 32d ChV: 0,003^f	48h LC50: 0,327 ^f	ALGER 96h EC50: 0,040 ^f	MW: 290,41 Log Kow: 5,80	BCF: 5856 HENRY: 1,78E-6 ^c 8,48E-6 ^d Koc: 1,23E4	Lätt bionedbrytbar t½ i luft: 1,091d	Luft: 0,00522 Vatten: 15,7 Jord: 0,00334 Sediment: 84,3
13	15716-30-0	14d LC50: 1252,5 ^a 96h LC50: 85,38 ^g ChV: 50,914 ^g	48h LC50: 785,48 ^g	ALGER 96h EC50: 6,637 ^g ChV: 5,071^g	MW: 253,30 Log Kow: 1,35	BCF: 0,490 HENRY: 1,75E-7 Koc: 10	Lätt bionedbrytbar t½ i luft: 0,136d	Luft: 9,8E-12 Vatten: 99,8 Jord: 1,1E-6 Sediment: 0,221

NR	CAS	EFFEKTER I FISK (MG/L)	EFFEKTER I DAPHNIA (MG/L)	EFFEKTER I ALGER (MGL) OCH EV MYSID	FYSIKALISK-KEMISKA DATA	FÖRDELNING VATTEN-BIOTA/LUFT/ORG KOL	NEDBRYTBARHET	INITIAL FÖRDELNING I OLIKA MATRISER (%)
14	71617-10-2	FISK 14d LC50: 3,116 ^a 96h LC50: 1,431 ^f 32d ChV: 0,013^f	48h LC50: 1,548 ^f	ALGER 96h EC50: 0,179 ^f	MW: 248,32 Log Kow: 4,33	BCF: 429,7 HENRY: 7,71E-2 ^c 3,05E-1 ^d Koc: 1,78E3	Lätt bionedbrytbar t½ i luft: 0,23 d	Luft: 0,0121 Vatten: 66,3 Jord: 0,027 Sediment: 33,7
15	88122-99-0	14d LC50: 8,61E-11^b 8,61E-11 ^f 96h LC50: 1,11E-6 ^g 4,35E-12^f 1,44E-9 ^h ChV: 6,34E-12 ^f	48h LC50: 1,32E-11 ^g 1,32E-11 ^f 16d EC50: 4,89E-10 ^f	ALGER 96h EC50: 1,53E-7 ^g ChV: 1,62E-7 ^g	MW: 823,10 Log Kow: 17,05	BCF: 3,162 ¹⁰ HENRY: 3,30E-13 Koc: 1E10 ^f	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,061d	Luft: 1,72E-27 Vatten: 1,98 Jord: 1,98E-25 Sediment: 98
16	155633-54-8	14d LC50: 0,000214^a 96h LC50: 0,004 ^{s,l} 0,000383 ^{s,m} 0,00187 ^e ChV: 2,3E-5^{s,l} 3,1E-5 ^{s,m} 30dChV: 0,000244 ^e 90d ChV: 0,000277 ^e	48h LC50: 0,0005 ^{s,l} 0,000404 ^{s,m} 0,024 ^e ChV: 0,000102 ^{s,l} 0,00013 ^{s,m} 21dChV 0,000209 ^e	ALGER 96h EC50: 0,005 ^{s,l} 0,000451 ^{s,m} 6,23E-5 ^e ChV: 0,000752 ^{s,l} 0,000694 ^{s,m} 96hChV: 0,000464 ^e	MW: 501,85 Log Kow: 9,46	BCF: 27,53 HENRY: 9,08E-8 Koc: 4,7E8 ^f	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,46d	Luft: 7,28E-15 Vatten: 1,98 Jord: 3,35E-11 Sediment: 98

¹⁰ BCF värdet antas till detta värde då log K_{ow} är över 7

NR	CAS	EFFEKTER I FISK (MG/L)	EFFEKTER I DAPHNIA (MG/L)	EFFEKTER I ALGER (MGL) OCH EV MYSID	FYSIKALISK-KEMISKA DATA	FÖRDELNING VATTEN-BIOTA/LUFT/ORG KOL	NEDBRYT-BARHET	INITIAL FÖRDELNING I OLIKA MATRISER (%)
17	154702-15-5	14d LC50: 3,42E-8 ^r 96h LC50: 4,25E-5 ^r 2,79E-9 ^r 2,15E-7 ^h ChV: 4,88E-9 ^g 2,5E-9 ^{r,h}	DAPHNIA 48h LC50: 6,87E-9 ^r 16d EC50: 6,8E-8 ^r	ALGER 96h EC50: 5,27e-006 ^g ChV: 5,24e-006 ^g	MW: 766,0 Log Kow: 14,03	BCF: 3,162 ¹¹ HENRY: 1,49E-17 Koc: 2,8E9	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,047d	Luft: 4,58E-30 Vatten: 1,24 Jord: 2,6E-25 Sediment: 98,8
18	36861-47-9	14d LC50: 0,132 ^a 96h LC50: 0,511 ^{k,l} 0,660 ^{k,m} 0,059 ^{k,h} ChV: 0,008 ^{k,l} 0,011 ^{k,m} 0,030 ^{k,h}	48h LC50: 0,111 ^{k,l} 0,102 ^{k,m} ChV: 0,017 ^{k,l} 0,022 ^{k,m}	MYSID ^l 96h LC50: 0,000776 ^{k,l} 0,000501 ^{k,m} ALGER 96h EC50: 0,048 ^{k,l} 0,051 ^{k,m} ChV: 0,047 ^{k,l} 0,057 ^{k,m}	MW: 254,38 Log Kow: 5,92	BCF: 7224 HENRY: 2,18E-1 ^c Koc: 1,22E4	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,120 d	Luft: 0,000127 Vatten: 5,38 Jord: 0,00069 Sediment: 94,6
	38102-62-4	14d LC50: 0,307 ^a 96h LC50: 0,939 ^{k,l} 1,256 ^{k,m} 0,120 ^{k,h} ChV: 0,018 ^{k,l} 0,025 ^{k,m} 0,054 ^{k,h}	48h LC50: 0,231 ^{k,l} 0,231 ^{k,m} ChV: 0,035 ^{k,l} 0,047 ^{k,m}	MYSID ^l 96h LC50: 0,003 ^{k,l} 0,002 ^{k,m} ALGER 96h EC50: 0,100 ^{k,l} 0,115 ^{k,m} ChV: 0,087 ^{k,l} 0,110 ^{k,m}	MW: 240,35 Log Kow: 5,47	BCF: 3233 HENRY: 1,64E-1 Koc: 7,84E3	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,120d	Luft: 0,000328 Vatten: 14,2 Jord: 0,00138 Sediment: 85,8

¹¹ BCF värdet antas till detta värde då log K_{ow} är över 7

NR	CAS	EFFEKTER I FISK (MG/L)	EFFEKTER I DAPHNIA (MG/L)	EFFEKTER I ALGER (MGL) OCH EV MYSID	FYSIKALISK-KEMISKA DATA	FÖRDELNING VATTEN-BIOTA/LUFT/ORG KOL	NEDBRYTBARHET	INITIAL FÖRDELNING I OLIKA MATRISER (%)
19	15087-24-8	14d LC50: 0,375 ^a 96h LC50: 1,088 ^{k,l} 1,468 ^{k,m} 0,141 ^{k,h} ChV: 0,022 ^{k,l} 0,031 ^{k,m} 0,062 ^{k,h}	48h LC50: 0,275 ^{k,l} 0,280 ^{k,m} ChV: 0,041 ^{k,l} 0,057 ^{k,m}	MYSID ^l 0,003 ^{k,l} 0,003 ^{k,m} ALGER 96h EC50: 0,120 ^{k,l} 0,139 ^{k,m} ChV: 0,101 ^{k,l} 0,130 ^{k,m}	MW: 240,35 Log Kow: 5,37	BCF: 2738 HENRY: 1,98E-1 ^c Koc: 7,54E3	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,125 d	Luft: 0,000381 Vatten: 13,1 Jord: 0,00213 Sediment: 86,9
20	118-60-5	FISK 14d LC50: 0,117 ^a 96h LC50: 0,285 ^g 0,732 ^e ChV: 0,008 ^g 30d ChV: 0,018 ^e 90d ChV: 0,005 ^e	48h LC50: 0,320 ^e 21d ChV: 0,014 ^e	ALGER 96h EC50: 0,026 ^g 0,038 ^e ChV: 0,022 ^g 96h ChV: 0,038 ^e	MW: 250,34 Log Kow: 5,97	BCF: 7856 HENRY: 3,34 ^c 2,91E-3 ^d Koc: 8,56E3	Lätt bionedbrytbar t½ i luft: 0,490 d	Luft: 0,0329 Vatten: 12,5 Jord: 0,02 Sediment: 87,4
21	21245-02-3	14d LC50: 0,194 ^a 96h LC50: 0,404 ^b ChV: 0,012 ^g	48h LC50: 0,082 ^g	ALGER 96h EC50: 0,037 ^g ChV: 0,031 ^g	MW: 277,41 Log Kow: 5,77	BCF: 5486 HENRY: 4,06E-1 ^c Koc: 2,41E3	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,080d t½ hydrolys: 590 år ¹²	Luft: 0,00128 Vatten: 16,3 Jord: 0,000994 Sediment: 83,7
22	4065-45-6	14d LC50: 10 882 ^a 96h LC50: 4571 ^b 30d ChV: 719 ^g 90d ChV: 19,7 ^p	48h LC50: 770 ^p 21d ChV: 488 ^p	ALGER 96h EC50: 42 416 ^p 96h ChV: 1653 ^p	MW: 308,31 Log Kow: 0,37	BCF: 3,16 HENRY: 7,12E-10 ^c Koc: 92,4 ^l	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,144d	Luft: 1,99E-14 Vatten: 99,8 Jord: 5,57E-9 Sediment: 0,196

¹² Gäller vid pH 7. Uppskattas till 59 år vid pH 8. Osäker bedömning pga ett fragment ej är tillgängligt i databasen så ett substitut har använts vid beräkningen.

NR	CAS	EFFEKTER I FISK (MG/L)	EFFEKTER I DAPHNIA (MG/L)	EFFEKTER I ALGER (MGL) OCH EV MYSID	FYSIKALISK-KEMISKA DATA	FÖRDELNING VATTEN-BIOTA/LUFT/ORG KOL	NEDBRYTBARHET	INITIAL FÖRDELNING I OLIKA MATRISER (%)
	6628-37-1	14d LC50: 4,22E ⁵ 96h LC50: 6203 ^e 30d ChV: 1012 ^e 90d ChV: 13,3 ^e	48h LC50: 445,32 ^e 21d ChV: 657 ^e	ALGER 96h EC50: 1,74E ⁵ 96h ChV: 2416 ^e	MW: 330,29 Log Kow: -1,42	BCF: 3,16 HENRY: 7,15E-10 ^c Koc: 92,4 ^d	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,144 d	Luft: 2,98E-11 Vatten: 99,8 Jord: 6,92E-10 Sediment: 0,192
23	103597-45-1	14d LC50: 6,86E-7 ^d 96h LC50: 7,67E-5 ^{s,l} 4,3E-6 ^{s,m} 3,49E-5 ^e ChV: 1,38E-7 ^{s,l} 3,29E-7 ^{s,m} 30d ChV: 4,27E-6 ^e 90d ChV: 1,66E-5 ^e	48h LC50: 2,92E-6 ^{s,l} 2,8E-6 ^{s,m} 0,00187 ^e ChV: 1,22E-6 ^{s,l} 2,59E-6 ^{s,m} 21d ChV: 3,94E-6 ^e	ALGER 96h EC50: 0,000167 ^{s,l} 7,52E-6 ^{s,m} 1,81E-7^e ChV: 2,4E-5 ^{s,l} 2,61E-5 ^{s,m} 96h ChV: 7,64E-6 ^e	MW: 658,89 Log Kow: 12,46	BCF: 3,16 ¹³ HENRY: 3,31E-19 Koc: 1E-10 ^{c,l}	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,322d	Luft: 8,51E-31 Vatten: 1,24 Jord: 2,41E-25 Sediment: 98,8
24	180898-37-7	14d LC50: 2,06E ⁸ 96h LC50: 0,193 ^{v,m} 1,6E6 ^x	48h LC50: 9468 ^y 53532 ^x	ALGER 96h EC50: 12081 ^x 96h ChV: 655 ^x	MW: 674,56 Log Kow: -4,15	BCF: 3,16 HENRY: 4,9E-31 Koc: 3,28E8	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,2d	Luft: 3,29E-43 Vatten: 99,8 Jord: 2,94E-34 Sediment: 0,197

¹³ Antas till detta värde när log K_{ow} är över 7

NR	CAS	EFFEKTER I FISK (MG/L)	EFFEKTER I DAPHNIA (MG/L)	EFFEKTER I ALGER (MGL) OCH EV MYSID	FYSIKALISK-KEMISKA DATA	FÖRDELNING VATTEN-BIOTA/LUFT/ORG KOL	NEDBRYTBARHET	INITIAL FÖRDELNING I OLIKA MATRISER (%)
25	187393-00-6	FISK 14d LC50: 0,005 ^e 96h LC50: 0,024 ^f 0,056 ^{k,l} 0,061 ^{k,m} 0,004 ^{k,h} ChV: 0,000378 ^{k,l} 0,000375 ^{k,m} 0,004 ^{k,h}	48h LC50: 0,004 ^f 0,007 ^{k,l} 0,004 ^{k,m} 0,008 ^u ChV: 0,0012 ^{k,l} 0,00122 ^{k,m} 0,0012 ^u	MYSID ^l 96h LC50: 5,25E-6 ^{k,l} 1,27E-6^{k,m} ALGER 96h EC50: 0,058 ^f 0,003 ^u 0,003 ^{k,l} 0,002 ^{k,m} ChV: 0,052 ^f 0,005 ^{k,l} 0,005 ^u	MW: 627,83 Log Kow: 8,03	BCF: 80,29 HENRY: 4,83E-10 ^c Koc: 2,29E6 ⁱ	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,031d	Luft: 1,62E-15 Vatten: 2,68 Jord: 1,13E-13 Sediment: 97,3
28	302776-68-7	FISK 14d LC50: 0,059 ^e 96h LC50: 0,224 ^g 0,093 ^e ChV: 0,004 ^g 30dChV: 0,013 ^e 90dChV: 0,004 ^e	DAPHNIA 48h LC50: 0,023 ^g 0,298 ^e 21d ChV: 0,010 ^e	ALGER 96h EC50: 0,021 ^g 0,019 ^e ChV: 0,018 ^g 96h ChV: 0,026 ^e	MW: 397,52 Log Kow: 6,54	BCF: 3151 HENRY: 1,91E-5 ^c Koc: 3,16E4 ⁱ	Ej biologiskt lättnedbrytbar t½ i luft: 0,047d	Luft: 3,25E-9 Vatten: 3,75 Jord: 4,33E-7 Sediment: 96,3

a) Neutral organic SAR (baseline toxicity)

b) Aromatic Amines-Acid SAR

c) Bond estimate

d) Group Estimate

e) Phenols SAR

f) Acrylates SAR

g) Esters SAR

h) saltvattensfisk

i) Kan påverkas av pH

j) Diketones SAR

k) Vinyl/Allyl ketones SAR

l) CLOGP

m) SRC

n) Imidazoles-acid SAR

o) Allylic/Vinyl nitriles SAR

p) phenols-acid SAR

q) vinyl/allyl ketones-acid SAR

r) triazines SAR

s) benzotriazoles SAR

t) aliphatic amines SAR

u) vinyl/allyl ethers SAR

v) peroxy acids SAR

x) imidazoles-SAR

12 BILAGA C: PBT OCH VPVB KRITERIER ENLIGT REACH

Kriterierna ska ej tillämpas på oorganiska ämnen. De gäller dock även för organiska metallföreningar.

	Kriterier relaterade till persistens. Halveringstider i olika matriser	Kriterier relaterade till bioackumulering. BCF, baserat på uppmätta halter i vattenlevande organismer	Kriterier relaterade till toxicitet
PBT	Havsvatten: >60d <i>eller</i> Söt/bracksvatten: >40d <i>eller</i> Havssediment: >180d <i>eller</i> Söt/bracksvattensediment: >120d <i>eller</i> Jord: >120d	>2000	NOEC för vattenlevande organismer: < 0,01 mg/l <i>eller</i> Cancerframkallande kat 1 eller 2 <i>eller</i> Mutagent kat 1 eller 2 <i>eller</i> Reproduktionsstörande kat 1, 2 eller 3 <i>eller</i> Klassificeras som T, R48 eller Xn, R48 enligt direktiv 67/548/EEG
vPvB	Havs-, söt- eller bracksvatten: >60d <i>eller</i> Havs-, söt- eller bracksvattensediment : >180d <i>eller</i> Jord: >180d	>5000	