



# Notat om anvendelse af JAGG ved vurdering af PFAS- forbindelser **Instruks**

Udgiver: Miljøstyrelsen

Redaktion: Jacqueline A. Falkenberg, NIRAS

ISBN: 978-87-7038-456-8

Miljøstyrelsen offentliggør rapporter og indlæg vedrørende forsknings- og udviklingsprojekter inden for miljøsektoren, som er finansieret af Miljøstyrelsen. Det skal bemærkes, at en sådan offentliggørelse ikke nødvendigvis betyder, at det pågældende indlæg giver udtryk for Miljøstyrelsens synspunkter. Offentliggørelsen betyder imidlertid, at Miljøstyrelsen finder, at indholdet udgør et væsentligt indlæg i debatten omkring den danske miljøpolitik.

Må citeres med kildeangivelse

# Indhold

<b>1.</b>	<b>Indledning og baggrund</b>	<b>4</b>
<b>2.</b>	<b>PFAS-beregninger i JAGG</b>	<b>6</b>
2.1	Valg af PFAS-stoffer	6
2.2	Indtastning af målte data - jordprøver	7
2.3	Beregning af fasefordeling for de 4 PFAS forbindelser (PFOA, PFNA, PFHxS og PFOS) i Miljøstyrelsens kvalitetskriterie for sum af 4 PFAS	8
2.4	Beregning af fasefordelingen for de 22 PFAS forbindelser i Miljøstyrelsens kvalitetskriterie for sum af 22 PFAS	10
2.5	Hvordan foretages en beregning i grundvandmodul for sum af 4 PFAS eller sum af 22 PFAS?	10
<b>3.</b>	<b>Udvidelse af stofdatabase med PFAS-forbindelser</b>	<b>17</b>
3.1	Standardparametre i stofdatabase	17
3.2	Anvendelse af andre fysisk-kemiske værdier	18
3.3	Forklaring om, hvordan fysisk-kemiske parametre anvendes i de forskellige moduler i JAGG	19
<b>4.</b>	<b>Oversigt over mindre justering i JAGG 2.1</b>	<b>21</b>
<b>5.</b>	<b>Referencer</b>	<b>22</b>

# 1. Indledning og baggrund

Indenfor de sidste par år er der kommet stigende opmærksomhed på forureninger med PFAS-forbindelser. Miljøstyrelsen har i juli 2021 fastsat kvalitetskriterier baseret på to parametre /1/:

- Sum af 4 PFAS-stoffer

PFOA	PFHxS
PFNA	PFOS

- Sum af 22 PFAS-stoffer

PFBA	PFBS
PFPeA	PFPeS
PFHxA	PFHxS
PFHpA	PFHpS
PFOA	PFOS
PFNA	PFNS
PFDA	PFDS
PFUnDA	PFUnDS
PFDODA	PFDoDS
PFTTrDA	PFTTrDS
	6:2 FTS
	PFOSA

I forbindelse med risikovurdering af forureningsforhold anvendes ofte Miljøstyrelsens risikovurderingsværktøj, JAGG 2.1, men PFAS-forbindelser er ikke omfattet af JAGG's stofdatabase fra 2016.

Derfor er der i den nyeste version af JAGG 2.1 af den 20-09-2022 tilføjet alle 22 PFAS-forbindelser. Derudover er tilføjet NN-DMS (et nedbrydningsprodukt af pesticider som tolylfuanid og dichlofluorid) og TFA (trifluoreddikesyre, et muligt nedbrydningsprodukt af visse pesticider) til stofdatabase, da disse to stoffer hyppigt påvises i grundvandsprøver. Disse 24 enkeltstoffer er derfor oprettet i JAGG's stofdatabase sammen med deres fysisk-kemiske egenskaber.

Herudover er der tilføjet grundvandskriterierne for hhv. sum af 22 PFAS, sum af 4 PFAS og sum af pesticider med henblik på beregninger i grundvandsmodulet.

For en generel vejledning om anvendelse af JAGG og de forskellige beregningsmoduler henvises til Miljøprojekt nr. 1880 - Manual for program til risikovurdering – JAGG 2.1 /2/.

I afsnit 2 gennemgås, hvordan der foretages beregninger med PFAS-forbindelser i beregningsmodulerne.

I afsnit 3 er der en kort opsummering af de data, der er anvendt ved tilføjelse af de 24 enkeltstoffer til stofdatabase samt kvalitetskriterier for grundvand for parametrene for sum af 22 PFAS, sum af 4 PFAS og sum af pesticider.

I afsnit 4 redegøres for en række mindre justeringer, som er indført som konsekvens af, at der bl.a. foretages beregninger med meget lave koncentrationer og beregninger for sumværdier. Desuden redegøres for, hvilke parametre (fysisk-kemisk egenskaber) der anvendes i de for-

skellige beregningsmoduler. Dette er med henblik på at hjælpe brugeren til at afgøre, om anvendelse af alternative fysisk-kemisk egenskaber vil have betydning for ens konklusion. Det kunne f.eks. være, hvis brugeren gerne vil anvende andre værdier fra litteraturen eller værdier fra feltmålinger fra den pågældende lokalitet.

## 2. PFAS-beregninger i JAGG

Beregninger med JAGG 2.1 kan anvendes til at understøtte risikovurderinger såvel som den konceptuelle forståelse af fasefordeling og spredning af PFAS-forbindelser i miljøet i forbindelse med jord- og grundvandsundersøgelser.

Brugeren skal være fortrolig med anvendelse af JAGG og de forskellige beregningsmoduler. I Miljøprojekt nr. 1880 - Manual for program til risikovurdering – JAGG 2.1 /2/ findes en generel vejledning om anvendelse af JAGG og de forskellige beregningsmoduler.

JAGG 2.1 er baseret på de ligninger, som fremgår af vejledning nr. 7 om "Oprydning på forurenede lokaliteter – appendikser" udgivet i 1998 /3/ og de to rapporter om vertikal transport i den umættede zone; hhv. Miljøprojekt nr. 1786, 2015 og nr. 1828 fra 2016. I 2016 er der desuden foretaget ændringer i indeklimamodul, og der er etableret moduler for olie- og benzinprodukter. Modulerne for olie- og benzinprodukter er ikke relevante for PFAS-stofferne. Da der ikke p.t. findes afdampningskriterier for PFAS-forbindelserne, kan der heller ikke foretages beregning af risiko over for indeklimaet eller udeluft i forhold til PFAS-forbindelserne.

### 2.1 Valg af PFAS-stoffer

På opstartssiden klikkes på knappen [Enkeltstoffer] og modulet [Kemiske data og fugacitet for enkeltstoffer] åbnes.

I modulet kan der vælges op til 4 stoffer fra rullemenuerne ved at trykke på "Stof 1"- "Stof 4", jf. Figur 2.1. Alle 22 PFAS-forbindelser findes under gruppebetegnelsen "PFAS" i rullemenuen, der kommer fra, når f.eks. "Stof 1" vælges.

Jordtypen skal kun vælges, såfremt der skal beregnes fugacitet (fasefordeling), f.eks. fordeling til porevand fra en jordprøve eller evt. fordeling til en jordprøve fra en porevandkoncentration. Ved beregning af fasefordeling foretager JAGG automatisk en beregning af fasefordeling mellem jord, poreluften og porevand.

**Kemiske data og fugacitet for enkeltstoffer**

**Lokaliteten**

Lokalitetsnavn: Afprøvning af JAGG 2.1 med PFAS-forbindelser

Adresse: \_\_\_\_\_ Postnr./By: \_\_\_\_\_

Lokalitetsnummer: \_\_\_\_\_ Projekt nr.: \_\_\_\_\_

Beregning udføres for: PFOA PFNA PFHxS PFOS

Opstart: \_\_\_\_\_ Dataark: \_\_\_\_\_ Grundvand: \_\_\_\_\_

Olie & benzin: \_\_\_\_\_ Udskrift: \_\_\_\_\_ Indeklima: \_\_\_\_\_

**Nulstil værdier** Vejledning: \_\_\_\_\_ Udeluft: \_\_\_\_\_

Vertikal transport: \_\_\_\_\_

Jordtype	Poreluft-volumen $V_v$	Vand-indhold $V_v$	Samlet porøsitet $\approx V_v + V_v$	Volumen af jordskellet $V_d$	Korn-rumvægt (kg/l) $d$	Densitet $\rho$	% Indhold organisk kulstof $f_{oc}$
Sandmuld	0,05 - 0,30	0,15 - 0,35	0,45	0,55	2,5 - 2,6	1,43	2
Egen liste	0,1	0,35			2,6		

**Kemiske data** Vælg stof for fugacitetsberegning eller indtast egne stofs specifikke data

Stof 1 Egen liste Stof 2 Egen liste Stof 3 Egen liste Stof 4 Egen liste Bemærkning

Stofnavn: PFOA PFNA PFHxS PFOS

CAS-nummer: 335-67-1 375-95-1 307-55-1 1763-23-1

Molmasse: 414,07 464,08 400,11 500,13 g/mol

Damptryk: 54 18,6 58,9 6,8 Pa

Vandopløselighed: 9500 1200 2300 570 mg/l

Henry's konstant: 0,01 0,03 0,004 0,02 dimensionsløs (bruges i vertikal transport modul)

Log oktanol/vand ford. koef.  $\log K_{ow}$ : 5,3 5,92 5,17 6,43 Husk at både Koc og Log K<sub>ow</sub> skal indtastes såfremt der anvendes egne data

Koc: 166 392 145 889

Grundvandskvalitetskriterie, GV: \_\_\_\_\_ µg/l

Afdampningskriterie, luft: \_\_\_\_\_ mg/m<sup>3</sup>

Jordkvalitetskriterie: \_\_\_\_\_ mg/kg TS

Diffusionskoefficient i luft: 4,04E-06 3,82E-06 4,11E-06 3,68E-06 m<sup>2</sup>/s

Diffusionskoefficient i vand: 4,04E-10 3,82E-10 4,11E-10 3,68E-10 m<sup>2</sup>/s

Vindhastighed: 0,1 0,1 0,1 0,1 m/s

FIGUR 2.1. Efter valget af stoffer ses detailoplysninger for de udvalgte stoffer.

## 2.2 Indtastning af målte data - jordprøver

Enhederne i JAGG 2.1 ved indtastning af koncentrationer i jord er som standard mg/kg TS, mens det er mg/l for vandprøver og mg/m<sup>3</sup> for poreluft. Til højre på siden er der derfor indsat et gråt felt, hvor de indtastede værdier er omregnet til henholdsvis µg/kg TS, ng/l og ng/m<sup>3</sup>, således at der er muligt at kontrollere indtastningen af de lave koncentrationer, der normalt påvises for PFAS-forureninger, og som fremgår af analyseblanketterne. I nedenstående Figur 2.2 er vist et eksempel, hvor der er indtastet jordkoncentrationer for PFOA, PFNA, PFHxS og PFOS, og der er valgt en "sandmuld" som jordtype.

**Kemiske data og fugacitet for enkeltstoffer**

**Lokaliteten**

Lokalitetsnavn: Afprøvning af JAGG 2.1 med PFAS-forbindelser

Adresse: \_\_\_\_\_ Postnr./By: \_\_\_\_\_

Lokalitetsnummer: \_\_\_\_\_ Projekt nr.: \_\_\_\_\_

Beregning udføres for: PFOA PFNA PFHxS PFOS

Opstart Dataark Grundvand  
 Olie & benzin Udskrift Indeklima  
 Nulstil værdier Vejledning Udeluft  
 Vertikal transport

**Fugacitet** For hvert stof indtast målepunkt og evt prøvetagningsdato samt den målte værdi

Målepunkt	Prøve X - PFOA	Prøve X - PFNA	Prøve X - PFHxS	Prøve X - PFOS	Bemærkning	
Dato						
Målt konc. i poreluft	C <sub>L</sub>				mg/m <sup>3</sup>	
Beregnet jordkoncentration	C <sub>t</sub>	0	0	0	mg/kg TS	
Beregnet vandkoncentration	C <sub>v</sub>	0	0	0	mg/l	
Målt konc. i grundvand	C <sub>v</sub>				mg/l	
Beregnet poreluftskonc.	C <sub>L</sub>	0	0	0	mg/m <sup>3</sup>	
Beregnet jordkonc.	C <sub>t</sub>	0	0	0	mg/kg TS	
Målt konc. i jorden	C <sub>t</sub>	0,0055	0,00077	0,0013	0,032	mg/kg TS
Beregnet poreluftskonc.	C <sub>L</sub>	0,001465691	0,00027651	0,001709453	0,004275306	mg/m <sup>3</sup>
Beregnet vandkoncentration	C <sub>v</sub>	0,001542854	9,52386E-05	0,000413349	0,00177532	mg/l

	PFOA	PFNA	PFHxS	PFOS	
	Prøve X - PFOA	Prøve X - PFNA	Prøve X - PFHxS	Prøve X - PFOS	
Tjek af enheder					
-	-	-	-	-	ng/m <sup>3</sup>
-	-	-	-	-	µg/kg TS
-	-	-	-	-	ng/l
-	-	-	-	-	ng/l
-	-	-	-	-	ng/m <sup>3</sup>
-	-	-	-	-	µg/kg TS
5,5	0,8	1,3	32,0	µg/kg TS	
1.465,7	276,5	1.709,5	4.275,3	ng/m <sup>3</sup>	
1.542,9	95,2	413,3	1.775,3	ng/l	

**FIGUR 2.2.** Eksempel fra JAGG 2.1 for målte data for 4 PFAS i en jordprøve (som jordtype er valgt en standard sandmuld med 2% organisk kulstof)

### 2.3 Beregning af fasefordeling for de 4 PFAS forbindelser (PFOA, PFNA, PFHxS og PFOS) i Miljøstyrelsens kvalitetskriterie for sum af 4 PFAS

I eksemplet i Figur 2.2 er der indtastet data for en vilkårlig jordprøve (sandmuld med 2 % organisk kulstof) med et indhold på 68 µg/kg TS for sum af 22 PFAS, heraf 39,6 µg/kg TS for sum af PFOA, PFNA, PFHxS og PFOS (sum af 4 PFAS), hvor PFOS er den dominerende komponent med 32 µg/kg TS. Hvis man er interesseret i at vide, om den påviste jordforurening kan give anledning til, at grundvandskriteriet for sum af 4 PFAS er overskredet i porevandet i ligevægt med jordprøven, så skal de beregnede porevandskoncentrationer for de 4 enkeltstoffer summeres, se Tabel 2.1.



**TABEL 2.1.** Fasefordeling fra jord til porevand baseret på værdier fra Figur 2.2  
(De røde værdier viser en overskridelse af kvalitetskriterierne)

Stof	Koncentration i jord µg/kg TS	Beregnet porevandskoncentration ng/l
PFOA	5,5	1.543
PFNA	0,77	95
PFHxS	1,3	413
PFOS	32	1.775
Sum af 4 PFAS	<b>39,6</b>	<b>3.826</b>
Kvalitetskriterier	10	2

Som hjælp til brugeren er der ligeledes indsat et gråt felt på udskriftssiden for fugacitetberegninger, hvor de afrundede resultater gengives omregnet til mindre enheder som µg/kg TS, ng/l og ng/m<sup>3</sup>. For standardberegninger for mange forureningstyper som BTEX og chlorerede opløsningsmidler er der ikke behov for at omregne til mindre enheder og disse omregnede værdier i det grå felt vil ikke fremgå af udskriftet. Udskriftssiden er kun delvis låst, idet man kan ikke skrive på siden, men man kan markere og kopiere en række celler. Hvis de kopierede celler indsættes i en Excel regneark som "Paste værdier/values" vil brugeren kunne foretage en summering af de relevante værdier, se Figur 2.3.

### Fugacitetsberegninger

**Lokaliteten**

Navn: \_\_\_\_\_ Afprøvnings af JAGG 2.1 med PFAS-forbindelser Lokalitetsnr.: \_\_\_\_\_  
 Adresse: \_\_\_\_\_ Postnr./by: \_\_\_\_\_  
 Matrikel nr.: \_\_\_\_\_ Projekt nr.: \_\_\_\_\_  
 Note: \_\_\_\_\_

Indhold af organisk kulstof  $f_{oc}$   %

**Stoffer**

Forureningskomponent **nej**

	Stof 1	Stof 2	Stof 3	Stof 4	
	PFOA	PFNA	PFHxS	PFOS	
Målepunkt	Prøve X - PFOA	Prøve X - PFNA	Prøve X - PFHxS	Prøve X - PFOS	
Dato					
Molmasse	414	464	400	500	g/mol
Damptryk	54,0	18,6	58,9	6,8	Pa
Vandopløselighed	9.500	1.200	2.300	570	mg/l
log oktanol/vand ford. koef.	5,3	5,92	5,17	6,43	
$K_{oc}$	169	392	145	889	
Henrys konstant	0,01	0,03	0,004	0,02	
Maksimal ford. luft	0,00	0,00	0,00	0,00	
Maksimal ford. vand	0,07	0,03	0,08	0,01	
Maksimal ford. jord	0,93	0,97	0,92	0,99	
Mættede damptryk	9.025	3.484	9.512	1.373	mg/m <sup>3</sup>

**Fugacitetsberegninger**

Angiv signifikant cifre

**Målt konc. i poreluft**

	Stof 1	Stof 2	Stof 3	Stof 4	
Beregnet jordkonc.					mg/m <sup>3</sup>
Beregnet vandkonc.					mg/l

**Målt konc. i grundvand**

	Stof 1	Stof 2	Stof 3	Stof 4	
Beregnet poreluftskonc.					mg/m <sup>3</sup>
Beregnet jordkonc.					mg/kg TS

**Målt konc. i jorden**

	Stof 1	Stof 2	Stof 3	Stof 4	
Beregnet poreluftskonc.	0,0056	7,7E-04	0,0013	0,032	mg/kg TS
Beregnet vandkonc.	0,00147	2,8E-04	0,00171	0,00428	mg/m <sup>3</sup>
Beregnet vandkonc.	0,00154	9,5E-05	4,1E-04	0,00178	mg/l

Risiko for fri fase?

Anvendt Brugerdata?

Udskriv ark

Luk

	PFOA	PFNA	PFHxS	PFOS	
Prøve X - PFOA	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	ng/m <sup>3</sup>
Prøve X - PFNA	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	µg/kg TS
Prøve X - PFHxS	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	ng/l
Prøve X - PFOS	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	ng/l
	5,5	0,77	1,3	32	µg/kg TS
	1470	277	1710	4280	ng/m <sup>3</sup>
	1540	95,2	413	1780	ng/l

**FIGUR 2.3.** Eksempel af udskriftssiden for fugacitetsberegning med et gråt felt med resultatværdier omregnede til andre enheder.

## 2.4 Beregning af fasefordelingen for de 22 PFAS forbindelser i Miljøstyrelsens kvalitetskriterie for sum af 22 PFAS

Såfremt man gerne vil beregne fasefordeling i en sandmuld (2% organisk kulstof) for alle 22 stoffer i jordprøven med et indhold på 68 µg /kg TS for sum af sum af 22 PFAS, er det nødvendigt at gentage beregninger med alle 22 stoffer og summere alle de beregnede porevandskoncentrationer. Resultaterne for en vilkårlig jordprøve er gengivet i Tabel 2.2.

**TABEL 2.2.** Fasefordeling fra jord til porevand for alle 22 PFAS i sumkriteriet  
(De røde værdier viser en overskridelse af kvalitetskriterierne)  
(Værdier under detektionsgrænsen er sat til detektionsgrænsen)  
Fe 4 PFAS i sumkriteriet ( PFOA, PFNA, PFHxS og PFOS er mærkeret med fed)

Stof	Koncentration i jord µg/kg TS	Beregnet porevandskoncentration ng/l
PFBA	4,5	2.703
PFPeA	8	5.861
PFHxA	4,8	3.232
PFHpA	9,5	2.710
<b>PFOA</b>	<b>5,5</b>	<b>1.543</b>
<b>PFNA</b>	<b>0,77</b>	<b>95</b>
PFDA	<0,11	2,73
PFUnDA	<0,11	0,76
PFDoDA	<0,11	0,05
PFTTrDA	<0,11	0,05
PFBS	<0,11	73,1
PFPeS	0,12	73,9
<b>PFHxS</b>	<b>1,3</b>	<b>413</b>
PFHpS	<0,12	14,6
<b>PFOS</b>	<b>32</b>	<b>1.775</b>
PFNS	<0,21	4,36
PFDS	<0,11	0,82
PFUnDS	<1	7,4
PFDoDS	<1	7,4
PFTTrDS	<1	7,4
6:2 FTS	1,3	413
PFOSA	<0,1	2,9
22 PFAS	68	<b>18.933</b>
Kvalitetskriterier	400	100

## 2.5 Hvordan foretages en beregning i grundvandmodul for sum af 4 PFAS eller sum af 22 PFAS?

I grundvandsmodulet kan man enten anvende det målte indhold af enkeltstoffer i porevandet / grundvandet eller det målte indhold for sum af 4 PFAS eller sum af 22 PFAS. I modulet [Kemiske data og fugacitet for enkeltstoffer] vælges de ønskede parametre fra rullemenuerne, jf. Figur 2.4.

Man behøver ikke at indtaste en jordart eller foretage en fugacitetsberegning, når der skal foretages beregninger i grundvandsmodulet, og der indtastes porevand/grundvandsdata i modulet [Kemiske data og fugacitet for enkeltstoffer].

**Kemiske data og fugacitet for enkeltstoffer**

**Lokaliteten**

Lokalitetsnavn: Afprøvning af JAGG 2.1 med PFAS-forbindelser

Adresse: \_\_\_\_\_ Postnr./By: \_\_\_\_\_

Lokalitetsnummer: \_\_\_\_\_ Projekt nr.: \_\_\_\_\_

Beregning udføres for: PFOA PFOS **Sum af 4 PFAS** **Sum af 22 PFAS**

Opstart Dataark **Grundvand**

Olie & benzin Udskrift Indeklima

**Nulstil værdier** Vejledning Udeluft

Vertikal transport

---

**Fugacitet** For hvert stof indtast målepunkt og evt prøvetagningsdato samt den målte værdi **Bemærkning**

Målepunkt		Prøve 1	Prøve 1	Prøve 1	Prøve 1	
Dato		09-09-2022	09-09-2022	09-09-2022	09-09-2022	Prøve 1
Målt konc. i poreluft	C <sub>L</sub>					mg/m <sup>3</sup>
Beregnet jordkoncentration	C <sub>t</sub>	0	0	0	0	mg/kg TS
Beregnet vandskoncentration	C <sub>v</sub>	0	0	0	0	mg/l
Målt konc. i grundvand	C <sub>v</sub>	0,00034	0,00098	0,001613	0,0073	mg/l
Beregnet poreluftskonc.	C <sub>L</sub>	0	0	0	0	mg/m <sup>3</sup>
Beregnet jordkonc.	C <sub>t</sub>	0	0	0	0	mg/kg TS

**FIGUR 2.4** Indtastning af målte porevand eller grundvandsdata for PFOA, PFOS, sum af 4 PFAS og sum af 22 PFAS

Efter indtastning af målte koncentrationerne i porevand/grundvand klikkes der på knappen for grundvandsmodulet.

I modulet [Grundvandskoncentrationen i det første betydende magasin] indtastes oplysninger om "Det forurenede område". Herefter vælges aquifermateriale fra rullemenuen, og den hydrauliske gradient i det første betydende magasin indtastes, se Figur 2.5.

**Grundvandskoncentrationen i det første betydende magasin**

**Lokaliteten**

Lokalitetsnavn: Afprøvning af JAGG 2.1 med PFAS-forbindelser

Adresse: \_\_\_\_\_ Postnr./By: \_\_\_\_\_

Lokalitetsnummer: \_\_\_\_\_ Projekt nr.: \_\_\_\_\_

Beregning udføres for: PFOS PFOA PFHxS 6.2.FTS

Enkelstoffer Dataark Indeklima

Overfør værdier Udskrift Udeluft

Nulstil værdier Vejledning Vertikal transport

**Det forurenede område**

Der skal vælges mellem to beregningstyper:

A - Beregnet koncentration - ud fra en målt konc. i kilden (porevand, terrænnært grundvand) [Data overføres fra modulet Enkelstoffer eller Vertikal transport]

B - Målt koncentration i toppen af første betydende magasin [Data overføres fra modulet Enkelstoffer]

A: Beregnet koncentration  B: Målt koncentration

Længde af kildeområde Y 100 m

Bredde af kildeområde X 100 m

Areal af det forurenede område 10.000 m<sup>2</sup>

Nettonedbør N 300 mm/år

Kommune/Egn \_\_\_\_\_

**Det første betydende magasin**

Indtast data for det første betydende magasin, hvori risiko skal beregnes

Bemærkning

Aquifermateriale	Hydraulisk gradient (m/m)	Hydraulisk lednings-evne	Effektiv porøsitet	Vand-mættede porøsitet	Bulk-massefylde (kg/l)	% indhold organisk kulstof	Tykkelse af magasin (m)	Opblandingsdybde (m)
Egen liste	i	k	eff.	e <sub>w</sub>	ρ	f <sub>oc</sub>	max d <sub>w</sub>	d <sub>m</sub>
Sand, mellemkornet	0,005	5E-05-1E-04 5,00E-05	0,15 - 0,3 0,2	0,35 - 0,5 0,45	1,4 - 1,7 1,7	0,01		0,666

Gns. porevandshastighed Vp 39,45 m/år

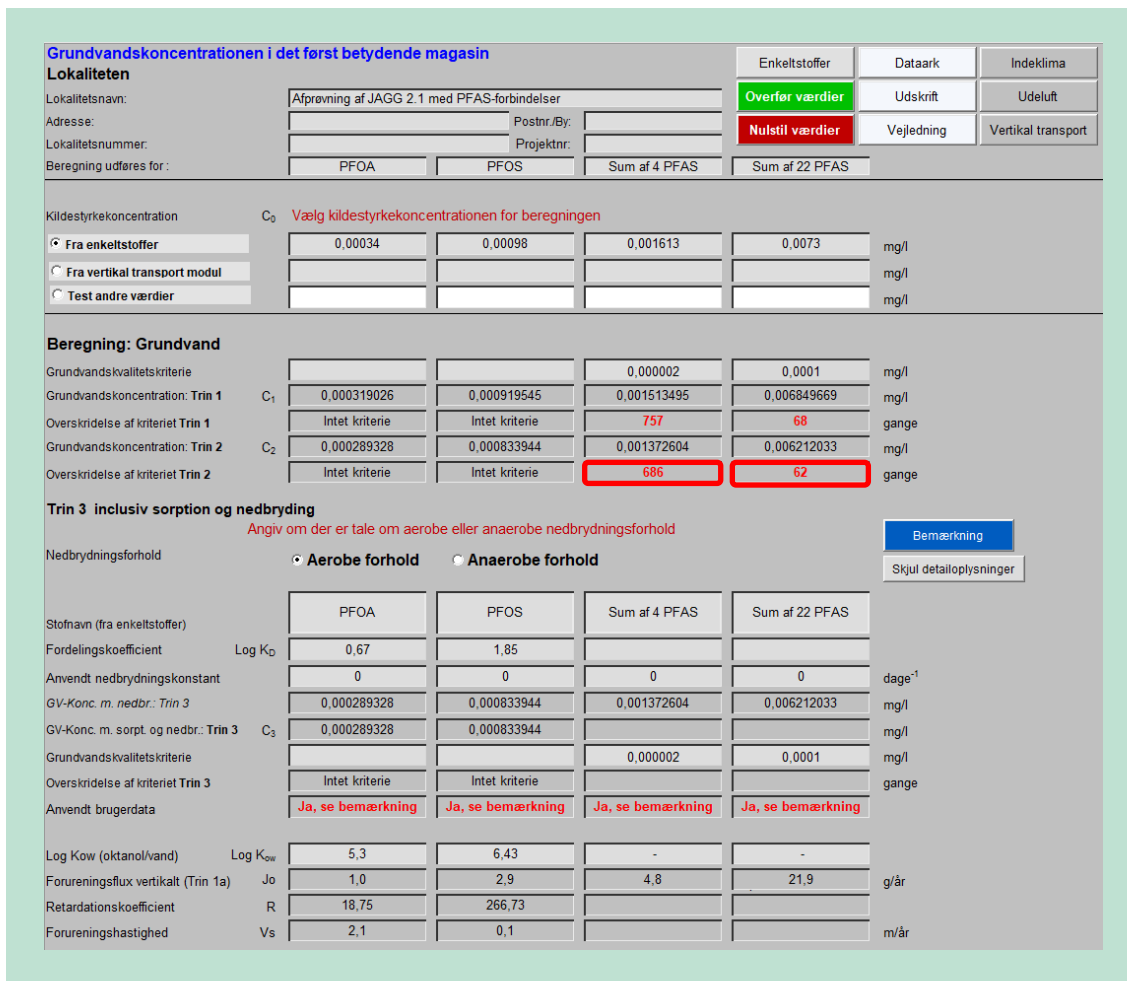
Afstand til teoretisk beregningspunkt L 39,447 m

Transporttid til teoretisk beregningspunkt t<sub>tid</sub> 1,00 år

**FIGUR 2.5** Indtastning af oplysninger om det første betydende magasin

Under sektion "Beregning: Grundvand" er værdierne fra modulet [Kemiske data og fugacitet for enkeltstoffer] overført. Såfremt der er målt en porevand-/grundvandskoncentration, anvendes denne som grundlag for beregningen. Ellers anvendes en porevandskoncentration beregnet ift. en jordprøve (fugacitetsberegning).

De beregnede grundvandskoncentrationer for trin 1- og trin 2-beregninger vises sammen med overskridelse af grundvandskriteriet, jf. Figur 2.6.



**FIGUR 2.6** De beregnede grundvandskoncentrationer i trin1 og trin 2 i det første betydende magasin

Bemærk, at der kun findes grundvandskriterier for sum af 4 PFAS og sum af 22 PFAS. Selvfølgelig vil et indhold af PFOA (eller PFOS, PFNA og PFHxS) større end 2 ng/l betyde, at grundvandskriteriet for sum af 4 PFAS på 2 ng/l er overskredet, men graden af overskridelsen kendes ikke medmindre koncentrationerne for alle 4 PFAS summeres.

Som det ses af Figur 2.6, er der overskridelser for sum af 4 PFAS og sum af 22 PFAS efter fortynding i trin 1- og trin 2-beregninger. Da der ikke findes nedbrydningskoefficienter for PFAS-forbindelser og de fleste PFAS anses for at være persistente, er koncentrationer i trin 3 identiske med trin 2.

Som udgangspunkt viser JAGG 2.1 de beregnede koncentrationer i et teoretiske beregningspunkt svarende til 1 års transporttid eller maksimalt 100 m /3/. I JAGG 2.1 kan man dog også aflæse trin 2-koncentrationer i en afstand af 100 m ved at klikke på fluebenet for én eller flere af de fire stoffer (allernederst i arket), hvorved der åbnes en tabel og en figur, jf. Figur 2.7. Koncentrationen for sum af 4 PFAS falder fra 0,00137 mg/l (1.373 ng/l) i 40 m's afstand til 0,0011 mg/l (1.100 ng/l) i 100 m's afstand (se Figur 2.7).

Vælg stoftabel for afstandsdata

Stof 1   
 Stof 2   
 **Stof 3**   
 Stof 4

Data for stof 3 → Sum af 4 PFAS

Afstand	100	0	10	20	30	40	50	75	100	m
Transporttid	2,5	0,0	0,3	0,5	0,8	1,0	1,3	1,9	2,5	år
Opblandingsdybde, m	1,78	0,25	0,25	0,32	0,50	0,68	0,85	1,31	1,78	m
Forureningskoncentration C <sub>2</sub>	0,0011	0,001513	0,001513	0,001486	0,001426	0,00137	0,001317	0,0012	0,0011	mg/l
Konc. med nedbrydning C <sub>3</sub>	0,0011	0,001513	0,001513	0,001486	0,001426	0,00137	0,001317	0,0012	0,0011	mg/l
Transporttid (sorp.)	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	år
Konc. m. sorpt. og nedbr. C <sub>3</sub>	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	mg/l

**FIGUR 2.7.** Eksempel på muligheden for at vise trin 2 koncentrationen i forskellig afstand til kilden (op til 100 m)

Man kan desuden anvende de beregnede porevandskoncentrationer fra fasefordelingen for en jordprøve, såfremt der ikke indtastes målte værdier for grundvandet/porevandet. I eksempel i Figur 2.8 anvendes porevandskoncentrationer fra Tabel 2.1.

**Grundvandskoncentrationen i det først betydende magasin**

**Lokaliteten**

Lokalitetsnavn:            

Adresse:     Postnr./By:            

Lokalitetsnummer:     Projekt nr.:        

Beregning udføres for:  PFOA     PFNA     PFHxS     PFOS

Kildestyrkekoncentration C<sub>0</sub> **Vælg kildestyrkekoncentrationen for beregningen**

Fra enkeltstoffer                    mg/l

Fra vertikal transport modul                    mg/l

Test andre værdier                    mg/l

**Beregning: Grundvand**

Grundvandskvalitetskriterie                 mg/l

Grundvandskoncentration: **Trin 1** C<sub>1</sub>                    mg/l

Overskridelse af kriteriet **Trin 1**                    gange

Grundvandskoncentration: **Trin 2** C<sub>2</sub>                    mg/l

Overskridelse af kriteriet **Trin 2**                    gange

**FIGUR 2.8.** Eksempel baseret på de beregnede porevandskoncentrationer fra Figur 2.2 og Tabel 2.1

De samlede resultat for sum af 4 PFAS baseret på fasefordeling fra en jordprøve med et indhold på 39,6 µg/kg TS er vist i Tabel 2.4.

**TABEL 2.3.** Beregning af grundvandskoncentration efter fasefordeling fra jord til porevand baseret på værdier fra Tabel 2.1.  
(De røde værdier viser en overskridelse af kvalitetskriterierne)

Stof	Jordprøven µg/kg TS	Porevand- koncentration	Grundvand Trin 1	Grundvand	Grundvand Trin 2 (ved 100 m)
				Trin 2 (ved beregningspunkt 1 års transport (ved 39,4 m) ng/l	
PFOA	5,5	1.543	1450	1.310	1.052
PFNA	0,77	95	89	81	65
PFHxS	1,3	413	388	352	282
PFOS	32	1.775	1.670	1.510	1.210
Sum af 4 PFAS	39,6	3.826	3.597	3.253	2.609
Kvalitetskriterier for sum af 4 PFAS	10			2	

Som hjælp til brugeren er der ligeledes indsat et gråt felt på udskriftsside for grundvand, hvor de afrundede resultater gengives omregnet til mindre enheder, dvs. ng/l. Udskriftssiden er kun delvis låst, idet man kan ikke skrive på siden, man kan markere og kopiere en række celler. Hvis disse kopierede celler indsættes i en Excel regneark som "Paste værdier/values" vil brugeren kunne foretage en summering af de relevante værdier.

The screenshot displays a software interface for groundwater calculations. On the left, there are input fields for 'Lokaliteten' (Location), 'Navn' (Name), 'Adresse' (Address), 'Matrikel nr.' (Municipality number), and 'Note'. Below these are sections for 'Stoffer og stofegenskaber' (Substances and properties) and 'Beregning: Grundvand' (Calculation: Groundwater). The 'Stoffer og stofegenskaber' section includes a table with columns for 'Stof 1', 'Stof 2', 'Stof 3', and 'Stof 4', and rows for 'PFOA', 'PFNA', 'PFHxS', and 'PFOS'. The 'Beregning: Grundvand' section includes a table with columns for 'Stof 1', 'Stof 2', 'Stof 3', and 'Stof 4', and rows for 'Kildestyrken' (Source strength), 'Trin 1-beregning' (Trin 1 calculation), and 'Trin 2-beregning' (Trin 2 calculation). The right side of the interface shows a grid of calculated values in ng/l for each substance and sample, with a grey background for the calculation results.

**FIGUR 2.9.** Eksempel af udskriftssiden for grundvandsberegninger med et gråt felt med resultatværdier omregnede til ng/l.

Den samme øvelse kan gentages for de beregnede porevandskoncentrationer for de 22 PFAS i Tabel 2.2. Resultaterne for de 22 PFAS vises ikke her, men da grundvandsmodellen kun beregner effekten af en fortynding i trin-2 beregninger, så er det de kortkædede PFAS med de højest beregnede porevandskoncentrationer, som vil dominere i den samlede sum for 22 PFAS. Dette er illustreret for PFBA og PFPeA sammenlignet med PFOA og PFOS i Tabel 2.5.

**TABEL 2.4.** Beregning af grundvandskoncentration efter fasefordeling fra jord til porevand baseret på værdier fra Tabel 2.2  
(De røde værdier viser en overskridelse af kvalitetskriterierne)

Stof	Jordprøven  µg/kg TS	Porevand- koncentration	Grundvand Trin 1	Grundvand	
				Trin 2 (ved beregningspunkt 1 års transport (ved 39,4 m) ng/l	Grundvand Trin 2 (ved 100 m)
PFBA	4,5	2.703	2.540	2.300	1.843
PFPeA	8	5.861	5.500	4.990	3.996
PFOA	5,5	1.543	1.450	1.310	1.052
PFOS	32	1.775	1.670	1.510	1.210
Sum af 4 ud af 22 PFAS	50	11.882	11.160	10.110	8.101
Kvalitetskriterier for sum af 22 PFAS	400			100	



# 3. Udvidelse af stofdatabase med PFAS-forbindelser

## 3.1 Standardparametre i stofdatabase

I stofdatabase er der for stofgruppen PFAS anvendt de officielle forkortelser for de 22 PFAS-forbindelser omfattet af Miljøstyrelsens kvalitetskriterier /1/. Udover de fysisk-kemiske egenskaber er der indsat CAS-nr., molekylvægt (molmasse) og kvalitetskriterier for sumpparametre.

De fysisk-kemiske egenskaber for PFAS-forbindelser er taget fra den reviderede version af VMR's (Regionernes Videncenter for Miljø og Ressourcer) håndbog om undersøgelse og afværgelse af forureninger med PFAS-forbindelser udgivet i 2022 /4/.

Som det påpeges i håndbogen, er der meget få eksperimentelle data (målte data) om fysisk-kemiske egenskaber for PFAS-forbindelser, og en række værdier er estimeret ud fra en QSAR-modellering (Quantitative structure–activity relationship models) baseret på strukturen af de neutrale molekyler, dvs. uden dissociering. I litteraturen findes stor spredning i de estimerede værdier, og de estimerede værdier er ofte for de ikke-dissocierede PFAS, hvilket betyder, at usikkerheden vedr. disse værdier er stor. Udfordringen er, at de 22 PFAS-forbindelser i Miljøstyrelsens kvalitetskriterier spænder fra de kortkædede PFBA og PFBS til de meget langkædede PFTTrDA og PFTTrDS, dvs. stoffer med molvægt fra 214 til 750. De fysisk-kemiske egenskaber ændrer sig i takt med den stigende længde af kulstofkæden. I VMR-håndbogen er det derfor valgt at gengive de meste konservative værdier, dvs. højeste opløselighed og højeste damptryk.

Såfremt der ikke findes fysisk-kemiske værdier for en PFAS forbindelse, er der anvendt et bedst bud baseret på en PFAS forbindelse med tilsvarende fluor kulstofkæde. Disse er markeret med gult i Figur 3.1.

Stofnavn	Gruppe	CAS-nummer	Grundvands-kvalitets-kriterie		Afdampnings-kriterie	Jordkvalitets-kriterie		molvægt	damptryk	vand-opløselig-hed	log Kow (okt vand ford. Koeff.)		Henry's konstant	Diff. Koeff. I luft	Diff. Koef. vand	Vind-hastighed
			µg/l	mg/m <sup>3</sup>		mg/lg	g/mol				Pa	mg/l				
6.2 FTS	PFAS	27619-97-2						428,17	0,11	1300	4,44	145	0,00001	3,97E-06	3,97E-10	0,1
PFBA	PFAS	375-22-4					214,04	3900,00	560,000	2,82	71	6,00E-04	5,62E-06	5,62E-10	0,1	
PFBS	PFAS	375-73-5					300,1	631	30,000	3,9	63	0,002	4,74E-06	4,74E-10	0,1	
PFDA	PFAS	335-76-2					514,09	6,6	5,140	2006	6,5	0,05	3,62E-06	3,62E-10	0,1	
PFDODA	PFAS	307-55-1					614,1	0,7	0,7	7,77	108579	0,26	3,32E-06	3,32E-10	0,1	
PFDODS	PFAS	79789-39-5					700,16	0,0016	23,88	7,07	6734	0,07	3,11E-06	3,11E-10	0,1	
PFDS	PFAS	335-77-3					600,14	0,71	190	7,66	6734	0,07	3,35E-06	3,35E-10	0,1	
PFFpA	PFAS	375-85-9					364,06	158	4,200	4,67	163	0,006	4,31E-06	4,31E-10	0,1	
PFFpS	PFAS	375-92-8					450,12	21	465	4,81	400	0,008	3,87E-06	3,87E-10	0,1	
PFFhA	PFAS	307-24-4					314,05	457	21,700	4,06	62	0,003	4,64E-06	4,64E-10	0,1	
PFFhS	PFAS	307-55-1					400,11	58,9	2,300	5,17	145	0,004	4,11E-06	4,11E-10	0,1	
PFNA	PFAS	375-95-1					464,08	18,6	1,200	5,92	392	0,03	3,82E-06	3,82E-10	0,1	
PFNS	PFAS	69259-12-1					550,1	1,5	222	6,78	2397	0,002	3,50E-06	3,50E-10	0,1	
PFOA	PFAS	335-67-1					414,07	54	9,500	5,3	166	0,01	4,04E-06	4,04E-10	0,1	
PFOS	PFAS	1763-23-1					500,13	6,8	570	6,43	889	0,02	3,68E-06	3,68E-10	0,1	
PFOSA	PFAS	754-91-6					499,14	0,25	4,5	5,62	1690	0,01	3,68E-06	3,68E-10	0,1	
PFPeA	PFAS	2706-90-3					264,05	1,350	112,600	3,43	56	1,00E-03	5,06E-06	5,06E-10	0,1	
PFPeS	PFAS	2706-91-4					350,1	11	1,720	3,38	69	0,003	4,39E-06	4,39E-10	0,1	
PFTfDA	PFAS	72629-94-8					664,11	0,3	0,2	8,25	108579	0,42	3,19E-06	3,19E-10	0,1	
PFTfDS	PFAS	791553-89-8					750,16	0,003	54,84	7,44	6734	0,07	3,00E-06	3,00E-10	0,1	
PFTnDA	PFAS	2659-94-8					564,09	2,2	93	7,15	7267	0,12	3,46E-06	3,46E-10	0,1	
PFTnDS	PFAS	749786-16-1					650,15	0,0014	34,98	6,49	6734	0,07	3,22E-06	3,22E-10	0,1	
Sum af 22 PFAS	PFAS		0,1		0,4											
Sum af 4 PFAS	PFAS		0,002		0,01											

**FIGUR 3.1.** Fysisk-kemiske egenskaber for de 22 PFAS-forbindelser er indsat i stofdatabase. (Såfremt der ikke findes værdier, er der indsat et bedst bud baseret på en PFAS med tilsvarende fluor kulstofkæde. Disse værdier er markeret med gult)

For TFA og NN-DMS anvendes fysisk-kemisk data fra følgende databaser: [PubChem](#) fra US National Institutes of Health (NIH) og [ChemSpider](#) fra Royal Society of Chemistry.

For Miljøstyrelsens sumparametre for sum af 22 PFAS, sum af 4 PFAS og sum af pesticider er der ikke indsat fysisk-kemiske egenskaber. Dette skyldes, at der ikke kan defineres et modelstof, som repræsenterer grupperne som helhed. PFAS-forureninger kan have meget forskellige sammensætninger; for eksempel prøver, hvor kun de kortkædede og mobile PFAS-forbindelser dominerer eller prøver, hvor der hovedsageligt konstateres langkædede PFAS-forbindelser.

De pågældende grundvandskriterier for sumparametrene er dog oprettet i JAGG, se Figur 3.1 og afsnit 2.5. Dette betyder, at der kan foretages trin 1- og trin 2-beregninger i grundvandsmodul baseret på en porevandsvandskoncentration eller en målt grundvandskoncentration ved kilden. Trin 3-beregninger kan ikke foretages, da der ikke er indsat nedbrydningskonstanter, som kan repræsentere grupperne som helhed og derfor angiver JAGG, at koncentrationer i trin 3 er identiske med trin 2.

Bemærk, at der ikke findes individuelle grundvandskriterier for de enkelte PFAS-forbindelser kun for sum af 4 og 22 PFAS. Derimod er der individuelle grundvandskriterier for hver enkelt pesticid. Samtidig er der af hensyn til fuldkommenhed indsat jordkvalitetskriterier for PFAS-sumparametre, men der er intet modul i JAGG 2.1, hvor jordkvalitetskriterier indgår i beregningerne.

Arket med stofdatabasen er et låst og "gemt" ark og kan dermed ikke ændres. Brugeren kan dog altid indtaste deres egne værdier for de fysisk-kemiske egenskaber, som anvendes i beregninger, se afsnit 3.2.

### **3.2 Anvendelse af andre fysisk-kemiske værdier**

Der er stor spredning i litteraturværdier for fysisk-kemiske egenskaber, og de valgte parametre i VMR-håndbogen /4/ er baseret på et skøn af, at de er repræsentative og konservative.

Brugeren af JAGG 2.1 kan indtaste alternative værdier i JAGG 2.1, som de enten har hentet fra litteraturen, som repræsenterer lokalitetens forurenings- og geologiske forhold eller eksperimentelle data, f.eks.  $K_d$  fra udvaskningsforsøg med jord fra den pågældende lokalitet. Hvis brugeren indtaster en brugerværdi, vil dette sammen med standardværdien altid fremgå af udskriften, jf. Figur 3.2. Dette er en standardfunktion i JAGG 2.1 og kan ikke ændres. JAGG 2.1 vil i beregningerne anvende Brugers indtastede værdi.

**Indtastningsfelt**

	Stof 1	Egen liste
Stofnavn	PFOS	
CAS-nummer	1763-23-1	
Molmasse	m	500,13
Damptryk	p	6,8
Vandopløselighed	S	570
Henry's konstant	K <sub>H</sub>	0,02
Log oktanol/vand ford. koef. log K <sub>ow</sub>		6,43
K <sub>oc</sub>	K <sub>oc</sub>	889 500
Grundvandskvalitetskriterie, GV		
Afdampningskriterie, luft		
Jordkvalitetskriterie		
Diffusionskoefficient i luft	D <sub>L</sub>	3,68E-06
Diffusionskoefficient i vand	D <sub>W</sub>	3,68E-10
Vindhastighed		0,1

**Udskrift**

**Stoffer**

Kommentar *ja*

Forureningskomponent

Stof 1	
PFOS	
Prøve 1	
Dato	09-09-22
Molmasse	500
Damptryk	6,8
Vandopløselighed	570
log oktanol/vand ford. koef. log K <sub>ow</sub>	6,43
K <sub>oc</sub>	889 500
Henry's konstant	0,02

Bemærkninger om kemiske data: Der anvendes en K<sub>oc</sub> for PFOS på 500 baseret på en målt K<sub>d</sub>-værdi.

FIGUR 3.2 Eksempel, hvor der er valgt egen værdi for K<sub>oc</sub>, som fremgår af udskriften.

### 3.3 Forklaring om, hvordan fysisk-kemiske parametre anvendes i de forskellige moduler i JAGG

De fysisk-kemiske egenskaber i stofdatabase anvendes i de forskellige beregningsmoduler. Brugere, som vælger stoffer fra stofdatabase, vil altid få samme resultat, såfremt der indtastes de samme målte koncentrationer og samme jordtype eller hydrauliske forhold.

Såfremt brugeren indtaster alternative fysisk-kemiske egenskaber, vil det beregnede resultat muligvis påvirkes, især hvis der anvendes fugacitetsmodul til at beregne en teoretisk porevands- eller poreluftskoncentration. Om resultatet påvirkes afhænger af, hvilken værdi for den fysisk-kemiske egenskab der ændres, og hvilket beregningsmodul der anvendes. Oversigten over konsekvenserne vises i Tabel 3.1. Om resultatet påvirkes væsentligt, er desuden afhængig af forskellen i værdien af den alternative fysisk-kemiske egenskab samt de bagliggende ligninger. Brugeren kan altid illustrere konsekvens af anvendelse af andre værdier ved hjælp af følsomhedsberegning, for eksempel ift. K<sub>oc</sub> (fordelingskoefficient mellem organisk kulstof og vand), damptryk og opløselighed.

Såfremt der foretages en indeklimate- eller udeluftberegning baseret på målte poreluftmålinger, vil resultatet påvirkes af ændringer i stoffets diffusionskoefficient i luften. Diffusionskoefficienterne er typisk beregnet i forhold til ligning i vejledning nr. 7 fra 1998, hvor det antages, at et stofs diffusionskoefficient i luft er omvendt proportionel med stoffets molvægt. Diffusionskoefficient i vand antages at være en faktor 10.000 mindre end i luften. Teoretiske diffusionskoefficienter for de 22 PFAS-forbindelser er indsat i stofdatabase.

Såfremt der foretages en grundvandsberegning baseret på målte vandkoncentrationer, vil resultatet kun påvirkes i trin-3 beregninger såfremt der foretages ændringer i standardværdier for stoffets oktanol-vand fordelingskoefficient (K<sub>ow</sub>), og K<sub>oc</sub> samt nedbrydningskonstanter under anaerobe og aerobe forhold. Trin-1 og trin 2-beregninger påvirkes ikke af ændringer i de fysisk-kemiske parametre, medmindre beregningerne er baseret på fasefordeling fra en jordprøve. Som nævnt anses de fleste PFAS-forbindelser at være ikke-nedbrydelige, og der vil således ikke ske nogen beregningsmæssig reduktion i koncentrationniveauet i trin 3- beregning i grundvandsmodul.

**TABEL 3.1.** Oversigt over, hvilke parametre der anvendes i de forskellige beregningsmoduler, og om anvendelse af andre alternative fysisk-kemiske værdier vil påvirke resultatet

JAGG modul	S Vandopløselighed	p Damptryk	K <sub>oc</sub> Fordelingskoefficient mellem organisk kulstof og vand	Log K <sub>ow</sub> Fordelingskoefficient mellem oktanol og vand	K <sub>H</sub> Fordelingskoefficient mellem luft og vand	D <sub>L</sub> Diffusionskoefficient i luft	D <sub>w</sub> Diffusionskoefficient i vand
Fasefordeling mellem jord, vand og poreluft	Påvirker	Påvirker	Påvirker				
Indeklima*	*	*	*			Påvirker	
Udeluft*	*	*	*			Påvirker	
Grundvand, trin 1*	*	*	*				
Grundvand, trin 2*	*	*	*				
Grundvand, trin 3*	*	*	*	Påvirker			
Vertikal transport*	*	*	Påvirker		Påvirker	Påvirker	Påvirker

\* Såfremt koncentrationen til et beregningsmodul er baseret på en fasefordeling, vil beregningen påvirkes af alternative værdier for vandopløselighed, damptryk og K<sub>oc</sub>.

## 4. Oversigt over mindre justeringer i JAGG 2.1

I forbindelse med arbejdet med PFAS-forbindelser er der konstateret nogle uhensigtsmæssige visninger i de forskellige ark og udskrifter.

For god ordens skyld er følgende justeringer foretaget:

Da kvalitetskriterierne for PFAS er ret lave, f.eks. 2 ng/l for sum af 4 PFAS kan selv et meget lavt indhold af PFAS i de forskellige medier være problematiske. Det har derfor været nødvendigt at øge antallet af decimaler i beregningsarkene og udskrifter for modulerne for grundvand og vertikal transport, så resultaterne enten vises med op til 5 decimaler eller som eksponentiel (videnskabelig) notation.

Da der kun findes grundvandskriterier for sum af 4 PFAS og sum af 22 PFAS, er det ligeledes ændret således, at der altid vises "Intet kriterie" for de enkelte PFAS-forbindelser i grundvandsmodulet. Såfremt brugeren indtaster et grundvandskriterie i modulet "enkeltstoffet", f.eks. 0,002 µg/l (2 ng/l) i indtastningsfeltet, vil denne værdi anvendes i grundvandsmodulet.

For sumparametre for PFAS og pesticider er der ingen fysisk-kemiske egenskaber, som kan anvendes som modelværdier for at repræsentere alle stofferne i summen, og derfor bør hver celle for en fysisk-kemisk parameter for sumparametrene være blanke. Hvis en celle er blank, vil Excel opfatte det som om, at cellen har en værdi lig med 0, for eksempel at vandopløseligheden er 0 mg/l. I dette tilfælde vil et målt indhold i grundvandet altid føre til en besked om, at der er risiko for fri fase i grundvandet. I stedet anvendes der nu et tegn "-" for de manglende fysisk-kemiske parametre for sumparametre.

Med hensyn til behovet for at aflæse grundvandskoncentrationer i 100 m's afstand er der desuden i grundvandsmodulet for oliestoffer indsat et felt, således at brugeren kan indtaste et beregningspunkt, som anvendes i stedet for 1 års transport, og dermed kan man beregne trin 1- og trin 2-koncentrationer i 100 m's afstand. Dette mulighed har manglet i de tidligere JAGG-versioner.

## 5. Referencer

1. Miljøstyrelsen. Liste over kvalitetskriterier i relation til juli 2021 (udgave revideret for trykfejl). <https://mst.dk/kemi/kemikalier/graensevaerdier-og-kvalitetskriterier/sundhedskvalitetskriterier/graensevaerdier-for-jord/>
2. Miljøstyrelsen. Manual for program til risikovurdering – JAGG 2.1. Miljøprojekt nr. 1880, september 2016.
3. Miljøstyrelsen. 1998. Vejledning nr. 7 om "Oprydning på forurenede lokaliteter – Appendikser".
4. Regionernes Videncenter for Miljø og Ressourcer. 2022. Håndbog om undersøgelse og afværge af forurening med PFAS-forbindelser



### **Notat om anvendelse af JAGG ved vurdering af PFAS- forbindelser**

I forbindelse med risikovurdering af forureningsforhold anvendes ofte Miljøstyrelsens risikovurderingsværktøj, JAGG 2.1, men PFAS-forbindelser er ikke omfattet af JAGG's stofdata-base fra 2016.

Derfor er der i den nyeste version af JAGG 2.1 af den 20-09-2022 tilføjet alle 22 PFAS-forbindelser. Derudover er tilføjet NN-DMS (et nedbrydningsprodukt af pesticider som to-lyfluanid og dichlofluanid) og TFA (trifluoreddikesyre, et muligt nedbrydningsprodukt af visse pesticider) til stofdatabasen, da disse to stoffer hyppigt påvises i grundvandsprøver. Disse 24 enkeltstoffer er derfor oprettet i JAGG's stofdatabase sammen med deres fysisk-kemiske egenskaber.

Herudover er der tilføjet grundvandskriterierne for hhv. sum af 22 PFAS, sum af 4 PFAS og sum af pesticider med henblik på beregninger i grundvandsmodulet. Notatet her giver en vejledning i, hvordan der foretages PFAS-beregninger i JAGG 2.1, samt en kort opsummering af de bagvedliggende data.



Miljøstyrelsen  
Tolderundsvej 5  
5000 Odense C

[www.mst.dk](http://www.mst.dk)