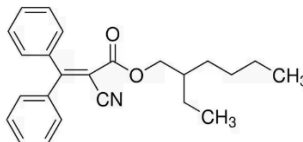


FACTSHEET Octocrylen (OC)	Aktualisierung ¹ der Ableitung der HBM-Werte		
			
Substanz	Octocrylen		
Wertableitungsjahr	2023		
Aktualisierung	2026		
Publikation	Bundesgesundheitsblatt - Gesundheitsforschung - Gesundheitsschutz 66 https://doi.org/10.1007/s00103-023-03785-2 [1]		
Parameter	Wert / Deskriptor	Dimension	Kommentare
HBM-Werte CPAA			
HBM-I-Wert (Männer/Kinder)	5,3	mg/L	Matrix: Urin Biomarker: CPAA (2-Cyano-3,3-diphenylacrylsäure)
HBM-I-Wert (Frauen)	4,5	mg/L	
HBM-II-Wert (Männer/Kinder)	18	mg/L	
HBM-II-Wert (Frauen)	16	mg/L	
HBM-Werte DOCCA			
HBM-I-Wert (Männer/Kinder)	22	µg/L	Matrix: Urin Biomarker: DOCCA (2-(Carboxymethyl)butyl 2-cyano-3,3-diphenylacrylat; Dinor-OC-Carbonsäure)
HBM-I-Wert (Frauen)	19	µg/L	
HBM-II-Wert (Männer/Kinder)	78	µg/L	
HBM-II-Wert (Frauen)	67	µg/L	
Allgemeine Informationen			
CAS-Nummer	6197-30-4		
IUPAC Name	2-Ethylhexyl-2-cyano-3,3-diphenylacrylat		
Molare Masse Octocrylen	361,48	g/mol	
HBM-Biomarker der Exposition	CPAA DOCCA		Spezifische Metaboliten
Molare Masse der Metaboliten	CPAA: 249,27 DOCCA: 363,41	g/mol	
Datenbasis Toxikologie			
Schlüsselstudie/Autor(en) (Jahr)	Triskelion BV, 2019		[2]
Spezies	Ratte		
Applikationsweise/Studienart	Oral (Futter)		OECD-Richtlinie 443
Expositionsdauer	Erweiterte Ein-Generationen-Studie zur Reproduktionstoxizität (EOGRTS)		Während der Paarungszeit (10 Wochen) u. der Paarung (max. 2 Wochen), Trächtigkeit und Laktation bis zum 21. postnatalen Tag
Kritischer Endpunkt/Effekt	Systemische Toxizität, Reproduktions- und Entwicklungstoxizität		
NOAEL	153	mg/kg KG/d	POD für HBM-I-Werte
LOAEL	534	mg/kg KG/d	POD für HBM-II-Werte

¹ Die Aktualisierung der HBM-Werte erfolgte aufgrund der Aktualisierung der in die Berechnung eingehenden körpertgewichtsbezogenen täglichen Urinvolumina sowie der Anwendung eines systematischen Rundens der berechneten Werte.

Bewertungsfaktoren und externe Dosis zur Ableitung von HBM-Werten			
Angepasster Expositionsfaktor (Zeitskalierung)	2		Mögliche Effektverstärkung durch Exposition über die gesamte Lebenszeit ist abzudecken
Interspezies Faktor	4		Allometrisch
	2,5		Dynamisch
Intraspezies Faktor	5		Allgemeinbevölkerung, kinetisch + dynamisch; reduziert von 10 auf 5, da EOGRS die besondere Empfindlichkeit während der Entwicklung abdeckt
Weitere Bewertungsfaktoren: Qualität der gesamten Daten	3		Berücksichtigung von Unsicherheiten im Zusammenhang mit den Ergebnissen der mechanistischen Studie [3]
Gesamtbewertungsfaktor (TAF)	300		
POD/TAF	Für HBM-I: 0,51 Für HBM-II: 1,78	mg/kg KG/d	Externe tolerable Dosis (ETD) für HBM-I-Wert: $153/300 = 0,51$ Externe Dosis für HBM-II-Wert: $534/300 = 1,78$
Parameter zur Berechnung der HBM-Werte mittels Massenbilanz-Ansatz			
Fue	CPAA: 45% = 0,45 DOCCA: 0,13% = 0,0013		Ausscheidungsanteil im Urin, Anteil der Wirkstoffdosis, die im Urin als spezifischer Metabolit ausgeschieden wurde, molare Basis [4,5]
Verhältnis der molaren Masse des Metaboliten zur molaren Masse Octocrylen	Für CPAA: 0,69 Für DOCCA: 1,01		249,27/361,48 363,41/361,48
Urinvolumen pro kg KG und Tag	Männer/Kinder: 0,030 Frauen: 0,035	L/(kg KG · d)	Standardwerte [6]
Kalkulation der HBM-Werte entsprechend Massenbilanz-Ansatz (Grundsatzpapier der Kommission Human-Biomonitoring [7])			
CPAA			
HBM-I-Wert (Männer/Kinder)	Gerundeter Wert: 5,3	mg/L	$[0,51 \times 0,69 \times 0,45] / 0,030$
HBM-I-Wert (Frauen)	Gerundeter Wert: 4,5	mg/L	$[0,51 \times 0,69 \times 0,45] / 0,035$
HBM-II-Wert (Männer/Kinder)	Gerundeter Wert: 18	mg/L	$[1,78 \times 0,69 \times 0,45] / 0,030$
HBM-II-Wert (Frauen)	Gerundeter Wert: 16	mg/L	$[1,78 \times 0,69 \times 0,45] / 0,035$
DOCCA			
HBM-I-Wert (Männer/Kinder)	Gerundeter Wert: 0,022 mg/L $\triangleq 22 \mu\text{g/L}$		$[0,51 \times 1,01 \times 0,0013] / 0,030$
HBM-I-Wert (Frauen)	Gerundeter Wert: 0,019 mg/L $\triangleq 19 \mu\text{g/L}$		$[0,51 \times 1,01 \times 0,0013] / 0,035$
HBM-II-Wert (Männer/Kinder)	Gerundeter Wert: 0,078 mg/L $\triangleq 78 \mu\text{g/L}$		$[1,78 \times 1,01 \times 0,0013] / 0,030$
HBM-II-Wert (Frauen)	Gerundeter Wert: 0,067 mg/L $\triangleq 67 \mu\text{g/L}$		$[1,78 \times 1,01 \times 0,0013] / 0,035$

Begründung

Octocrylen (OC) wird aufgrund seiner UV-absorbierenden Eigenschaften im UVB- und UVA-Bereich als UV-Filter in Sonnenschutzmitteln eingesetzt, zumeist in Kombination mit anderen UV-Filtern. Weiterhin wird es wegen seiner Photostabilität als Stabilisator für andere nicht-photostabile UV-Filter in Sonnenschutzmitteln und Kosmetika oder auch als Photostabilisator für andere Produkte (z. B. Kunststoffe) verwendet.

Die erweiterte Ein-Generationen-Studie zur Reproduktionstoxizität (EOGRTS) [2] wird als Schlüsselstudie zur Bewertung der Toxizität von OC angesehen und der NOAEL (*No Observed Adverse Effect Level*) von 153 mg/kg Körpergewicht pro Tag für systemische Toxizität, Reproduktions- und Entwicklungstoxizität wurde als Ausgangspunkt (POD; engl.: *Point Of Departure*) für die Ableitung von HBM-I-Werten herangezogen. Der LOAEL (*Lowest Observed Adverse Effect Level*) aus der EOGRTS in Höhe von 534 mg/kg KG/d diente als Basis für die Ableitung von HBM-II-Werten. Unterstützend wurde eine mechanistische subakute Fütterungsstudie an Wistar-Ratten [3] herangezogen. Unter Berücksichtigung eines Gesamt-Bewertungsfaktors von 300 wurde von dem NOAEL ein TDI-analoger Wert (TDI für täglich tolerierbare Aufnahmemenge; engl.: *Tolerable Daily Intake*) von 0,51 mg/kg KG/d zur Ableitung der HBM-I-Werte und von dem LOAEL eine externe Dosis von 1,78 mg/kg KG/d zur Ableitung der HBM-II-Werte kalkuliert. Die OC-Metaboliten CPAA (Esterhydrolyseprodukt 2-Cyano-3,3-diphenylacrylsäure) mit einem Fue von 45 % und DOCCA (Beta-Oxidationsprodukt 2-(Carboxymethyl)butyl 2-cyano-3,3-diphenylacrylat (Dinor-OC-Carbonsäure)) mit einem Fue von 0,13 % stellen die für ein Human-Biomonitoring relevanten Expositionsbiomarker dar [4,5]. Es wurden auf Basis der dargelegten PODs und Bewertungsfaktoren HBM-I- und HBM-II-Werte jeweils separat für die Biomarker CPAA und DOCCA abgeleitet und beschlossen.

Für den **Biomarker CPAA** wurden HBM-I-Werte für Kinder und Männer von 5,3 mg/L und für Frauen von 4,5 mg/L Urin abgeleitet. Der HBM-II-Wert für Kinder und Männer beträgt 18 und für Frauen 16 mg/L.

Für den **Biomarker DOCCA** betragen die HBM-I-Werte für Kinder und Männer 22 µg/L und für Frauen von 19 µg/L. Der HBM-II-Wert für Kinder und Männer beträgt 78 µg/L und für Frauen 67 µg/L.

Referenzen

1. Kommission Human-Biomonitoring des Umweltbundesamtes (2023) Stoffmonographie für Octocrylen – HBM-Werte für die Metaboliten 2-Cyano-3,3-diphenylacrylsäure (CPAA) und 2-(Carboxymethyl)butyl 2-cyano-3,3-diphenylacrylat (Dinor-OC-Carbonsäure, DOCCA) im Urin der Allgemeinbevölkerung. Bundesgesundheitsbl 66: 1304–1314. <https://doi.org/10.1007/s00103-023-03785-2>
2. Triskelion BV (2019) Extended One Generation Reproductive Toxicity Study (EOGRTS) according OECD Test Guideline 443. Testing laboratory: Triskelion BV, Report no: 03R0495/00X056, Owner company: BASF SE; DSM
3. BASF SE (2019) Octocrylene—Mechanistic study in Wistar rats on thyroid toxicity via enzyme induction in the liver. Administration via the diet for 4 weeks (study report). Testing laboratory: BASF SE, Report no: 99C0495/00S048. Owner company; BASF SE; DSM Nutritional Products AG; Merck KGaA; Symrise AG
4. Bury D, Belov VN, Qi Y, Hayen H, Volmer DA, Brüning T, Koch HM (2018) Determination of urinary metabolites of the emerging UV filter octocrylene by online-SPE-LC-MS/MS. Anal Chem 90(1): 944–951. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.7b03996>
5. Bury et al (2019) Urinary metabolites of the UV filter octocrylene in humans as biomarkers of exposure. Arch Toxicol 93(5): 1227–1238
6. Kommission Human-Biomonitoring des Umweltbundesamtes (2025) Änderung des Leitwertes für die körpertgewichtsnormierte tägliche Urinausscheidung von Erwachsenen. Bundesgesundheitsbl 68: 830–837. <https://doi.org/10.1007/s00103-025-04062-0>
7. Kommission Human-Biomonitoring des Umweltbundesamtes (2014) Grundsatzpapier zur Ableitung von HBM-Werten. Stellungnahme der Kommission Human-Biomonitoring des Umweltbundesamtes. Bundesgesundheitsbl Gesundheitsforsch Gesundheitsschutz 57(1):138-147. <http://link.springer.com/article/10.1007/s00103-013-1867-2>