
Svenskt Vatten

UTVECKLING

Rapport
Nr 2025-8

Screening av kemiska ämnen i avloppsnätet

Gunnar Thorsén
Bahare Esfahani
Stefan Freigi
Ioana Chelcea
Asa Motiei
Swapnil Chavan
Charlotta Nilsson
Raed Awad
Pernilla Gideflod
Ziye Zheng
Johan Lindberg

Svenskt Vatten

UTVECKLING

Svenskt Vatten Utveckling (SVU) är kommunernas eget FoU-program om kommunal VA-teknik. Programmet finansieras i sin helhet av kommunerna. Programmet lägger tonvikten på tillämpad forskning och utveckling inom det kommunala VA-området.

Författarna är ensamt ansvariga för rapportens innehåll, varför detta ej kan åberopas såsom representerande Svenskt Vattens ståndpunkt.

Svenskt Vatten Utveckling

Svenskt Vatten AB

POSTADRESS BOX 14057, 167 14 Bromma

BESÖKSADRESS Gustavslundsvägen 12, 167 51 Bromma

TELEFON 08-506 002 00

E-MAIL svensktvatten@svensktvatten.se

www.svensktvatten.se

RAPPORTENS TITEL	Screening av kemiska ämnen i avloppsnätet
TITLE OF THE REPORT	Screening of chemical compounds in the sewage system
FÖRFATTARE	Gunnar Thorsén, Bahare Esfahani och Stefan Freigi, IVL, Ioana Chelcea, RISE, Asa Motiei, IVL, Swapnil Chavan och Charlotta Nilsson, RISE, Raed Awad, Pernilla Gideflod och Ziye Zheng, IVL, Johan Lindberg, RISE
RAPPORTNUMMER	2025-8
ANTAL SIDOR	77
SAMMANDRAG	Projektet har kommit fram till att verksamheter som handel, industrier, sjukhus och bostäder bidrar med olika mönster av kemikalier till avloppsnätet. Kemiska screeninganalyser har använts för att leta efter ett stort antal kemikalier i avloppsvattnet. Kemikalierna har riskklassificerats och farobedömts. Resultaten kan användas för att stödja framtida prioriteringar av strategiska insatser i uppströmsarbetet.
SUMMARY	The project results show that activities such as trade, industry, hospitals and residential areas contribute with different patterns of chemicals to the sewer system. Chemical screening analyses have been used to search for a large number of chemicals in wastewater samples. The chemicals have been classified and ranked for potential hazard properties. The results can be used to support future prioritisation of strategic actions in upstream work.
SÖKORD	Suspect screening, avloppsvatten, sjukhus, bostäder, industrier, handel, hormonstörande effekt, PFAS, källspårning
KEYWORDS	Suspect screening, wastewater, hospital, residence housing, industries, commerce areas, endocrine disrupting effect, PFAS, source attribution
MÅLGRUPPER	Vatten- och avloppsorganisationer, miljö- och hälsoskydd, nationella myndigheter som Naturvårdsverket och Kemikalieinspektionen
RAPPORT	Finns att hämta hem som pdf från Vattenbokhandeln. https://vattenbokhandeln.svensktvatten.se/
UTGIVNINGÅR	2025
UTGIVARE	© Svenskt Vatten AB
REFERENS	Thorsén G., Esfahani B., Freigi S., Chelcea I., Motiei A., Chavan S., Nilsson C., Awad R., Gideflod P., Zheng Z. och Lindberg J. (2025). <i>Screening av kemiska ämnen i avloppsnätet</i> . SVU-rapport 2025-8. Stockholm: Svenskt Vatten.

Om projektet

PROJEKTNUMMER	22-114
PROJEKTETS NAMN	Kemisk screening i avloppsnätet som stöd för uppströmsarbete
PROJEKTETS FINANSIERING	Svenskt Vatten Utveckling, Stiftelsen IVL, SVOA, Mälarenergi vatten AB, Uppsala Vatten och Avfall AB, MittSverige Vatten och Avfall AB, Käppalaförbundet

Förord

Detta projekt tillkom genom diskussioner inom VA-kluster Mälardalens uppströmsgrupp. Bakgrunden var att det fanns ett intresse av en bredare kartering av organiska kemiska ämnen som kunde användas för att ge vägledning till uppströmsverksamheten. Kunskapen om vilka ämnen som tillförs från olika källor är bristfällig och de karteringsverktyg som finns, till exempel digitala inrapporteringsverktyg, uppfattades inte som heltäckande. Därför fanns ett intresse av att utvärdera om en kemisk screening skulle kunna ge en bild av förekomst eller fördelning av ämnen i avloppsnätet. Den information som togs fram i undersökningen skulle kunna ge svar på om sjukhus, industrier, bostäder eller handelsplatser bidrog olika mycket med vissa ämnen eller om de bidrog med specifika ämnen. Detta skulle i så fall kunna ge vägledning om hur uppströmsarbetet kan bedrivas för att minska utsläppen till avloppsnätet av ämnen som har toxiska egenskaper.

Inom projektet togs prover på avloppsledningsnätet vid platser som i så stor utsträckning som möjligt endast påverkades av antingen bostäder, handelsplatser, industrier eller sjukhus samt vid inloppen och utloppen till reningsverken. Provtagning gjordes i fyra olika städer: Stockholm, Västerås, Uppsala och Sundsvall/Timrå. Totalt sett kunde över 200 ämnen identifieras i proverna. Många ämnen hade en slumpmässig fördelning mellan proverna medan vissa verkade vara mer knutna till en viss typ av källa. Prover har dock tagits med en blandning av flödesproportionell och tidsstyrd provtagning och endast vid en tidpunkt, så dessa resultat är att betrakta som indikativa. Naturvårdsverket bidrog via ett kompletterande projekt så att de utgående proverna från avloppsreningsverken kunde inkluderas i screeningen, att tio av de ämnen som hittades kunde få en positiv identifiering samt att hormonstörande effekt kunde studeras i samtliga prover. Resultaten från detta projekt sammanfattas i denna rapport då de bidrar till projektets helhet. En del av den information som ligger till grund för rapporten finns publicerad i en separat Excelfil. Detta gäller bland annat data från de mätningar som har gjorts med vätskekromatografi och associerade data som har använts vid farobedömning av de ämnen som har identifierats.

Följande personer har medverkat och haft följande roller:

- Gunnar Thorsén (IVL): projektledning, databearbetning och rapportskrivning
- Asa Motiei (IVL), Ioana Chelsea och Swapnil Chavan (RISE): prioritering av kemiska ämnen och riskbedömning
- Ziye Zheng (IVL): databearbetning
- Charlotta Nilsson och Johan Lindberg (RISE): faro- och riskbedömning av kemiska ämnen
- Bahare Esfahani och Stefan Freigi (IVL): kemiska screeninganalyser och databearbetning
- Raed Awad och Pernilla Gideflod (IVL): PFAS- och metallanalyser

Från VA-organisationerna har följande personer varit involverade i projektet: Katja Nähri (SVOA), Sandra Burman och Susanna Grystad (Mälarenergi), Sofie Orvestedt (Uppsala Vatten och Avfall AB), Jessica Schröder och Sofia Wängdahl (MittSverige Vatten och Avfall) och Angelica Andreasson (Käppalaförbundet).

Provtagning på de olika ledningsnäten utfördes av Peter Johansson på mProv konsult AB.

Gunnar Thorsén, projektledare

Innehåll

Förord.....	2
Sammanfattning	4
Summary	5
Ordlista.....	6
1 Introduktion	8
1.1 Bakgrund	8
1.2 Projektets syfte.....	8
1.3 Projektets genomförande	9
2 Kemiska screeningtekniker.....	11
3 Försöksupplägg och provtagning	15
3.1 Provtagningsplatser.....	15
3.2 Provtagning.....	15
4 Datasammanställning kemiska ämnen	18
5 Prioritering kemiska ämnen.....	20
5.1 Insamling av experimentella data för hälsorisker för människor.....	21
5.2 Insamling av experimentella data för miljöfaror	21
5.3 Insamling av data från REACH-förordningar	21
5.4 Rangordning av kombinerade datauppsättningskemikalier	22
6 Provupparbetning och kemisk analys	23
6.1 Upparbetning av prover.....	23
6.2 Tester för upparbetning inför GC-MS	23
6.3 Tester för upparbetning inför HPLC-HRMS.....	24
7 Resultat	25
7.1 Analys av PFAS.....	25
7.2 Analys av metaller	27
7.3 Non-target screening med GC-MS	28
7.4 Suspect screening med LC-MS	30
7.5 Farobedömning av identifierade ämnen.....	35
7.6 Användningsområden och ämnestyper.....	39
7.7 Ämnen på Priolistan	41
8 Tilläggsprojekt från Naturvårdsverket	43
9 Diskussion	47
9.1 Generella observationer.....	47
9.2 Identifiering av kemiska ämnen.....	47
9.3 Prioritering av ämnen för uppströmsarbete	48
9.4 Resultat från mätning av PFAS, metaller och östrogen effekt	48
9.5 Användningsområden för identifierade ämnen	49
10 Slutsatser och råd	50
10.1 Stöd för uppströmsarbete	50
11 Framtida forskningsbehov.....	51
Referenser	52
Bilaga A Beskrivning av alternativ prioriteringsmetod och de kemiska analyserna	56
Bilaga B Bildexempel på placering av vakuumprovtagaren.....	59
Bilaga C Identifierade ämnen GC-MS	60
Bilaga D Identifierade ämnen LC-MS och GC-MS, ämneskategorier	65
Bilaga E Informationskällor till farobedömning.....	70
Bilaga F PFAS-resultat från avloppsprover.....	72
Bilaga G Beskrivning av stödjande information (separat Excel-fil)	77

Sammanfattning

Projektet har kommit fram till att verksamheter som handel, industrier, sjukhus och bostäder bidrar med olika mönster av kemikalier till avloppsnätet. Kemiska screeninganalyser har använts för att leta efter ett stort antal kemikalier i avloppsvattnet. Kemikalierna har riskklassificerats och farobedömts. Resultaten kan användas för att stödja framtida prioriteringar av strategiska insatser i uppströmsarbetet.

Kemisk karaktärisering av avloppsvatten utförs för det mesta med riktade kemiska analyser där bara ett fåtal ämnen undersöks. En bredare kartläggning av kemiska ämnen kräver i regel att flera analyspaket används av ett analyslaboratorium, och en sådan kartläggning blir snabbt kostsam. Därför fanns ett intresse av att utvärdera om en kemisk screening skulle kunna ge en bild av hur kemiska ämnen förekommer och fördelar sig i avloppsnätet.

Fyra VA-organisationer bidrog med prover från platser i avloppsnätet som i huvudsak påverkas av antingen flerfamiljsbostäder, handelsplatser, industriområden eller sjukhus. Prover togs även på inkommande och utgående avloppsvatten till reningsverket för att skatta reduktionen av de kemiska ämnena över reningsverket. Provtagningen gjordes i Stockholm, Västerås, Uppsala och Sundsvall/Timrå.

Två olika kemiska screeningmetoder användes för att karaktärisera innehållet av så många olika kemiska ämnen som möjligt. Dessa screeningmetoder är inte kvantitativa men signalintensiteten kan jämföras mellan olika prover för ett och samma ämne. Ett arbete utfördes för att skapa en *suspect list* av prioriterade ämnen att söka efter i svenska avloppsprover. Dessa ämnen riskklassificerades för att möjliggöra prioritering av ämnena, dels med avancerade beräkningsmetoder, dels genom att söka fram och kombinera experimentell information om ämnens toxiska egenskaper från offentligt tillgängliga källor. Dessa riskklassningar användes sedan för att göra en farobedömning.

Totalt identifierades över 200 ämnen i proverna. Ämnena kategoriserades efter användningsområden och grupperades för att underlätta för framtida uppströmsarbete. De relativa signalerna för ämnena jämfördes för att identifiera om det fanns mönster i data som tydde på att de i större utsträckning kom från en viss typ av källa. Exempelvis hade tre ämnen relaterade till gummi något förhöjda signaler från industriområden. Ett UV-skyddsämne hade högre halt i prover från bostäder, och ett antal antibiotika och läkemedel hade högre halter i prover från sjukhus. En annan iakttagelse var att den relativa signalintensiteten från bostäder var generellt hög för många ämnen, vilket tyder på att hushåll kan bidra med en relativt stor kemisk belastning till avloppsreningsverken.

Inom projektet gjordes även kvantitativa analyser av PFAS och metaller, samt utredning av hormonstörande effekt. För PFAS observerades förhöjda halter av 6:2-PAP, 8:2-PAP och 6:2-diPAP i vissa prov. Metallanalyserna visade att det eventuellt kan finnas högre halter av kobolt, nickel och bly i prover från industriområden. Mätningarna av hormonstörande effekt visade att denna i de flesta fall reducerades kraftigt över reningsverken samt att medelvärdet i prover från sjukhus visade på en något högre effekt än i prover från de andra typerna av källor.

I den stödjande information som publiceras i en separat Excelfil parallellt med rapporten kan fler kandidatämnen identifieras.

Summary

The project results show that activities such as trade, industry, hospitals, and residential areas contribute with different patterns of chemicals to the sewer system. Chemical screening analyses have been used to search for a large number of chemicals in wastewater samples. The chemicals have been classified and ranked for potential hazard properties. The results can be used to support future prioritisation of strategic actions in upstream work.

Chemical characterisation of wastewater is mostly performed with targeted chemical analyses, where only a few substances are investigated. A broader survey of chemical substances generally requires the use of several analytical packages by a laboratory, and such surveys quickly become expensive. Therefore, there was an interest in evaluating whether chemical screening could provide an overview of how chemical substances occur and how they are distributed in the sewer system.

Four wastewater organisations contributed with samples from locations in the sewer system primarily influenced by either multi-family housing, commercial areas, industrial zones, or hospitals. Samples of incoming and outgoing wastewater were also taken at the treatment plants to estimate the potential reduction of chemicals across the treatment process. Sampling was conducted in Stockholm, Västerås, Uppsala, and Sundsvall/Timrå.

Two different chemical screening methods were used to characterise the content of as many different chemical substances as possible. These screening methods are not quantitative, but the signal intensity can be compared between different samples for the same substance. Work was carried out to create a suspect list of prioritised substances to search for in Swedish wastewater samples. These substances were risk-classified to enable prioritisation, both with advanced computational methods and by searching for and combining experimental information about the toxic properties of substances from publicly available sources. These risk classifications were then used to make a hazard assessment.

A total of over 200 substances were identified in the samples. The substances were grouped into use categories to facilitate future upstream work. The relative signals for the substances were compared to identify if there were patterns in the data suggesting that they were more likely to come from a certain type of source. For example, three substances related to rubber showed slightly elevated signals from industrial zones. A UV protectant had higher concentrations in samples from residential areas, and several antibiotics and pharmaceuticals had higher levels in samples from hospitals. Another observation was that the relative signal intensity from residential areas was generally high for many substances, indicating that households may contribute a relatively large chemical load to wastewater treatment plants.

Within the project, quantitative analyses of PFAS and metals were also conducted, as well as investigations of endocrine-disrupting effects. For PFAS, elevated levels of 6:2-PAP, 8:2-PAP, and 6:2-diPAP were observed in certain samples. The metal analyses suggested that higher levels of cobalt, nickel, and lead might be present in samples from industrial areas. Measurements of endocrine-disrupting effects showed that these were generally significantly reduced across the treatment plants, and that the average in samples from hospitals indicated a slightly higher effect than in samples from other source types.

More candidate substances can be identified from the supporting information published in a separate Excel file alongside the report.

Ordlista

BCF (bioconcentration factor)	Graden av uppkoncentrering hos ett kemiskt ämne mellan nivåerna i en födoväv
CAS-nummer	Ett identifikationsnummer givet till en specifik kemikalie av organisationen Chemical Abstract Service (CAS). Olika former av samma substans, t.ex. olika salter, kan ha olika CAS-nr.
Dalton (Da)	Enhet för molekylvikt
EI (electron ionization)	Teknik för att skapa joner inom masspektrometri som utnyttjar kollisioner i gasfas mellan molekyler och elektroner, där elektronerna accelereras med en given energi, t.ex. 70 eV
Ekotox-kriterier (persistens, toxicitet och bioackumulation)	Kriterier med vilka man kan uppskatta ett ämnes påverkan på ett ekosystem
Endpoints	Fysikalisk, biologisk eller fysiologisk effektparameter, t.ex. östrogen påverkan, mutagen effekt, etc.
ESI (elektrosprayjonisering)	Teknik för att skapa joner i gasfas genom att utsätta ett vätskeflöde för ett högt elektriskt fält. Laddningar överförs till molekyler lösta i vätskan då spraydropparna dunstar bort.
ESI-spektrum	Masspektrum från ett kemiskt ämne som har genererats via elektrosprayjonisering
Exposure Index	Exponeringsindex
Flödesproportionell provtagning	Provtagning där volymen prov som tas bestäms av hur mycket vatten (i detta fall avloppsvatten) som passerar förbi provtagaren per tidsenhet
GC-MS (gaskromatografi kopplat till masspektrometri)	En konfiguration av ett kemiskt analysinstrument där gaskromatografi används för separation av olika ämnen och masspektrometern används som detektor
INCHIKEY-information (International Chemical Identifier Key)	En rad med bokstäver som beskriver den kemiska sammansättningen och strukturen för en molekyl, t.ex. InChi-informationen för etanol: LFQSCWFLJHTTHZ-UHFFFAOYSA-N
LC-MS (vätskekromatografi kopplat till masspektrometri)	En konfiguration av ett kemiskt analysinstrument där vätskekromatografi används för separation av olika ämnen och masspektrometern används som detektor
LOQ (lower limit of quantification)	Lägst koncentrationen eller mängden av ett ämne i ett prov för vilket ett kvantitativt värde kan bestämmas med en viss mätmetod.
m/z-värde	Kvoten av värdet mellan ett kemiskt ämnes joniserade form som ges av jonens massa delad med dess laddning

Nivåstyrd provtagning	Automatisk provtagning som startas beroende på vilken nivå som vattenytan har
Non-target screening (untargeted screening)	Förutsättningslös kemisk analys där analysinstrumentet samlar in så många kemiska signaler som möjligt för att i nästa steg koppla signalerna till kemiska ämnen
NORMAN-nätverket	Ett i huvudsak europeiskt nätverk av universitet, forskningsinstitut och laboratorier som samarbetar för att identifiera och förbättra möjligheten att studera av nya kemiska riskämnen
PBT	Persistent (långlivad), bioackumulerbar och toxisk – tre effektparametrar som kan användas för att uppskatta hur farligt för miljön som ett visst kemiskt ämne är
PMT	Persistent (långlivad), mobil, och toxisk – tre effektparametrar som kan användas för att uppskatta hur farligt för miljön som ett visst kemiskt ämne är, med fokus på ämnen som kan få långväga spridning
PNEC-värde (Predicted No Effect Concentration)	En skattad koncentration under vilken ingen biologisk eller fysiologisk effekt förväntas förekomma för ett visst kemiskt ämne
Schymanski-skalan	En skala som först beskrevs av Emma Schymanski och kollegor, som beskriver hur säker en identifiering av ett kemiskt ämne från masspektrometriska data är
Screening	Ungefär: kartering, en mer eller mindre storskalig inventering av kemiska signaler, kemiska ämnen eller koncentrationer av kemiska ämnen i ett visst prov eller en serie prover
SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System)	En rad med bokstäver och tecken som innehåller information om kemisk struktur. Två sätt att representera etanol med SMILES är: C-C-O och CCO (enkelbindningar och väteatomer behöver inte skrivas ut)
Suspect screening	Kartering av kemiska ämnen i ett visst prov som utgår ifrån en lista på förväntade ämnen
Suspect target-lista	Lista av masstal på kemiska ämnen som används för att programmera masspektrometern. Innehåller oftast även information om kemisk sammansättning och namn samt ibland även CAS-nummer.
SVHC (Substances of Very High Concern)	Ämnen som bedöms vara av extra intresse på grund av förväntad negativ påverkan, stora produktionsvolym, lång livslängd, etc.
Tidsstyrd provtagning	Automatisk provtagning som startas vid definierade tidsintervall eller tidpunkter
vMvP (mycket mobila och mycket persistenta ämnen)	Ämnen som bedöms vara både mycket långlivade i miljön och som har stor potential att spridas över långa avstånd
Wide scope target screens	En bred kartering av många ämnen som utförs med metoder som ger kvantitativa värden på ämnenas förekomst

1 Introduktion

1.1 Bakgrund

Kemisk karaktärisering av avloppsvatten utförs mestadels med riktade kemiska analyser där ett fåtal ämnen undersöks. Riktad analys med kommersiellt tillgängliga analyspaket avslöjar endast en mycket liten bråkdel av de kemiska ämnen som förekommer, och de ämnen eller parametrar som det finns krav på att följa upp är få. En bredare kartläggning av kemiska ämnen kräver i regel att flera analyspaket används, dvs flera grupper av kemiska substanser som erbjuds av ett analyslaboratorium. En sådan kartläggning blir snabbt kostsam om många olika analyspaket behöver utnyttjas.

En bredare förståelse för den totala kemiska sammansättningen av avloppsvatten saknas därför, även om ett tidigare SVU-finansierat projekt har sammanställt en databas med ca 600 olika substanser, som kvantitativt uppmätts i inkommande avloppsvatten från olika reningsverk (Hansson et al. 2017). Ett antal screeninganalyser av såväl utgående avloppsvatten som biologiska prover och recipientprover har även finansierats av Nordiska Ministerrådet (Schlabach et al. 2017). Denna studie omfattade dock endast ett reningsverk per land i de nordiska länderna. Flera liknande projekt har förekommit eller förekommer i Europa (NOR-water, Joint Danube Survey, Vandalf), även om inga av dessa har studerat förekomsten av ämnen på ledningsnätet utan bara vid och nedströms reningsverken.

Projektet tillkom genom diskussioner inom VA-klustret Mälardalens uppströmsgrupp. Bakgrunden var att det fanns ett intresse av en bredare kartering av organiska kemiska ämnen som kunde användas för att ge vägledning till uppströmsverksamheten. Kunskapen om vilka ämnen som tillförs från olika källor är bristfällig och de karteringsverktyg som finns, till exempel digitala inrapporteringsverktyg, uppfattades inte som heltäckande. Därför fanns ett intresse av att utvärdera om en kemisk screening skulle kunna ge en bild av förekomst eller fördelning av ämnen i avloppsnätet. Den information som togs fram i undersökningen skulle kunna ge svar på om sjukhus, industrier, bostäder eller handelsplatser bidrog olika mycket med vissa ämnen eller om de bidrog med specifika ämnen. Detta skulle i så fall kunna ge vägledning om hur uppströmsarbetet kan bedrivas för att minska utsläppen till avloppsnätet av ämnen som har toxiska egenskaper.

1.2 Projektets syfte

Det här projektet syftade till att förbättra förståelsen för mikroföroreningar som sprids från olika verksamheter kopplade till avloppsnätet. Genom att utvärdera förekomsten av många prioriterade ämnen (inklusive PFAS och metaller) kopplat till verksamheter möjliggörs både riktade kampanjer till olika samhällsaktörer när det gäller uppströmsåtgärder och förbättrad framtida övervakning.

Projektet skulle undersöka om verksamheter som handel, industrier, sjukhus eller bostäder bidrar med olika mönster av kemikalier till avloppsnätet, t.ex. att unika ämnen tillförs från sjukhus eller att hushåll bidrar extra mycket med vissa ämnen. En kemisk screening utfördes därför för att kunna identifiera så många kemiska ämnen som möjligt. Målet med att ta fram denna information är att den kan underlätta vid identifiering av källor under uppströmsarbete.

För att vidare kunna prioritera bland de identifierade ämnena användes digitala modelleringsverktyg och andra dataverktyg för att skatta faroegenskaper hos de identifierade ämnena. En skattning av den reduktion i avloppsvattnet som sker över reningsverken kunde också göras då möjligheten gavs att mäta de relativa signalerna för

inkommande och utgående avloppsvatten. Denna information kan också användas vid prioritering av ämnen att fokusera på. Vidare gavs möjligheten att mäta proavernas östrogena effekt, vilket kan vägleda när det gäller förekomsten av hormonstörande ämnen samt hur denna effekt reduceras över reningsverken. Projektet skulle även mäta PFAS och metaller, vilka är ämnen som har identifierats som potentiella uppströmsfrågeställningar hos de deltagande VA-organisationerna.

1.3 Projektets genomförande

För att få en uppfattning om hur olika typer av verksamheter eller miljöer, i detta fall flerbostadshus, sjukhus, industrier av olika typer samt handelsplatser, bidrar med olika typer av kemiska ämnen utfördes en så bred kemisk karaktärisering som möjligt för att utreda om de olika påverkanstyperna bidrar med olika kemisk belastning till ledningsnätet. Detta kan antingen vara att det är kemiska ämnen som är specifika för en viss typ av verksamhet eller område, eller att halterna av vissa ämnen är avsevärt högre från en typ av påverkan, t.ex. sjukhus. Kartläggningen kan användas för att förbättra förståelsen för hur ledningsnät och avloppsreningsverk ska utformas samt ge information om en utökning av kemiska parametrar för kvantitativ analys är nödvändig. Karteringen kan även vara till hjälp vid prioritering av informationskampanjer eller andra uppströmsåtgärder riktade till olika typer av verksamheter eller aktörer.

Projektet har haft två delar:

1. en initial litteratur- och datakartläggning av ämnen som har studerats i avloppsreningsverk
2. den påföljande kemiska screeningen/kartläggningen.

Litteraturstudien syftade till att sammanställa vilka ämnen som ska inkluderas på den lista av specifika masstal som analysinstrumentet ska söka efter då den samlar in data, en så kallad *Suspect target*-lista. Data samlades in från rapporter, vetenskapliga publikationer och databaser. Exempel på datakällor är det europeiska NORMAN-nätverkets databas där det bland annat finns en lista med 1123 prioriterade ämnen för svenska reningsverk sammanställd av kemikalieinspektionen (KEMI), kandidatlistan (ECHA 2019) och VA-kluster Mälardalens databas över ämnen som tidigare har uppmätts i avloppsvatten (Hansson et al. 2017). Liknande studier har gjorts på utgående avloppsvatten och recipientvatten, men inte på avloppsnätet (Montes et al. 2022; Alygizakis et al. 2019). Särskild vikt har lagts vid organiska ämnen på kandidatförteckningen, vilket skulle kunna ge en förbättrad möjlighet att ställa krav på utökad uppföljning av användandet av särskilda riskämnen (*substances of very high concern*, SVHC).

För att vara representativt för mer än en enskild region och för att hitta områden som i stort sett endast hade en typ av påverkan togs prover i fem olika ledningsnät från fyra VA-organisationer: Stockholm, Västerås, Uppsala och Sundsvall/Timrå. Provpunkter valdes ut av respektive VA-organisation för att i huvudsak vara påverkade av:

- **Flerbostadshus.** I detta projekt beslutades att studera flerbostadsområden och inte områden med villor/enfamiljshus.
- **Industriområden.** För att åstadkomma någorlunda liknande typer av industrier var ambitionen att ta prover vid områden som dominerades av mindre verksamheter såsom bilvårdsanläggningar och verkstäder och inte en enskild, större verksamhet.
- **Sjukhus.** Samtliga VA-organisationer som bidrog med prover hanterar avlopp från större sjukhus.
- **Handelsområden.** Med handelsområden menas handelsplatser eller större samlingar av affärer. En ambition var att inkludera elektronikkedjor då de skulle kunna

bidraga med kemikalier som förekommer i plast och elektronik och om möjligt även blomster- eller växtförsäljning som skulle kunna bidra med pesticider.

- *Inkommande- och utgående avloppsvatten* vid avloppsreningsverk.

Kemiska screeningmetoder har utnyttjats för att karaktärisera förekomsten av kemiska ämnen i de olika proverna. Två komplementära analystekniker har använts för att kunna fånga upp så många olika ämnen som möjligt i analysen: GC-MS och LC-MS.

I de analyser som har gjorts med *gaskromatografi kopplat till masspektrometri* (GC-MS) har en helt förutsättningslös analys utförts, dvs att det inte finns några förutbestämda kemiska ämnen vars kemiska signaler instrumentet ska söka efter. Så många signaler som möjligt samlas in, och sedan görs en identifiering av de individuella kemiska signalerna genom jämförelser med fragmenteringsmönster, så kallade masspektrum, som är specifika för olika organiska kemikalier. Dessa masspektrum finns tillgängliga i olika databaser.

Kemisk screening har utförts en längre tid med GC-MS medan tekniken har utvecklats senare för *vätskekromatografi kopplat till masspektrometri* (LC-MS). Detta innebär att de databaser med spektrum som finns för LC-MS inte är lika standardiserade och välutvecklade som för GC-MS. Det är också fler ämnen som kan identifieras med LC-MS, vilket leder till större risk för falska positiva identifieringar. För de analyser som har utförts med LC-MS har instrumentet programmerats att söka efter kemiska signaler enligt en lista med masstal som motsvarar ämnen som är intressanta i just dessa prov. Detta förfarande kallas för att göra en *suspect screening*. Dessa screeningmetoder är inte kvantitativa men signalintensiteten kan jämföras mellan olika prover för ett och samma ämne.

Jämförelsen mellan intensiteten av signalerna i de olika proverna har gjorts för att skatta den relativa förekomsten av de identifierade ämnena i de olika provpunkterna. Projektets ambition har varit att identifiera så många organiska ämnen som möjligt av dem som förekommer i avloppsnätet och kunna jämföra den relativa signalintensiteten för att kunna fånga upp ämnen som har högre signaler från vissa typer av påverkan. Projektet har även farobedömt de identifierade ämnena, dels utifrån tillgängliga experimentella data, dels genom att använda avancerade datamodeller som kan beräkna dess möjliga toxicitet. De ämnen som har identifierats har också klassificerats efter vad de kan ha för användningsområden. Utifrån kombinationen av den relativa förekomsten i olika prover och de kemiska ämnenas inneboende faroegenskaper är förhoppningen att detta kan vara ett stöd vid prioriteringen inom uppströmsarbetet för VA-organisationer.

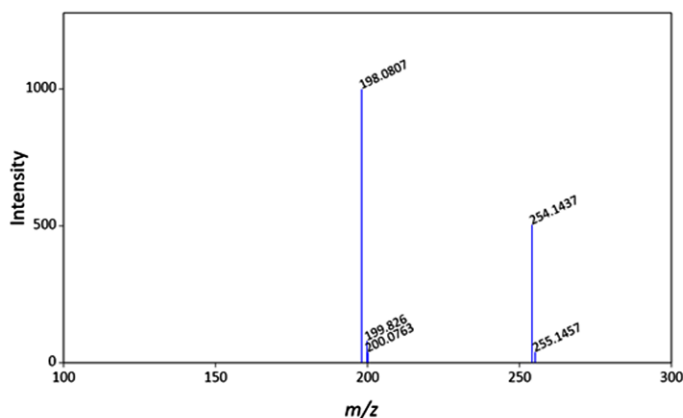
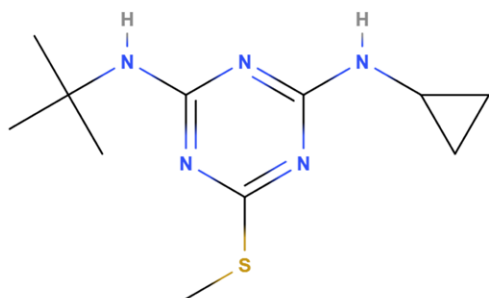
2 Kemiska screeningtekniker

Kemiska screeningtekniker, inklusive *non-target screening* (eller *untargeted*), *suspect screening* och *wide scope target screens*, har sett en snabb utveckling under de senaste decennierna (Hollender et al. 2023).

- *Non-target screening* är en förutsättningslös kemisk analys där analysinstrumentet samlar in så många kemiska signaler som möjligt för att i nästa steg koppla signalerna till kemiska ämnen via sökningar i olika databaser.
- *Suspect screening* är en kartering av kemiska ämnen i ett visst prov som utgår ifrån en lista på förväntade ämnen. Listor kan tas fram för kemiska ämnen med ett visst ursprung (typ läkemedel eller PFAS) eller som ger en viss effekt (tex hormonstörande ämnen).
- En *wide scope target screen* är när en bred kartering av många ämnen utförs med metoder som ger kvantitativa värden på ämnenas förekomst.

Kemiska screeningtekniker har fördelen att data från så många signaler som möjligt i ett givet prov samlas in och analyseras, jämfört med riktade kemiska analyser, där målet är att mäta förutbestämda kemiska ämnen. Riktade kemiska analyser är oftast mycket bra på att hitta ”nålen i höstacken” även om det innebär att man inte observerar högaffeln eller spaden som också finns där. Utvecklingen har till stor del drivits på av utvecklingen inom kromatografisk separationsteknik, masspektrometrisk instrumentering och datahanteringsprogramvara. Instrumentering med modern högupplöst masspektrometri (HRMS) erbjuder möjligheten att generera noggranna massbestämningar av ett mycket stort antal kemiska ämnen i ett givet prov. Med tillräcklig god kromatografisk separation, massupplösning och massnoggrannhet är det möjligt att föreslå en unik elementär sammansättning till en detekterad signal.

Ett exempel är att en signal skapad i en LC-MS av bekämpningsmedlet irgarol, med molekylformeln $C_{11}H_{19}N_5S$, bör generera signaler i masspektrometern med ett masstal, kvoten av jonens massa och laddning, nära 254,1434 Dalton (”exakt massa”). Detta sker om en positiv spänning har använts för att skapa joner i instrumentets jonkälla vilket oftast leder till att ett ämne tar upp en extra proton. Genom att fragmentera dessa molekyljoner i masspektrometers kollisionscell erhålls ett masspektrum av ämnet. Figur 2.1 visar struktur och positivt ESI-spektrum för irgarol. Detta spektrum jämförs sedan med referensspektrum i databaser och om en fullständig matchning hittas identifieras föreningen preliminärt som irgarol. Denna identifiering är endast preliminär tills den har bekräftats med irgarol som referensstandard med samma instrument och samma inställningar. I många fall erhålls mer än en möjlig träff och då tillskrivs en lägre grad av säkerhet i identifieringen.



Figur 2.1

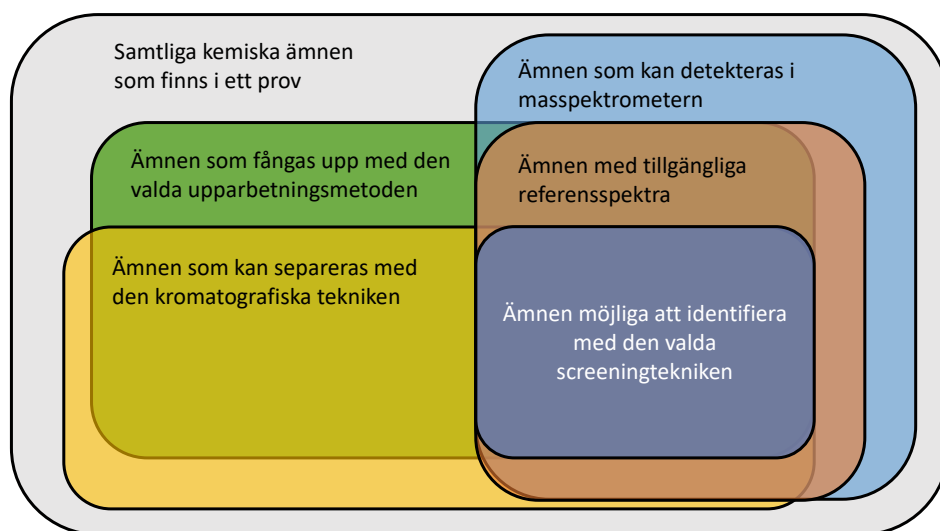
Kemisk struktur och positivt ESI-spektrum för bekämpningsmedlet irgarol (från Molview). I detta exempel uppvisar m/z-värdena relativa fel av endast 1 miljondel (ppm), 254,1437 i masspektromet jämfört med det teoretiska värdet 254,1434 (från Pubchem/Massbank). Vanligtvis brukar man sätta en gräns vid en avvikelse på 5 ppm för att räkna det som en godkänd träff.

Säkerheten för en identifiering kan uttryckas med hjälp av den femgradiga Schymanski-skalan (Schymanski et al. 2014), där en femma bara är en jämförelse med ett masstal i en masslista och en etta är en substans som bekräftas med hjälp av en referensstandard.

Följande steg förekommer i Schymanski-skalan:

1. Positiv identifikation genom konfirmerande experiment där en referenssubstans har analyserats med samma instrument och samma inställningar och där signalen överensstämmer gällande både retentionstid och spektrum.
2. En sannolik kemisk struktur har identifierats men en positiv identifiering har inte utförts.
 - a. En unik träff med god överensstämmelse som tillskriver ämnet en specifik struktur har gjorts för signalen i ett referensbibliotek av masspektrum.
 - b. Det går inte att fastställa strukturen enbart med hjälp av masspektrum, men det finns annan information som stödjer att det är en specifik struktur.
3. Mer än en träff med god överensstämmelse har gjorts i ett referensbibliotek av masspektrum, men exempelvis kan inte positionen av funktionella grupper inom molekylen fastställas.
4. En specifik summaformel, t.ex. $C_{11}H_{19}N_5S$, kan tillskrivas signalen.
5. Endast ett noggrant och högupplöst masstal har genererats, t.ex. 254,1434 Da.

Det är viktigt att komma ihåg att även om ett stort antal signaler kan genereras för ett visst prov så representerar de potentiella identifikationerna fortfarande en delmängd av alla kemiska ämnen som kan förekomma i provet. Detta illustreras i Figur 2.2 där samtliga kemiska ämnen i ett prov representeras med det gråa fältet. Här ingår ämnen som inte fångas upp i den valda upparbetningstekniken (t.ex. metalljoner, Ca^{2+}) eller som kan separeras med den kromatografiska tekniken (t.ex. ämnen som är för polära). Vissa ämnen är svåra att jonisera i masspektrometern och kommer inte att ge en signal om inte halterna är väldigt höga. För att kunna göra en identifiering krävs även att referensspektrum finns i tillgängliga databaser. Endast de ämnen som uppfyller alla dessa kriterier kan detekteras. Dessa begränsningar diskuteras mer i detalj nedan.



Figur 2.2

Antalet kemiska ämnen som kan identifieras i en suspect screen eller non-target screen som delmängd av samtliga kemiska ämnen som finns i provet (anpassad efter Hollender et al. 2023). Samtliga kemiska ämnen i ett prov representeras med det gråa fältet.

Dessa kriterier är olika beroende på vilken teknik man använder för att genomföra den kemiska screeningen. Olika upparbetningstekniker kommer att fånga upp eller extrahera olika ämnen ur provet. Vätske/vätske-extraktion i ett tvåfasssystem med lösningsmedel med olika polaritet eller användandet av extraktionskolonner packade med material som har specifika kemiska ytegenskaper kan användas för att få så många ämnen som möjligt extraherade ur provet, men aldrig samtliga. Ämnen med tillräckligt höga halter och som ger väldigt starka signaler i masspektrometern kan ibland studeras i vattenprover utan extraktion, men detta kan i sin tur leda till nedsmutsning av instrumenten. Med gaskromatografi kan man separera ämnen som är mer flyktiga, oftast opolära ämnen eller ämnen med låg molekylvikt. Den joniseringsteknik som oftast används för gaskromatografi, electron ionization (EI), ger generellt sett en bra jonisering av de ämnen som kan separeras med den kromatografiska tekniken. De spektrala databaserna som finns för GC-MS har funnits under lång tid och är väl kurerade, vilket ger en bra säkerhet vid identifikation. Spektrala databaser för LC-MS är inte lika etablerade och har en större variation i kvaliteten på den spektrala informationen än de som tillhandahålls för GC-MS. Det genererade masspektrumet har även en större variation med avseende på instrumenttillverkare och inställningar inom LC-MS, där samma inställning för kollisionsenergien kan ge olika relativ förekomst av fragment i olika instrument.

Vätskekromatografisk separation av extrakt från vattenprover utförs ofta med en kolonn som har en hydrofob (fet) yta där ämnen som är mindre polära får längre retention och eluerar vid en högre inblandning av ett organiskt lösningsmedel. Ett sådant system kan vara svårt att använda för identifikation av väldigt polära ämnen, t.ex. kolhydrater eftersom de inte kommer att retarderas i systemet.

Hur dataanalysen genomförs kan också påverka möjligheten till identifiering. Antalet signaler som behöver processas för varje prov är oftast för stort för att hanteras manuellt och automatiserade processflöden används därför. I denna process utförs ofta en rad olika databehandlingssteg, t.ex. korrigering av små skillnader i kromatografisk retention mellan olika prover och en automatisk kontroll av isotopsignaler kopplade till förekomst av vissa grundämnen (^{13}C , ^{37}Cl , ^{81}Br , etc.). Begränsningar brukar användas för att minska föreslagna summaformler som innehåller grundämnen som inte sannolikt förekommer i organiska ämnen, t.ex. iridium eller hafnium. Redan vid matchningen mellan massstal och möjliga summaformler utförs en sällning av rimliga ingående ämnen. Detta kan ge upphov till falska negativa identifieringar.

Även om ett masspektrum kan genereras med hög upplösning och god massnoggrannhet finns möjligheten att detta ämne saknas i databaserna av masspektrum. Skillnader i masspektrum som beror på den kollisionsenergi som har använts vid experimentet

eller som beror på instrumenttyp kan även påverka möjligheterna att få en bra träff i databaserna. Detta kan också resultera i falska negativa resultat.

Vid den automatiserade databehandlingen kan identifikationer ibland göras för samma ämne vid olika retentionstider. Detta är en följd av att det genereras så många signaler från varje prov att falska identifikationer ibland förekommer. För att förbättra säkerheten vid identifiering kan en uppskattning av den förväntade retentionstiden i det kromatografiska systemet utnyttjas. Denna kan göras genom att analysera en blandning av ämnen som fungerar som en retentionstidsstandard och sedan jämföra de föreslagna identifieringarna med denna standard. Genom NORMAN-nätverket kan en standardblandning med retentionstidsstandarder för positiv och negativ ESI erhållas och via Athens universitet kan även beräknade retentionstider fås. NORMAN-nätverket har även beräknat retentionstidsindex för >100 000 ämnen, och inkluderat detta i en databas av information om olika substanser: NORMAN Substance Database (NORMAN SusDat). I Tabell 2.1 finns information extraherat ur databasen för ämnet 1,3-diphenylguanidine.

Tabell 2.1

Information extraherat ur NORMAN susdat för 1,3-diphenylguanidine. I denna tabell finns bland annat information som är nödvändig om man ska göra en suspect screen. Vissa tabellkolumner har tagits bort i tabellen.

Norman SusDat ID	Namn	CAS-nummer	Validerings-nivå	Molekyl-formel	Molekylvikt endast kol-12	[M+H] ⁺	[M-H] ⁻	Skattad RTI POS ESI	Skattad RTI NEG ESI	logKow EPI Suite
NS00011462	1,3-Diphenyl-guanidine	102-06-7	Level 2	C ₁₃ H ₁₃ N ₃	211.1109	212.118224	210.103671	284	234	2.89

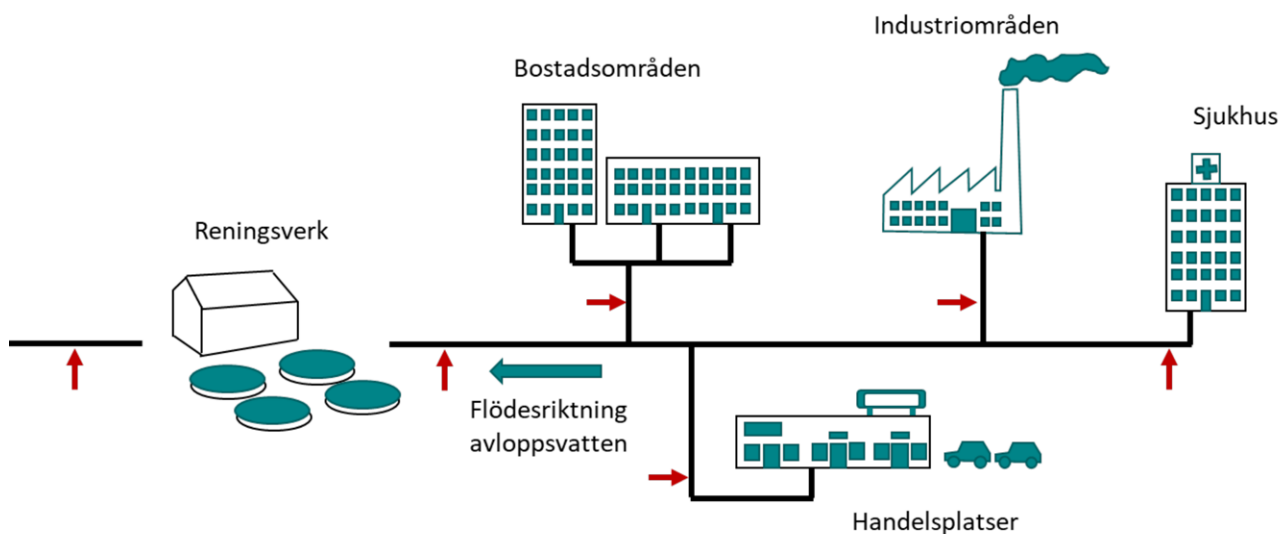
3 Försöksupplägg och provtagning

3.1 Provtagningsplatser

De deltagande VA-organisationerna föreslog provtagningsplatser på de aktuella avloppsnäten i Stockholm, Västerås, Uppsala och Sundsvall/Timrå utifrån huvudsaklig påverkan från flerbostadshus, sjukhus, industrier och handelsplatser. Dessutom togs prover på det inkommande och utgående avloppsvattnet, även om det utgående avloppsvattnet inte avsågs att undersökas inom ramen för det befintliga projektet. Figur 3.1 visar en schematisk bild av provtagningsplatserna med de huvudsakliga påverkanstyperna.

Figur 3.1

Schematisk bild av försöksupplägget gällande de ingående provtyperna. Ställen på avloppsnätet där prover är tagna är indikerade med röda pilar.



De medverkande VA-organisationerna ansvarade för att föreslå provtagningspunkter ute på respektive avloppsnät som huvudsakligen hade endast en typ av påverkan. Denna påverkan kan komma från verksamheter som bedrivs, tex sjukvård på ett sjukhus eller från industrier i ett industriområde, men även från människors bostäder. Detta var i olika grad möjligt för de olika punkterna på respektive nät. Anledningen att både Sundsvalls och Timrås ledningsnät var med och provtogs var för att det inte gick att åstadkomma tillräckligt separerade påverkanstyper annars. För avloppet från Akademiska Sjukhuset i Uppsala fanns en provtagningspunkt i direkt anslutning till sjukhuset som endast påverkades av sjukhuset självt. För Västmanlands Sjukhus i Västerås hittades en provtagningspunkt som i huvudsak påverkades av sjukhuset men där det förekom bostäder (villor och flerbostadshus) på nätet uppströms sjukhuset.

3.2 Provtagning

Eftersom endast en provtagning skulle utföras på varje plats så beslutades att flödesproportionell provtagning inte var nödvändig. Avsaknaden av en flödesmätare gör att provtagningen kräver en mindre insats vid etableringen av provtagningsutrustningen vilket gör att provtagningsperioden kunde förkortas. Tre olika typer av provtagning utfördes, beroende på vilken utrustning som fanns tillgänglig vid de olika provtagningsplatserna: flödesproportionell provtagning, tidsstyrd provtagning och nivåstyrd

provtagning. Den sistnämnda användes då provtagningen genomfördes vid en pumpstation och innebar att ett prov togs vid de tillfällen då pumpbrunnen tömdes. Antalet tömningar (och provtagningar) under perioden varierade från 57 stycken (Västerås industri) till 334 stycken (Uppsala bostäder). Vid den flödesproportionella provtagningen togs prover var 10:e m³ för bostadsområdet i Stockholm och var 3:e m³ för bostadsområdet i Västerås. Vid tidsstyrd provtagning togs prover var 15:e minut, förutom de sista två dagarna för sjukhuset i Stockholm, då det inte gick att få tillträde att tömma provtagningsflaskorna på grund av en helg. Då togs i stället prover var 30:e minut.

Riskerna med en tidsstyrd provtagning är att endast liten utspädning sker i den utvalda punkten under provtagningstiden, eller att det finns stora tillskott av vatten till följd av kraftig nederbörd vilket skulle resultera i ökad utspädning. Osäkerheten till följd av utspädningsgraden behöver tas i beaktning när man jämför signalen av ett visst ämne i olika prover. Vid en mer fullständig analys, där även en kvantitativ bedömning av halterna ska nås, behöver provtagning utföras vid mer än ett tillfälle och flödesproportionell provtagning användas snarare än tidsstyrd. I Tabell 3.1 anges adress, start- och stopptider samt provtagningsmetod för de olika provpunkterna ute på avloppsnäten.

Tabell 3.1

Information om provtagningsplatser ute på avloppsnäten samt start- och stopptider.

Kommun	Påverkanstyp	Provtagningsadress	Start-datum	Starttid	Stopp-datum	Stopptid	Prov-tagning
Stockholm	Bostäder	Pilvingegatan 2	230515	07:15	230519	13:10	FP
Stockholm	Handel	Brunn vid rondellen på Lissmavägen vid Truckvägen	230515	07:00	230519	14:55	TS
Stockholm	Industri	Svarvarvägen 4	230515	07:00	230519	15:05	TS
Stockholm	Sjukhus	Servicekopplingspunkt, dagvattentunnel under sjukhuset	230529	12:10	230602	08:50	TS
Västerås	Bostäder	Brunn på Kungsfågelgatan	230529	13:26	230602	07:50	FP
Västerås	Handel	Brunn på Kuggstångsgatans vändplan	230529	07:00	230602	07:35	TS
Västerås	Industri	Pumpstation på Lågspinnargatan 4	230529	07:00	230602	08:25	NS
Västerås	Sjukhus	Brunn till höger om sjukhusets entré	230529	12:10	230602	08:50	TS
Uppsala	Bostäder	Pumpstation på Torgny Segerstedts Allé	230529	07:00	230602	11:40	NS
Uppsala	Handel	Pumpstation på Takpannegatan 19	230529	07:00	230602	10:40	NS
Uppsala	Industri	Pumpstation på en gångväg intill Libroringen	230529	07:00	230602	10:10	NS
Uppsala	Sjukhus	Kasun nere på arbetsområdet öster om ingång 70	230529	07:00	230602	11:15	TS
Sunsdvall	Bostäder	Brunn på gångvägen nordost om Bäckebovägen 26	230612	08:50	230616	09:08	TS
Sunsdvall	Handel	Brunn på vägen bakom Antennvägen 39	230612	08:30	230616	08:55	TS
Timrå	Industri	Brunn på gräsytan nordost om Terminalvägen 16	230612	10:20	230616	09:40	TS
Sunsdvall	Sjukhus	Brunn på norra delen av Balders IP	230612	08:30	230616	08:55	TS

Provtagningen genomfördes med hjälp av en vakuumprovtagare (AquaCell) som antingen provtog enligt ett tidsstyrt schema, med styrning från pumpstationen eller från en flödesmätare. Bildexempel på vakuumprovtagarens placering vid provtagning i gatumiljö och vid pumpstationer finns i Bilaga B. I nästan samtliga provtagningar har tömning av proverna genomförts dagligen och ett samlingsprov har sammanställts utifrån flödet under respektive provtagningsdygn. I något enstaka fall har tömningen gjorts påföljande vardag då det har varit helg. Samlingsprovet har kylförvarats under pågående provtagning och verksamheten har därefter ansvarat för att fördela och distribuera prover till laboratorierna. Innan provtagningen skulle starta diskuterades provtagningskärl och materialval för provtagningsutrustningen. Eftersom provtagningen skulle

genomföras under en kort tid så gjordes inga förändringar på provtagningsutrustningen. Då många av provtagningskärlen hade använts under lång tid och diskats mellan provtagningar ansågs det att det fanns viss risk för kontaminering, men att denna troligtvis skulle vara liten i förhållande till halterna av kemiska ämnen i avloppsvattnet.

4 Datasammanställning kemiska ämnen

En data- och litteratursökning utfördes för att kunna sammanställa en lista av kemiska substanser som var troliga att förekomma i avloppsvatten. Sökningen gjordes med kombinationer av söktermer som: non-target screening, untargeted screening, suspect screening, wastewater, municipal wastewater, liquid chromatography, mass spectrometry, LC-MS, GC-MS, LC-HRMS. De sökmotorer som användes var Google Scholar och Clarivate Web of Science. Då väldigt lite finns publicerat gällande screening av ett större antal ämnen i själva avloppssystemen var det nödvändigt att inkludera artiklar som analyserade utgående (renat) avloppsvatten. Artiklar med bifogade listor innehållande nödvändig information, t.ex. masstal vid analys, samlades in. I följande stycken återges kortfattat innehållet i de artiklar där det har funnits extra information (supporting information) som bedömdes värdefull för att sätta samman en lista av kemikalier som var relevant att söka efter i svenska avloppsvatten och som därför har varit huvudkällorna till den prioritetslista som användes i studien.

Olika strategier för kemisk screening utnyttjades i de olika studierna. I en spansk studie (Montes 2022), utfördes en *suspect screening*-analys på både ytvattenprover och utgående avloppsvatten. Ekotox-kriterier (persistens, toxicitet och bioackumulation) utnyttjades för att reducera en initial lista på 3500 initiala kandidater till ämnen att studera till 604 ämnen på *suspect*-listan. Av dessa ämnen kunde 343 ämnen tentativt identifieras. Beräkningsmodeller användes sedan för att klassificera de identifierade ämnena som persistenta, bioackumulerbara och toxiska (PBT) eller som mycket mobila och mycket persistenta (vMvP), en klassificering som är användbar för ämnen som kontinuerligt tillförs till naturen men som har lägre potential för bioackumulation. Listan kopplad till publikationen är en sammanställning av prioriterade farliga ämnen i EU-direktiv (EU 2013/39), ämnen av mycket hög oro (SVHC) (ECHA 2019a), lista över ämnen som är föremål för godkännande enligt EU:s REACH-förordning (ECHA 2019b), och även OSPAR List of Chemicals for Priority Action (OSPAR 2010), EPA Priority Pollutants List under Clean Water Act (EPA 2019), NORMAN övervakningsbaserad prioriteringslista med ett slutpoäng över 1,25 (NORMAN 2017), listor över REACH-registrerade ämnen som uppfyller PMT/vMvP-kriterierna som sammanställts av den tyska federala miljömyndigheten (UBA) (Neumann et al. 2019; Rüdell et al. 2020) och Norges geotekniska institut (NGI) (Arp et al. 2019), och slutligen föreningar som upptäckts med hög frekvens i europeiskt yt- och dricksvatten som ett resultat av PROMOTE-projektet (Schultze et al. 2019).

I en tysk studie (Finckh 2022) prioriterades 499 ämnen fram baserat på tidigare screeninganalyser samt förväntade ämnen med olika användningar, t.ex. läkemedel, plasttillsätsämnen, bekämpningsmedel, etc. I en *target screen*-metod utfördes en kvantitativ analys av ett stort antal ämnen, men med t.ex. en generell extraktionsmetod för en bred grupp av ämnen och ett mindre antal surrogatstandarder (även kallade internstandarder). I studien analyserades 56 utgående avloppsvattenprover från 52 reningsverk spridda över Europa. En volym på 50 liter vatten extraherades med en högvolymsfastfasextraktionsutrustning. En uppkoncentreringsfaktor på 1000 ggr användes för de prover som samlades in. En utvärdering av de detekterade ämnenas bidrag till eventuell toxicitet och risk gjordes på genererade data.

Kemikalieinspektionen (KEMI) har publicerat en lista på 1123 prioriterade ämnen att undersöka i avloppsvatten (KEMI 2019). Denna lista baseras på användardata för kemiska ämnen på den nordiska marknaden som samlas in av KEMI men som inte är offentligt tillgängliga. I KEMI:s lista har man tagit hänsyn till förväntade mängder av

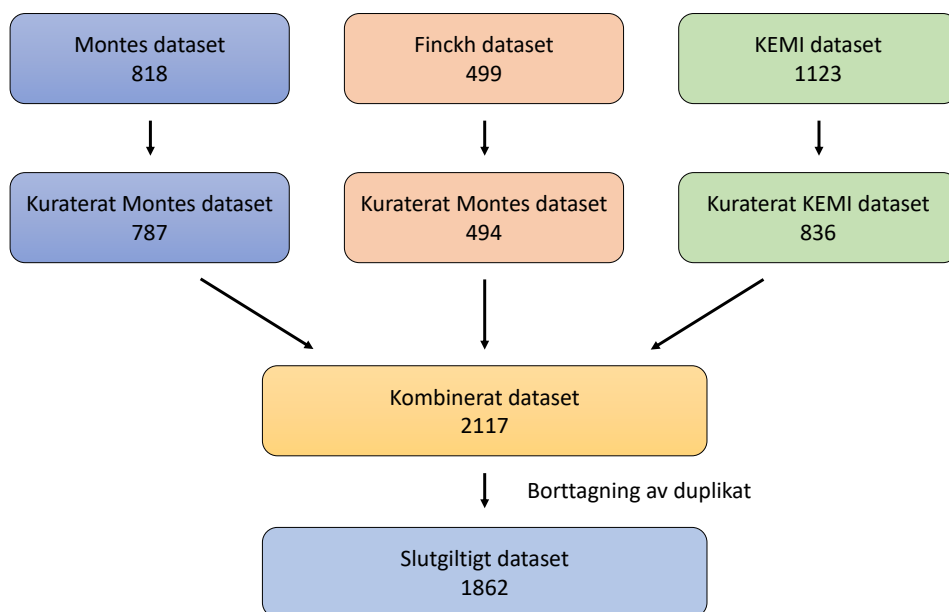
ämnet och även hur pass rimligt det är att detta sprids till omgivningen, en s.k. *Exposure Index*. Denna lista finns att tillgå via NORMAN-nätverkets databas av prioriterade listor, den s.k. *Suspect List Exchange*. Efter en genomgång av listorna med avseende på hur mycket information som delgavs, t.ex. molekylvikt eller monoisotopisk massa, bestämdes att ett första försök skulle göras att skapa en lista av de gemensamma ämnen som fanns på flera listor utifrån KEMI:s prioriterade lista, informationen som fanns i publikationen från Montes et al. (2022) och informationen som fanns i Finckh et al. (2022).

5 Prioritering kemiska ämnen

Två olika metoder utvärderades för att sammanfoga listorna av kemiska ämnen som identifierats och för att prioritera ämnena med avseende på potentiell toxicitet. En första ansats utfördes med det fritt tillgängliga dataverktyget KNIME där förekomst av ämnen på de olika listorna kunde jämföras samt en automatisk modellering av toxicitet kunde utföras via fritt tillgängliga metoder (VEGA-modeller). Parallellt med denna prioriteringsövning gjordes en sammanslagning av de kemikalier som förekom i de källor som beskrevs i föregående avsnitt (Montes 2022; Finckh 2022) och en riskklassificering utav dessa från experimentella data som kunde sökas ut från offentligt tillgängliga databaser. Då den senare modelleringen baserades på experimentella data, vilket oftast ges större tyngd som bevis användes denna metod vid den slutgiltiga rangordningen av kemikalier. Sammanfogningen av listor med dataverktyget KNIME beskrivs i Bilaga A. Arbetet med sammanslagning och prioritering av de tre listorna av ämnen som inkluderades utfördes enligt följande process:

De data som fanns tillgängliga från Montes et al. bestod av 818 kemikalier. Det fanns cirka 22 kemikalier som togs bort då de saknade information om den kemiska strukturen, INCHIKEY-information, som var nödvändig för den fortsatta datahanteringen. Avsaknaden av INCHIKEY-information kan bero på att den kemiska strukturen inte är bestämd, vilket till exempel är fallet för kemiska reaktionsprodukter som ger upphov till ett stort antal produkter. Dessa kan ändå ha en eller flera CAS-nummer knutna till den kemiska reaktionsprodukten. Totalt nio kemikalier avlägsnades vidare då dessa var duplikat av kemikalier redan i denna datauppsättning. Detta resulterade i en slutlig Montes-datauppsättning med 787 kemikalier. Finckh-datasetet bestod av 499 kemikalier varav fem saknade INCHIKEY-information. Därför togs 494 poster med från denna datauppsättning. För 240 av de 1123 kemikalier som fanns i KEMI:s lista på 1123 kemikalier kunde INCHIKEY-information inte inhämtas och dessa avlägsnades därför. På samma sätt hittades 94 poster som tillhörde 42 unika kemiska ämnen som antingen var duplikat på listan eller i vissa fall även triplikat. Duplikaten och triplikaten togs bort så att endast unika poster fanns kvar på listan. Den slutliga KEMI-datauppsättningen bestod då av 836 kemikalier.

En sammanslagen lista av kemikalier skapades av de kurerade datauppsättningarna från de källor av information som hade valts ut: Montes-, Finckh- och KEMI-prioritetslistan (Figur 5.1). Det fanns få överlappande kemikalier bland de tre källorna, och dessa togs bort för att generera den slutgiltiga listan på 1862 kemikalier.



Figur 5.1

Illustration som visar processen för kombinerandet av kemikalier från olika källor.

5.1 Insamling av experimentella data för hälsorisker för människor

Experimentella data för hälsofarliga endpoints såsom karcinogenicitet, mutagenicitet, reproduktionstoxicitet, endokrina störningar etc. samlades in från olika offentliga arkiv och databaser. Tabell 1 i Bilaga E sammanfattar alla de mänskliga hälsocentrerade endpoints som söktes för att hämta data för kemikalierna.

5.2 Insamling av experimentella data för miljöfaror

Ekotoxikologiska data (biologisk nedbrytning, mobilitet, akvatisk toxicitet och persistens) för de kemiska ämnen som ingick i den sammanslagna listan inhämtades från olika källor. För biologisk nedbrytning användes databasen för biologisk nedbrytning från National Institute of Technology and Evaluation (NITE), Japan (NITE, 2024). Dessvärre förekom inte data för biologisk nedbrytning för någon av kemikalierna i NITE. För de andra tre endpoints, dvs persistens, rörlighet och akvatisk toxicitet, utnyttjades information som tillgängliggjordes via Montes et al. Med hjälp av data från Montes et al. har information för 648, 787 och 490 kemikalier kunnat tillskrivas för respektive persistens, rörlighet och akvatisk toxicitet.

5.3 Insamling av data från REACH-förordningar

REACH-förordningar som Waste Framework Directive (WFD), Biocidal Products Regulation (BPR), Prior Informed Consent (PIC) och persistenta organiska föroreningar (POP) har använts för att utvärdera om kemikalierna i den sammanslagna listan omfattas av dessa förordningar. Till eventuella regulatoriska listor som användes hörde även listan över särskilt farliga ämnen (SVHC), hämtad från Echas webbplats (ECHA 2019a). Totalt identifierades och flaggades 149 av 1862 ämnen som tillhörande SVHC-listan. På liknande sätt hittades 97 kemikalier på BPR-listan och 121 kombinerade datauppsättningskemikalier matchades till PIC-förordningslistan. Slutligen matchades totalt 39 av ämnena till POP-förordningslistan.

5.4 Rangordning av kombinerade datauppsättningskemikalier

För att skapa en prioriterad lista av kemikalier rangordnades den kombinerade listan med avseende på human toxicitet, miljötoxicitet samt eventuell märkning enligt REACH-förordningen. Fyra kombinerade jämförelsetal beräknades från insamlade data: CMR-poäng, EDC-poäng, ekotoxpoäng samt REACH-poäng för alla ämnen där information fanns tillgänglig. För att härleda dessa poäng omvandlades alla REACH-märkningar för varje endpoint till ett binärt format, dvs. om ett ämne var positivt (t.ex. ämnet är karcinogent) fick det värdet 1 och om ett ämne var negativt märktes det som 0.

CMR-poängen är en summa av REACH-märkningar för karcinogenicitet, mutagenicitet och reproduktionstoxicitet. EDC-poängen beräknades som ett aritmetiskt medelvärde av märkningar för alla 12 endokrina endpoints. Ecotox-poängen beräknades som en summa av märkningar för persistens, biologisk nedbrytning, mobilitet och akvatisk toxicitet. REACH-betyget var en summa av SVHC-, POP-, BPR- och PIC-märkningar. Slutligen härleddes en kombinerad RISK-poäng genom att summera poängen från de fyra kategorierna, dvs. CMR-poäng, EDC-poäng, ekotoxpoäng och REACH-problempoäng (se Tabell 5.1). Resultaten för samtliga ämnen som identifierades med LC-MS finns presenterade i den Excel-fil som har publicerats tillsammans med rapporten (se även Bilaga G för information).

Tabell 5.1

Tabell som illustrerar summeringen av de olika faropoängen för olika toxicitet till ett slutgiltigt riskvärde.

CAS-nummer	Namn	CMR-poäng	EDC-poäng	Ekotox-poäng	REACH problem-poäng	RISK-poäng
34123-59-6	Isoproturon	1	0,08	3	2	6,08
121-14-2	2,4-dinitrotoluene	1	0,00	3	2	6,00
101-14-4	2,2'-dichloro-4,4'-methylenedianiline	1	0,17	3	1	5,17
60-09-3	4-aminoazobenzene	1	0,17	3	1	5,17
72490-01-8	Fenoxycarb	0	0,17	3	2	5,17

6 Provupparbetning och kemisk analys

6.1 Upparbetning av prover

Som beskrevs i inledningen så är en av de begränsande faktorerna för hur många ämnen som kan identifieras i ett visst prov att dessa ämnen fångas upp med den provupparbetningsteknik som har valts. En GC-MS-analys är fördelaktig för organiska ämnen som är opolära och som inte har för stor molekylvikt. För att polära ämnen ska ha tillräckligt låg kokpunkt så att de kommer igenom gaskromatografikolonnen behöver de också vara relativt små. LC-MS kan med fördel användas för att analysera organiska ämnen av ett brett polaritetsspann. För att säkerställa att extraktionen av proverna gav en heltäckande bild av de kemiska ämnena i de insamlade proverna utfördes därför först tester för både GC-MS och LC-MS-analysflödena gällande vilken extraktionsmetod som gav bäst resultat. För såväl metodutvecklingen inom LC-MS och GC-MS användes inkommande prover till reningsverken.

I textavsnitten nedan beskrivs upparbetningstesterna eftersom det är ny utveckling utförd inom detta projekt medan den tekniska beskrivningen av de instrumentella analyserna beskrivs i Bilaga A. De kemiska analyserna gjordes med metoder utvecklade inom tidigare screeningprojekt (KEMI 2021).

6.2 Tester för upparbetning inför GC-MS

Två olika arbetsflöden beskrivna i litteraturen testades för att utvärdera vilket som fungerade bäst för avloppsvatten (Blum 2017; Blum 2018; Paxéus 1996; Eriksson 2003). Metoderna baserades på antingen vätske/vätske-extraktion (*liquid-liquid extraction, LLE*) eller fastfasextraktion (*solid phase extraction, SPE*).

För LLE användes diklormetan (DCM) för extraktion med ett fasförhållande på 1:4 (DCM:Prov). Extraktionerna utfördes i 12 ml provrör av borosilikatglas. Provrören placerades på ett skakbord under 5 minuter. Provrören centrifugerades sedan vid 1800 varv per minut under 5 minuter för att snabba på fassetparationen. Alla glasvaror pyrolyserades vid 400 °C i minst 10 timmar innan experimenten. Pyrolyserad aluminiumfolie användes innanför korken för att förhindra eventuell kontamination från korkmaterialet. Provrören placerades på ett skakbord under 5 minuter. Provrören centrifugerades sedan vid 1800 varv per minut under 5 minuter för att snabba på fassetparationen.

Två olika SPE-kolonner utvärderades för extraktion av proverna, en ren hydrofobisk fas C18 (6 ml, 500 mg Biotage, Uppsala) och en modifierad polystyren-divenylbensen-fas framtagen för att extrahera ett brett polaritetsområde av organiska ämnen ur vattenbaserade prover, Oasis HLB, (6 ml, 500 mg Waters, Milford, Mass., USA). SPE-kolonnerna konditionerades med 4:1 (DCM:acetone) där sedan 250 ml provvolym extraherades och eluerades med 5 ml, 4:1 (DCM:acetone). Extrakten torkades med vattenfritt natriumsulfat och centrifugerades vid 1800 varv per minut under 5 minuter och slutligen överfördes extrakten till nya provrör och evaporerades till ca. 1 ml under ett flöde av kvävgas.

Signalintensiteten blev signifikant bättre med SPE gentemot LLE då betydligt större volymer prov kunde analyseras. Ovannämnda SPE-kolonner kompletterade varandra väl och under provextraktionen användes de i seriekoppling.

6.3 Tester för upparbetning inför HPLC-HRMS

En lista på 172 läkemedel användes i detta försök för att testa LC-MS-analysflödet och för att utvärdera hur väl de olika ämnena fångades upp i provupparbetningskolonnerna. Läkemedel är en mycket bred grupp av kemiska ämnen när det gäller molekylstorlek, fettlöslighet och förekomsten av kemiska grupper som är sura eller basiska. Tre olika fastfaskolonner utvärderades för extraktion av proverna; en svag anjonbytare Isolute WAX (200 mg, 5 ml, Biotage, Uppsala) framtagen för extraktion av starka syror, en katjonbytare Oasis MCX (200 mg, 5 ml, Waters, Irland) framtagen för extraktion av basiska ämnen samt en modifierad polystyren-difenylbensen-fas Oasis HLB (200 mg, 5 ml, Waters, Irland) framtagen för att extrahera ett brett spektrum av organiska ämnen med varierande polaritet ur vattenbaserade prover. Ett inkommande prov delades upp i sex alikvoter på ca 100 g var (två duplikat för varje fastfaskolonn) och spikades med 100 ng av 42 st läkemedel samt 20 ng av fem hormonämnen. Kolonnerna sköljdes och konditionerades med olika lösningsmedel innan proverna applicerades. Blankprover bestående av MQ extraherades med varje fastfaskolonn och analyserades tillsammans med extrakten.

WAX-kolonnen konditionerades med 0,1 % ammoniumlösning i metanol (MeOH) (v/v) följt av metanol och sköljdes sedan med Milli-Q vatten (MQ). Provet applicerades långsamt till kolonnen (2 droppar/sekund). Kolonnen sköljdes sedan med 25 mM ammoniumacetat buffert (pH 4) och analyterna eluerades med MeOH följt av 0,1 % ammoniumlösning i MeOH (v/v). Extraktet evaporerades under värme (40 °C) och kvävgas (N₂) tills 1 ml återstod och överfördes sedan till vial för analys.

MCX-kolonnen konditionerades med MeOH och sköljdes sedan med MQ. Provet applicerades långsamt till kolonnen (2 droppar/sekund). Kolonnen sköljdes sedan med 2 % myrsyra i MQ (v/v) och analyterna eluerades med MeOH följt av 5 % ammoniumhydroxidlösning i MeOH (v/v). Extraktet evaporerades under värme (40 °C) och kvävgas (N₂) till torrhet och återlöstes i MeOH:MQ (1:1 v/v). Extraktet centrifugerades och supernatanten överfördes till vial för analys.

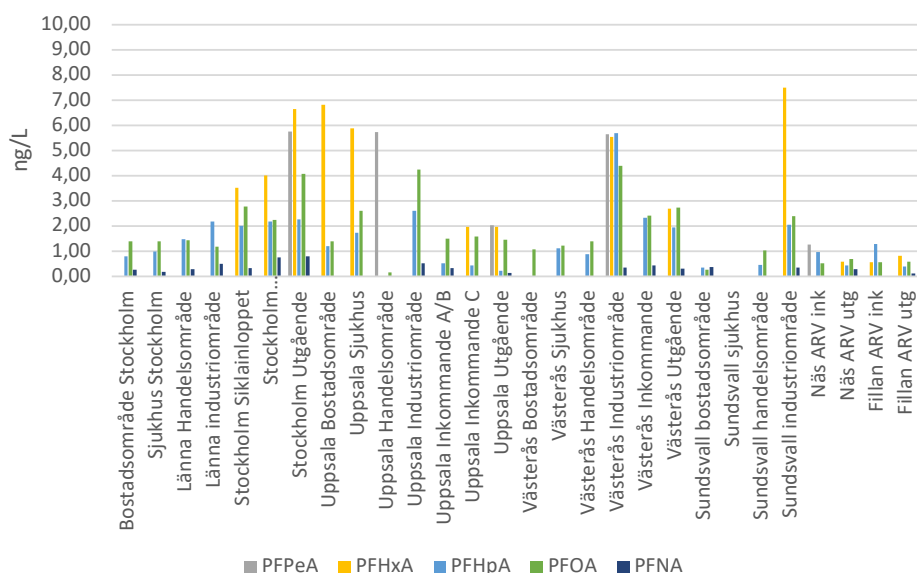
HLB-kolonnen konditionerades med MeOH och sköljdes sedan med MQ. Provet applicerades långsamt till kolonnen (2 droppar/sekund). Kolonnen sköljdes sedan med MQ och analyterna eluerades med MeOH följt av aceton. Extraktet evaporerades under värme (40 °C) och kvävgas (N₂) till torrhet och återlöstes i MeOH:MQ (1:1 v/v). Extraktet centrifugerades och supernatanten överfördes till vial för analys.

De tre olika fastfaskolonnerna utvärderades genom att jämföra signalintensiteten (area under den kromatiska toppen) som erhöles från extrakten som genererats med de olika kolonnerna. Det fanns exempel där signalintensiteten var högre för basiska ämnen på MCX-kolonnen, t.ex. för nikotin och norepinefrin, vilket kan vara väntat. Det var dock endast ett väldigt litet antal av ämnena som hade en högre signal från en annan kolonn än HLB. Det fanns ungefär lika många exempel på där HLB-kolonnen gav en bättre extraktion. I slutändan blev valet att enbart HLB-kolonnen skulle ge en tillräckligt bra extraktion för upparbetning av vattenproverna för analys på HPLC-HRMS då den ansågs ha en god kapacitet för att fånga upp ämnen med varierande polaritet och syra-bas-egenskaper.

7 Resultat

7.1 Analys av PFAS

Samtliga resultat från PFAS-analysen finns redovisade i Bilaga F, Tabell F.1. Av de 26 PFAS som mättes var det PFPrA, PFBA, PFHxA, PFHpA, PFOA, PFNA, PFPrS, PFBS, PFPeS, PFHxS, PFOS, 6:2-FTS och 6:2 diPAP som var de som detekterades mest frekvent. Figur 7.1 visar koncentrationerna i avloppsvattnet i ng/liter för karboxylsyrorerna PFPeA, PFHxA, PFHpA, PFOA och PFNA. De kortkedjiga PFPrA och PFBA har inte inkluderats då dessa har ett par värden som är mycket höga och är att betrakta som outliers. I den masspektrometriska analysen av dessa förekommer endast mycket lite av den kvalificeringsjon som används för att verifiera att signalen är fri från interfererande ämnen. En visuell inspektion av rådata för de höga värdena visade att det kunde vara överlappande signaler som inte endast härrörde från PFPrA och PFBA.

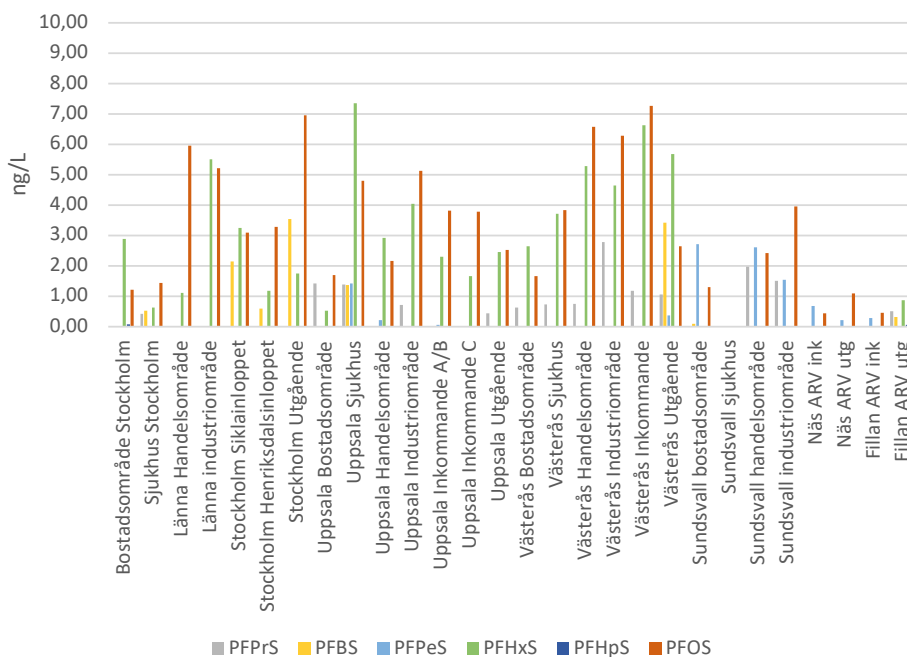


Figur 7.1

Halter av korta PFAS-karboxylsyror i de olika proverna. Halterna i proverna är generellt sett låga, saknar egentlig struktur och uppvisar ibland högre halter av vissa PFAS i utgående än i inkommande avloppsvatten.

Resultaten för de korta karboxylsyrorerna som presenteras i Figur 7.1 visar på en stor variation mellan de olika uppmätta PFAS-ämnena både med avseende på provtagningsplats och avloppsnät. Halterna är dock generellt sett låga, från <1 ng/liter upp till 7 ng/liter, så några egentliga slutsatser är svåra att dra. Inga av provtagningspunkterna ute på nätet i Stockholm visade på förekomst av PFPeA eller PFHxA men det inkommande avloppsvattnet till såväl Siklailoppet som Henriksdalsinloppet visade på förekomst av PFHxA och det utgående avloppsvattnet hade såväl PFPeA som en högre halt av PFHxA. Nedbrytning av PFAS innehållande t.ex. 6:2-telomerkedjor i avloppsreningsverket kan vara en förklaring till detta. I Västerås återfinns högre halter av samtliga PFAS mellan PFPeA och PFOA, men detta speglas inte i provet från det inkommande avloppsvattnet till reningsverket.

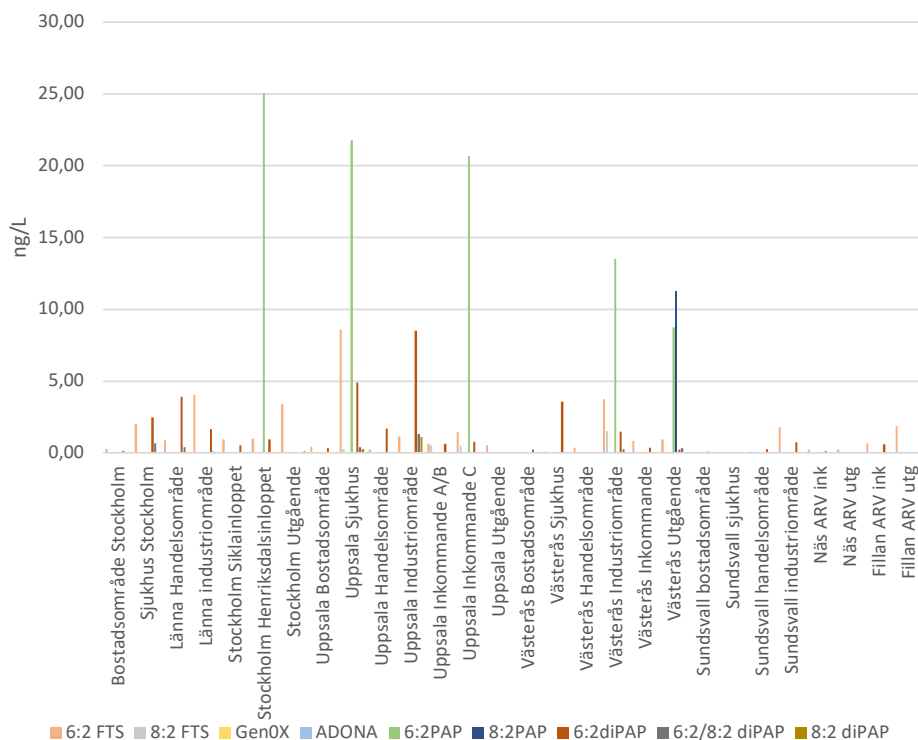
Figur 7.2 visar resultaten från de PFAS som är av sulfonsyratyp: PFPrS, PFBS, PFPeS, PFHxS, PFHpS och PFOS. Även för dessa ämnen saknas tydliga mönster även om halterna av PFHxS och PFOS korrelerar relativt väl för de flesta prover. PFPeS uppmättes nästan uteslutande i Sundsvalls ledningsnät, medan PFHxS saknas i dessa prover. Dock är halterna i samma intervall som för karboxylsyrorerna ovan.



Figur 7.2

Korta PFAS-sulfonsyror i de olika proverna. Halterna i proverna är generellt sett låga, saknar egentlig struktur och uppvisar ibland högre halter av vissa PFAS i utgående än i inkommande avloppsvatten.

Halterna av PFOS-ersättningsämnen och övriga PFAS visas i Figur 7.3. I vissa enskilda prover kan högre halter av 6:2-FTS, 6:2-PAP, och 6:2-diPAP mätas. Dessa ämnen används ofta för att ge en fett- och vattenavstötande yta på papper. Genom returpapper kan dessa ämnen vara kvar i kretsloppen under lång tid. Toalettpapper har föreslagits som en möjlig källa till 6:2-PAP i avloppsslam.



Figur 7.3

Resultat för övriga PFAS i de olika proverna. I enskilda prover har högre halter av vissa PFAS, 6:2-FTS, 6:2-PAP, 6:2-diPAP och 8:2-PAP, uppmätts. Dessa är PFAS som ofta sammankopplas med pappersprodukter.

7.2 Analys av metaller

Alla prover analyserades för 11 olika metaller. Analysen utfördes av ALS i Umeå med ICP-SFMS enligt SS-EN ISO 17294-2:2023 och US EPA Metod 200.8:1994 efter upplösning med salpetersyra i autoklav enligt SS 28150:1993 (SE-SOP-0400). De metaller som ingick i analyspaketet var arsenik, barium, kadmium, kobolt, krom, koppar, molybden, nickel, bly, vanadin och zink.

Medelvärdena för de olika påverkanstyperna (sjukhus, handelsplatser, industrier och bostadsområden samt inkommande prover) presenteras i Tabell 7.1.

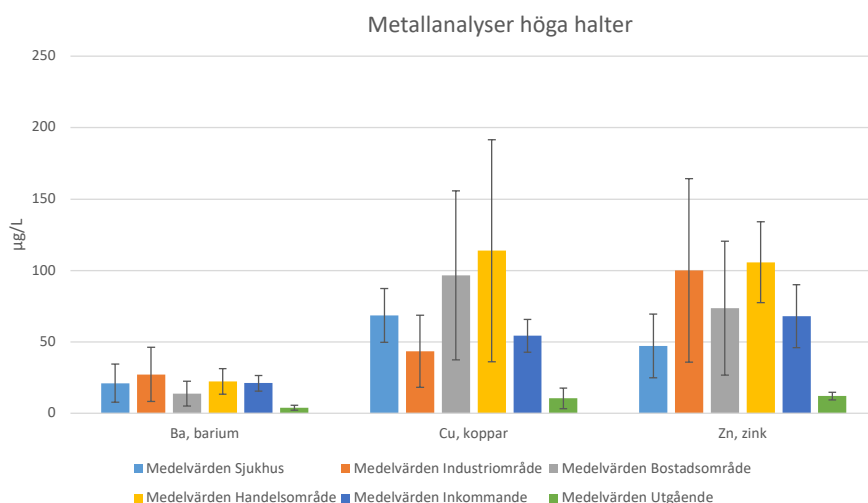
Tabell 7.1

Medelvärden för metaller i de olika påverkanstyperna.

Ämne	Sjukhus	Industriområde	Bostadsområde	Handelsområde	Inkommande ARV	Utgående ARV
As, arsenik	1,2	1,9	1,1	2,3	1,2	0,9
Ba, barium	21	27	14	22	21	4
Cd, kadmium	0,05	0,09	0,09	0,09	0,09	<LOQ*
Co, kobolt	0,4	2,3	0,3	0,6	1,2	1,8
Cr, krom	0,9	2,8	2,1	2,4	2,1	2,2
Cu, koppar	69	43	97	114	54	11
Mo, molybden	2,3	2,3	2,1	1,9	2,2	1,3
Ni, nickel	3,9	12	3,5	5,2	5,0	4,3
Pb, bly	1,0	3,8	0,9	1,5	1,6	<LOQ*
V, vanadin	0,4	2,0	0,4	1,4	1,7	0,4
Zn, zink	47	100	74	106	68	12

*LOQ = kvantifieringsgräns

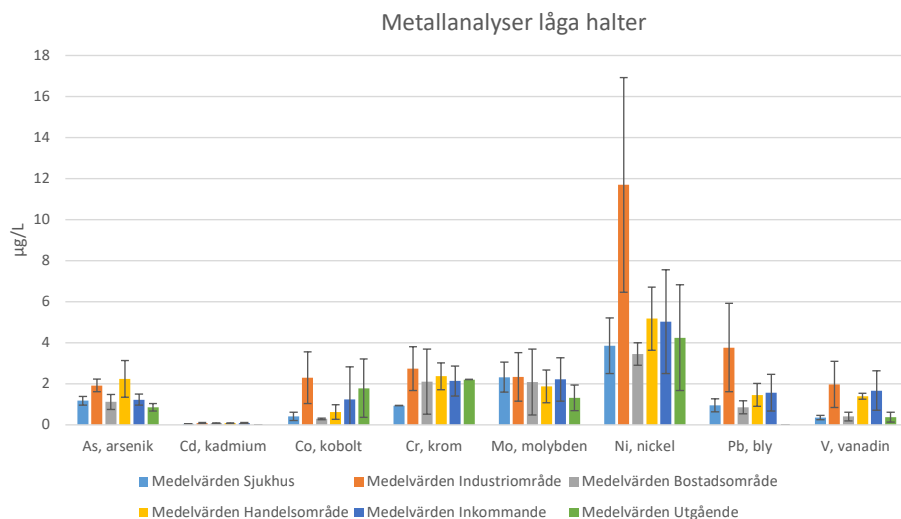
Variationen mellan mätvärden i de olika mätpunkterna är självklart stor, vilket är att förvänta när endast tidsstyrd och inte flödesproportionell provtagning har utförts. Detta innebär att stora skillnader behövs för att några slutsatser ska kunna dras och att mätningarna bör betraktas i perspektiv av tidigare mätningar. De ämnen som återfanns i högre halter i proverna var zink, koppar och barium. Medelvärdena för de olika påverkanstyperna (sjukhus, handelsplatser, industrier och bostadsområden samt inkommande prover) var mellan 46 och 106 µg/liter för zink, 43 och 113 µg/liter för koppar och 14 och 27 µg/liter för barium. Generellt avskildes dessa ämnen bra i reningsverken, med medelvärden för utgående halter på 12, 11 och 4 µg/liter för respektive zink, koppar och barium. Medelvärden och spridningar för zink, koppar och barium visas i Figur 7.4.



Figur 7.4

Medelvärden och spridningar (standardavvikelse) för metaller med höga koncentrationer i de olika proverna. Dessa avskiljs väl i reningsverken men ingen typ av källa kan identifieras.

Figur 7.5 visar medelvärden och spridningar för de ämnen som uppvisade låga halter i de provtagna avloppsnäten. Resultaten visade medelvärden för arsenik på mellan 1,1 och 1,9 µg/liter för arsenik, 0,05 och 0,09 µg/liter för kadmium, 0,3 och 2,3 µg/liter för kobolt, 0,9 och 2,8 µg/liter för krom, 1,9 och 2,3 µg/liter för molybden, 3,5 och 12 µg/liter för nickel, 0,9 och 3,8 µg/liter för bly och mellan 0,4 och 2,0 µg/liter för vanadin.



Figur 7.5
Medelvärden och spridningar (standardavvikelse) för metaller med låga koncentrationer i de olika proverna. Flera av dessa metaller avskiljs sämre över avloppsreningsverken, och för kobolt, nickel och bly är medelvärdena högre från industriområdena än från de andra påverkanstyperna.

ANOVA-tester utfördes för de olika metallerna i provtagningspunkterna för sjukhus, industri, bostad och handel. Mätvärdena för de inkommande proverna till avloppsreningsverken togs inte med då dessa inte kan anses vara oberoende variabler i detta försök. De påverkanstyper som visades vara signifikant skilda från andra i det aktuella datasetet var nickel och kobolt från industriområden, som var signifikant högre ($P=0,05$) än de övriga påverkanstyperna. Även bly var signifikant högre från industriområdena, även om provet från Västerås var under rapporteringsgränsen. För de statistiska beräkningarna ersattes rapporteringsgränsen i dessa fall med ett värde = rapporteringsgränsen delat med roten ur två ($LOR/2^{0.5}$). Även vanadin var signifikant högre för industriområden än för sjukhus och bostadsområden, men ej för handelsområden.

7.3 Non-target screening med GC-MS

Vid jämförelse av de ämnen som hade de högsta relativa signalerna från samtliga prover från respektive påverkanstyp framgick det att det finns en del skillnader mellan bostäder, handelsplatser, industriområden och sjukhus. Tabeller av dessa redovisas i Bilaga C, Tabell C.1. Exempel på ämnen som har höga intensiteter i prover från industriområden är en kort metylerad dipropylenglykol (CAS-nr 20324-32-7). Även en icke metylerad dipropylenglykol finns representerad (CAS-nr 106-62-7). Två långa grenade alifatiska kolväten, en grenad alifatisk alkohol samt fenol och UV-skyddsämnet octocrylene förekommer bland de ämnen som har höga signaler.

De ämnen som hade högst generell signal från bostäder var oljesyra (oleic acid), som kommer från olika vegetabiliska oljor och 1-hexadecanol. Ett annat ämne som förekommer i mat är tetradekansyra som finns i mjölk. Ett ämne som förekommer och har antibakteriella egenskaper men som även kan vara ett lösningsmedel är 2-fenoxyetanol. Flera av de ämnen som kom från bostäder kan förväntas ha ytaktiva egenskaper t.ex. etylenglykol monododecyleter och diklorättiksyra-dodecylester. Två doftämnen identifierades även i proverna från bostäder: mentylacetat och metyl-dihydroxyjasmonat/hedione.

För handelsplatser förekommer 2-propylheptanol, som kan vara ett lösningsmedel men som även kan förekomma i färger och lim. Samma ytaktiva substanser identifieras för handelsplatser som för bostäder. Tre av ämnena är antingen att betrakta som etylenglykolrelaterade, 2-butoxyetanol och 2-[2-[2-metoxietoxy]etoxy-1,3-dioxalan eller propylenglykolämnen, 1-(2-metoxi-1-metyletoxy)-2-propanol. Den senare är en metylerad dipropylenglykol som även hittades i avlopp från industrier. Ytterligare ett ämne som hittades var 4-metyl-indole.

De ämnen som hade högsta relativa signalerna från sjukhus var koffein (*caffeine*) och squalen, som är en fettkomponent som förekommer i människohuden. Förutom dessa ämnen identifierades 2-fenoxyetanol, som även förekom från hushåll, 2-[2-[2-metoxietoxy]etoxy-1,3-dioxalane, en omättad långkedjig alkohol (cis-9-Octadecen-1-ol), samt en längre alifatisk karboxylsyra (9-Dekensyra).

Totalt sett ledde den kemiska screeningen som utfördes med GC-MS till 147 identifieringar. Denna lista presenteras i Bilaga C, Tabell C.2. De identifierade ämnena är de som har en bra överensstämmande match med spektrum i NIST-databasen. En stor grupp av de identifierade ämnena är mättade och omättade alifatiska alkoholer, t.ex. (Z)6, (Z)9-pentadecadien-1-ol, 1-hexanol, 1-heptanol, 2-propylheptanol, etc. Totalt sett 27 av 148 ämnen tillhörde denna grupp. En annan stor grupp var alifatiska kolväten, där 29 ämnen av 148 var av denna typ. Identifierade ämnen inkluderade såväl raka som grenade och cykliska kolväten, t.ex. deka, undekan, tridekan, men även heikosan, 2,6-dimetyldekan, 2-metyldekan, 1,3 dimetylundekan och 2,6-dimetylhexadekan. Identifiering av längre alifatiska kolväten och placeringen av förgreningar i molekylen kan dock vara besvärlig, så identifieringarna av dessa typer av ämnen är inte så säkra även om det är troligt att ämnet just tillhör denna grupp. För en positiv identifikation behövs en analys av ett standardämne. Dessa ämnen förekommer ofta som blandningar och kan då användas som lösningsmedel eller som bränsle. Då lösligheten för dessa ämnen i vattenmassan är låg är det troligt att dessa ämnen är partikelbundna.

Övriga grupper med flera identifierade ämnen var glykoletrar, innefattande både etylen- och propylenglykoletrar. Totalt 18 av de 147 ämnena med tentativa identifieringar var av dessa typer av ämnen, t.ex. tetraetylenglykol monododecyleter, trietylenglykol monododecyl eter, metylerade polypropylenglykol med två och tre propylenenheter samt några mindre etylenglykolderivat. Längre alifatiska syror var också en grupp med flera föreslagna substanser, totalt 10 av 147 med t.ex. oktansyra, pentadekansyra och hexadekansyra. Dessa ämnen kan förekomma i rengöringsmedel eller som tillsatser i färger, lacker och lim beroende på dess kemiska struktur.

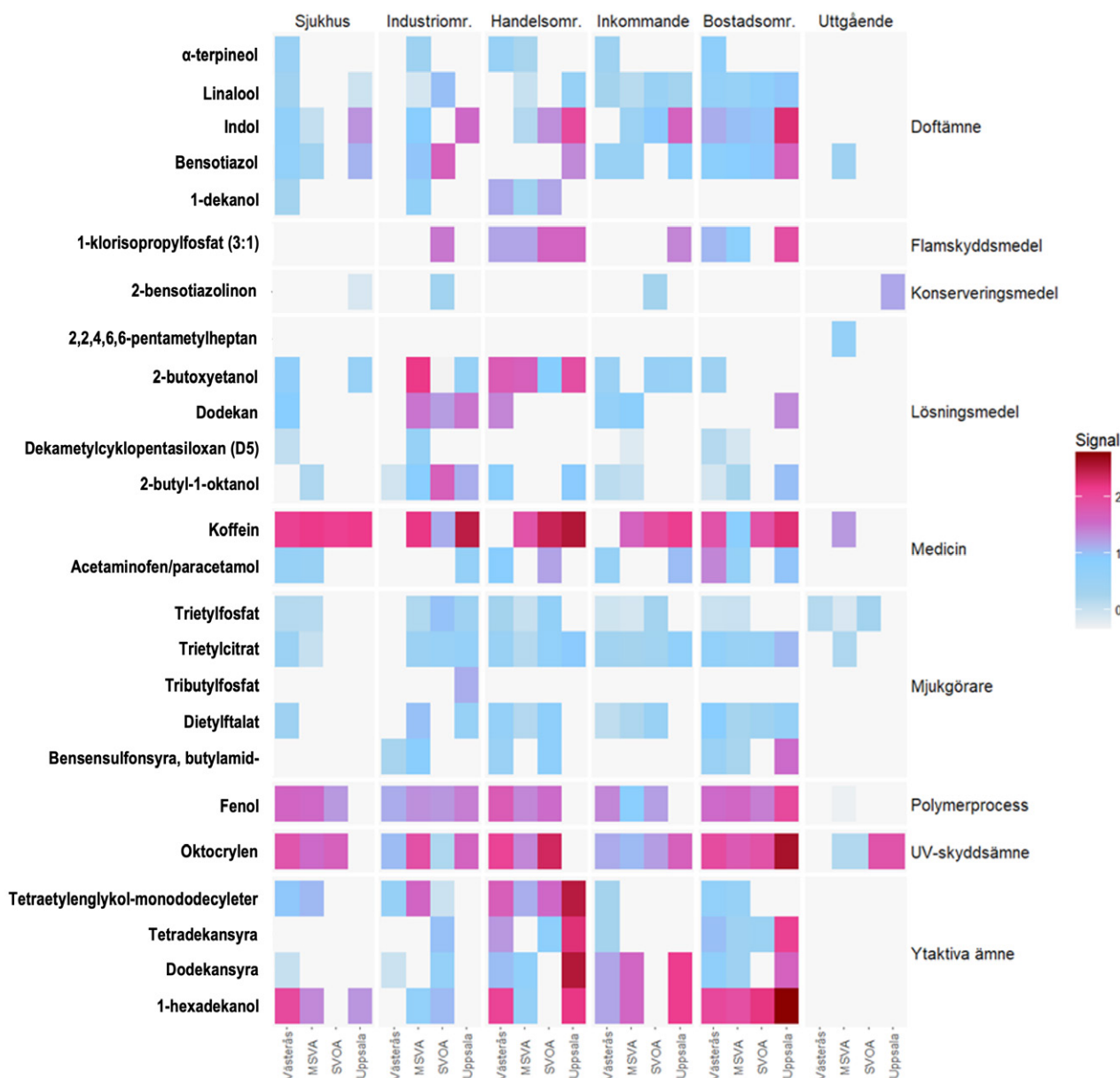
Andra typer av ämnen var t.ex. etrar (5 föreslagna ämnen), aromatiska alkoholer (4 ämnen, bl.a. fenol), omättade alifatiska kolväten (3 ämnen) och estrar (3 ämnen). Vissa ämnen är svåra att gruppera, t.ex. 2-piperidone, som är monomeren till nylon 5, vanillylalkohol (4-Hydroxy-3-metoxibenzylalkohol), 2-bensothiazolinon, paracetamol, koffein, metyldihydrojasmonat (hedione), linalool, decametylcyclopentasiloxan (D5), octocrylen, och guaiacol. Flera plasttillsatsämnen finns med som föreslagna ämnen, t.ex. dietylhexyl terftalat (1,4-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-etylhexyl) ester), N-Butylbenzenesulfonamid (Benzenesulfonic acid butyl amide, n-BBSA), dietylftalat, trietyltrat, trietylfosfat och tributylfosfat.

Tidigare studier har också identifierat 1-butyl-pyrrolidinon (CAS nr 3470-98-2) (Blum, 2018), trikloropropylfosfat (TCPP, 1-kloro-2-propanol-fosfat (3:1)), n-BBSA och octocrylen (Blum, 2017). Alifatiska alkoholer, längre alkaner, glykoletrar och alkansyror har också hittats i gråvatten (Eriksson, 2003). Indole, kaffein, α -metyl-benzylalkohol, bensotiazol, n-BBSA, tributylfosfat (TBP), TCPP och alifatiska syror har identifierats vid en tidigare studie av avloppsvatten i Göteborg (Paxéus, 1996). Skillnader i vilka ämnen som identifieras kan dels bero på ursprunget till avloppsvattnet, men även t.ex. om eventuellt suspenderade partikulärt material har tagits med i provupparbetningen.

En *heat map* (en färgrepresentation av värden i en tabell) av signalintensiteten (log-omvandlat) av de ämnen som förekom i flest antal prover uppmätta med GC-MS visas i Figur 7.6. Grupperingar med avseende på påverkanstyp anges i toppen av figuren och vilket avloppsnät som provet tagits i finns angivet i botten av figuren. Namn på ämnet syns i vänstra delen av figuren och användningsområden eller typ av ämne finns angivet till höger i figuren.

Figur 7.6

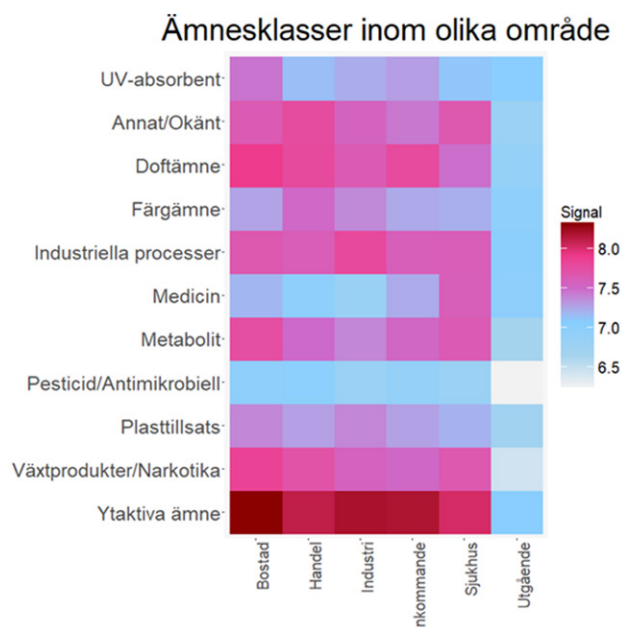
Signalintensiteten (log-omvandlat) för ämnen identifierade i GC-MS i flertalet av proverna, utvalda för att de är representativa för olika typer av ämnen och har beräknad toxisk påverkan.



7.4 Suspect screening med LC-MS

En översiktsbild av relativ förekomst av kemikalier kopplade till olika grupper av ämnen identifierade med LC-MS visas i Figur 7.7. Trender som kan ses i denna figur är att bidraget från bostäder när det gäller ytaktiva ämnen och UV-skyddsämnen är betydande. Detta ses även i Figur 7.6. Läkemedel och antibiotika är ämnesgrupper som har högre relativa signaler från sjukhus, vilket kan verka logiskt även om mycket av den medicin

som förskrivs till patienter konsumeras i hemmen snarare än vid sjukhusen. De ämnen som kan kategoriseras som industrikemikalier uppvisar högre relativa signaler från industriområden även om denna grupp av ämnen, som t.ex. innehåller ämnen som förekommer i färger och lim, rengöringsmedel etc., har en bred användning i samhället vilket ger utslag för att de även förekommer i samtliga påverkanstyper. En iakttagelse är även att bostäder ligger högt inom samtliga typer av ämnen vilket innebär att en relativt hög belastning av många olika kemikalier till reningsverket kan komma från bostäder.



Figur 7.7

Relativ signalintensitet (log-omvandlat) aggregerat över användningsområden för kemikalieklasser i prover från de olika påverkanstyperna.

Figur 7.8 A visar signalen för den ytaktiva substansen Surfonyl 104 i de olika proverna: blankprov, bostäder, handelsplatser, industriområden, sjukhus, samt inkommande och utgående avloppsvatten från reningsverken. I figuren visas även att Surfonyl 104 förekommer i samtliga prover, att spridningarna i signalintensitet är stor mellan de olika proverna (även inom grupperna), att det inte finns någon större skillnad i signalintensitet för de olika påverkanstyperna och att avskiljningen i avloppsreningsverken är god.

Många ämnen förekommer i prover från samtliga påverkanstyper och det är inte möjligt att särskilja en specifik typ av verksamhet som bidrar mer än andra. Sammanställningar av de ämnen som förekommer i majoriteten av prover, för positiv och negativ ESI finns i den Excel-fil som publicerats tillsammans med rapporten. Informationen som förekommer i denna fil finns beskrivet i Bilaga G. Efter att den initiala listan av identifierade ämnen ifrån LC-MS-experimenten hade rensats från de ämnen som uppvisar generellt låga signaler, de ämnen för vilka det förekommer interferenser i blankproverna, de som endast har hittats i ett enskilt prov, samt de som inte kunde få en tillräckligt säker identifiering, återstod en lista på 87 ämnen. Många av de identifierade ämnena är läkemedel, men även ämnen som används som plast- och gummiadditiv, ytaktiva substanser och bekämpningsmedel var kategorier som hade fler än tio substanser. Det är ibland svårt att hitta information om vilket användningsområde en viss substans har, men ungefär tio ämnen kan kategoriseras som kemikalier som har industriell användning, eller en bred användning där de kan förekomma i färger, lim, cement etc. Några doftämnen (fem) finns med i listan på möjliga identifikationer liksom metaboliter av läkemedel (fem). Även naturligt förekommande substanser, t.ex. abetinsyra/rosin och ett par isoflavoner finns som möjliga identifierade ämnen.

Vissa ämnen uppvisar dock starkare signaler i prover från de olika påverkanstyperna, och dessa ämnen presenteras i Bilaga D, Tabell D1-D8. Ämnen har inkluderats i tabellen om de har högre signaler i en viss typ av prover samt att det är i minst två kommuner som detta har noterats. Exempel på detta visas i Figur 7.8 B-D några ämnen som i högre grad är knutna till sjukhus, industri- och bostadsområden. Fler ämnen var typiska för sjukhus och bostadsområden än de som identifierades från industri- och handelsområden. Detta kan bero på att verksamheterna har en större spridning i de olika kommunerna eller att de unika ämnen som används i dessa områden inte hamnar i avloppssystemet.

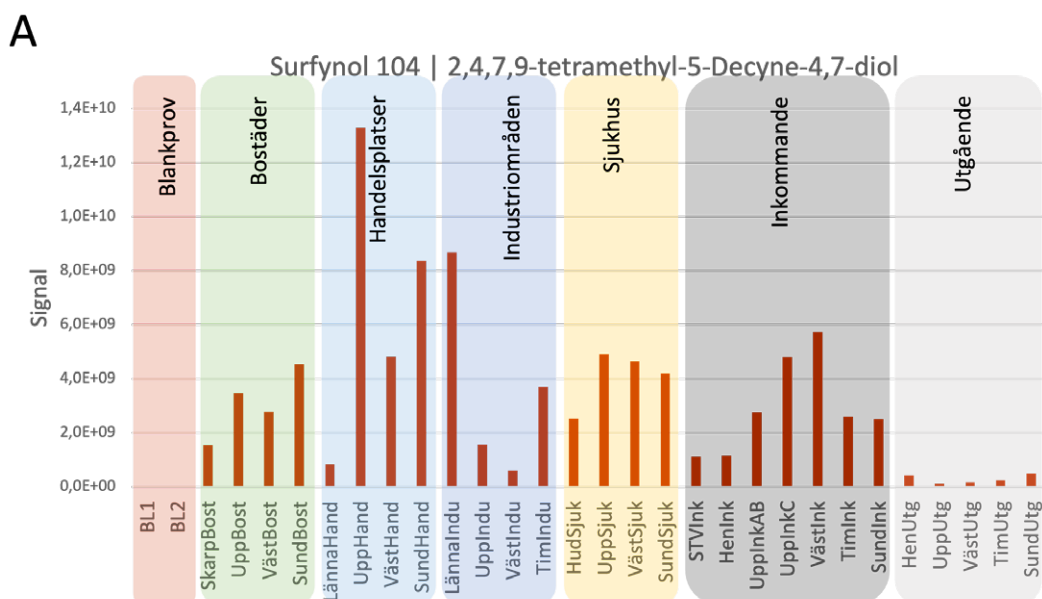
I Figur 7.8 B presenteras signalerna från några antibiotikum och läkemedel som uppvisar högre signaler i proverna som kommer från sjukhus. Detta tyder på att användningen är i högre grad knuten till sjukhus och att dessa antibiotikum och läkemedel inte har lika stor användning inom hemmen och på arbetsplatser, vilket erhöles för t.ex. kandesartan, irbetsartan, diklofenak, ibuprofen, naproxen och trimetoprim. Endast två av de ämnen vars signaler var högre i proverna från sjukhusen kunde räknas som annat än läkemedel. Namngivningen kan vara ett hinder för att upptäcka vilket läkemedel som kan knytas till vilket ämne, t.ex. användes beteckningen (RS)-5-metoxymet-((4-metoxymet-3,5-dimetylpyridin-2-yl) metylsulfonfyl)-1H-benzo[d]imidazole i den suspect-lista som utnyttjades för ämnet esomeprazole, som förekommer i omeprazol och saluförs som Nexium.

I Figur 7.8 C visas ett exempel på en substans, 1,3-difenylguanidin, som hittas i de flesta prover, men som uppvisar högre signaler från industriområden. Enligt PubChem används ämnet vid gummitillverkning och enligt ECHA kan utsläpp ske över lång tid vid användning av gummimaterial eller från t.ex. gummiunderlag. Ämnet bedöms bland annat vara reproduktionstoxiskt.

UV-skyddsämnet octocrylen uppvisar i denna studie en stark korrelation till bostadsområden, vilket visas i Figur 7.8 D. Detta kan vara en följd av användning i solkrämer och kosmetika. Octocrylen är under utvärdering gällande PBT-klassning och är toxiskt för vattenlevande organismer. Resultaten visar vidare att det är ett ämne som förekommer i majoriteten av de inkommande proverna, men att det avskiljs effektivt i reningsverken. Identiteten hos octocrylen har inte verifierats genom analys av standardreferensmaterial. Däremot har den identifierats i både GC-MS- och LC-HRMS-analyserna.

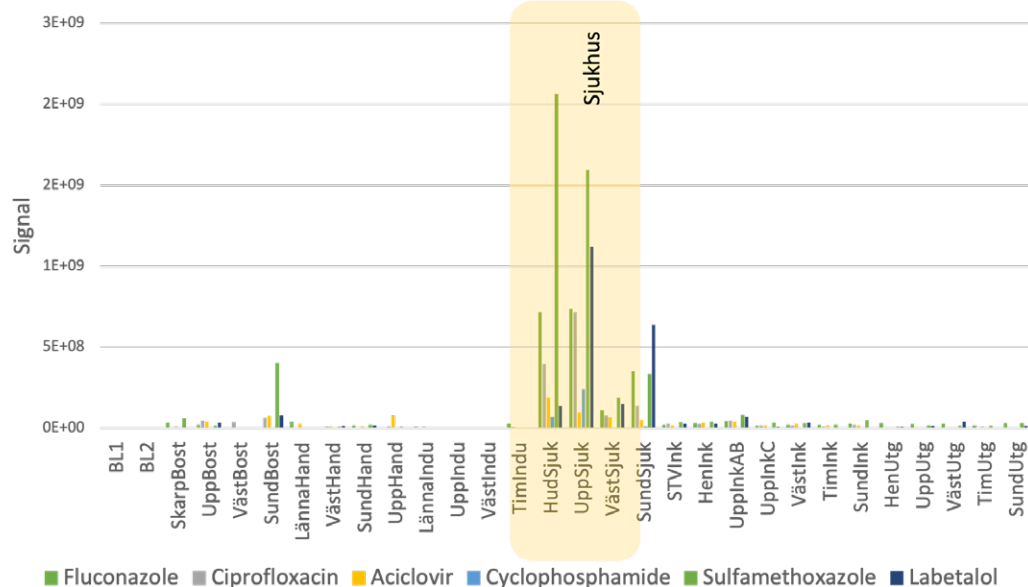
Figur 7.8

Relativa signaler för utvalda ämnen i de olika proverna. Graf A visar signalerna för den yttaktiva substansen Surfonyl 104, B visar sex olika läkemedel och antibiotika, C visar gummitillsatsämnet 1,3-difenylguanidine och D visar UV-skyddsämnet octocrylen.



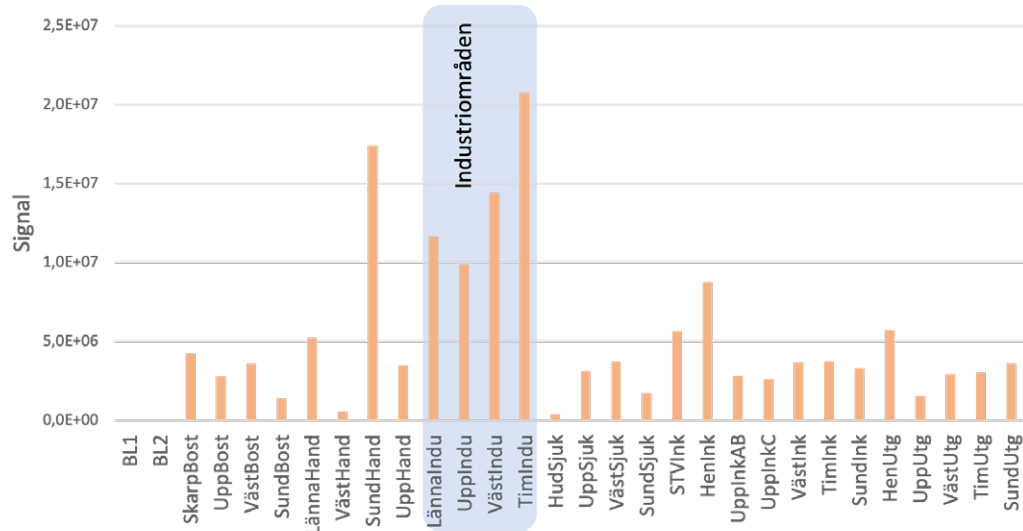
B

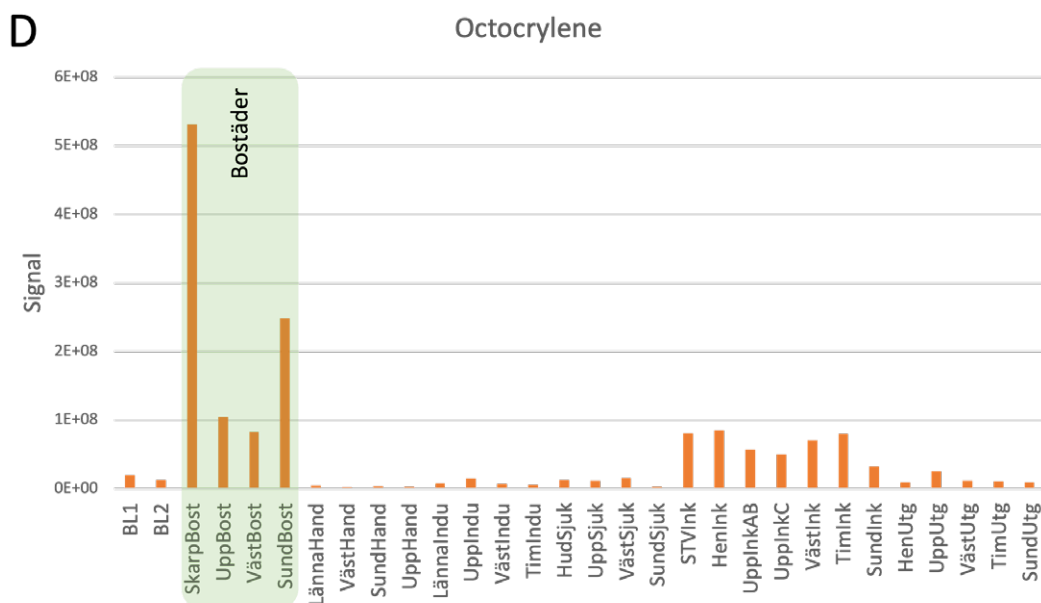
Antibiotikum och läkemedel



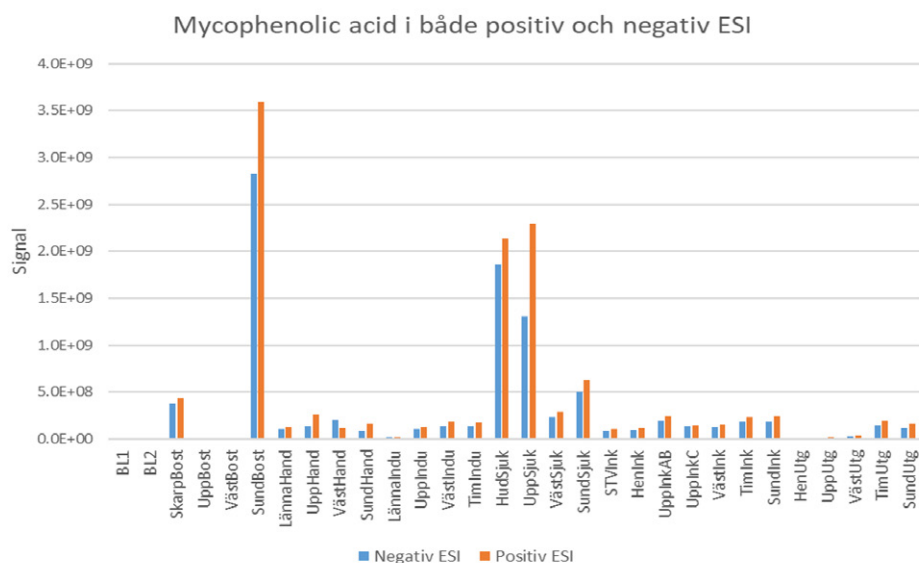
C

1,3-diphenylguanidin





En förbättrad säkerhet i identifieringen av ämnen fås om ämnet kan identifieras både med positiv och negativ ESI. Signalintensiteterna är ofta väldigt olika mellan dessa och detta beror väldigt mycket på hur lätt ämnet avger eller tar upp protoner (vätejoner) vid joniseringen. När ett ämne mäts kvantitativt med LC-MS är det fördelaktigt att ha en surrogatstandard (även kallad internstandard) som är en isotopinmärkt analog (t.ex. ibuprofen med ett antal vattenmolekyler utbyta mot deuterium) för att kompensera för förluster i uppberedningssteget och påverkan vid joniseringen från andra ämnen som har samma retentionstid i analysen. Det senare benämns jonsuppression (ion suppression på engelska) om det leder till en undertryckt signal. I denna analys har isotopinmärkta ämnen tillsatts för ett relativt stort antal läkemedel, PFAS, fenoler, hormoner och plastadditiv, men för de ämnen som det inte finns referenssubstanter kan inte någon kompensation för joniseringen göras. Mykofenolsyra, som bland annat används för behandling av autoimmuna sjukdomar som Crohns, uppvisar dock en liknande signal för både positiv och negativ ESI och även en god överensstämmelse mellan de olika proverna vilket ger stöd för möjligheten till relativ kvantifiering av signalerna i de olika proverna. Detta presenteras i Figur 7.9.



Figur 7.9

Signalen för mykofenolsyra uppvisar liknande mönster av signaler från de olika proverna i både negativ och positiv ESI, vilket ger stöd för möjligheten till relativ kvantifiering av signalerna i de olika proverna.

Majoriteten av alla ämnen som identifierades i de flesta prover, antingen med positiv eller negativ ESI, identifierades i minst ett prov med den andra polariteten. Av de totalt 87 ämnen som identifierades i LC-MS så var det 52 ämnen som identifierades både i positiv och negativ ESI vilket motsvarar 60 % av ämnena. Ett 10-tal ämnen identifierades i både GC-MS och LC-MS. Detta är antagligen dels en följd av urvalet av ämnen som har gjorts för LC-MS, där urvalskriterierna kan ha diskriminerat allt för hydrofoba ämnen (avskiljs ofta väl i avloppsreningsverk) samt att de ämnen som identifierats i GC-MS-analysen inte lämpar sig bra för analys i LC-MS, t.ex. alifatiska kolväten. Detta visar att det är värdefullt att använda sig av bägge teknikerna vid kemisk screening om det inte finns ett specifikt syfte att studera t.ex. väldigt vattenlösliga (mobila) föreningar.

7.5 Farobedömning av identifierade ämnen

Ett paket med 99 modeller från Vega (v 1.2.3) och MistraSafeChem digitala modelleringsverktyg (v 1.0) användes för att förutsäga eventuella faror för människa och miljö för de föreningar som identifierades med GC-MS. En lista över de modeller som har använts finns i Bilaga E. Valda endpoints grupperades i 12 toxicitetsendpoints: karcinogenicitet, mutagenicitet, reproduktions- och utvecklingstoxicitet, endokrin påverkan, akvatisk toxicitet, toxicitet i terrestra (landbaserade) miljöer, persistens och biologisk nedbrytning, biokoncentration, hudsensibilisering, hudgenomträngning samt hud- och ögonirritation. I modellpaketet finns flera modeller för varje vald slutpunkt. Därför beräknades ett konsensuspoäng för varje förening baserat på alla modeller riktade mot samma effekt, såväl som på tillförlitligheten av varje förutsägelse för respektive modeller.

För varje predikterat resultat tilldelades en poäng mellan -1 och 1 där 1 representerar aktiva/toxiska föreningar och -1 representerar inaktiva/icke-toxiska föreningar. Detta benämns ”prediktionspoäng”. Modeller som ger kontinuerliga utfall, dvs inte enbart diskreta tal, såsom biokoncentrationsfaktor (BCF) eller flera kategoriutfall såsom Persistence-modeller från IRFMN (Vega), fick numeriska poäng mellan -1 och 1, baserat på intensiteten av den förutsagda effekten. Till exempel tilldelades BCF-värden >5000 poängen 1, medan de som har ett poäng mellan 2000 och 5 000 fick poängen 0,5, vilket motsvarar de gränsvärden som fastställts av REACH-förordningen för att klassificera föreningar antingen som ”mycket bioackumulerande” (vB) eller ”bioackumulerande” (B). Både de ingående Vega- och MistraSafeChem-modellerna ger en uppskattning av tillförlitligheten för varje förutsägelse. Dessa omvandlades till poäng från 0,9 (hög tillförlitlighet) till 0,2 (låg tillförlitlighet). Värdet 1 i detta sammanhang tilldelades endast experimentella data medan ett värde 0 gavs för föreningar som inte kunde klassificeras. Dessa poäng kommer att kallas ”tillförlitlighetsvärde”.

Prediktions- och tillförlitlighetsvärden multiplicerades sedan för varje modell för att få ett modellvärde som tar hänsyn till både det predikterade värdet och tillförlitligheten. Slutligen beräknades det geometriska medelvärde för individuella modellvärden för att få ett ”konsensusvärde” för varje förening och var och en av toxicitetsendpoints. Ett undantag är kategorin ”endokrin påverkan” (ED) som ytterligare delades upp i åtta underkategorier för agonism eller antagonism av östrogen-, androgen-, sköldkörtel- och progesteronreceptorer.

En poäng nära 1 representerar föreningar som beräknas ha en stark påverkan på en viss endpoint, medan en poäng på -1 representerar föreningar med låg beräknad påverkan. Konsensuspoäng nära 0 kan betyda följande: 1) det råder inte konsensus mellan modellerna (t.ex. vissa modeller förutspår positivt utfall medan någon förutspår negativt utfall), 2) föreningens påverkan predikteras med låg tillförlitlighet eller ligger utanför modelldomänen, 3) en kombination av både brist på konsensus och låg tillförlitlighet för prediktioner. Poäng på $\geq 0,5$ ansågs vara en varning med hög tillförlitlighet, medan poäng mellan -0,1 och 0,1 anses otillförlitliga. Således kunde föreningar med poäng

$\geq 0,5$ "flaggas" för specifika effektmått och diskuteras i resultat- och diskussionsavsnittet nedan.

För visualiseringsändamål delades toxicitetskategorierna in ytterligare i fyra huvudkategorier: 1. Cancerframkallande, mutagena och reproduktionstoxiska (CMR), 2. Endokrinstörande förening (EDC), 3. Ekotoxisk (Ekotox) och 4. Giftighet för ögon och hud (Öga/hud). Databearbetning utfördes i Konstanz information miner (KNIME) (v. 5.2.0) och visualisering gjordes med ggplot2 i R (v.4.4.0).

De slutliga poängen för varje struktur och toxicitetskategori visas i Figur 7.10. Det konsensusvärde som redovisas möjliggör en enklare tolkning av resultat från flera datorberäkningsmodeller för varje toxicitetskategori. Nackdelen med detta är dock att viss information går förlorad. Ett exempel är när man jämför de individuella modellpoängen för alger, *Daphnia magna* och fisktoxicitet med konsensusvärdet för kategorin "akvatisk toxicitet" så kan det vara uppenbart att vissa föreningar endast är giftiga för fisk, men inte för alger eller *Daphnia*. Dettas resulterar i en låg konsensuspoäng och indikerar inte att den är giftig för vattenlevande organismer trots att den är potentiellt giftig för fisk. Icke desto mindre visar de flesta av föreningarna värden i liknande intervall för de individuella modeller som använts som för den totala akvatiska toxicitetspoängen, vilket styrker att resultaten i de flesta fall är representativa.

En ytterligare faktor är att föreningar som ligger utanför domänen av modellen får poängen 0 på grund av prediktionens låga tillförlitlighet. Detta leder till att vissa föreningar har lägre riskpoäng på grund av bristfällig tillgång till data, snarare än att de inte utgör en faktisk fara. Emellertid är dataluckor av detta slag ännu vanligare när det gäller experimentella data, och beräkningsmetoden som har utnyttjats här erbjuder då ett sätt att identifiera ett större antal farliga föreningar, trots bristen på experimentella data. Dessutom är detta tillvägagångssätt ett snabbt sätt att identifiera potentiella kemikalier som kan utgöra en fara och prioritera dessa för testning.

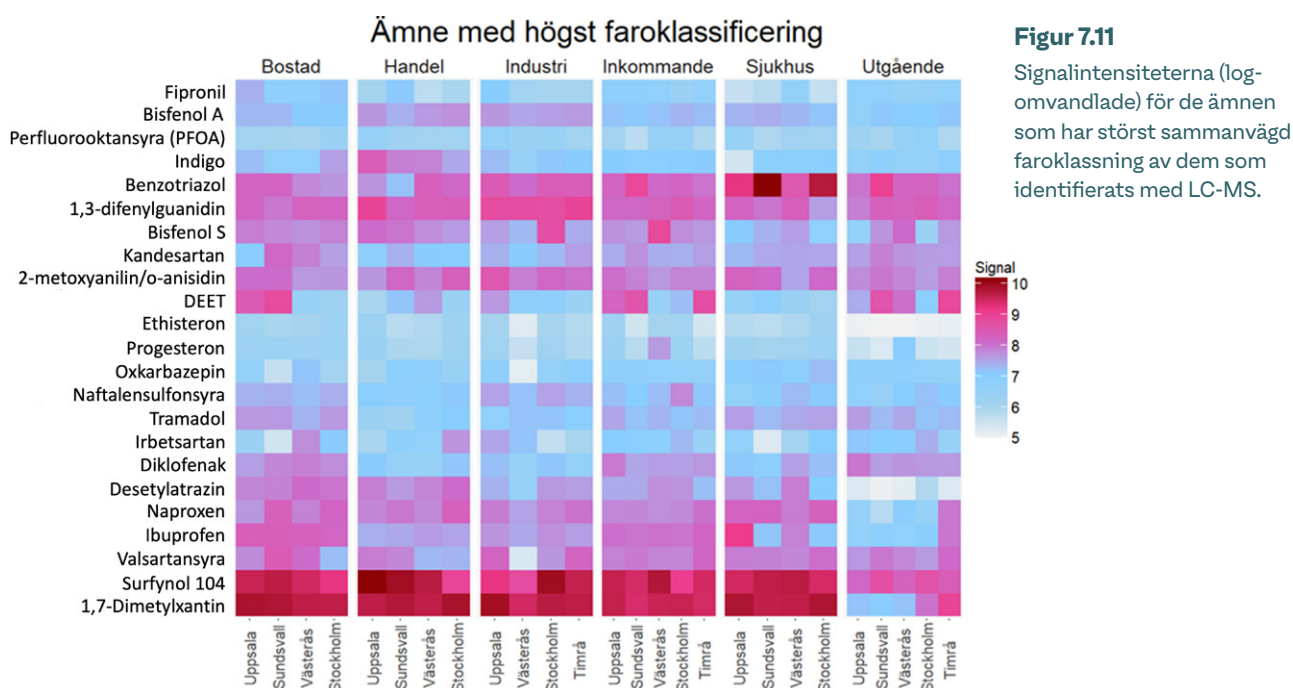


Figur 7.10
Beräknade toxiska effekter från prioriterade ämnen identifierade med GC-MS.

Den farobedömning som utfördes för att prioritera de kemiska ämnena inför analysen kan även användas för att prioritera de ämnen som har identifierats. Denna prioritering kommer då att endast ta hänsyn till experimentella data, som generellt sett anses vara mer tillförlitliga än de som är beräknade. Det bör dock påpekas att vid sammanräkningen av olika resultat för att ta fram en konsensusbedömning från modellberäkningen så får eventuella experimentella data en väldigt stor vikt så där bör inte bedömningen skilja mycket. Figur 7.11 visar signalintensiteten i de olika proverna för de ämnen som har identifierats med LC-MS som har högst summerad faroklassning. I denna figur har summan av de eventuella bidragen till toxicitet summerats för CMR, EDC, Ekotox, och REACH-klassning använts, vilket ger en något större vikt för ekotoxicitet då denna summaparameter har ett högre maxvärde än de övriga. Det är viktigt att komma ihåg att det endast går att jämföra ämnena med samma ämne i andra prover och inte jämföra mellan ämnen då det bara är signalintensiteten som redovisas.

Intressanta mönster som framträder i Figur 7.11 är att Bisfenol A har en något högre påverkan från handel och industri, indigo har starkast bidrag från handel, benzotriazol har lite högre signaler kopplat till sjukhus och 1,3-difenylguanidin har, som tidigare

beskrivits, större påverkan från industriområden. Det är viktigt att komma ihåg att det inte är kvantitativa bedömningar så jämförelser är giltiga endast inom raderna. Ett ämne som ger upphov till en låg signal kan annars se ut som att den bör ge en liten effekt, men detta är ingen slutsats som kan dras. Anledningarna att benzotriazol och 1,3-difenylguanidin har så höga signaler kan lika gärna vara att de ger höga instrumentella signaler. Insektsmedlet DEET har de högsta signalerna från bostadsområden, speciellt i proverna från Sundsvall och Uppsala, vilket kanske kan visa på en större användning i dessa områden. Mönstret återkommer i inkommande avloppsvatten där Sundsvall, Timrå och Uppsala har högre signaler än Stockholm och Västerås. Tramadol har högsta signaler från bostadsområden och sjukhus, medan diklofenak har de högsta signalerna från bostäder. En metabolit som har höga signaler från samtliga områden är 1,7-dimetylxanthin, som också är känd som paraxanthin och är en metabolit till koffein. Benzotriazol, 1,3-difenylguanidin, Bisfenol S, Candesartan, 2-Metoxyanilin, o-Anisidin och DEET reduceras inte till så stor grad över reningsverket.



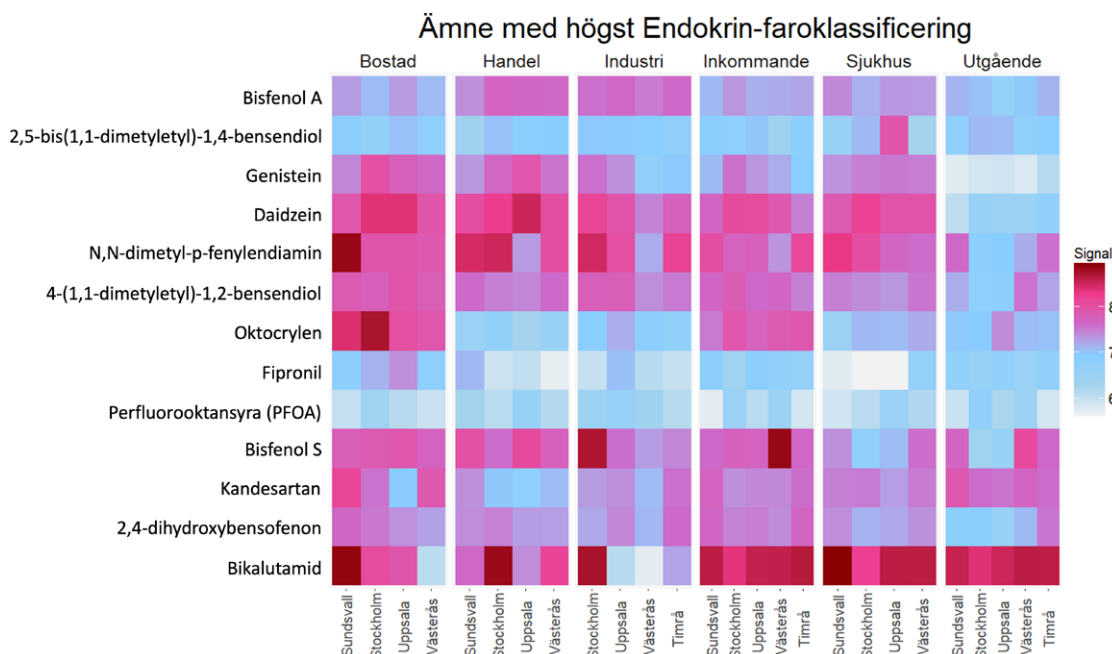
För att hitta de ämnen som har störst påverkan på en viss faroklass så kan dessa ämnen enkelt sorteras fram och detta kan till och med vara mer relevant i vissa fall. De ämnen som har störst CMR-påverkan är indigo, benzotriazol, 1,3-difenylguanidin, o-anisidin samt N,N-dimetyl-p-fenylenediamin. Här tillkommer endast N,N-dimetyl-p-fenylenediamin till de ämnen som diskuterades ovan, och för detta ämne saknas information på ECHA:s hemsida (ECHA substanceinfo_a) om användning och det syns inte någon koppling till någon specifik typ av påverkan. Ämnena med högst REACH-faroklassificering finns också representerade i Figur 7.11. Dessa är fipronil, PFOA, bisfenol-A och-S, o-anisidin och DEET. Fipronil är ett insektsmedel som används mot t.ex. löss, vilket kan förklara att den har en något högre signalintensitet från bostadsområden. Bisfenol S är mer vattenlöslig än Bisfenol-A vilket också leder till en sämre reduktion över reningsverket.

Om de ämnen som har högst faroklassning för endokrin (hormonstörande) påverkan filtreras fram baserat på faroklassning kommer dessvärre inte alla de endogena hormonerna med, som troligtvis har störst påverkan, eftersom dessa inte kommer med i den sökning som har gjorts. De högst rankade ämnena när det gäller EDC visas i Figur 7.12. En observation som kan göras är att den fytoöstrogena isoflavonoiden genistein och det strukturellt liknande ämnet daidzein är representerade i denna grupp och

att de förekommer från flera olika källor. Antioxidanten 2,5-bis(1,1-dimetyletyl)-1,4-Benzenediol, även känd som 2,5-di-tert-butylhydroquinon (ECHA substanceinfo_b), och 4-(1,1-dimetyletyl)-1,2-benzenediol, även kallad 4-tert-butylpyrocatechol (ECHA substanceinfo_c), finns med bland dessa ämnen. Dessa kan förekomma som tillsatser i färg, gummi, plast, kitt eller modellera. Octocrylen och 2,4-dihydrobenzofenon är UV-skyddsämnen som kan förekomma i olika material. Biclutamid är ett antiandrogent läkemedel som används för behandling av prostatacancer.

Figur 7.12

Signalintensiteterna (log-omvandlade) för de ämnen som har högst EDC-klassning av de som har identifierats med LC-MS.



När det gäller de ämnen som har högst ekotoxrisk så är det, som tidigare påpekats, i stort sett samma ämnen som har hög total riskklassning då ekotoxrisken har stor påverkan på det totala värdet. Det är samma ämnen förutom PFOA, bisfenol S, DEET och o-anisidin. Förhoppningsvis kan prioriteringar av ämnena som dessa, baserat på faroklass, vägleda uppströmsarbetet i att hitta ämnen att arbeta med och att via kontroller undersöka om verksamheter använder sig av dessa ämnen. Den tabell som har tagits fram genom detta arbete innehåller mer detaljerad faroklassning, även för t.ex. östrogen eller androgen påverkan.

7.6 Användningsområden och ämnestyper

För att underlätta tolkningen av resultaten gjordes en uppskattning av användningsområde för de ämnen som identifierades via LC-MS och användningsområden och i vissa fall ämnestyper när det gäller GC-MS. Anledningen att samma klassning inte gjordes för GC-MS-data var att de ämnen som identifierades i GC-MS i stor utsträckning förekommer i många blandningar, t.ex. bränslen och oljor eller som emulgeringsämnen som kan förekomma i ett stort antal produkter. De kategorier på användningsområden som användes för klassificering var: läkemedel, plastadditiv, bekämpningsmedel, färgämne, industrikemikalie, metabolit, ytaktivt ämne och doftämne. Ämnen för vilka väldigt ospecifik information gavs klassades slutgiltigt som okänd/övrigt. För att tillskriva användningsområden till de olika ämnena gjordes sökningar på ämnena och resultat från i huvudsak ECHA (*substance infocard*), Chempider, National institute of Health (NIH) databas och Wikipedia användes. Wikipedia gav mestadels information om läkemedel. De olika grupperingarna finns redovisade i Bilaga C.

Den största gruppen av ämnen var läkemedel, vilket täckte cirka 39 % av samtliga identifieringar för LC-MS-data. Sedan följde, i minskande andel av identifieringar: plastadditiv (11 %), bekämpningsmedel (5 %), industrikemikalier (5 %), ämnen för vilka ett tydligt användningsområde inte kunde tillskrivas (4 %), metaboliter (3 %), ytaktiva ämnen (2 %) och färgämnen (1 %). Till gruppen plastadditiv har mjukgörare, UV-skyddsämnen och antioxidanter räknats in även om UV-skyddsämnena och antioxidanterna kan ha andra användningsområden, t.ex. inom kosmetika eller i konsumtionsprodukter. I gruppen bekämpningsmedel ingår både herbicider, fungicider och insekticider. Acceleratorer vid gummitillverkning, rostskyddsämnen, melamin-polymerer och nylonmonomerer är ämnestyper som har inkluderats i kategorin industrikemikalier.

I GC-MS identifierades ett antal mjukgörare och andra plastadditiv (6 %), terpenor och andra doftämnen (5 %), ämnen som är vanligt förekommande i konsumtionsprodukter (3 %), industrikemikalier (2 %), samt läkemedel (1 %) och bekämpningsmedel (1 %). De kategoriseringar som har gjorts för de ämnen som har varit svåra att hitta en enskild användning av har varit, från hög till låg procent av andel identifieringar: alifatiska kolväten (20 %), alifatiska alkoholer (18 %), glykoletrar (12 %), organiska syror (7 %), aromatiska alkoholer (3 %), etrar (3 %), omättade alifatiska kolväten (2 %), estrar (2 %), ketoner (1 %), aromatiska kolväten (1 %) och aldehyder (1 %). Även om inte alla ämnen har kunnat kategoriseras med avseende på användningsområden så är förhoppningen att indelningarna i olika användningsområden ska kunna bidra med information till vilka påverkanstyper som skulle kunna vara mål för ett uppströmsarbete.

Läkemedel är en grupp ämnen som är svår att hantera i uppströmsarbete på grund av den fria förskrivningsrätten hos läkare, vilket innebär att de kan skriva ut det läkemedel som de anser är bäst för patienten. Ur ett hälsoperspektiv är det lätt att förstå att detta är en princip som bör bibehållas. Att ställa miljönyttan av att välja ett visst läkemedel i stället för ett annat mot hälsonyttan hos patienten kan vara svårt. Ändå har ett stort arbete skett med fokus att lyfta fram läkemedel som har en lägre miljöpåverkan, tex ”kloka listan” som publiceras av Region Stockholm på Janusinfo (www.janusinfo.se). Denna har syftet att det mer miljövänliga läkemedlet kan väljas, om det har samma effekt men mindre miljöpåverkan eftersom läkemedel ändå kan ha effekt på andra organismer i den omgivande miljön om de inte reduceras effektivt över reningsverken och släpps ut i miljön.

Vissa läkemedel får ett CMR-värde i modellen som utgått ifrån experimentella data som europeiska kemikalieinspektionen ECHA har tillhandahållit. Detta rör sig om ciprofloxacin, metronidazol och cyclophosamid, en cancermedicin som klassas som CMR-aktivt i beräkningsmodeller. Metronidazol listas som misstänkt karcinogen av både WHO och International Agency for Cancer Research (IACR) (Wikipedia_a) och ciprofloxacin ger utslag för karcinogenicitet i cellbaserade tester som används för att riskbedöma kemikalier (Wikipedia_b). Biklutamid, kandesartan och closapin beräknas av modellen som bygger på experimentella data som hormonstörande (eller hormonpåverkande). Dock klassificeras vissa läkemedel, som har hormonpåverkande effekt inte som hormonstörande av modellen. Detta gäller prednisolon och progesteron. Detta kan ha att göra med dessa ämnens klassificering i olika EU-regelverk. Av de läkemedel som identifierats får 17 en hög ekotox-klassificering av modellen och ett ämne, warfarin, får en hög *reach concern score*. Det innebär att warfarin redan är identifierad från europeiska kemikaliemyndigheten som bekymmersam ut ett miljötoxicitetsperspektiv.

En del av de ämnen som har identifierats och som tillhör gruppen plastadditiv har filtrerats bort då de har för höga värden i blankproverna. Ftalater har t.ex. en tendens att ansamlas i lösningsmedel om dessa kommer i kontakt med den omgivande luften. Därför saknas en del ämnen i den slutgiltiga listan, som kanske hade förväntats att hittas i proverna. Ftalater är dock en grupp ämnen som har studerats relativt utförligt och kan därför anses ha lägre prioritet i denna studie. Den enda ftalaten som identifierades med LC-MS och som inte hade höga bakgrundssignaler var dimetylftalat. I

LC-MS identifierades även mjukgöraren N-butylbensensulfonamid. I GC-MS identifierades också dietylftalat, den strukturellt liknande mjukgöraren diethylhexylterftalat samt N-butylbensensulfonamid. Ytterligare mjukgörare och flamskyddande ämnen (för plast) som identifierades var trikloropropylfosfat (TCPP), tributylfosfat, trietyl-citrat och trietylfosfat. UV-skyddsämnen som identifierades i LC-MS var 2,4-dihydroxybenzofenon (BP-1), hexylsalicylat, fenylbenzimidazol sulfonic acid, oxobenzon (PB-3), Avobenzon (1,3-Propanedion, 1-[4-(1,1-dimetyletyl)fenyl]-3-(4-metoxifenyl)-) (ECHA substanceinfo_d) och octocrylen, där octocrylen också identifierades i GC-MS. Avobenzon är under utredning både som PBT-ämne och som hormonstörande inom EU. En antioxidant som identifierades var 2,5-bis(1,1-dimetyletyl)-1,4-Benzenediol, som är ett misstänkt PBT-ämne samt väldigt toxiskt för vattenlevande organismer med långvarig effekt (ECHA substanceinfo_b). Även bisfenol-A och bisfenol-S identifierades.

Bland bekämpningsmedlen förekom både fungicider, pesticider och biocider. Bland fungicider identifierades fluconazol och fludixonil. Exempel på pesticider/insektssmedel är fipronil, DEET, och icaridin och exempel på biocider är 1,2-benzisothiazolinon. Två nedbrytningsprodukter till atrazin identifierades också, desetylatrazin. Färgämnen och ämnen som kan kopplas till färgämnen är t.ex. indigo (2-(1,3-dihydro-3-oxo-2H-indol-2-yliden)-1,2-dihydro-3H-indol-3-one) och o-anisidin.

Många kemikalier med diverse användningsområden, som t.ex. att de ingår i färgblandningar eller lacker, har tillskrivits gruppen industrikemikalier. Här ingår t.ex. ämnen som används vid gummitillverkning 1,3-difenylguanidin, N-cyclohexylcyclohexaneamin (dicyclohexylamin) och 6-PPD (4-(dimetylbutylamino)dipfenylamin) och även benzotriazol. Många ytaktiva ämnen identifierades till Schymanski index 4 och det är rimligt att denna grupp skulle kunna hittas då den har ett så brett applikationsområde och förekommer i många konsumtionsprodukter, t.ex. tvättmedel, diskmedel, rengöringsmedel, schampo, kosmetika etc. Många av dessa ämnen klassas som skadliga för akvatiska organismer med långvarig effekt. Dessbättre avskiljs de till hög grad i avloppsreningsverken, de flesta med uppskattningsvis >80 %. En trolig anledning till att identifikationerna i denna grupp har varit liten i LC-MS är att det inte har funnits tillräckligt många referensmasspektrum i de databaser som har utnyttjats eller att dessa inte har varit av tillräcklig kvalitet för att en god matchning har kunnat göras.

Ett antal ämnen har slutligen listats som övriga ämnen och naturprodukter. Där finns ämnen som kokaine och ethisterone som kan förekomma som olagligt använda ämnen, naturprodukter som genistein, daidzein, squalen, samt doftämnen som methyl dihydrojasmonat, linalool, α -terpienol och mentylacetat. Även en cyklisk siloxan, decametylcyclopentasiloxan (D5), och ett ämne som används för att katalysera blekningsreaktioner i t.ex. tvättmedel, tetracetyletylenediamin (TEAD), identifierades.

7.7 Ämnen på Priolistan

Ett speciellt fokus i arbetet skulle vara de ämnen som förekommer på Kemikalieinspektionens PRIO-lista (eller EU:s candidate list). Denna lista hade dock ingen uppgift om molekylvikt eller molekylformel för de ämnen som listas. Detta innebär ett stort kureringsarbete. Många av de ämnen som ingår på PRIO-listan är oorganiska salter, eller t.ex. olika salter utav PFAS-ämnena. Antalet listade ämnen på PRIO-listan är 454 (lista nedladdad med senaste tillägg 2022-06-20). Detta inkluderar 38 olika salter av perfluorhexansulfonsyra (PFHxS), 6 poster som beskriver GenX (HFPO-DA), 24 poster för heptylfenol (olika förgreningar på alkylkedjan), etc. Initialt antogs att PRIO-listans ämnen var med i Kemikalieinspektionens lista på prioriterade ämnen för analys i avloppsvatten. Detta stämmer för alla tillägg som är äldre än 2018-01-15. Dock har många av ämnena som har tillförts PRIO-listan efter 2019-06-16 inte tagits med

i screeningen. Bland dessa ingår UV-skyddsämnet 4-MBC, tris(2-metoxyetoxy) vinylsilane, 4-isododecylfenol och 2,2-bis(bromometyl)propan-1,3-diol (BMP). Vissa ämnen som har tillförts PRIO-listan i ett senare skede har dock funnits med i de listor som har sammanställts, t.ex. Lilial (CAS nr: 80-54-6), som är ett av de ämnen som också har tentativt identifierats i prover från handelsplatser. Den cykliska siloxanen D5 finns också på PRIO-listan och har identifierats i GC-MS-analyserna. Bisfenol A och o-Anisidin (CAS nr: 90-04-0) har också identifierats i proverna. Förutom dessa så har många av PFAS-ämnena varit inkluderade i den riktade analysen, t.ex. HFPO-DA, PFHxS, PFDA, PFNA samt PFOA.

Vid en genomgång av de poster som finns i PRIO-listan bedömdes 110 av 454 inte lämpliga för analys med varken GC-MS eller LC-MS (exempelvis metallsalter), 224 har varit inkluderade i suspect-listan eller bör ha detekterats med GC-MS och 79 har inte undersökts men bör ha detekterats om de hade funnits med på suspect-listan. Av de sistnämnda är 40 nonylfenoletoxylater och 9 är isomerer av 4-MBC.

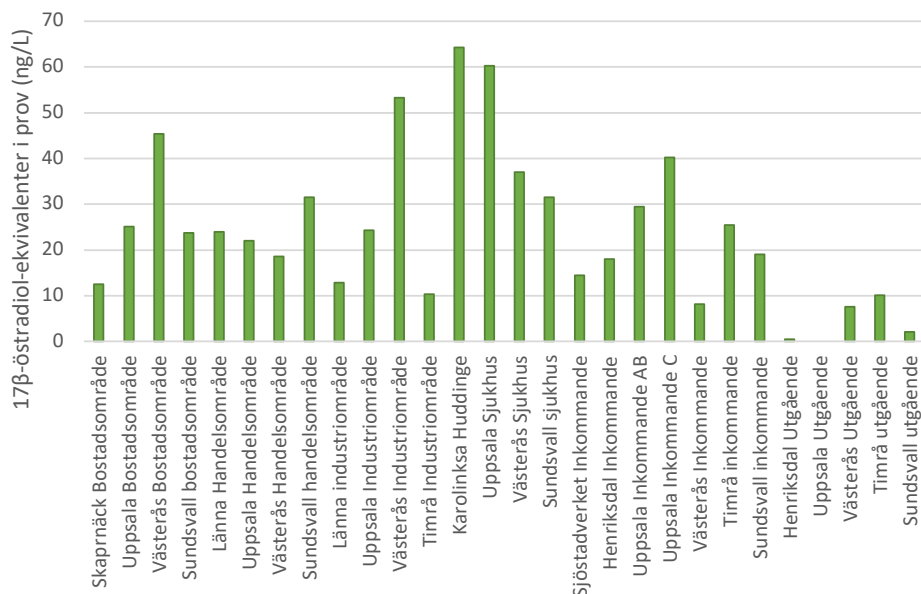
8 Tilläggssprojekt från Naturvårdsverket

Naturvårdsverket upphandlade ett tilläggssprojekt under 2023 då en tillförsel av medel till det aktuella projektet kunde medföra viktig information som skulle kunna användas som stöd för en eventuell framtida implementering av EU:s uppdaterade avlopps-direktiv (EU: 2024/3019). De medel som tillfördes projektet var ämnade att användas för följande experiment:

1. Mätning av östrogen effekt i de olika proverna från avloppsnäten och avloppsreningsverken. Detta utförs genom en YES-assay (*Yeast Estrogen Screen*) som innebär att en genmodifierad jästcellsstam som uttrycker en human östrogenreceptor utsätts för en spädserie av varje prov. Vid inbindning av kemiska ämnen till östrogenreceptorn uttrycks ett enzym, β -laktas, som konverterar ett substrat som ger upphov till en färgförändring och som kan relateras till den östrogena effekten i provet.
2. Inkluderandet av de utgående avloppsproverna i den kemiska screeningen. Detta kan ge en uppfattning om den relativa reduktionen av de identifierade ämnena över avloppsreningsverken.
3. En konfirmerande identifiering av tio kemiska ämnen genom inköp av standard-ämnen och analys av dessa med samma experimentella parametrar som proverna analyserades med.

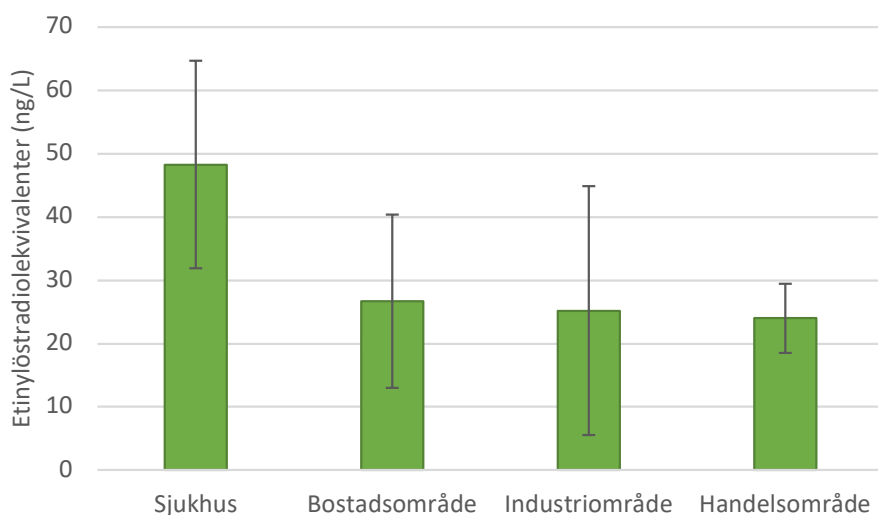
Analysen av den östrogena effekten har levererats till Naturvårdsverket i en delrapport, men en sammanfattning och tolkning av resultaten inkluderas även här.

I Figur 8.1 är det svårt att urskilja någon trend i data, men proverna från sjukhusen är generellt höga i förhållande till de övriga påverkanstyperna. Om ett medelvärde tas för dessa så framkommer denna skillnad tydligare, vilket visas i Figur 8.2. Sjukhusen är statistiskt högre än de övriga proverna ($P=0,05$) men då det endast har gjorts en provtagning vid ett enda tillfälle på året är detta något som mest kan ses som en indikation. En annan observation som kan göras är att avloppsreningsverken generellt åstadkommer en god reduktion av den hormonstörande effekten, särskilt för Stockholm och Uppsala, men detta kan också variera över tid.



Figur 8.1

Östrogen effekt, i ng/liter 17β-östradiol-ekvivalenter, uppmätt i de olika avloppsnäten, sorterade efter påverkanstyp för bostäder, handelsområden, industriområden, sjukhus, inkommande och utgående avloppsvatten.



Figur 8.2

Medelvärden och spridning (standardavvikelse) för de olika påverkanstyperna.

Den skattade reduktionsgraden av de identifierade ämnena har beräknats för mätningarna gjorda med LC-HRMS. För de ämnen som identifierades i GC-MS, som generellt är mer fettlösliga än de som identifieras i LC-MS, var reduktionen så pass stor att det endast var få substanser som gav upphov till signaler i de utgående proverna. Genom att analysera den procentuella reduktionen över reningsverken baserat på medelvärden för inkommande och utgående avloppsvatten kunde följande iakttagelser göras. Mer än hälften av ämnena reducerades till mer än 50 %. För 41 av 196 ämnen kunde en negativ reduktion, eller ingen reduktion alls, skattas med avseende på medelvärdet. Det ämnet som uppvisade störst negativ reduktion var propylparaben, vilket berodde på ett jämförelsevis högt värde uppmätt i det utgående avloppsvattnet från Uppsala. Detta kan betraktas som en outlier och ämnet uppvisar generellt sett låga signaler i analyserna, vilket skulle kunna tyda på att den inte är ett ämne att fokusera på.

Baserat på identifikationerna som gjordes i LC-HRMS valdes tio ämnen ut där referenssubstanser (kemiskt rena standarder) skulle köpas in för att positivt identifieras. Dessa ämnen presenteras i Tabell 8.1. Urvalet av ämnen gjordes utifrån användningsområden för de olika substanserna. Tre stycken ämnen används vid gummitillverkning och skulle kunna spridas från antingen partiklar som frigörs från däck vid användning,

från ytor som belagts med material innehållande däck eller vid annan verksamhet som arbetar med syntetiskt gummi. Dessa är 1,3-difenylguanidin, dicyclohexanamin och 4-(dimetylbutylamino) difenylamine (6PPD). Det sist nämnda av dessa ämnen har under senare år uppmärksammats då en oxidationsprodukt av detta ämne, 6PPD-Q, visats vara mycket toxiskt för vissa laxfiskar (Tian et al. 2022). Andra ämnen som har uppmärksammats under senare år är plastadditiv. Detta är en mycket stor grupp av ämnen och t.ex. kan vara antioxidanter som ska förhindra nedbrytning av plasten genom reaktioner med syret i luften, UV-skyddsämnen som gör plasten mer motståndskraftig mot ultraviolett strålning, mjukgörare som gör att plasten har rätt strukturella egenskaper samt flamskyddsmedel. UV-skyddsämnen förekommer även i en rad konsumtionsprodukter, t.ex. solkrämer. Fyra UV-skyddsämnen valdes ut: 2,4-dihydroxybenzophenone (BP-1) som ECHAs substance infocard är toxisk för akvatiska organismer med långvarig effekt, oxobenzon (BP-3) som enligt slutsatserna från EU:s expertgrupp för konsumentssäkerhet (SCCS, 2021) är ett misstänkt hormonstörande ämne och fenylbensimidazolsulfonsyra (ECHA substanceinfo_e). Ytterligare ämnen är ε-caprolactam, som är en monomer som används vid tillverkning av nylon och det ytaktiva ämnet Surfynol 104. Två insektsmedel valdes också ut, DEET och icaridin, som genom sitt användningsområde är biologiskt aktiva. Dessa ämnen stämades av med Naturvårdsverket och köptes in. Andra standardämnen som fanns på IVL inkluderades även, t.ex. läkemedel, hormoner och bisfenol A. I Tabell 8.1 redovisas samtliga ämnen som har identifierats positivt, och således kan tillskrivas ett Schymanski-index på 1.

Tabell 8.1

De ämnen som har positivt identifierats i denna studie och verifierats med referenssubstans.

Namn	Molekylvikt	ESI polaritet	För standardlösning		I prover		m/z-avvikelse (ppm)
			m/z molekylljon	Retentions-tid	m/z molekylljon	Retentions-tid	
1,3-Difenylguanidin	211,26	+	212,11832	8,6	212,11839	8,5	-0,33
2,4-Dihydroxybensofenon	214,22	+	215,0703	17,1	215,0704	16,9	-0,46
Surfynol 104	226,36	+	227,20047	21,3	227,20064	21,3	-0,75
Bensofenon-3/oxobenzon	228,24	+	229,08606	19,6	229,08621	19,5	-0,65
Benzotriazole	119,12	+	120,05589	8,9	120,0557	9,1	1,58
Cyclohexanamin	181,32	+	182,19048	10,3	182,19038	10,1	0,55
DEET	191,27	+	192,13831	16,4	192,13846	16,2	-0,78
ε-Caprolactam	113,16	+	114,09175	7,0	114,09171	7,1	0,35
4-(dimetylbutylamino)-difenylami (6PPD)	268,4	+	269,20108	15,5	269,20126	15,1	-0,67
o-anisidin 2-Metoxyanilin	123,15	+	124,07586	3,9	124,076	4,6	-1,13
Icaridin	229,32	+	230,17523	17,3	230,17528	17,6	-0,22
Amisulprid	369,17231	+	370,17963	7,6	370,17944	7,6	0,51
Atenolol	266,16134	+	367,17041	5,3	367,17029	5,2	0,33
Kandesartan	440,15987	+	441,16699	17,3	441,16714	17,1	-0,34
Citalopram	324,16381	+	325,17117	12,9	325,1714	12,4	-0,71
Diklofenak	295,01675	+	296,02408	19,9	296,0239	19,8	0,61
Fluconazol	306,10417	+	307,11154	10,8	307,11151	10,9	0,10
Irbesartan	428,23981	+	429,24008	17,1	429,23972	17,2	0,84
Losartan	422,16224	+	423,16956	16,9	423,16965	16,7	-0,21
Metotrexat	454,17162	+	455,17844	8,1	455,17883	8,1	-0,86
Metoprolol	267,18341	+	268,19077	9,8	268,19064	9,6	0,48
Naproxen	230,09434	+	231,10146	17,7	231,1017	17,5	-1,04
Oxazepam	286,05094	+	287,05832	16,5	287,05817	16,3	0,52

Namn	Molekyl- vikt	ESI polaritet	För standardlösning		I prover		m/z-avvi- kelse (ppm)
			m/z molekyljon	Retentions-tid	m/z molekyljon	Retentions- tid	
Paracetamol	151,06298	+	152,07047	5,6	152,07014	5,8	2,17
Propranolol	259,15736	+	260,16458	12,6	260,1647	12,1	-0,46
Sertralín	305,08115	+	306,08127	16,1	306,08118	15,5	0,29
Sulfametoxazol	253,05227	+	254,05956	9,2	254,0596	9,4	-0,16
Tramadol	263,1887	+	264,19595	9,6	264,19589	9,4	0,23
Trimetoprim	290,13791	+	291,14526	7,5	291,1452	7,5	0,21
Venlafaxin	277,20422	+	278,21161	12,1	278,2114	11,6	0,75
2,4-Dihydroxybensofenon	214,22	-	213,0548	16,8	213,05525	16,2	-2,11
Bensofenon-3/oxybenzon	228,24	-	227,07086	19,6	227,07098	19,1	-0,53
Icaridin	229,32	-	228,16026	16,8	228,16005	16,1	0,92
Fenylbensimidazol sulfonsyra	274,3	-	273,034	9,5	273,034	9,7	0,00
Amisulprid	369,17234	-	368,16504	9,0	368,16507	9,1	-0,08
Diklofenak	295,01691	-	294,00974	16,8	294,00952	16,1	0,75
Fluconazol	306,10417	-	305,09695	10,9	305,09695	10,9	0,00
Furosemid	330,00785	-	329,00067	11,1	329,00052	10,9	0,46
Hydroklortiazid	251,15186	-	295,95724	5,6	295,9574	6,0	-0,54
Ibuprofen	206,13003	-	205,12265	17,3	205,12265	16,2	0,00
Irbesartan	428,23251	-	427,22528	17,4	427,22501	16,7	0,63
Losartan	422,16254	-	421,15533	16,2	421,15527	15,4	0,14
Naproxen	230,09386	-	229,08664	13,9	229,08656	13,4	0,35
Oxazepam	286,05102	-	285,04385	16,5	285,04364	15,8	0,74
Sulfametoxazol	253,0521	-	252,0448	6,6	252,04483	6,9	-0,12
17-alpha-Etynylöstradiol	296,17755	-	295,17047	18,4	295,17032	18,9	0,51
BPA (Bisfenol A)	228,11463	-	227,10756	16,7	227,10721	16,0	1,54

9 Diskussion

9.1 Generella observationer

Projektets syfte var att undersöka om det förekom olika mönster av kemikalier från olika påverkanstyper ute på avloppsnätet. En mängd olika exempel på detta har lyfts vid presentationen av resultaten, t.ex. UV-absorberande ämnen som förekommer mer från bostäder, samt vissa antibiotika, läkemedel och en biocid som har större koncentration från sjukhus. I de mätningar som gjordes med GC-MS skilde sig mönstren på de ämnen som hade höga signaler mycket för de olika påverkanstyperna. En effekt som kan ha bidragit till detta mönster är att bostadsområdena har haft högre signaler både i GC-MS och LC-MS-analyserna. I GC-MS-mätningarna stack Uppsala ut med väldigt höga signaler för både bostadsområdet och handelsplatsen. Detta kan ju bero på låg tillförsel av grävatten eller att något annat har påverkat provtagningen. Trots att prover endast tagits vid ett tillfälle och att en blandning av tidsstyrd och flödesproportionell provtagning har utförts så framträder mönster hos kemikalierna som är kopplat till påverkanstyp. Detta gäller naturligtvis inte alla ämnen som har identifierats utan många har en tillförsel till avloppssystemet som inte kan kopplas till en viss påverkanstyp. Under planeringsfasen för projektet lyftes även att både industriområden och handelsplatser kan skilja sig åt med olika typer av verksamhet, men VA-organisationerna ansträngde sig att hitta områden liknande varandra så mycket det praktiskt gick.

9.2 Identifiering av kemiska ämnen

Det var många identifieringar som inte kunde tas hela vägen genom processen till en god säkerhet i identifieringen och som således förblir osäkra. Av de 192 ämnen som från början hade en låg säkerhet i LC-MS kunde säkerheten för 87 förbättras genom att kontrollera att matchningen med referensspektra var god, att retentionstiden i analysen var rimlig, etc. Detta är inte ovanligt för ett *non-target*- eller *suspect screening*-projekt då det är arbetskrävande att göra konfirmerande experiment och att granska den stora mängden data som genereras. Tillsammans med identifieringarna i GC-MS är det ändå fler än 200 ämnen som har identifierats motsvarande nivå två på Schymanski-skalan eller bättre. Det kan finnas flera anledningar att identifieringarna inte har lyckats. En anledning kan vara att listan på prioriterade ämnen var för lång och borde ha delats upp i olika mindre delexperiment, där instrumentets mjukvara kan programmeras att inte söka efter redan identifierade ämnen. Då får instrumentet mer tid att samla data för en eventuell identifieringsprocess. En annan anledning kan vara att endast en positiv och en negativ massa användes för att söka efter ämnen. Vissa ämnen bildar hellre addukter med t.ex. ammoniumjoner än vätejoner, men vi har endast inkluderat vätejoner för att *suspect*-listan inte ska bli för lång. En tredje anledning kan vara att för få databaser av MS²-spektrum användes för att hitta överensstämmande spektrum. När den tänkta LC-MS-metoden testades med en lista på ca 150 läkemedel vid testerna av uppberedningsmetoden så hittades flera läkemedel i dessa försök som inte kunde hittas när den längre listan användes, även om de fanns representerade på bägge listorna.

En annan orsak till att träffsäkerheten i identifieringar inte blev bättre kan vara själva sökningen och prioriteringen av kemiska ämnen att inkludera på *suspect*-listan. Den ursprungliga hypotesen var att det skulle gå att hitta en lista av gemensamma kandidater om man jämförde ett antal listor som hade tagits fram i tidigare projekt. Detta visade sig vara svårare än väntat. Dels fanns det många listor där informationen inte var tillräckligt utförlig för att den skulle kunna ligga som grund för vår lista utan att kräva väldigt stora

arbetsinsatser. PRIO-listan är dessvärre en av dessa, där information om molekylvikten, summaformeln och molekylstrukturen saknas för många ämnen. Dels var det nästan inget överlapp mellan de listor som valdes ut för att hitta de gemensamma ämnena. PRIO-ämnena kom med via de andra listorna som inkluderades, men inte de senaste tilläggen till PRIO-listan.

9.3 Prioritering av ämnen för uppströmsarbete

Farobedömningar av de kemikalier som inkluderades på *suspect* listan gjordes på två olika sätt. Först gjordes en beräkning av möjlig toxicitet baserat på molekylstrukturen. Sedan gjordes även en datamining där experimentella data identifierades och som sedan användes på den sammanslagna listan av prioriterade ämnen. Detta medförde två möjligheter: att kunna arbeta med en delmängd av den prioriterade listan och att kunna ge både information om att ämnet förekommer och vilken toxisk effekt det kan förväntas ha. Att det dessutom har genererat data som kanske ger information om var i samhället som ämnet tillförs till avloppsledningsnätet bidrar till en förbättrad möjlighet att prioritera ämnen i uppströmsarbetet.

Figur 7.10, 7.11 och 7.12 eller tabellerna i Bilaga C kan användas för en startpunkt för arbete med prioriterade ämnen. Flera av dessa ämnen är positivt identifierade genom Naturvårdsverkets tilläggsprojekt. Det är ämnen som har hög toxisk effekt och där finns även klassning gällande hormonstörande effekt. Ett stöd i prioriteringsprocessen kan även vara att utvärdera ämnena baserat på den skattade reningsgraden över reningsverket. Det är dock stor risk att ämnena eventuellt inte bryts ned via mikrobiell metabolism utan att de snarare avskiljs till följd av hur hydrofoba ämnena är. Detta kan medföra att de hamnar i slammet, som inte är en önskvärd situation om slammet ska spridas på åkermark.

9.4 Resultat från mätning av PFAS, metaller och östrogen effekt

De resultat som inte är direkt knutna till screeningdelen i projektet var analys av PFAS, metaller och hormonstörande effekt i samtliga prover. Resultaten från PFAS-analysen var svåra att tolka då koncentrationerna i de flesta fall var relativt låga och en tydlig struktur bland data inte kunde observeras. Däremot visade analyserna även att i vissa prover så var det lite högre halter av 6:2-PAP, 8:2-PAP och 6:2-diPAP. När det gäller metallanalyserna så fanns det indikationer att kobolt, nickel och bly spreds mer till avloppssystemet från industriområden än från andra påverkanstyper, men detta kan behöva följas upp med flera mätningar för att verifieras eller med inventering av verksamheter. Resultaten från testerna av östrogen hormonstörande effekt visade att sjukhusen kan ha en något högre påverkan än bostäder, industriområden och handelsplatser. En hypotes som framlades innan projektet startade var att bidrag från hormonstörande ämnen som emitteras av elektroniska produkter, t.ex. ftalater, organofosfater, UV-skyddsämnen etc. skulle kunna göra att handelsplatserna skulle ha ett högre bidrag, men detta verkar inte vara fallet. Möjliga förklaringar till att sjukhusen har något högre hormonstörande effekt kan vara att halterna av endogena hormoner är höga till följd av att det är en arbetsplats som är både personalintensiv och som dessutom behandlar stora antal patienter. Det finns även många läkemedel som påverkar hormonsystemet, antingen genom läkemedlets verkan eller som en önskad bieffekt. I figur 7.12 skulle läkemedlet bicalutamid kunna leda till en sådan effekt. Läkemedel är dock, som tidigare diskuterats, svåra att hantera i uppströmsarbetet. På sjukhusen är det även troligt att det används stora mängder cortisol-innehållande salvor (hydrokortison) där det aktiva ämnet är ett steroidhormon (glukokortikoid).

9.5 Användningsområden för identifierade ämnen

I rapporten har det gjorts ett arbete att försöka gruppera de olika ämnena efter användningsområden för att ytterligare ge ett stöd till prioriteringen av ämnen i uppströmsarbete. I denna screening har det identifierats fem olika ämnen som har trolig användning inom gummitillverkning, men som troligen även har andra spridningsvägar. Dessa är acceleratorerna 1,3-difenylguanidin och N-cyclohexyl-cyclohexanamin, antioxidanterna 6PPD och 2,5-bis(1,1-dimetyletyl)-1,4-benzenediol samt processkemikalien N,N-dimetyl-p-fenylenediamin. Både N-cyclohexyl-cyclohexanamin, även känd som dicyclohexylamin (DCHA) och 6PPD har studerats i en tidigare svensk screeningstudie (Brorström-Lundén 2012) visat sig ha stor spridning i miljön. Bland industrikemikalierna som har en bredare användning i samhället finns tillsatssämnen till färger, lacker och lim: 1-butyl-2-pyrrolidinon, 2-fenoxyethanol, 2-butoxyetanol, 2-furanmetanol. Den sistnämnda av dessa är en misstänkt karcinogen.

Plastadditiv är en annan potentiell grupp för prioritering. Ftalater är en grupp mjukgörare i plaster som har studerats ett tag, men i denna screening så har vi identifierat även N-butylbenzenesulfonamid och dietylhexylterftalat (1,4-bensenedikarboxylsyra, bis(2-etylhexyl) ester) som är ämnen som inte studerats lika utförligt. UV-skyddsämnen har användning i både plaster, färger och konsumtionsprodukter som kosmetika och solkrämer. Flera UV-skyddsämnen identifierades: 2,4-dihydroxybenzofenon (BP-1), fenylobenzimidazol sulfonsyra, oxybenzon (BP-3), hexylsalicylat avobenzon och octocrylen. Antioxidanter är en annan grupp av ämnen som även förekommer i plaster.

En rad olika bekämpningsmedel har identifierats i denna screening och många av dessa är ämnen som är toxiska för att uppnå den önskade verkan. Insektsmedel som DEET, icaridin, fipronil, biocider som 2-benzothiazolinon, propylparaben, och fungicider som fluconazol och fludixonil är exempel på ämnen som har identifierats. Endast ett färgämne, indigo, samt en kemikalie som kan förekomma som nedbrytningsprodukt eller orenhet i pigment, o-anisidin (Wikipedia_c) har kunnat identifieras. Bägge dessa ämnen hamnar högt i faroklassificeringen och o-anisidin är ett karcinogent ämne (ECHA substanceinfo_f).

10 Slutsatser och råd

Sammantaget har projektet uppnått syftet att utvärdera om olika källor till kemiska ämnen ger upphov till olika typ av kemisk belastning. Vissa skillnader i kemikalier samt skillnader i hur starka signaler som har hittats i de olika provtyperna har identifierats, även om många kemikalier i avloppssystemet har en tillförsel från många källor, enligt resultaten i denna rapport. Identifieringen av lämpliga provtagningsplatser för att generera prover som har påverkan från en viss typ av verksamhet har i sig ett värde för framtida studier av liknande karaktär.

Ett stort antal ämnen, fler än 200, har identifierats med god säkerhet i avloppsvatten. Att få ämnen identifierades med bäge teknikerna (LC-MS och GC-MS) visar att det är fördelaktigt att använda en kombination av komplementära tekniker för att öka antalet kemiska ämnen som möjligtvis kan identifieras. För en rad ämnen har identiteten verifierats genom analys av standardsubstanser. Att dessa skulle visa sig vara falska positiva identifieringar är högst osannolikt, men för gruppen som har identifierats med ett Schymanski-index på två kan det fortfarande finnas en liten risk.

10.1 Stöd för uppströmsarbete

Resultaten i rapporten skulle kunna användas till att stödja framtida prioriteringar för strategiska uppströmsinsatser. Riskklassificeringen av ämnen som har gjorts och utvärderingen av potentiell reduktion över reningsverket kan ge stöd i prioritering av kemikalier för uppströmsarbete, även om reduktionen över reningsverken enbart är studerad vid ett tillfälle och med signalintensitet och inte koncentrationer. Även arbetet som har gjorts för att klassificera ämnen som tillhörande olika kategorier av ämnen kan förhoppningsvis underlätta prioriteringen.

Ämnena kan angripas enskilt baserade på att de har en hög skattad faroklassning, tex bisfenol A, indigo, 1,3-difenylguanidin, o-anisidin eller Surfynol 104. Det går också att utgå från grupper av ämnen som har ett specifikt användningsområde, t.ex. gummi-relaterade ämnen, plastadditiv eller bekämpningsmedel. Inom gruppen plastadditiv finns såväl UV-skyddsämnen, mjukgörare och antioxidanter. Flera av dessa ämnen har användning i en lång rad produkter, tex färger och kosmetika. Detta gör att användningen blir bred i samhället och om ämnena då har en hög riskklassning eller uppvisar en hormonstörande effekt kan det vara viktigt att försöka minska tillförseln av dessa ämnen till avloppsnätet.

Figurerna 7.11 och 7.12 samt tabellerna D.1–D.8 kan studeras för att hitta ämnen som kan undersökas närmare. I den stödjande informationen som publiceras i en separat Excelfil parallellt med rapporten kan fler kandidatämnen identifieras.

11 Framtida forskningsbehov

I denna studie gjordes endast provtagning vid ett tillfälle och i vissa fall med tidsstyrd provtagning vilket inte ger ett bra mått på hur medelvärdena ser ut över ett år. Ur det perspektivet kan denna studie ge mer av en indikation än en helt representativ bild. Vid närmare studier av en viss påverkanstyp, eller uppföljande studier, skulle budgeten för provtagningen kunna ökas och prover tas vid flera tillfällen. En *suspect target*-karaktärisering av prover är dock tidskrävande varför det kommer att finnas en avvägning mellan hur många prover som kan tas och hur utförlig karaktärisering som kan göras.

Eftersom en *suspect* screening-studie utgår ifrån en förutbestämd lista av ämnen som har skapats för ett visst syfte, t.ex. utvärdering av troliga riskämnen i avloppsnätet, så är den listan som används begränsande för vilka resultat som kan uppnås. I fallet med PRIO-ämnena i denna studie så kom de senast tillagda PRIO-ämnena inte med i listan och deras eventuella förekomst kunde därför inte studeras. I en framtida studie bör mer höjd tas för den slutgiltiga kurreringen av *suspect*-listan för att undvika denna typ av misstag. Det kan även vara fördelaktigt att fokusera på en kortare lista av färre ämnen, eller modifiera själva analysförfarandet för att stegvis utvärdera förekomsten av ämnen i proverna genom upprepade analyser. Detta skulle dock göra själva analyserna och utvärderingen mer omfattande.

Det skulle vara värdefullt att föra över screeningmetodiken till en kvantitativ analys genom att för varje ämne bestämma joniserings-, kollisions- och andra analys-specifika parametrar för en grupp av prioriterade ämnen för att kunna generera riktiga mätdata för dessa ämnen. Screeningstudien som har genomförts här är en bra grund för fortsatt utveckling av analysmetodik. Det som då skulle kunna nås är en s.k. *target-screen* som kan ge mer detaljerad information.

När det gäller kopplingen till framtida uppströmsarbete så kan det finnas ett utredningsbehov för att förstå vilka ämnen som har större potential att kunna ersättas eller hur dess spridning till avloppsnätet kan minskas. För läkemedel har detta länge varit en diskussionsfråga där det är svårt att komma framåt om hälsoynnan ska vägas mot miljöpåverkan. Risken för antibiotikaresistens, eller även antimikrobiell resistens, är ytterligare en faktor som påverkar denna diskussion. Kan innovativa lösningar hittas för att minska påverkan från läkemedel som inte kan bytas ut, till exempel *pee-poo*-påsar som kan användas vid tillfällen då specifika läkemedel utnyttjas och som skickas för destruktion snarare än att ämnena hamnar i avloppsnätet. Även andra ämnesgrupper kan vara svåra att begränsa användningen av, t.ex. konserveringsmedel eller UV-skyddsämnen som tillsätts till färger, lacker eller andra produkter. Om man kan identifiera det minst miljö- eller hälsofarliga av dessa ämnen så kan de bästa alternativen föreslås.

Referenser

Alygizakis N.A. et al. (2019). Characterization of wastewater effluents in the Danube River Basin with chemical screening, in vitro bioassays and antibiotic resistant genes analysis. *Environment International*, vol. 127, ss. 420-429, <https://doi.org/10.1016/j.envint.2019.03.060>

Arp H.P.H. och Hale S.E. (2019). REACH: Improvement of Guidance and Methods for the Identification and Assessment of PMT/vPvM Substances.. Available online: <https://www.umweltbundesamt.de/en/publikationen/reach-improvement-of-guidancemethods-for-the> (accessed on 23 November 2020).

Blum K.M. et al. (2018). Persistence, mobility and bioavailability of emerging organic contaminants discharged from sewage treatment plants. *Science of the Total Environment*, vol. 612, ss. 1532–1542.

Blum K.M. et al. (2017). Non-target screening and prioritization of potentially persistent, bioaccumulating and toxic domestic wastewater contaminants and their removal in on-site and large-scale sewage treatment plants. *Science of the Total Environment*, vol. 575, ss. 265–275.

Brorström-Lundén E., Remberger M., Kaj L., Hansson K. et al. (2012). *Screening of benzothiazoles, benzenediamines, dicyclohexylamine and benzotriazoles*. IVL Svenska Miljöinstitutet, Rapport B2023.

ECHA(a) (2019). Candidate List of Substances of Very High Concern for Authorisation. European Chemicals Agency (ECHA). <https://echa.europa.eu/es/candidate-list-table> (accessed on 3 June 2021).

ECHA (b) (2019). List of Substances Included in Annex XIV of REACH (“Authorisation List”). European Chemicals Agency (ECHA). <https://echa.europa.eu/es/authorisation-list> (accessed on 3 June 2021).

ECHA (2024). Guidance on the application of the CLP criteria: guidance to Regulation (EC) No 1272/2008 on classification, labelling and packaging (CLP) of substances and mixtures. LU: Publications Office; [cited 2024 Jun 24]. Available from: <https://data.europa.eu/doi/10.2823/74224>

ECHA substanceinfo_a, N,N-dimethyl-p-phenylenediamine, <https://echa.europa.eu/sv/substance-information/-/substanceinfo/100.002.552>

ECHA substanceinfo_b, 2,5-bis(1,1-dimethylethyl)-1,4-Benzenediol, <https://echa.europa.eu/sv/substance-information/-/substanceinfo/100.001.674>

ECHA substanceinfo_c, 4-(1,1-dimethylethyl)-1,2-benzendiol, <https://echa.europa.eu/sv/substance-information/-/substanceinfo/100.002.413>

ECHA substanceinfo_d, Avobenzon, <https://echa.europa.eu/sv/substance-information/-/substanceinfo/100.067.779>

ECHA substanceinfo_e, phenylbenzimidazole sulphonic acid, <https://echa.europa.eu/sv/substance-information/-/substanceinfo/100.044.078>

ECHA substanceinfo_f, o-Anisidine, <https://echa.europa.eu/sv/substance-information/-/substanceinfo/100.001.785>

EU 2013/39 Directive of the European Parliament and of the Council of 12 August 2013 amending Directives 2000/60/EC and 2008/105/EC as regards priority substances in the field of water policy Directive. <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2013/39/oj>

EU 2024/3019: Europaparlamentets och rådets direktiv av den 27 november 2024 om rening av avloppsvatten från tätbebyggelse.

Eriksson E. et al. (2003). Household chemicals and personal care products as sources for xenobiotic organic compounds in grey wastewater. *Water SA*, vol. 29, nr. 2, ss. 135-146.

EPA (2019). Chemical Substances Undergoing Prioritization. Available online: <https://www.epa.gov/assessing-and-managingchemicals-under-tsca/prioritizing-existing-chemicals-risk-evaluation#final> (accessed on 15 September 2021).

Finckh S., Beckers L.M., Busch W., Carmona E., Dulio V., Kramer L. et al. (2022). A risk based assessment approach for chemical mixtures from wastewater treatment plant effluents. *Environment International*, vol. 164, ss. 107234.

Hansson K., Allard A-S. och Lexén J. (2017). *Screening av befintliga data avseende halter av oönskade substanser i spillvatten*. IVL Svenska Miljöinstitutet, Rapport B 2295.

Hollender J., Schymanski E.L., Ahrens L. et al. (2023). NORMAN guidance on suspect and non-target screening in environmental monitoring. *Environmental Science Europe*, vol. 35, ss 75. <https://doi.org/10.1186/s12302-023-00779-4>

Joint Danube Survey <http://www.danubesurvey.org/jds4/about>

KEMI (2019) DOI: 10.5281/zenodo.2653566

KEMI (2021). *Kartläggning av farliga kemiska ämnen i livsmedelsförpackningar av papper och kartong - En del i uppdraget om kartläggning av farliga ämnen 2017–2020*. Kemikalieinspektionen, Rapport 21/5.

Montes R. et al. (2022). Screening of Contaminants of Emerging Concern in Surface Water and Wastewater Effluents, Assisted by the Persistency- Mobility-Toxicity Criteria. *Molecules*, vol. 27, ss. 3915. <https://doi.org/10.3390/molecules27123915>

Neumann M.S.I. (2019). Protecting the Sources Of Our Drinking Water: The Criteria for Identifying Persistent, Mobile, and Toxic (PMT) Substances and Very Persistent, and Very Mobile (vPvM) Substances Under the EU Chemical Legislation REACH. UBA Texte 127/2019; German Environmental Agency (UBA), ISSN 1862-4804. <https://www.umweltbundesamt.de/en/publikationen/protecting-the-sources-of-our-drinking-water-the> (accessed on 2 November 2021).

NITE (2024) <https://www.nite.go.jp/data/000064112.xlsx>

NORMAN (2017).. Europe-wide Prioritisation of 966 NORMAN Substances as of 25 July 2016–Combined freshwater/marine water with Data from 2009–2016. <https://www.norman-network.com/nds/prioritisation/> (accessed on 18 June 2021).

NOR-water <http://nor-water.eu/en/home/>

OSPAR. (2010) OSPAR List of Chemicals for Priority Action; OSPAR, London, UK. <https://www.ospar.org/workareas/hasec/hazardous-substances/priority-action> (accessed on 3 June 2021).

Paxéus N. och Schröder H.F. (1996). Screening for Non-Regulated Organic Compounds in Municipal Wastewater in Göteborg, Sweden. *Water Science and Technology*, vol. 33, nr. 6, ss. 9-15.

Rüdel H., Körner W., Letzel T., Neumann M., Nödler K. och Reemtsma T. (2020). Persistent, mobile and toxic substances in the environment: A spotlight on current research and regulatory activities. *Environmental Science Europe*, vol. 32, ss. 1–11.

SCCS (Scientific Committee on Consumer Safety) (2021). Opinion on Benzophenone-3 (CAS No 131-57-7, EC No 205-031-5), final version of 30-31 March 2021, SCCS/1625/20.

Schlabach M. et al. (2017). *Suspect screening in Nordic countries Point sources in city areas*. TemaNord 2017:561, <http://dx.doi.org/10.6027/TN2017-561>.

Schulze S., Zahn D., Montes R., Rodil R., Quintana J.B., Knepper T.P., Reemtsma T. och Berger U. (2019). Occurrence of emerging persistent and mobile organic contaminants in European water samples. *Water Research*, vol. 153, ss. 80–90.

Schymanski E.L., Junho J., Gulde R., Fenner K., Ruff M., Singer H.P. och Hollender J. (2014). Identifying Small Molecules via High Resolution Mass Spectrometry: Communicating Confidence. *Environmental Science & Technology*, vol. 48, nr. 4, ss. 2097-2098, DOI: 10.1021/es5002105

Tian Z. et al. (2022). A ubiquitous tire rubber-derived chemical induces acute mortality in coho salmon. *Science*, vol. 371, ss. 185-189.

Vandalf <https://chemicalfingerprinting.com/projects/vandalf/>

Wikipedia_a Metronidazole - Wikipedia

Wikipedia_b Ciprofloxacin - Wikipedia

Wikipedia_c <https://en.wikipedia.org/wiki/O-Anisidine>

Bilagor

Bilaga A Beskrivning av alternativ prioriteringsmetod och de kemiska analyserna

Alternativ prioriteringsmetod

En initial jämförelse mellan de olika listorna utfördes med dataverktyget KNIME, där ett arbetsflöde kan programmeras som extraherar givna kolumner ur olika Excelark och jämföra dessa med varandra. Kemiska namn och CAS-nummer används för att identifiera kemiska ämnen som förekom flera gånger i kemikalielistorna från de tre källorna. CAS-nummer är nummerkombinationer ursprungligen tilldelade kemiska ämnen eller blandningar av kemiska ämnen av Chemical Abstract Services, som samlade sammanfattningar av artiklar för att underlätta informationssökning. Tyvärr saknas en specifik koppling mellan ett kemiskt ämne och ett CAS-nummer. Ett och samma ämne kan vara kopplat till fler CAS-nummer om det tex förekommer som blandningar eller reaktionsprodukter. Arbetsflödet var inställt på att ignorera alla avstavnings- och symboleffekter i texterna. Tyvärr resulterade denna övning i ett väldigt begränsat antal gemensamma ämnen på de tre listorna. Som beskrivits ovan beslutades att gå vidare och använda samtliga ämnen på alla listor efter att dubbletter avlägsnats.

Ett försök till prioritering av de kemiska ämnena utifrån deras förväntade toxicitet gjordes dock med beräkningsmodeller i onlineverktyget VEGA. De data som behövs för att göra beräkningar i VEGA är s.k. *Simplified Molecular Input Line Entry System* (SMILES) vilket är en kemisk notation som innehåller information om kemisk struktur. VEGA-noden för KNIME (<https://www.vegahub.eu/download/vega-qsar-for-knime/>) användes för att utföra beräkningarna för de ekotoxikologiska effekter för kemikalier för vilka ekotoxininformation saknades, såsom de kemikalier som samlats in i den lista som Kemikalieinspektionen tillhandahåller. VEGA i KNIME innehåller olika modeller från VEGA version 1.1.1 för olika effektmått inklusive karcinogenicitet, mutagenicitet, utvecklings-/reproduktionstoxicitet, hudsensibilisering, östrogenreceptorbindning, fisk akuttoxicitet LC₅₀, *Daphnia magna* akuttoxicitet LC₅₀ (48h), persistens i sediment, jord och vatten, biologisk nedbrytbarhet, biokoncentrationsfaktorer (BCF) samt okta-nol-vattenfördelningskoefficient (logP).

Efter att ha extraherat kemikaliers faroprofiler från experimentella databaser och beräkningsverktyg tillämpades ett diskret poängsystem från 0 till 2 på ett brett spektrum toxiska effekter och farokategorier (*toxicity endpoints*) för människor och miljö över kemikalier i valda listor där den högsta poängen (2) motsvarar den högre nivån av toxicitet och/eller farliga egenskaper. Beroende på vilken information som fanns tillgänglig från de olika publikationerna användes olika endpoints i detta system individuellt och separat för varje lista. Kriterier som karcinogenicitet/mutagenicitet, Cramer-klassificering och persistens samt andra kriterier för kemikalier tillhandahållna av Montes et.al (2022) utnyttjades. Andra kriterier som används för kemikalierna, som fanns i listan som tillhandahålls av (Finckh 2022a) inkluderar sådana som är viktiga för ekotoxicitet: PNEC-värde, biologisk nedbrytning och BCF-nivå. En slutgiltig riskpoäng aggregerades över alla kriterier, och kemikalierna med de högsta poängen filtrerades ut och prioriterades för studien.

Dessutom tilldelades kemikalierna i listan som tillhandahålls av KEMI fyra användningsgrupper: jordbruk, urban/mänsklig, industri och laboratorium baserat på tillgänglig information om deras användningssektor och de produkter de kan användas för. Kemikalierna som filtrerades i kategorin "Urban/människa" prioriterades högre i vår prioriteringslista eftersom de är mer relevanta för denna forskning.

Efter att ha tillämpat poängsystemet, filtrerat ämnena med högst farliga poäng, och även beaktat relevant produkttyp, sammanställdes en lista med 722 ämnen i vår prioriteringslista att börja screeningen med. Denna lista användes dock inte vid själva analyserna då den lista som togs fram genom prioriteringen med avseende på tillgängliga experimentella data ansågs mer applicerbar.

Analysmetod GC-MS

Instrumentet som användes vid analysen bestod av en GC-MS med en 5977B gas-kromatograf, en 7683B automatisk injektor och en 5975C masspektrometer (Agilent Technologies, Palo Alto, CA, USA). Jonkällan och detektorn var satta till 250 °C respektive 200 °C, samt användes elektronjonisering (EI) med 70 eV för jonisering. Injektorn utförde en pulserad splitless injektion på 1 µl och MSD ChemStation (Agilent) användes för utvärdering av resultaten. Den kromatografiska separationen utfördes på en HP-PONA kolonn (längd 50 m; I.D 0,2 mm; tjocklek 0,5 µm; Agilent).

Temperaturprogrammet startades på 30 °C i 15 min. Programmet ökade sedan temperaturen med 1,5 °C/min till 70 °C, sedan med 3 °C/min i 15 min, följt av 10 °C/min till 200 °C och slutligen med 10 °C/min till 250 °C som hölls i 27 min för en slutgiltig analysid på 115 min.

Analysmetod HPLC-HRMS

Analysen utfördes på ett binärt Ultimate 3000 ultrahög prestanda vätskekromatografisystem (UHPLC) med autoinjektor kopplat till en Q-Exact Focus kvadropol-Orbitrap högresolutions-masspektrometer (HRMS) med elektroprayjonisering (HESI) från ThermoFisher Scientific. 10 µl prov injicerades och analyserades med både positiv och negativ jonisering. Den kromatografiska separationen utfördes på en Atlantis C18 T3 kolonn (2,1 x 150 mm, 3 µm) utrustad med guard-kolonn från Waters, Irland, med ett flöde på 0,4 ml/min med ett gradientprogram på 38 min vid 35 °C. Mobilfaserna inkluderade Milli-Q vatten med 0,1 % myrsyra (v/v) (A1) och metanol (B1) i positiv jonisering samt Milli-Q vatten med 5 mM ammoniumacetat (A2) och metanol (B2) i negativ jonisering.

Gradienten började med 5 % B i 1 min följt av en linjär ökning till 95 % B vid 23 min som hölls kvar i 12 min för att sedan sjunka ner till 5 % B vid 36,5 min. Kolonnen konditionerades sedan i 1,5 min mellan injektionerna. Proverna analyserades i full Scan (massintervall 100–1500 m/z) med en upplösning på 70 000 FWHM (*full width half maximum*) följt av data beroende MS fragmentering (FS-ddMS²) med en upplösning på 17 500 FWHM och 5 ppm masstolerans samt 3,0 m/z isoleringsfönster och 30 % normaliserad kollisionenergi, utifrån en masslista med 1862 ämnen. Inför analysen i positivt respektive negativt läge rengjordes jonkällaren och instrumentet kalibrerades med ThermoFishers kalibreringslösningar. Mellan vart sjätte prov analyserades ett QC-prov (provextrakt spikat med 50 ämnen) samt en instrumentblank bestående av metanol och vatten (1:1 v/v).

Utvärdering av GC-MS-data

MSD ChemStation (Agilent) användes för utvärdering av data där en blanksubtraktion först gjordes på samtliga toppar. Därefter matchades topparnas spektrum mot ett bibliotek, NIST (National Institute of Standards and Technology), som genererade ett reversematch-betyg baserat på hur säker matchningen är. Ett matchningsvärde över 900 (skalan går från 0-999) antogs vara tillräckligt hög för att säkerställa identifieringen. Om samma isomerer detekterades gjordes en manuell bedömning. Jämfört med Schymanski-skalan så motsvarar identifieringen med GC-MS på detta sätt nivå två. Resultat vars signalintensitet var <10 gånger blankvärdet för ett visst ämne togs bort då dessa skulle kunna riskera att endast representera kontamination som kommer från upparbetningen eller analyssteget.

En semikvantifiering utfördes med hjälp av 2 stycken internstandarder, toluene-d8 för analyter med retentionstid mellan 15 och 60 min samt hexadecan-d34 för analyter mellan 61 och 115 min. Efter den initiala databehandlingen så sorterades data efter de olika påverkanstyperna, och de ämnen som identifierades i samtliga avloppsnät för respektive bostäder, handelsplatser, industriområden och sjukhus filtrerades fram. Dessa finns redovisade i Bilaga B, Tabell B.1. Intensitetsvärden som redovisas är relativt internstandarderna enligt ovan. En sammanställning av samtliga identifierade ämnen från GC-MS-analyserna finns redovisad i Bilaga B, Tabell B.2.

Utvärdering av HPLC-MS-data

Analysdata som framtagits med hög upplösning och exakt massa bearbetades med ett arbetsflöde i mjukvaran Compound Discoverer 3.3.231 (Thermo Scientific). Listan med 1864 ämnen samt deras massor, m/z och molekylformel inkluderades i flödet och toppar detekterades i mjukvaran utifrån exakt massa (5 ppm massavvikelse) på moderjonen, signalintensitet >10 000, S/N 1,5 och retentionstidsskift 0,5.

Modellering av retentionstider utfördes med en linjär modell framtagen med hjälp av Retention Time Indices Platform från Athens Unversitet (National and Kapodistrian University of Athens). En lösning med olika ämnen (500 ng/ml) analyserades med samma metod som proverna och identifierades därefter i Xcalibur (Thermo Scientific) med exakt massa (5 ppm massavvikelse) varpå retentionstiderna (Rt) kunde överföras till plattformen för att skapa en linjär modell för att förutspå retentionstider utifrån retentionstidsindexen (RTI) som återfanns i NORMAN Substance Databasen.

Initialt detekterades 774 ämnen i positiv jonisering samt 648 ämnen i negativ jonisering från masslistan med 1862 ämnen. Flera dubletter hittades för varje ämne vilket innebar totalt 5753 träffar och 5208 träffar i positiv respektive negativ jonisering. Alla träffar filtrerades utifrån tre kriterier (1. MS2 data finns, 2. $\Delta Rt < 2,5$ min, 3. kromatografisk topp ska vara Gausisk med 10x högre signalintensitet än blank). Efter första filtreringen förekom fortfarande en del dubbelträffar för samma ämnen; dessa toppar filtrerades utifrån högsta återfunna intensiteten i proverna och lägsta blank samt lägst ΔRt . Toppar med högre intensitet i blankar än prover exkluderades helt. Detta resulterade i 436 preliminärt identifierade ämnen från den positiva joniseringen samt 238 preliminärt identifierade ämnen från den negativa joniseringen. Signalintensiteten för samtliga ämnen jämfördes över samtliga proverna. De ämnen som hade så höga signaler i blankproverna eller generellt låga signaler i proverna så att signalen var <10 gånger blankvärdena togs bort. Identifieringar som hade högre signaler endast i ett prov togs också bort då det är svårt att dra några slutsatser om detta ämne skulle vara specifikt för någon specifik typ av påverkan. De två rensade listorna med preliminärt identifierade ämnen från positiv och negativ jonisering slogs sedan ihop och dubletter som återfanns från dessa listor avlägsnades utifrån lägst signalintensitet. Till slut återstod en lista med 192 ämnen där identifieringen granskades genom överensstämmelse med tillgängliga masspektrum.

Databassökningar med MS²-data av de preliminärt identifierade ämnena utfördes sedan mot mzCloud (matchningsfaktor 60) och mzVault (10 ppm massavvikelse för moderjonen och matchningsfaktor 50) spektraldatabaser. Flera av de preliminärt identifierade ämnena bekräftades även med inköpta standarder som analyserades med samma metod och arbetsflöde i Compound Discoverer. Ämnen kunde identifieras i proverna utifrån exakt massa, retentionstid och MS² spektrum som jämförts med standarderna. Säkerheten i identifieringen listades för varje ämne genom tillämpning av Schymanski skalan som beskrevs i inledningen. När listan på 192 ämnen rensats för de ämnen som inte kunde tillskrivas en identifiering motsvarande Schymanski-index nivå 1 eller 2 kvarstod 87 identifieringar från LC-MS-analyserna.

Bilaga B Bildexempel på placering av vakuumprovtagaren



Bilaga C Identifierade ämnen GC-MS

Tabell C.1 Bostäder	Stockholm	Västerås	Uppsala	Sundsvall
Phenol	26	33	95	38
2-[2-[2-Methoxyethoxy]ethoxy-1,3-dioxalane	12	21	22	10
Menthyl acetate	14	13	29	18
Ethanol, 2-phenoxy-	80	80	153	66
Benzothiazole	9	6	45	7
Indole	9	13	183	10
Dichloroacetic acid, dodecyl ester	6	82	392	43
Hedione, Methyl dihydrojasmonate	15	19	26	15
Octocrylene	74	90	395	56
Ethylene glycol monododecyl ether	33	48	302	37
Tetradecanoic acid	3	10	120	3
Caffeine	75	72	179	7
1-Hexadecanol	159	100	600	83
Isobutyl tetradecyl ether	17	15	158	9
2-Methyleicosane	28	4	66	18
cis-9-Octadecen-1-ol	62	37	695	32
Oleic Acid	114	232	6624	138

Tabell C.1–C.4

Ämnen identifierade med GC-MS från olika påverkanstyper och som har höga relativa signaler (>20 i ett eller flera prover).

Tabell C.2 Handelplatser	Stockholm	Västerås	Uppsala	Sundsvall
Ethanol, 2-butoxy-	8	54	82	47
2-Propanol, 1-(2-methoxy-1-methylethoxy)-	37	63	80	27
2-[2-[2-Methoxyethoxy]ethoxy-1,3-dioxalane	25	11	171	19
2-Propylheptanol	166	16	135	9
1H-Indole, 4-methyl-	5	4	236	2
Decyl isobutyl carbonate	207	35	139	7
Dichloroacetic acid, dodecyl ester	71	30	346	16

Tabell C.3 Industriområden	Stockholm	Västerås	Uppsala	Timrå
Phenol	18	13	26	20
2-Propanol, 1-(2-methoxy-1-methylethoxy)-	27	76	69	199
1-Propanol, 2-(2-hydroxypropoxy)-	47	2	20	3
Octane, 2,3,7-trimethyl-	50	2	10	10
Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	72	1	12	9
Decyl isobutyl carbonate	8	1	36	72
1-Octanol, 2-butyl-	47	1	13	7
Octocrylene	2	11	41	78

Tabell C.4 Sjukhus	Stockholm	Västerås	Uppsala	Sundsvall
2-[2-[2-Methoxyethoxy]ethoxy-1,3-dioxalane	24	20	29	3
Ethanol, 2-phenoxy-	62	52	74	43
9-Decenoic acid	13	5	39	13
Caffeine	126	120	143	147
cis-9-Octadecen-1-ol	38	61	33	49
Squalene	821	68	41	61

(Z)6,(Z)9-Pentadecadien-1-ol
1,2-Cyclohexanediol, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-
1,4-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester
1-Butoxy-2-propanol
1-Decanol
1-Di(tert-butyl)silyloxydodecane
1-Heneicosanol
1-Heptanol
1-Hexadecanol
1-Hexanol
1H-Indole, 4-methyl-
1-Nonadecene
1-Nonanol
1-Octanol, 2-butyl-
1-Propanol, 2-(2-hydroxypropoxy)-
1-Tetradecene
1-Tridecene
2,2-Dimethyl-5-[2-(2-trimethylsilylethoxymethoxy)-propyl]-[1,3]dioxolane-4-carboxaldehyde
2,3-Dimethylundecane
2,4-Diethyl-6-methyl-1,3,5-trioxane
2,5-Piperazinedione, 3,6-bis(2-methylpropyl)-
2,6-Dimethyl-7-octen-2-ol
2,6-Dimethylnonane
2,6-Dimethylundecane
2-[2-[2-Methoxyethoxy]ethoxy-1,3-dioxalane
2-Benzothiazolinone
2-Butyl-1-octanol
2-Ethyl-1-hexanol
2-Furanmethanol
2-Methyldecane
2-Methyleicosane
2-Methylhexadecan-1-ol
2-Methylundecane
2-Methyl-Z,Z-3,13-octadecadienol
2-Piperidinone, N-[4-bromo-n-butyl]-

Tabell C.5

Lista över ämnen identifierade med GC-MS i ett eller flera prover.

2-Piperidinone/2-Pentenoic acid, 4-hydroxy-
2-Piperidone
2-Propanol, 1-(2-methoxy-1-methylethoxy)-
2-Propanol, 1,1'-[(1-methyl-1,2-ethanediyl)bis(oxy)]bis-
2-Propanol, 1-[1-methyl-2-(2-propenyloxy)ethoxy]-
2-Propanol, 1-chloro-, phosphate (3:1)
2-Propylheptanol
2-Pyrrolidinone, 1-butyl-
3,7-Dimethyldecane
3-Hydroxydecanoic acid
3-Methyl-2-heptanol
3-Methyldecane
3-Methylpentadecane
3-Methylundecane
4-Hydroxy-3-methoxybenzyl alcohol
4-Methyldecane
5-Amino-2-methoxyphenol, N,O-diacetyl-
6-Methyl-5-heptene-2-one
9,12-Octadecadien-1-ol, (Z,Z)-
9-Decenoic acid
9-Hexadecen-1-ol, (Z)-
9-methylheptadecane
9-Octadecenamide, (Z)-
Acetamide, N-acetyl-N,N'-1,2-ethanediylbis-
Acetamide, N-phenyl-
Acetaminophen
Benzeneacetaldehyde
Benzenepentanol, γ-methyl-, acetate
Benzenesulfonic acid butyl amide
Benzothiazole
Benzyl alcohol
Benzyl alcohol, γ-methyl-
Bis(1-chloro-2-propyl)(3-chloro-1-propyl)phosphate
Caffeine
Carbonic acid, decyl undecyl ester
Carbonic acid, decyl undecyl ester
cis-7-Tetradecen-1-ol
cis-9-Octadecen-1-ol
Cyclohexanol, 4-(1,1-dimethylethyl)-
Cyclopentaneacetic acid, 3-oxo-2-pentyl-, methyl ester
Cyclopentasiloxane, decamethyl-
Decahydro-2-methylnaphthalene
Decane
Decyl isobutyl carbonate
Decyl isobutyl ether

Dichloroacetic acid, dodecyl ester
Diethyl Phthalate
Diethylene Glycol ethyl ether
Diethylene glycol hexyl ether
Diethylene glycol monododecyl ether
Dimethyl sulfone
Dimethyl sulfone
Dipropylene glycol, butyl ether
Dodecane
Dodecane
Dodecane, 2,6,10-trimethyl-
Dodecane, 2-methyl-
Dodecanoic acid
E,E,Z-1,3,12-Nonadecatriene-5,14-diol
Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-
Ethanol, 2-[2-(2-methoxyethoxy)ethoxy]-
Ethanol, 2-butoxy-
Ethanol, 2-phenoxy-
Ethylene glycol monododecyl ether
Eugenol
Hedione
Hedione
Heneicosane
Heptadecane, 2,6-dimethyl-
Heptylcyclohexane
Hexadecane
Hexylene glycol
Indole
Isoborneol
Isobutyl tetradecyl ether
Isobutyraldehyde, diethyl acetal
Linalool
Linalool tetrahydride
L- α -Terpineol
Menthyl acetate
Methyl (4S,5R)-2,2,5-trimethyl-1,3-dioxolane-4-carboxylate
m-Xylene
n-Hexadecanoic acid
Nonadecane
Octadecanoic acid
Octaethylene glycol monododecyl ether
Octane, 2,3,7-trimethyl-
Octanoic acid
Octocrylene
Oleic Acid

Pentadecane, 2,6,10-trimethyl-
Pentadecanoic acid
Phenol
Phenol, 2-methoxy-
Phenylethyl Alcohol
p-Menthan-8-ol
Silane, trichlorooctadecyl-
Squalene
Tetracetylenediamine
Tetradecane
Tetradecane, 3-methyl-
Tetradecanoic acid
Tetraethylene glycol monododecyl ether
trans-4a-Methyl-decahydronaphthalene
Tributyl phosphate
Tridecane
Tridecane, 2-methyl-
Tridecane, 3-methyl-
Triethyl citrate
Triethyl phosphate
Triethylene glycol monododecyl ether
Undecane
Z,E-3,13-Octadecadien-1-ol
Z-10-Methyl-11-tetradecen-1-ol propionate
Z-11-Hexadecenoic acid
α-Terpineol

Bilaga D Identifierade ämnen LC-MS och GC-MS, ämneskategorier

Tabellerna D1–D6

Ämnen identifierade med LC-MS och GC-MS där en kategori för ämnet har kunnat identifieras, inklusive säkerhet vid identifiering (SI), skattad reduktion över reningsverket och påverkanstyp.

Tabell D.1 Läkemedel	CAS-nr	SI	Reduktion	Påverkan	Anteckning
Candesartan	139481-59-7	1	-55 %	Alla	
Diclofenac	15307-86-5	1	9 %	Alla	
Fluconazole	86386-73-4	1	-11 %	Alla	
Furosemide	54-31-9	1	23 %	Alla	
Hydrochlorothiazid Hydrochlorothiazide	58-93-5	1	0 %	Alla	
Ibuprofen	15687-27-1	1	78 %	Alla	
Irbesartan	138402-11-6	1	-13 %	Alla	
Losartan	114798-26-4	1	15 %	Alla	
Naproxen	22204-53-1	1	68 %	Alla	
Tramadol	27203-92-5	1	-15 %	Alla	
Trimethoprim	738-70-5	1	96 %	Alla	
Fluconazole	86386-73-4	1	-3 %	Sjukhus	
Oxazepam	604-75-1	1	-19 %	Sjukhus	
Sulfamethoxazole	723-46-6	1	59 %	Sjukhus	
Aciclovir	59277-89-3	2	85 %	Alla	
Bicalutamide	90357-06-5	2	0 %	Alla	Prostatamedicin
Gemfibrozil	25812-30-0	2	54 %	Alla	
Ketoprofen	22071-15-4	2	38 %	Alla	
Lamotrigine	84057-84-1	2	-119 %	Alla	
Morphine	57-27-2	2	95 %	Alla	
Mycophenolic acid	24280-93-1	2	53 %	Alla	
Oxcarbazepine	28721-07-5	2	-1 %	Alla	
Prednisolone	50-24-8	2	83 %	Alla	
Progesterone	57-83-0	2	71 %	Alla	
Valsartan acid	137862-53-4	2	15 %	Alla	
(RS)-5-methoxy-2-((4-methoxy-3,5-dimethylpyridin-2-yl) methylsulfinyl)-1H-benzo[d]imidazole	73590-58-6	2	16 %	Sjukhus	Omeprazol/ Nexium
10,11-Dihydro-10-hydroxycarbamazepine	29331-92-8	2	-29 %	Sjukhus	Antiepileptic drug
Allopurinol	315-30-0	2	97 %	Alla	
Amitriptyline Amitriptyline	50-48-6	2	41 %	Sjukhus	Antidepressant
Ciprofloxacin	85721-33-1	2	88 %	Sjukhus	

Tabell D.1 Läkemedel	CAS-nr	SI	Reduktion	Påverkan	Anteckning
Clozapine	5786-21-0	2	-32 %	Sjukhus	
Cyclophosphamide	50-18-0	2	15 %	Sjukhus	
Labetalol	36894-69-6	2	34 %	Sjukhus	Betablockare
Metronidazol	443-48-1	2	-176 %	Sjukhus	
Mirtazapine	61337-67-5	2	-18 %	Sjukhus	
Propranolol	525-66-6	2	-77 %	Sjukhus	
Salbutamol	18559-94-9	2	5 %	Sjukhus	
Trimethoprim	738-70-5	2	-46 %	Sjukhus	
Warfarin 2H-1-Benzopyran-2-one, 4-hydroxy-3-(3-oxo-1-phenylbutyl)-	81-81-2	2	-34 %	Sjukhus	
Sertraline	79617-96-2	2	2 %	Industri	
Acetaminophen paracetamol	103-90-2	2*			

* Detta ämne har identifierats med GC-MS och har genomgått ett annat identifieringsförfarande än de andra ämnena. Se metodavsnittet för detaljer.

Tabell D.2 Plasttillsatssämnen	CAS-nr	Sl	Reduktion	Källa	Anteckning
2,4-Dihydroxybenzophenone	131-56-6	1	62 %	Alla	BP-1 UV skydd
Bisphenol-A Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-	80-05-7	1	40 %	Alla	Plastmonomer
Phenylbenzimidazole sulfonic acid	27503-81-7	1	-6 %	Alla	UV-skyddsämne
Oxybenzone Benzophenone-3	131-57-7	1	29 %	Handel	UV-protection agent
1,4-Benzenediol, 2,5-bis(1,1-dimethylethyl)-	88-58-4	2	-25 %	Alla	Antioxidant
Benzoic acid, 2-hydroxy-, hexyl ester	6259-76-3	2	71 %	Alla	Hexylsalicylate, UV-Skydd
Bisphenol S	80-09-1	2	70 %	Alla	Plastmonomer
Dimethyl phthalate	131-11-3	2	77 %	Alla	Mjukgörare
n-Butylbenzenesulphonamide N-Butylbenzenesulfonamide	3622-84-2	2	-1 %	Alla	Mjukgörare
1,3-Propanedione, 1-[4-(1,1-dimethylethyl)phenyl]-3-(4-methoxyphenyl)-	70356-09-1	2	47 %	Industri	Avobenzon, UV skydd
Octocrylene 2-Propenoic acid, 2-cyano-3,3-diphenyl-, 2-ethylhexyl ester	80135-31-5 6197-30-4	2b	80 %	Bostad	UV skydd
1,4-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	6422-86-2	2*			Diethylhexyl terephthalate, mjukgörare
2-Propanol, 1-chloro-, phosphate (3:1) Tris chloropropyl phosphate	13674-84-5	2*			TCPP, mjukgörare
Benzenesulfonic acid butyl amide N-Butylbenzenesulfonamide	3622-84-2	2*			Mjukgörare
Diethyl Phthalate	84-66-2	2*			Mjukgörare
Silane, trichlorooctadecyl-	112-04-9	2*			Silikontillverkning
Tributyl phosphate	126-73-8	2*			Mjukgörare
Triethyl citrate	77-93-0	2*			Mjukgörare
Triethyl phosphate	78-40-0	2*			Mjukgörare

* Detta ämne har identifierats med GC-MS och har genomgått ett annat identifieringsförfarande än de andra ämnena.

Tabell D.3 Bekämpningsmedel	CAS-nr	Sl	Reduktion	Påverkan	Anteckning
DEET	134-62-3	1	-30 %	Alla	Insektsmedel
Fluconazole	86386-73-4	1	-11 %	Alla	Fungicid
Icaridin	119515-38-7	1	31 %	Handel	Pesticid
Desethylatrazine	6190-65-4	2	99 %	Alla	Metabolit
Fipronil	120068-37-3	2	11 %	Alla	Insekticid
Nitromethylidynetrimethanol	126-11-4	2	91 %	Alla	
1,2-Benzisothiazolinone 1,2-Benzisothiazol-3(2H)-one	2634-33-5	2	87 %	Sjukhus	Biocid
Propyl paraben	94-13-3	2	-311 %	Handel	Biocid
Fludioxonil	131341-86-1	2	30 %	Handel	Fungicid
2-Benzothiazolinone	934-34-9	2*			Biocid

* Detta ämne har identifierats med GC-MS och har genomgått ett annat identifieringsförfarande än de andra ämnena.

Tabell D.4 Metaboliter	CAS-nr	SI	Reduktion	Påverkan	Anteckning
1,7-Dimethylxanthine	611-59-6	2	94 %	Alla	Coffeinmetabolit
Acetyl-sulfamethoxazole	21312-10-7	2	75 %	Alla	
Carboxyibuprofen	15935-54-3	2	-12 %	Alla	
Desethylatrazine	6190-65-4	2	99 %	Alla	
Ibuprofen methyl ester	61566-34-5	2	63 %	Alla	

Tabell D.5 Färgämnen	CAS-nr	SI	Reduktion	Påverkan	Anteckning
2-Methoxyaniline, o-Anisidine	90-04-0	1	0.1476629	Alla	
2-(1,3-dihydro-3-oxo-2H-indol-2-ylidene)-1,2-dihydro-3H-indol-3-one	482-89-3	2	0.4897438	Alla	Indigo

Tabell D.6 Industrikemikalier	CAS-nr	SI	Reduktion	Påverkan	Anteckning
1,3-Diphenylguanidine	102-06-7	1	13 %	Alla	Gummitillverkning
Benzotriazole 1H-Benzotriazole	95-14-7	1	-36 %	Alla	
e-Caprolactam	105-60-2	1	31 %	Alla	Nylon-monomer
4-(dimethylbutylamino)diphenylamin (6PPD)	793-24-8	1	86 %	Industri	Antioxidant gummi
Cyclohexanamine, N-cyclohexyl-	101-83-7	1	57 %	Industri	Dicyclohexylamin, gummitillverkning
1,4-Benzenediol, 2,5-bis(1,1-dimethylethyl)-	88-58-4	2	-25 %	Alla	Antioxidant gummi
N,N-Dimethyl-p-phenylenediamine	99-98-9	2	69 %	Alla	Eventuellt gummitillverkning
Naphthalenesulfonic acid	120-18-3	2	75 %	Alla	
1,2-Benzenediol, 4-(1,1-dimethylethyl)-	98-29-3	2	67 %	Alla	Trol antioxidant, färger, kitt
2-Furanmethanol	98-00-0	2*			Furfuryl alcohol
2-Piperidone	675-20-7	2*			Monomer of nylon 5
2-Pyrrolidinone, 1-butyl-	3470-98-2	2*			Utbredd användning, färger etc.
Ethanol, 2-phenoxy-	122-99-6	2*			Utbredd användning, färger etc.
Ethanol, 2-butoxy-	111-76-2	2*			Tvätt- och rengöringsprodukter
2-[2-[2-Methoxyethoxy]ethoxy-1,3-dioxalane	74733-99-6	2*			Polyetoxylat

* Detta ämne har identifierats med GC-MS och har genomgått ett annat identifieringsförfarande än de andra ämnena.

Tabell D.7 Ytaktiva ämnen	CAS-nr	SI	Reduktion	Påverkan	Anteckning
Surfynol 104 5-Decyne-4,7-diol, 2,4,7,9-tetramethyl-	126-86-3	1	90 %	Alla	
2-Propenoic acid, 2-methyl-, dodecyl ester	142-90-5	2	81 %	Alla	
Pentadecafluorooctanoic acid (PFOA) Perfluorooctanoic acid	335-67-1	2	-19 %	Alla	
Tetradecanoic acid	544-63-8	2	84 %	Alla	Finns i mjölk

Tabell D.8 Övriga ämnen/naturprodukter	CAS-nr	SI	Reduktion	Påverkan	Anteckning
7-Amino-4-methylcoumarin	26093-31-2	2	28 %	Alla	
Cocaine	50-36-2	2	90 %	Alla	Drog
Daidzein	486-66-8	2	96 %	Alla	Isoflavone
Ethisterone	434-03-7	2	90 %	Alla	Anabol steroid?
Genistein	446-72-0	2	96 %	Alla	Isoflavone
m-Xylene-4-sulfonic acid	88-61-9	2	81 %	Alla	
Rosin	8050-09-7	2	81 %	Alla	
Squalene	111-02-4	2*			Fett från hud
Caffeine	58-08-2	2*			Caffeine
Cyclopentasiloxane, decamethyl-	541-02-6	2*			D5
Phenol, 2-methoxy-	90-05-1	2*			Guaiacol, finns i whiskey och kaffe
Tetracetylenediamine	10543-57-4	2*			Taed, bleach activator
4-Hydroxy-3-methoxybenzyl alcohol	498-00-0	2*			Vallinyl alcohol, flavoring
Cyclopentaneacetic acid, 3-oxo-2-pentyl-, methyl ester	24851-98-7	2*			Methyl dihydrojasmonate, hedione
Indole	120-72-9	2*			
Linalool	78-70-6	2*			Doftämne, terpene
Linalool tetrahydride	78-69-3	2*			Doftämne, terpene
Menthyl acetate	79-20-9	2*			Doftämne
α-Terpineol	98-55-5	2*			Doftämne, terpene

Bilaga E Informationskällor till farobedömning

Tabell E.1

De källor som har använts för att inhämta humantoxicitetsdata för en specifik toxisk mekanism, identifikationsnummer hos PubChem för varje datakälla samt antalet kemikalier som finns listade i varje källa.

Endpoint	PubChem identifier	Description	No. of chemicals annotated from combined dataset
Androgen Receptor Agonist	743053	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule agonists of the androgen receptor (AR) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/743053]	827
Androgen Receptor Antagonist	743063	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule antagonists of the androgen receptor (AR) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/743063]	680
Estrogen Receptor Agonist	743077	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule agonists of the estrogen receptor alpha (ER-alpha) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/743077]	816
Estrogen Receptor Antagonist	743078	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule antagonists of the estrogen receptor alpha (ER-alpha) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/743078]	706
Progesterone Receptor Agonist	1347036	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule agonists of the Progesterone receptor (PR) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/1347036]	930
Progesterone Receptor Antagonist	1347031	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule antagonists of the Progesterone receptor (PR) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/1347031]	746
Thyroid Receptor Agonist	743066	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule agonists of the thyroid receptor (TR) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/743066]	855
Thyroid Receptor Antagonist	743067	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule antagonists of the thyroid receptor (TR) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/743067]	631
Glucocorticoid Receptor Agonist	720719	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule agonists of the glucocorticoid receptor (GR) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/720719]	835
Glucocorticoid Receptor Antagonist	720725	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule antagonists of the glucocorticoid receptor (GR) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/720725]	725
Retinoid Acid Receptor Agonist	1159553	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule agonists of the retinoic acid receptor (RAR) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/1159553]	721
Retinoid Acid Receptor Antagonist	1159555	Quantitative high throughput screening assay to identify small molecule antagonists of the retinoic acid receptor (RAR) signaling pathway [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/1159555]	503
Carcinogenicity	1259411	CCRIS dataset containing chemical records with carcinogenicity, mutagenicity, tumor promotion, and tumor inhibition test results [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/1259411]	0

Endpoint	PubChem identifier	Description	No. of chemicals annotated from combined dataset
Mutagenicity	N/A	In vitro mutagenicity records compiled from EFSA, Hansen and Kazius datasets. [Reference: doi: 10.3389/fphar.2021.708050]	614
Reproductive Toxicity	N/A	A reproductive toxicity data set compiled from the ECHA-C&L Inventory (https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/cl-inventory-database/) and OECD-eChemPortal (https://www.echemportal.org/echemportal/index.action), public databases. [References: jiang https://doi.org/10.1002/jat.3772 Feng https://doi.org/10.1016/j.toxlet.2021.01.002]	338

Bilaga F PFAS-resultat från avloppsprover

Tabell F.1

Koncentrationer av PFAS i ng/l i proverna från avloppsnätet samt inkommande och utgående prover från avloppsreningsverk.

Sample Name	PFPrA*	PFBA*	PFPeA	PFHxA	PFHpA	PFOA	PFNA	PFDA	PFUnDA	PFDoDA	PFTTrDA	PFTeDA	PFHxDA	PFODA	PFPrS	PFBS	PFPeS	PFHxS	PFHpS
Bostadsområde Stockholm	1,28	11,42	0,00	0,00	0,80	1,39	0,26	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,89	0,08
Sjukhus Stockholm	0,75	2,52	0,00	0,00	0,99	1,40	0,18	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,43	0,52	0,00	0,63	0,00
Länna Handelsområde	4,69	102,51	0,00	0,00	1,48	1,42	0,29	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,12	0,00
Länna industriområde	14,60	9,47	0,00	0,00	2,18	1,18	0,51	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	5,50	0,00
Stockholm Siklainsloppet	5,44	46,53	0,00	3,51	2,00	2,78	0,33	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,15	0,00	3,24	0,00
Stockholm Henriksdalsinloppet	2,27	0,00	0,00	4,02	2,17	2,23	0,75	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,59	0,00	1,17	0,00
Stockholm Utgående	2,81	8,57	5,75	6,65	2,25	4,08	0,79	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3,54	0,00	1,75	0,00
Uppsala Bostadsområde	0,58	15,00	0,00	6,82	1,20	1,39	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,42	0,00	0,00	0,52	0,00
Uppsala Sjukhus	0,78	16,50	0,00	5,88	1,73	2,59	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,38	1,37	1,41	7,35	0,00
Uppsala Handelsområde	71,88	522,30	5,74	0,00	0,00	0,15	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,21	2,92	0,00
Uppsala Industriområde	2,10	0,00	0,00	0,00	2,61	4,24	0,52	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,72	0,00	0,00	4,04	0,00
Uppsala Inkommande A/B	1,85	0,00	0,00	0,00	0,51	1,51	0,32	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,07	2,29	0,00
Uppsala Inkommande C	0,00	0,00	0,00	1,96	0,43	1,58	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,67	0,00
Uppsala Utgående	3,15	0,00	2,03	1,96	0,23	1,46	0,13	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,43	0,00	0,00	2,45	0,00

Sample Name	PFPrA*	PFBA*	PFPeA	PFHxA	PFHpA	PFOA	PFNA	PFDA	PFUnDA	PFDODA	PFTTrDA	PFTeDA	PFHxDA	PFODA	PFPrS	PFBS	PFPeS	PFHxS	PFHpS
Västerås Bostadsområde	2,21	0,85	0,00	0,00	0,00	1,07	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,63	0,00	0,00	2,64	0,00
Västerås Sjukhus	4,25	2,88	0,00	0,00	1,12	1,23	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,73	0,00	0,00	3,71	0,00
Västerås Handelsområde	1,26	1,83	0,00	0,00	0,88	1,39	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,75	0,00	0,00	5,28	0,00
Västerås Industriområde	4,74	2,49	5,65	5,54	5,68	4,39	0,35	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,71	2,79	0,00	0,00	4,64	0,00
Västerås Inkommande	2,58	0,00	0,00	0,00	2,32	2,41	0,43	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,17	0,00	0,00	6,63	0,00
Västerås Utgående	3,24	4,33	0,00	2,69	1,94	2,73	0,30	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,05	3,42	0,37	5,67	0,00
Sundsvall bostadsområde	0,39	0,00	0,00	0,00	0,34	0,26	0,37	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,09	2,72	0,00	0,00
Sundsvall sjukhus	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Sundsvall handelsområde	9,96	0,00	0,00	0,00	0,46	1,02	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,97	0,00	2,61	0,00	0,00
Sundsvall industriområde	5,82	2,31	0,00	7,49	2,05	2,39	0,34	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,50	0,00	1,53	0,00	0,00
Näs ARV ink	4,44	0,00	1,27	0,00	0,97	0,51	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,68	0,00	0,00
Näs ARV utg	4,72	0,00	0,00	0,58	0,43	0,68	0,29	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,21	0,00	0,00
Fillan ARV ink	18,86	0,00	0,00	0,57	1,28	0,57	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,29	0,00	0,00
Fillan ARV utg	13,83	1,92	0,00	0,81	0,39	0,57	0,12	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,50	0,32	0,00	0,87	0,05

*PFPrA och PFBA har en inte inkluderats i denna utvärdering då det inte gick att utesluta att de höga värdena berodde på interferens från andra ämnen,

Sample Name	PFOS	PFNS	PFDS	PFUnDS	PFD _o DS	PFT _r DS	6:2 FTS	8:2 FTS	Gen0X	ADONA	FPrPA	FPePA	FHpPA	6:2 FTUA	8:2 FTUA	10:2 FTUA	FOSAA
Bostadsområde Stockholm	1,22	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,27	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Sjukhus Stockholm	1,43	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,04	0,00	0,00	0,00	0,00	0,27	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Länna Handelsområde	5,96	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,87	0,00	0,00	0,00	0,00	0,30	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Länna industriområde	5,22	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	4,06	0,00	0,00	0,00	0,00	0,34	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Stockholm Siklainloppet	3,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,95	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Stockholm Henriksdalsinloppet	3,29	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,97	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Stockholm Utgående	6,95	0,08	0,00	0,00	0,00	0,00	3,41	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Uppsala Bostadsområde	1,70	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,43	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Uppsala Sjukhus	4,81	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	8,59	0,27	0,00	0,00	0,00	0,35	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Uppsala Handelsområde	2,16	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,24	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Uppsala Industriområde	5,13	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,14	0,00	0,00	0,00	0,00	1,27	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Uppsala Inkommande A/B	3,81	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,65	0,53	0,00	0,00	0,00	0,15	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Uppsala Inkommande C	3,78	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,44	0,52	0,00	0,00	0,00	1,41	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Uppsala Utgående	2,53	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,56	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Västerås Bostadsområde	1,66	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Västerås Sjukhus	3,84	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Västerås Handelsområde	6,58	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,38	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Västerås Industriområde	6,29	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3,73	1,54	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Sample Name	PFOS	PFNS	PFDS	PFUnDS	PFD _o DS	PFT _r DS	6:2 FTS	8:2 FTS	Gen0X	ADONA	FPrPA	FPePA	FHpPA	6:2 FTUA	8:2 FTUA	10:2 FTUA	FOSAA
Västerås Inkommande	7,26	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,85	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Västerås Utgående	2,64	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,96	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,64
Sundsvall bostadsområde	1,31	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Sundsvall sjukhus	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Sundsvall handelsområde	2,42	0,00	0,00	0,00	0,00	1,36	0,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Sundsvall industriområde	3,96	0,00	0,00	0,00	0,00	0,59	1,80	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Näs ARV ink	0,44	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,22	0,00	0,00	0,00	0,00	0,38	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Näs ARV utg	1,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,22	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Fillan ARV ink	0,45	0,00	0,00	0,00	0,00	0,34	0,69	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Fillan ARV utg	0,63	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,85	0,00	0,00	0,00	0,00	0,94	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Bostadsområde Stockholm	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,13	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Sjukhus Stockholm	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,47	0,69	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Länna Handelsområde	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3,92	0,40	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Länna industriområde	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,65	0,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,37		
Stockholm Siklainloppet	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,55	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Stockholm Henriksdalsinloppet	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	25,03	0,00	0,96	0,00	0,05	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Stockholm Utgående	0,17	0,22	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,11	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Uppsala Bostadsområde	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,34	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Uppsala Sjukhus	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	21,78	0,00	4,89	0,41	0,25	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Uppsala Handelsområde	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,69	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		

Sample Name	PFOS	PFNS	PFDS	PFUnDS	PFD _o DS	PFT _r DS	6:2 FTS	8:2 FTS	Gen0X	ADONA	FPrPA	FPePA	FHpPA	6:2 FTUA	8:2 FTUA	10:2 FTUA	FOSAA
Uppsala Industriområde	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	8,51	1,32	1,12	0,00	0,00	0,00	0,00	0,66		
Uppsala Inkommande A/B	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,65	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Uppsala Inkommande C	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	20,69	0,00	0,78	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Uppsala Utgående	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Västerås Bostadsområde	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,22	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Västerås Sjukhus	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3,57	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Västerås Handelsområde	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Västerås Industriområde	0,00	1,44	0,00	0,00	0,00	13,51	0,00	1,51	0,27	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Västerås Inkommande	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,36	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Västerås Utgående	0,00	0,00	0,00	0,37	0,00	8,76	11,23	0,24	0,33	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Sundsvall bostadsområde	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,09	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Sundsvall sjukhus	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Sundsvall handelsområde	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,27	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,81		
Sundsvall industriområde	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,76	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Näs ARV ink	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,15	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Näs ARV utg	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Fillan ARV ink	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,62	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
Fillan ARV utg	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		

Bilaga G Beskrivning av stödjande information (separat Excel-fil)

Bifogad till denna rapport finns en Excel-fil innehållande de ämnen som identifierades med god säkerhet med LC-MS och den relevanta informationen som användes i rapporten för dessa data. Endast de ämnen för vilka identifieringarna gjordes vid schymanski-index ett och två är inkluderade. I Excel-filen presenteras bland annat följande information:

1. Det namn som användes i suspect target listan	kolumn A
2. Molekylformeln	kolumn B
3. Schymanski Index	kolumn J
4. Eventuellt innehåll av klor, brom eller svavel	kolumn L
5. Om ämnet har starkast signal vid positiv eller negativ jonisering	kolumn M
6. Om ämnet har identifierats i både positiv och negativ jonisering	kolumn N
7. Signalintensitet i blankprover	kolumn P–Q
8. Signalintensitet i de olika proverna	kolumn R–AS
9. Skattad reduktionsgrad över reningsverket	kolumn AT
10. Användningsområde för kemiska ämnen	kolumn AU–BC
11. Huvudsaklig källa på nätet (bostäder, handelsplatser,, alla påverkanstyper)	kolumn BD
12. Anteckningar kring metaboliter, typ av läkemedel, alternativa namn, etc.	kolumn BE
13. CAS-nummer	kolumn BF
14. SMILES	kolumn BG
15. INCHIKEY	kolumn BH
16. Ev humantox- eller ekotoxparametrar (1 = aktivitet, 0 = ej aktivitet, blank = data saknas)	kolumn BJ–CE
17. Sammanslagna CMR-, ED-, ekotox- och REACH-parametrar	kolumn CF–CI
18. Sammanslaget riskvärde	kolumn CJ

Vissa kolumner är dolda i kalkylbladet, t.ex.: massan på jonen som identifierades, ämnets monoisotopiska massa (ämnets molekylvikt där endast ^{12}C -isotoper förekommer), retentionstid i det kromatografiska systemet, skillnaden mellan den uppmätta massan och den teoretiska massan för ämnet (om uttryckt i Dalton). Denna information kan vara intressant för forskargrupper som jobbar med kemiska screeningmetoder.

Svenskt Vatten

UTVECKLING

Svenskt Vatten Utveckling

Svenskt Vatten AB

POSTADRESS BOX 14057, 167 14 Bromma

BESÖKSADRESS Gustavslundsvägen 12, 167 51 Bromma

TELEFON 08-506 002 00

E-MAIL svensktvatten@svensktvatten.se

www.svensktvatten.se